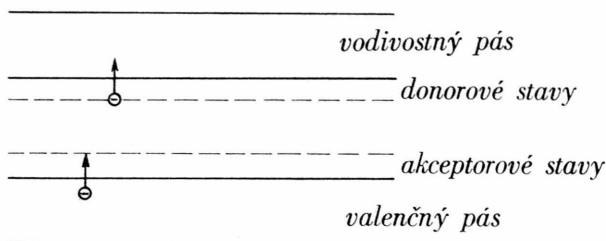


m_p v tomto prípade je efektívna hmotnosť diery v hornom okraji valenčného pásu. Význam zavedenia fiktívnych častíc, ako sú diery (niekedy sa používa termín defektné elektróny) sa nám ozrejní, ak si uvedomíme, že pri konečnej teplote sa budú uprázdňovať stavy nachádzajúce sa v úzkom pásiku v hornom okraji valenčného pásu, ktorých energia je vyjadrená jednoduchým približným vzťahom.



Obr. 18.6.

Na základe pásovej štruktúry môžeme vykonať aj určitú klasifikáciu tuhých látok. Kovy sú charakterizované tým, že ich pásy sa dotýkajú alebo prekrývajú, preto koncentrácia elektrónov nezávisí od teploty. Pohyblivosť elektrónov v dôsledku tepelných zrážok s iónmi klesá pri zvyšovaní teploty, a preto elektrický odpor stúpa. Polovodiče sa vyznačujú tým, že pri teplote 0 K majú plne obsadený valenčný pás, a preto sa v dôsledku vzťahu (1) správajú ako nevodiče. Pri zvyšovaní teploty elektróny preskakujú z valenčného do vodivostného pásu a tým vznikajú diery a vodivostné elektróny, ktoré sú schopné prenášať náboj. Pretože koncentrácia dier a vodivostných elektrónov s teplotou stúpa rýchlejšie ako klesá ich pohyblivosť, bude elektrický odpor klesať. Pri reálnych polovodičoch, ktoré obsahujú prímiesy (pozri čl. 2.5), môžu tieto prímiesy vytvoriť v zakázanom páse buď akceptorové, alebo donorové stavy tak, ako je to znázornené na obr. 18.6. V prípade akceptorových stavov, ktoré majú snahu zachycovať elektróny, a ktoré sa nachádzajú v blízkosti valenčného pásu, budú elektróny z valenčného pásu preskakovať na akceptorové stavy, čím vzniknú iba diery (p -typ). V prípade donorových stavov, ktoré majú snahu zbaviť sa elektrónov, budú sa pri zvyšovaní teploty vytvárať iba vodivostné elektróny (n -typ). Nevodiče sa vyznačujú tým, že pri teplote 0 K majú plne obsadený valenčný pás a šírka zakázaného pásu je taká veľká, že nemôžu nastať preskoky elektrónov z valenčného do vodivostného pásu.

18.10. Tepelné kmity iónov, pojem fonónu. Doteraz sme sa zaoberali pohybom elektrónov pri určitej konfigurácii iónov. Teraz budeme skúmať pohyb

iónov, ktorý je opísaný rovnicou (18.3.11). Postup riešenia tejto rovnice bude nasledovný. Najprv budeme skúmať systém iónov ako klasický systém popísaný Newtonovou mechanikou, a potom prejdeme k vlnovej mechanike. Z podmienky stability kryštálu vyplýva, že musí existovať určitá konfigurácia iónov, pri ktorej je potenciálna energia iónov minimálna. Polohy iónov v tejto konfigurácii budeme nazývať rovnovážnymi polohami. Ióny sa môžu pohybovať iba v blízkosti týchto polôh. Pre jednoduchosť budeme opäť skúmať jednorozmerný nekonečne dlhý kryštál, ktorý sa skladá z jedného druhu iónov. Vzdialenosť rovnovážnych polôh dvoch susedných iónov nech je a . Označme rovnovážne polohy iónov x_{i0} a ich príslušné odchýlky z rovnovážnych polôh u_i . Ďalej predpokladajme, že ióny kmitajú iba v malom okolí rovnovážnych polôh. Formálne rozvineme potenciálnu energiu do Taylorovho radu v okolí rovnovážnych polôh a z predpokladu malých odchýlok sa obmedzíme iba na členy druhého stupňa. Takéto priblíženie sa nazýva harmonické priblíženie.

Po vykonaní rozvoja dostaneme:

$$U(u_1, u_2, \dots, u_n, \dots) = U(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0}, \dots) + \frac{1}{2} \sum_k \sum_l \frac{\partial^2 U}{\partial x_{k0} \partial x_{l0}} u_k u_l \quad (1)$$

Lineárne členy v rozvoji (1) nevystupujú, pretože prvé derivácie v rovnovážnych polohách sa rovnajú nule ako dôsledok minima potenciálnej energie. Z podmienky minima potenciálnej energie a z translačnej symetrie kryštálu vyplýva:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_{n0}^2} = 2C > 0 \text{ pre ľubovoľné } n \quad (2)$$

Ak označíme:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_{k0} \partial x_{l0}} \quad \text{ako } A_{kl}, \text{ tak vzťah (1) bude mať tvar}$$

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_k \sum_l A_{kl} u_k u_l \quad (3)$$

Koeficienty A_{kl} sú navzájom závislé, ako to vyplýva zo symetrie kryštálu. Pri jednorozmernom kryštále sa tieto závislosti dajú veľmi jednoducho získať. Za účelom ich získania vyšetrujme silu, ktorá účinkuje na n -tý ión. Túto silu počítame podľa známeho vzorca z mechaniky

$$f_n = - \frac{\partial U}{\partial u_n} = - \sum_k A_{nk} u_k \quad (4)$$

Ak sú všetky u_k rovnaké, čo znamená posunutie kryštálu ako celku, tak $f_n = 0$. Zo vzorca (4) dostaneme:

$$0 = -\sum_k A_{nk} u \quad (5)$$

Odkiaľ

$$\sum_k A_{nk} = 0$$

Z translačnej symetrie kryštálu vyplýva, že

$$\left. \begin{aligned} A_{n, n-1} &= A_{n, n+1} = A_1 \\ A_{n, n} &= A_{n+k, n+k} = 2C > 0 \end{aligned} \right\} \text{ pre ľubovoľné } n \quad (6a)$$

Ak sa obmedzíme iba na vzájomné pôsobenie medzi najbližšími susedmi a pôsobenie ďalších susedov zanedbáme, vzťah (5) bude mať tvar

$$A_{n, n-1} + A_{n, n} + A_{n, n+1} = 0 \quad (7)$$

Zo vzťahov (6a) a (7) dostaneme:

$$A_1 = -C$$

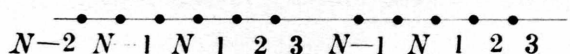
Po dosadení týchto výsledkov do vzorca (4) dostaneme silu f_n v tvare

$$f_n = C(u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n) \quad (8)$$

Podobné rovnice môžeme písať pre každý ión. Riešenie takejto sústavy rovníc je podrobne popísané v čl. 8.4. v prvom dieli tejto učebnice. Preto sa v našich úvahách obmedzíme iba na vysvetlenie pojmu fonón, ktorý má dôležitú úlohu vo fyzike tuhých látok.

Dosiaľ sme uvažovali nekonečne dlhý kryštál. V prípade konečného kryštálu o N iónoch vytvoríme nekonečný kryštál tak, že rovnaké konečné kryštály pospájame za sebou, ako je to znázornené na obr. 18.7. Ak vo vzťahu (8)

budeme silu písať v tvare $m \frac{d^2 u_n}{dt^2}$, tak podľa obr. 18.7 dostaneme:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 u_1}{dt^2} &= C(u_2 + u_N - 2u_1) \\ &\vdots \\ m \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \\ &\vdots \\ m \frac{d^2 u_N}{dt^2} &= C(u_{N-1} + u_1 - 2u_N) \end{aligned} \quad (9)$$


Obr. 18.7.

Riešenie tejto sústavy rovníc budeme hľadať v tvare

$$u_n = A \cdot e^{i(\omega t + naq)} + A^+ \cdot e^{-i(\omega t + naq)} \quad (10)$$

Po dosadení u_n do sústavy rovníc (9) dostaneme dve podmienky

$$\omega^2 = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{aq}{2} \quad (11)$$

a

$$e^{iNaq} = 1 \quad (12)$$

ktorých splnenie je potrebné na to, aby u_n bolo partikulárnym riešením sústavy (9). Vzťah (12) bude splnený, ak $Naq = j2\pi$, kde j je celé číslo. Vidíme, že q môže nadobúdať iba diskkrétne hodnoty, a to

$$q_j = \frac{j 2\pi}{aN} \quad (13)$$

Ostáva nám ešte určiť, ktoré j dávajú fyzikálne nové riešenia. Z periodicity riešenia (10) vyplýva, že postačí uvažovať q z intervalu $(-\pi/a, +\pi/a)$. Odkiaľ dostaneme, že j stačí uvažovať v intervale $(-N/2, +N/2)$. Partikulárne riešenie (10) predstavuje dve monochromatické vlny postupujúce proti sebe. Všeobecné riešenie môžeme písať v tvare

$$\begin{aligned} u_n &= \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{+\frac{N}{2}} A_j \cdot e^{i(\omega_j t + naq_j)} + A_j^+ \cdot e^{-i(\omega_j t + naq_j)} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{+\frac{N}{2}} a_j \cdot e^{inaq_j} + a_j^+ \cdot e^{-inaq_j} \end{aligned} \quad (14)$$

kde

$$a_j = \sqrt{N} A_j \cdot e^{i\omega_j t}$$

Z analytickej mechaniky vieme, že častokrát je výhodné prejsť od geometrických súradníc k takým zovšeobecneným súradniciam, pomocou ktorých vyjadrené pohybové rovnice sú jednoduchšie. Podobný zámer sledujeme teraz aj my.

Celková energia systému iónov je daná súčtom kinetickej a potenciálnej energie. Potenciálna energia podľa vzťahu (3) pri rešpektovaní symetrických vlastností koeficientov rozvoja má nasledujúci tvar

$$U = \frac{1}{2} C \sum_{n=1}^N (u_n - u_{n-1})^2 + U_0$$

Potom celková energia systému iónov sa dá vyjadriť vzťahom

$$E = \frac{1}{2} m \sum_{n=1}^N \left(\frac{du_n}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} C \sum_{n=1}^N (u_n - u_{n-1})^2 + U_0 \quad (15)$$

Po dosadení riešenia (14) a s uvažovaním vzťahu (11) a vzťahu ortogonalít

$$\sum_{n=1}^N e^{i(q_j + q_k)an} = \begin{cases} 0, & \text{pre } q_j + q_k \neq 0 \\ N, & \text{pre } q_j + q_k = 0 \end{cases}$$

dostaneme:

$$E = U_0 + 2m \sum_{j=+\frac{N}{2}}^{j=+\frac{N}{2}} \omega_j^2 a_j a_j^\dagger \quad (16)$$

Pre ďalší postup bude výhodné zaviesť nové reálne premenné nasledujúcou transformáciou

$$p_j = \frac{m\omega_j}{i} (a_j^\dagger - a_j), \quad x_j = (a_j^\dagger + a_j)$$

Po dosadení nových premenných do vzťahu (16) dostaneme konečný tvar pre energiu

$$E = U_0 + \sum_j \left[\frac{1}{2m} p_j^2 + \frac{1}{2} m \omega_j^2 x_j^2 \right] \quad (17)$$

Pomocou Hamiltonových kánonických rovníc sa môžeme presvedčiť, že x_j a p_j sú zovšeobecnené súradnice a impulzy. Energia systému iónov vyjadrená pomocou zovšeobecnených súradníc a impulzov má tvar súčtu výrazov, z ktorých každý predstavuje energiu harmonického oscilátora kmitajúceho s frekvenciou ω_j . Z mechaniky je známe, že ak sa systém skladá z pod-systémov navzájom na seba nepôsobiacich, tak ich energia je vyjadrená v tvare súčtu energií jednotlivých pod-systémov. Práve takýto tvar má aj energia systému iónov v harmonickom priblížení. Tým sa nám podarilo formálne previesť systém silne viazaných iónov na systém voľných harmonických oscilátorov.

Z vlnovej mechaniky vieme (príklad 1 v čl. 17.10), že energia harmonického oscilátora je kvantovaná a jej tvar je:

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n \right) h\nu \quad (18)$$

kde ν je kmitočet a n je celé kladné číslo (vrátane nuly). Zo vzťahu (18) vidieť, že energia harmonického oscilátora sa môže zväčšovať po kvantách $h\nu$. Takéto kvantum energie bude predstavovať kvázičasticu *fonón*. Ak sa teda

harmonický oscilátor kmitajúci s frekvenciou ω_j bude nachádzať v stave, ktorý je určený kvantovým číslom n , budeme hovoriť, že obsahuje n fonónov. Prijatím takejto predstavy môžeme nahradiť systém iónov v harmonickom priblížení systémom fonónov s rôznymi kmitočtami. Na základe doterajších výsledkov môžeme konštatovať, že sme dospeli k určitému modelu kryštálu, ktorý je reprezentovaný systémom vodivostných elektrónov, dier a fonónov zatvorených v akejsi skrinke, ktorej rozmery sú totožné s rozmermi kryštálu.

Na záver je potrebné poznamenať, že modelová predstava kryštálu ako zmesi plynov, ktorých „molekuly“ navzájom na seba nepôsobia, je správna iba v nulťom priblížení. V skutočnosti medzi elektrónmi a dierami na jednej strane a fonónmi na druhej strane existuje vzájomné pôsobenie, ktoré je zapríčinené prídavným poľom vznikajúcim v dôsledku kmitania iónov (je potrebné si uvedomiť, že pri vyšetrovaní dynamiky elektrónov sme uvažovali pevnú konfiguráciu iónov). Okrem tohto druhu poruchy existujú ešte aj ďalšie poruchy zapríčinené defektmi mriežky prípadne prítomnosťou cudzích atómov v mriežke. Tieto poruchy v našom modeli predstavujú iba malú poruchu, pretože ich koncentrácia je relatívne malá, lebo v opačnom prípade by sme nemohli hovoriť o symetrii kryštálu. Pre rovnovážne termodynamické stavy nie je potrebné tieto dodatočné polia uvažovať, dôležitú úlohu majú pri nerovnovážnych stavoch, ako je napr. prenos náboja prípadne energie.

18.11. Koncentrácia elektrónov a dier vo vlastnom polovodiči. Model kryštálu formulovaný v závere predchádzajúceho článku nám umožňuje používať pomerne dobre rozpracované metódy z teórie plynov. Ako príklad použitia týchto metód ukážeme výpočet koncentrácie elektrónov vo vodivostnom páse a dier vo valenčnom páse. Pretože ide o elektróny, musíme použiť Fermiho—Diracovu rozdeľovaciu funkciu. Podľa nej stredný počet častíc nachádzajúcich sa v určitom stave je daný vzorcom

$$\frac{N_i}{C_i} = \frac{1}{e^{i+\gamma E_i} + 1} \quad (1)$$

kde

$$\gamma = \frac{1}{kT}$$

$$\beta = -\frac{E_F}{kT}$$

pričom k je Boltzmannova konštanta, T je absolútna teplota, E_F je Fermiho hladina, C_i je počet stavov prislúchajúcich energii E_i a N_i je stredný počet elektrónov, ktoré majú energiu E_i .