

10. Den semiklassiska modellen för elektrondynamik

[AM12, HH 4.4]

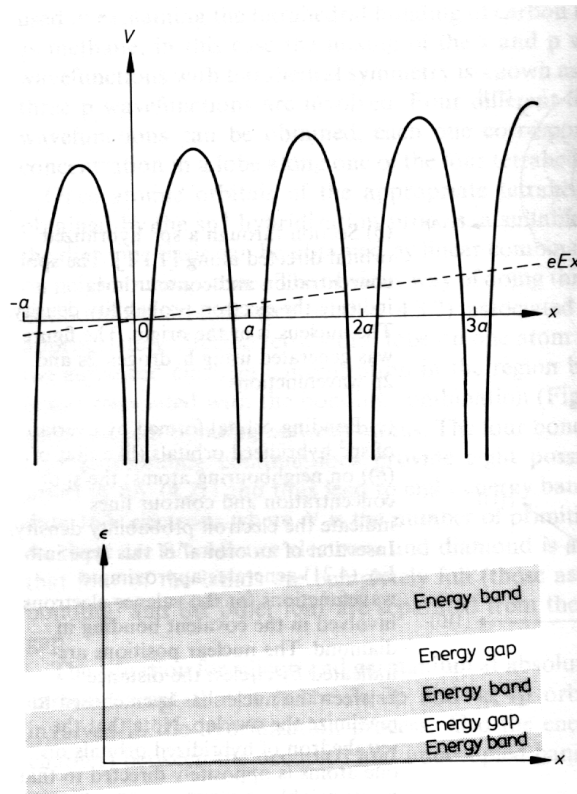
När man känner igen materials bandstruktur i detalj, kan man använda denna kunskap till att korrigera bristerna i Sommerfeld-modellen för metaller. Och nu har vi verkligen kommit så långt att detta går att göra: någon fundamentalt olik, djupare approximationsnivå existerar inte mera i allra flesta problem av praktiskt intresse i materialfysik.

Tyvärr har vi inte tid att gå in på denna modell i detalj. Men vi presenterar idéerna bakom hur detta kan göras i två steg. Först presenterar vi begreppet effektiv massa för elektroner, som också är viktig i halvledare, och sedan de semiklassiska rörelse-ekvationerna.

10.1. Effektiv massa

Ett enkelt sätt att beakta effekten av en periodisk potential för en elektrons rörelse är att anta att den periodiska potentialen leder till att elektronens rörelse inte skall beaktas med dess egentliga massa $m_{e,0}$, utan med någon effektiv massa m_e .

Betrakta ett homogent elfält E som påverkar en en-dimensionell potential. Om man nu tänker sig att detta elfälts energi eEx påverkar en periodisk potential, kommer detta att leda till att energibanden får en svag lutning p.g.a. fältet:



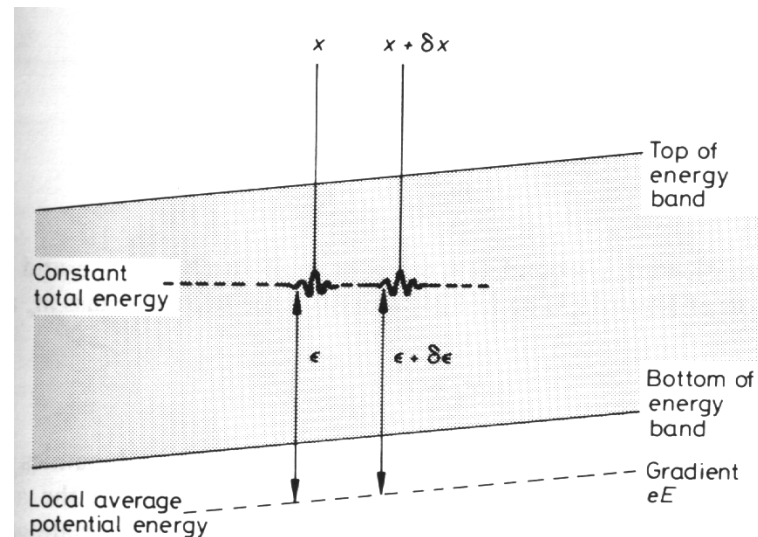
Om vi nu betraktar ett vågpaket som rör sig i ett av energibanden, kan vi beräkna dess rörelse. Vi antar att vi har ett vågpaket med en känd energi ϵ och vågtal k vid tiden t , och vill beräkna dess rörelse under ett tidsintervall δt .

Vi antar att vågpaketets hastighet är gruppshastigheten

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk} \quad (1)$$

Vi antar vidare att vågpaketets rörelse motsvarar den hos en klassisk partikel i att paketets totala energi hålls konstant. Om vi nu betraktar en förflyttning från x till $x + \delta x$ över tiden δt , blir ändringen i kinetisk energi $\delta \epsilon$

$$\delta \epsilon = -eE \delta x \quad (2)$$



Ändringen i k är nu

$$\delta k = \frac{dk}{d\epsilon} \delta \epsilon = \frac{1}{\hbar v} \delta \epsilon \quad (3)$$

och med att använda (2) och $v = dx/dt$ får vi

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar v} \frac{\delta \epsilon}{dt} = -\frac{eE}{\hbar v} \frac{dx}{dt} = -\frac{eE}{\hbar} \quad (4)$$

eller

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -eE \quad (5)$$

Denna rörelseekvation säger i princip helt enkelt att förändringen i rörelsemängd är lika med den tillämpade kraften. Men rörelsemängden är inte bara elektronens rörelsemängd, utan har en kontribution från hela kristallen. Därför kallas storheten $\hbar k$ i detta sammanhang ofta också för elektronens **kristallrörelsemängd**.

Vi kan också härleda en annan rörelse-ekvation. Om vi tar tidsderivatan av ekv. (1) och använder oss av ekv. (5) får vi

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dk}{dt} \frac{d}{dk} \frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dk}{dt} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} eE \quad (6)$$

som kan skrivas formellt

$$m_e \frac{dv}{dt} = -eE \quad (7)$$

där vi infört konstanten

$$m_e = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}} \quad (8)$$

Om vi betraktar ekvation (7) ser vi att den har exakt formen av Newtons rörelseekvation ifall m_e tolkas vara en massa. Detta leder alltså till begreppet **effektiv massa** för en elektron, där man

helt enkelt genom att använda ekvation (8) som en definition på en effektiv massa kan korrigera åtminstone en del av felet som uppstår i fri-elektronmodellen.

Om man på något sätt kan härleda eller mäta m_e , kan man sedan använda den i beräkningar för t.ex. konduktivitet och Hall-effekt med rörelse-ekvationer av typen

$$m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{f} \quad (9)$$

där \mathbf{f} är någon kraft som verkar på elektronerna i systemet.

Om vi betraktar m_e för en typisk dispersionsrelation i det första energibandet, ser vi ett intressant beteende. I.o.m. att relationen ju är parabolisk nära $k = 0$, men blir sedan svagare, kommer den att ha en inflexionspunkt där $\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} = 0$, och därmed m_e är oändligt. Utanför denna punkt kommer m_e att vara negativ:

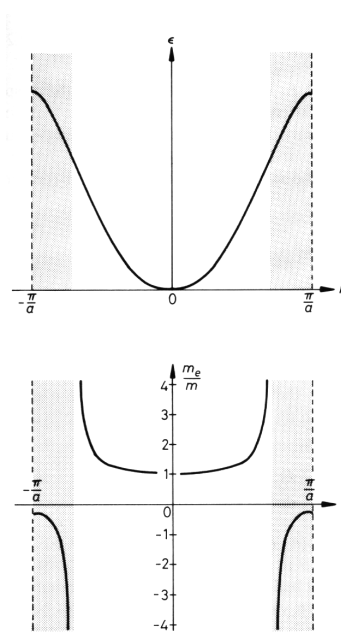


Fig. 4.15

Detta innebär alltså att i detta område kommer en partikel att röra sig i motsatt håll än vad man skulle vänta sig för en fri elektron.

Men en negativ massa är ju i högsta grad icke-intuitiv. Därför väljer man oftast att inte tänka sig att massan är negativ, utan istället att laddningen i ekvationer av typen

$$m_e \frac{dv}{dt} = qE \quad (10)$$

är positiv (positiva laddningar är ju inget onormalt). I.o.m. att det bara är fråga om ett teckenbyte

ändras inte beteendet av detta val. Men detta leder igen till konceptet av positiva **hål** i de övre delarna av ett energiband som laddningsbärare.

Vi kommer att ha nytta av dessa koncept då vi behandlar halvledare.

10.2. Semiklassiska modellen för elektrondynamik

Före vi går in på den egentliga modellen presenterar vi en sammanfattning på skillnaderna på Sommerfeld- och Bloch-modellen för elektronspridning:

Table 12.1
COMPARISON OF SOMMERFELD AND BLOCH ONE-ELECTRON EQUILIBRIUM LEVELS

	SOMMERFELD	BLOCH
QUANTUM NUMBERS (EXCLUDING SPIN)	\mathbf{k} ($\hbar\mathbf{k}$ is the momentum.)	\mathbf{k} , n ($\hbar\mathbf{k}$ is the crystal momentum and n is the band index.)
RANGE OF QUANTUM NUMBERS	\mathbf{k} runs through all of k -space consistent with the Born-von Karman periodic boundary condition.	For each n , \mathbf{k} runs through all wave vectors in a single primitive cell of the reciprocal lattice consistent with the Born-von Karman periodic boundary condition; n runs through an infinite set of discrete values.
ENERGY	$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$	For a given band index n , $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ has no simple explicit form. The only general property is periodicity in the reciprocal lattice: $\varepsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}).$
VELOCITY	The mean velocity of an electron in a level with wave vector \mathbf{k} is: $\mathbf{v} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}}.$	The mean velocity of an electron in a level with band index n and wave vector \mathbf{k} is: $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}.$
WAVE FUNCTION	The wave function of an electron with wave vector \mathbf{k} is: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{V^{1/2}}.$	The wave function of an electron with band index n and wave vector \mathbf{k} is: $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ where the function $u_{n\mathbf{k}}$ has no simple explicit form. The only general property is periodicity in the direct lattice: $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$

Vi presenterar här den semiklassiska modellens rörelse-ekvationer, och ger ett par exempel på tillämpningar. Vi härleder inte modellen: detta är så komplicerat att inte ens Ashcroft-Mermin ger in sig på det. Men vi ger en kvalitativ motivation för termerna i ekvationen.

I den semiklassiska modellen tänker man sig att elektronerna är vågpaket, som kan kolliderar på något sätt (t.ex. med fonon-elektron-kollisioner eller kollisioner med orenheter i gittret). Varje vågpaket antas kunna beskrivas av en position \mathbf{r} och en vågvektor \mathbf{k} , och man antar vidare att mellan kollisionerna beskriver den (kända) bandstrukturen $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ helt elektronernas rörelse. Vågvektorn \mathbf{k} är egentligen ett nånsorts medeltal över ett vågpakets vågvektorer.

Till slut antar man ännu att elektroner alltid rör sig i samma energiband, som betecknas med ett index n .

Den semiklassiska modellens rörelse-ekvationer för rörelse i ett el- och magnetfält är

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \quad (11)$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (12)$$

För övrigt innehåller modellen de flesta av Bloch-modellens drag. Speciellt bör man notera bland

dessa egenskapen att elektroner med vågtal som avviker bara med \mathbf{K} , där \mathbf{K} är en vektor i det reciproka gittret, är identiska om de finns i samma energiband.

I termisk jämvikt är distributionen av elektroner given av Fermi- distributionen som i Sommerfeld- modellen, med skillnaden att elektronenergierna nu beräknas från bandstrukturen,

$$f(\varepsilon_n(\mathbf{k})) \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} = \frac{\frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}}{e^{(\varepsilon_n(\mathbf{k})-\mu)/k_B T} + 1} \quad (13)$$

Denna modell har ett stort antal restriktioner till sitt tillämpningsområde, som vi dock inte går igenom. Intresserade kan se i AM kapitel 12.

10.2.1. Motivation för de semiklassiska ekvationerna

Den första av de semiklassiska ekvationerna, ekv. (11), är helt enkelt en omskrivning av grupphastigheten för en våg,

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \quad (14)$$

där vi använt oss av $\varepsilon = \hbar\omega$.

Den senare ekvationen, (12), är mer komplicerad att motivera. Men om vi bara betraktar en partikel i ett elfält $E = -\nabla\phi$, där den elektriska energin ju är $q\phi$, är det naturligt att anta att hela energin

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}(t)) - e\phi(\mathbf{r}(t)) \quad (15)$$

bevaras.

Tidsderivatan av detta ger

$$\frac{d}{dt} (\varepsilon_n(\mathbf{k}(t)) - e\phi(\mathbf{r}(t))) \quad (16)$$

$$= \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \mathbf{k}} \frac{d\mathbf{k}}{dt} - e \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad (17)$$

$$= \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \mathbf{k}} \frac{d\mathbf{k}}{dt} - e \nabla \phi \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad (18)$$

och om vi nu använder oss av ekv. (11) för att skriva om $\partial \varepsilon_n / \partial \mathbf{k}$ får vi

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \cdot \left(\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} - e \nabla \phi \right) \quad (19)$$

För att energin skulle nu bevaras, bör detta alltså vara lika med noll, vilket leder till ekvationen

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = e \nabla \phi = -e\mathbf{E} \quad (20)$$

som är samma som ekvation (12) då magnetfältet $\mathbf{H} = 0$.

10.2.2. Följder av ekvationerna

I denna diskussion pratar vi oftast bara om ett energiband åt gången, så vi lämnar bort underindexet n för storheterna.

10.2.2.1. Fyllda energiband är ickeledande

Betrakta ett fyllt energiband, dvs. ett sådant där alla energier ligger under ε_F . Vi har redan flera gånger visat att antalet elektroner i ett fyllt band är

$$\frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \quad (21)$$

i området $d\mathbf{k}$. I ett område $d\mathbf{r}$ i den direkta rymden kommer nu alltså antalet elektroner att vara

$$\frac{d\mathbf{r}d\mathbf{k}}{4\pi^3} \quad (22)$$

Om vi nu betraktar den sexdimensionella fasrymden (\mathbf{r}, \mathbf{k}) , kommer densiteten av elektroner där alltså att vara

$$\frac{1}{4\pi^3} \quad (23)$$

Liouvilles teorem för den semiklassiska rymden $\Omega = (\mathbf{r}, \mathbf{k})$ säger att fasrymds-volymen är konserverad av de semiklassiska ekvationerna. Detta teorem kan bevisas explicit, men det är lätt att förstå från en kvantmekanisk synvinkel: p.g.a. Paulis exklusionsprincip är det klart omöjligt att öka på densiteten i ett fyllt band, då det ju skulle innebära att elektroner börjar vara i samma tillstånd. Och p.g.a. att transitioner mellan energiband inte heller är möjliga i den semiklassiska modellen, kan densiteten i ett fyllt band inte heller sjunka.

Detta leder till att om densiteten är $1/4\pi^3$ vid $t = 0$, kommer den också att vara det för alla senare tider. Om vi nu betraktar elströmmen \mathbf{j} i den semiklassiska modellen, blir den p.g.a. densiteten $\frac{1}{4\pi^3}$ och elektronernas hastighet $(1/\hbar)(\partial\varepsilon/\partial k)$ (ekv. (11))

$$\mathbf{j} = -e \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial\varepsilon}{\partial k} \quad (24)$$

På liknande sätt kan energiflödet \mathbf{j}_ε beräknas med

$$\mathbf{j}_\varepsilon = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \varepsilon(\mathbf{k}) \frac{1}{\hbar} \frac{\partial\varepsilon}{\partial k} = \frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial(\varepsilon(\mathbf{k})^2)}{\partial k} \quad (25)$$

där vi i båda fallen integrerar över hela den första (fyllda) Brillouin-zonen.

Båda integralerna är alltså av typen

$$\int_{\text{primitiv cell}} dx \nabla f(x) \quad (26)$$

där f är någon funktion som har samma periodicitet som Bravais-gittret. Man kan visa att alla dylika integraler försvinner (se AM appendix I) I en dimension är det lätt att se varför så sker: tänk dig att integrera en sin- eller cos-funktion över en period i gittret. Därmed kommer alltså

$$\mathbf{j} = 0 \quad \text{och} \quad \mathbf{j}_\varepsilon = 0 \quad (27)$$

i fyllda energiband. Alltså kommer de fyllda banden inte att påverka ett materials elektriska eller energi- (värme-) ledningsegenskaper!

All ledning kommer alltså ur de delvis fyllda banden!

Detta förklarar varför material med fyllda band är isolatorer, varför isolatorer leder värme dåligt, och varför fri-elektron-modellen lyckas så bra i sitt antagande att antalet fria elektroner = antalet valenselektroner: i de flesta metaller är bara energibandena som innehåller valenselektroner delvis fyllda.

10.2.2.2. Hall-effekten

För att förstå rörelse av elektroner i ett yttre el- och magnetfält, tar vi och skriver om rörelse-ekvationen (12) något.

Vi börjar med att ta kryssprodukten med enhetsvektorn i fältets riktning $\hat{\mathbf{H}}$:

$$\hbar \hat{\mathbf{H}} \times \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \hat{\mathbf{H}} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \frac{e}{c} \underbrace{\left(\hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)) \right)}_{\underbrace{(\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{H})\mathbf{v}(\mathbf{k}) - (\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{v})\mathbf{H}}_{\underbrace{H\mathbf{v} - H(\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{v})\hat{\mathbf{H}}}_{H(\mathbf{v} - (\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{v})\hat{\mathbf{H}})}}} \quad (28)$$

Om vi nu inför en vektor

$$\mathbf{r}_\perp = \mathbf{r} - \hat{H}(\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{r}) \quad (29)$$

som är vinkelrät mot fältet \mathbf{H} och väsentligen \mathbf{r} :s komponent i planet vinkelrätt mot fältets \mathbf{H} riktning, ser vi att

$$\frac{d}{dt} \mathbf{r}_\perp = \mathbf{v} - \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{v}) \quad (30)$$

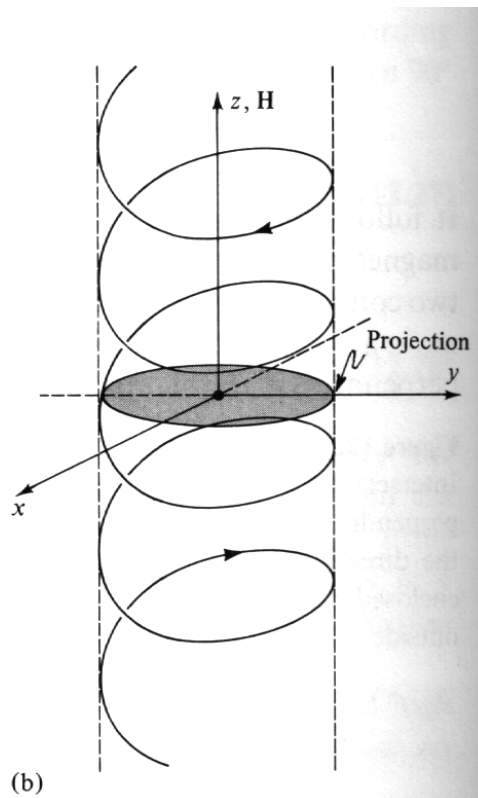
och ekvation (28) kan därmed skrivas som

$$\hbar \hat{\mathbf{H}} \times \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \hat{\mathbf{H}} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \frac{eH}{c} \frac{d\mathbf{r}_\perp}{dt} \quad (31)$$

Om man integrerar detta från $t = 0$ till $t = t$ får vi

$$\mathbf{r}_{\perp}(t) - \mathbf{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)) + \frac{Ec}{H} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{H}})t \quad (32)$$

Den första termen i detta uttryck är rörelse enbart i ett magnetfält. I fyllda skal är detta rörelse i en cirkulär-liknande bana:



Den senare termen beskriver elektroners drift om ett yttre elfält existerar.

Behandlingen av Hall-effekten fungerar nu helt liknande som i fri-elektronmodellen. Man tänker sig att elektronerna kolliderar med något medelintervall τ , och får då någon hastighet \mathbf{v} av elfältet. Nu är vi intresserade enbart av elektronernas rörelse i planet vinkelrätt mot magnetfältet p.g.a. den normala geometrin för Hall-experimentet:

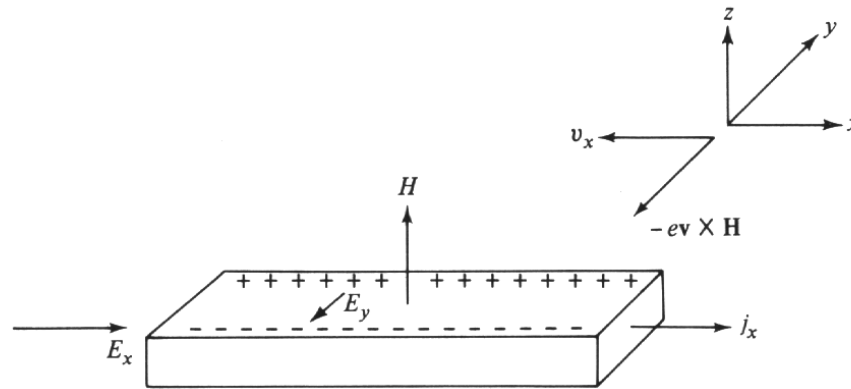


Figure 1.3
Schematic view of Hall's experiment.

Hastigheten vinkelrätt mot fältet \mathbf{v}_\perp kan från ekv. (32) beräknas bli

$$\mathbf{v}_\perp = \frac{\mathbf{r}_\perp(\tau) - \mathbf{r}_\perp(0)}{\tau} = -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times \frac{\mathbf{k}(\tau) - \mathbf{k}(0)}{\tau} + \frac{Ec}{H} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{H}}) \frac{\tau}{\tau} \quad (33)$$

Rörelsen i magnetfältets riktning är i fyllda skal alltså cirkulär. Ifall tidskonstanten τ är mycket större

än raten för cirkulär rörelse, kommer den första termen i högra ledet att inte vara av betydelse, och vi får det enkla resultatet för Hall-strömmen \mathbf{j}_\perp

$$\mathbf{j}_\perp = -nev_\perp = -\frac{n_e ec}{H} \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{H}} \quad (34)$$

Detta gäller alltså om laddningsbärarna är elektroner, med densiteten n_e . Om de däremot är hål, fås resultatet

$$\mathbf{j}_\perp = +n_h e \mathbf{v}_\perp = +\frac{n_h ec}{H} \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{H}} \quad (35)$$

Om vi beaktar geometrin i experimentet, kan vi nu skriva ner Hall-koefficienten

$$R_H = \frac{E_y}{j_x H} = \begin{cases} -\frac{1}{nec} & \text{för elektroner} \\ +\frac{1}{nec} & \text{för hål} \end{cases} \quad (36)$$

som ju är exakt samma resultat vi fick i fri-elektronmodellen.

Skillnaden är nu dock den att vi nu förstår hur de positiva Hall-koefficienterna kan uppkomma: de kommer från hål, som är alltså ofyllda elektrontillstånd i de övre delen av energibanden. Likaså förstår vi nu varför resultatet ovan inte alltid nödvändigtvis gäller. För att komma fram till resultatet

ovan, måste vi anta att elektronerna är i fyllda skal, eller hålen i sådana tillstånd som leder till cirkulär rörelse i magnetfältet. Om detta inte stämmer, kan vi inte lämna bort $\mathbf{H} \times \mathbf{k}$ -termen i ekvation (32), och behandlingen av Hall-effekten blir mycket mera komplicerad än för fria elektroner.

Men vi går inte in desto mera i denna mer komplicerade modell, utan nöjer oss med att vi kvalitativt har sett varför fri-elektron-modellen inte alltid fungerar.

Vad har du åtminstone lärt dig i detta kapitel?

- Begreppet effektiv massa
- Begreppet hål och hur det följer naturligt ur begreppet effektiv massa
- Att fyllda elektronband är ickeledande
- Du förstår den fysikaliska iden i den semiklassiska modellen och ekvationerna för elektrondynamik