

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 .

Celkový počet elektrónov na základe vzorca (1) je daný vzťahom

$$N = \sum_i 2N_i = \sum_i \frac{2}{e^{\frac{(E_i - E_F)}{kT}} + 1} \quad (2)$$

kde sčítanie robíme cez všetky stavy vo vodivostnom páse. Pretože každý stav môže byť obsadený dvoma elektrónmi s opačne orientovanými spinmi, bolo potrebné vo vzorci (2) zdvojnásobiť počet elektrónov.

Predpokladajme taký interval teplôt, pri ktorých elektróny po preskoku z valenčného pásu budú obsadzovať s veľkou pravdepodobnosťou úzky pás v dolnom okraji vodivostného pásu. To znamená, že funkcia na pravej strane vo vzorci (2) bude dávať pre energiu týchto stavov hodnotu blízku dvom a pre stavy s vyššou energiou hodnotu blízku nule. Na základe tejto úvahy môžeme vo vzorci (2) pre energiu elektrónov použiť približné vyjadrenie, ktoré v prípade jednorozmerného kryštálu je odvodené v čl. 18.8. V prípade trojrozmerného kryštálu má približné vyjadrenie energie elektrónov takýto tvar

$$E = E_{c,\min} + \frac{1}{8\pi^2} \frac{h^2}{m_n} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3)$$

kde

$$k_x = n_1 2\pi / L_1$$

$$k_y = n_2 2\pi / L_2$$

$$k_z = n_3 2\pi / L_3$$

L_1 , L_2 a L_3 sú geometrické rozmery kryštálu, n_1 , n_2 , n_3 = ľubovoľné celé čísla.

Diskrétné hodnoty k_x , k_y a k_z vyplývajú z periodických hraničných podmienok (čl. 18.7). Pretože diskrétné hodnoty energie elektrónu, ako to vyplýva zo vzťahu (3), sa nachádzajú blízko vedľa seba, môžeme sumáciu vo vzorci (2) nahradiť integrálom nasledujúcim spôsobom

$$N = \int_{E_{c,\min}}^{E_{c,\max}} \frac{2g(E) dE}{e^{\frac{(E - E_F)}{kT}} + 1} \quad (4)$$

kde $g(E)$ vyjadruje počet stavov pripadajúcich na jednotkový interval energie (odporúčame pozrieť čl. 9.4, kde sa použila podobná metóda pre výpočet integrálu).

Funkciu $g(E)$ dostaneme nasledovnou úvahou. Uvažujme množinu diskrétnych bodov v trojrozmernom priestore, súradnice, ktorých sú $\{n_1 2\pi / L_1$,

$n_2 2\pi/L_2$, $n_3 2\pi/L_3$ }. Formálne môžeme každému bodu priradiť určitý stav elektrónu. Potom podľa vzťahu (3) výraz

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{8\pi^2 m_n}{\hbar^2} (E - E_{c,\min})$$

možno chápať ako analytické vyjadrenie guľovej plochy, ktorá obklopuje body prislúchajúce k stavom s energiou $E_{c,\min}$ až E . Počet týchto stavov dostaneme tak, že objem gule predelíme objemom elementárnej bunky

$$G(E) = \frac{4}{3} \pi \frac{\left[\sqrt{\frac{8\pi^2 m_n}{\hbar^2} (E - E_{c,\min})} \right]^3}{8\pi^3 \frac{L_1 L_2 L_3}{L_1 L_2 L_3}} = \frac{3}{4} \frac{\pi V}{\hbar^3} (\sqrt{2m_n})^3 (E - E_{c,\min})^{3/2}$$

Funkciu $g(E)$ počítame podľa vzťahu

$$g(E) = \frac{dG(E)}{dE} = \frac{2\pi V}{\hbar^3} (2m_n)^{3/2} (E - E_{c,\min})^{1/2}$$

Dosadením do integrálu (4) dostaneme:

$$N = \frac{4\pi V (2m_n)^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^{E_{c,\max} - E_{c,\min}} \frac{x^{1/2} dx}{e^{\frac{E_{c,\min} - E_F + x}{kT}} + 1} \quad (5)$$

Zo vzťahu (5) pre koncentráciu elektrónov vyplýva vzťah

$$n = \frac{N}{V} = \frac{4\pi (2m_n)^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^{E_{c,\max} - E_{c,\min}} \frac{x^{1/2} dx}{e^{\frac{E_{c,\min} - E_F + x}{kT}} + 1} \quad (6)$$

Integrál (6) nevieme analyticky vypočítať, môžeme ho vyjadriť iba približne, ak $\frac{E_{c,\min} - E_F}{kT} > 4$, môžeme jednotku zanedbať a koncentrácia elektrónov bude vyjadrená približne vzťahom

$$n \doteq \frac{4\pi (2m_n)^{3/2}}{\hbar^3} e^{\frac{E_F - E_{c,\min}}{kT}} \int_0^{E_{c,\max} - E_{c,\min}} x^{1/2} e^{-\frac{x}{kT}} dx \quad (7)$$

Pretože exponenciálna funkcia v integráli rýchlo klesá, môžeme hornú hranicu rozšíriť do nekonečna. V tomto prípade sa integrál dá pomerne jednoducho vypočítať a koncentrácia elektrónov bude daná vzorcom

$$n = \frac{2(2\pi kT m_n)^{3/2}}{\hbar^3} e^{\frac{(E_F - E_{c,\min})}{kT}} = A_n e^{\frac{(E_F - E_{c,\min})}{kT}} \quad (8)$$

Pri výpočte koncentrácie dier vo valenčnom páse postupujeme takto: Stredný počet elektrónov chýbajúcich v určitom stave počítame podľa vzťahu

$$1 - \frac{N_i}{C_i} = \frac{1}{e^{\frac{(E_F - E_i)}{kT}} + 1}$$

pretože súčet stredného počtu elektrónov nachádzajúcich sa v určitom stave a stredného počtu elektrónov chýbajúcich v tom istom stave musí sa rovnať jednej (poznatok 2 v čl. 18.4). Celkový počet dier bude daný vzťahom

$$P = \sum_i \frac{2}{e^{\frac{(E_F - E_i)}{kT}} + 1}$$

kde sčítavame cez všetky stavy vo valenčnom páse. Energia diery v prípade trojrozmerného kryštálu je daná vzťahom

$$E = E_{v,\max} - \frac{1}{8\pi^2} \frac{\hbar^2}{m_q} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

Postupujúc analogicky ako v predchádzajúcom prípade, dôjdeme k nasledujúcemu vzorcu pre koncentráciu dier

$$p = \frac{4\pi(2m_p)^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^{\frac{(E_F - E_{v,\max} + x)}{kT}} + 1}$$

Opäť ak $(E_F - E_{v,\max})/kT > 4$, môžeme písať

$$p = \frac{4\pi(2m_p)^{3/2}}{\hbar^3} e^{\frac{(E_{v,\max} - E_F)}{kT}} \int_0^\infty \sqrt{x} e^{-\frac{x}{kT}} dx = A_p e^{\frac{(E_{v,\max} - E_F)}{kT}} \quad (9)$$

$$\text{kde } A_p = \frac{2(2\pi kT m_p)^{3/2}}{\hbar^3}$$

Pre vlastný polovodič (bez donorových a akceptorových stavov) platí $n = p$.

Dosadením vzorcov (8) a (9) do tejto rovnosti a jej logaritmovaním dostaneme:

$$E_F = \frac{E_{v,\max} + E_{c,\min}}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{A_p}{A_n}$$

Pri nízkych teplotách môžeme písať:

$$E_F = \frac{E_{v, \max} + E_{c, \min}}{2}$$

Dosadením do vzorcov (8) a (9) dostaneme hľadané koncentrácie elektrónov a dier

$$n = A_n e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}, \quad p = A_p e^{-\frac{\Delta E}{2kT}} \quad (10ab)$$

kde ΔE je šírka zakázaného pásu. Upozorňujeme na jednu skutočnosť, že zanedbaním jednotky v uvedených integráloch dostali sme rovnaké výsledky, ako keby sme použili klasickú Boltzmannovu rozdeľovaciu funkciu. Z toho vyplýva, že systém elektrónov a dier sa správa ako klasický plyn. Zo vzorcov (10ab) vidieť, že koncentrácie elektrónov a dier s rastúcou teplotou stúpajú exponenciálne, pričom pohyblivosť, ako sa dá ukázať, klesá s teplotou podľa určitej mocniny. Dôsledkom týchto skutočností je, že elektrický odpor polovodiča s rastúcou teplotou klesá.

18.12. Hallov jav v polovodiči. V tomto článku budeme skúmať procesy vytvorené elektrónmi a dierami vo vonkajšom elektrickom a magnetickom poli, ak je splnená podmienka vedenia prúdu. Opäť ako v predchádzajúcom prípade, aj tu sa s výhodou používajú metódy riešenia prebraté z kinetickej teórie plynov.

Procesy, ktoré ideme skúmať, prebiehajú v termodynamicky nerovnovážnom stave, a preto je potrebné počítať stredné hodnoty fyzikálnych veličín pomocou funkcie $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, ktorá určuje počet častíc (elektrónov, dier alebo fonónov) v objemovej jednotke geometrického a rýchlostného priestoru $\mathbf{v}$ nerovnovážnom termodynamickom stave ($\mathbf{v}$ znamená grupovú rýchlosť častíc). Pomocou funkcie $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ si vyjadríme veličiny, ktoré budeme v ďalších úvahách potrebovať. Koncentrácia častíc:

$$n = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\tau_{\mathbf{v}} \quad (1)$$

kde $d\tau_{\mathbf{v}}$ je elementárny objem v rýchlostnom priestore. Vektor hustoty toku častíc (počet častíc, ktoré prejdú plošnou jednotku za jednotkou času)

$$\mathbf{j} = \int \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\tau_{\mathbf{v}} \quad (2)$$

Stredná hodnota vektora rýchlosti častice

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{\int \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\tau_{\mathbf{v}}}{\int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\tau_{\mathbf{v}}} = \frac{\mathbf{j}}{n} \quad (3)$$