

# Fyzika polovodičů pro optoelektroniku I

Prof. Ing. Jan Franc, DrSc.  
Prof. RNDr. Pavel Höschl, DrSc.

(poslední úprava dne 19. října 2014)

# Obsah

<b>Obsah</b>	<b>1</b>
<b>Seznam obrázků</b>	<b>3</b>
<b>Seznam tabulek</b>	<b>5</b>
<b>1 Krystaly</b>	<b>7</b>
1.1 Krystalická struktura . . . . .	7
1.2 Zavedení Millerových indexů . . . . .	9
1.3 Reciproká mřížka . . . . .	9
1.4 Difrakce . . . . .	12
1.5 Laueho formulace difrakční podmínky . . . . .	13
1.6 Poruchová energie v přiblížení volných elektronů . . . . .	14
<b>2 Homogenní polovodič</b>	<b>16</b>
2.1 Statistika elektronů . . . . .	16
2.1.1 Rozdělovací funkce elektronů . . . . .	16
2.1.2 Elektrony ve vodivostním pásu . . . . .	17
2.1.3 Vlastnosti rozdělovací funkce . . . . .	17
2.1.4 Rozdělovací funkce elektronů v krystalu . . . . .	18
2.1.5 Výpočet koncentrace elektronů ve vodivostním pásu . . . . .	22
2.2 Statistika děr . . . . .	26
2.3 Příměsi . . . . .	27
2.3.1 Monovalentní donor . . . . .	27
2.3.2 Monovalentní akceptor . . . . .	28
2.4 Stanovení Fermiho meze . . . . .	29
2.5 Podmínka elektrické neutrality . . . . .	30
2.5.1 Nedegenerovaný kompenzovaný N-typ . . . . .	30
<b>3 Boltzmannova kinetická rovnice</b>	<b>34</b>
3.1 Odvození Boltzmannovy kinetické rovnice . . . . .	34
3.2 Platnost Boltzmannovy kinetické rovnice . . . . .	36
3.3 Stanovení nerovnovážné rozdělovací funkce . . . . .	38

3.4	Fyzikální význam relaxační doby . . . . .	39
3.4.1	Relaxační doba - rozptyl na podélných akustických fononech . . . .	42
3.4.2	Relaxační doba - rozptyl na ionizovaných příměsích . . . . .	43
3.4.3	Relaxační doba - rozptyl na podélných optických fononech . . . . .	44
3.5	Řešení Boltzmannovy kinetické rovnice . . . . .	45
3.6	Hustota elektrického proudu a hustota proudu energie bez vnějšího magnetického pole . . . . .	48
3.7	Hustota elektrického proudu a hustota proudu energie pro magnetické pole s jednou nenulovou složkou . . . . .	51
<b>4</b>	<b>Transportní jevy</b>	<b>55</b>
4.1	Transportní jevy bez magnetického pole . . . . .	55
4.1.1	Elektrická vodivost . . . . .	55
4.1.2	Termoelektrická síla (Seebeckův jev) . . . . .	57
4.1.3	Tepelná vodivost . . . . .	59
4.2	Transportní jevy při nenulovém magnetickém poli . . . . .	59
4.2.1	Podélné jevy v magnetickém poli . . . . .	61
4.2.2	Příčné jevy v magnetickém poli . . . . .	63
4.3	Polovodiče se smíšenou elektrickou vodivostí . . . . .	68
<b>5</b>	<b>Kinetika nosičů</b>	<b>70</b>
5.1	Rovnice kontinuity elektronů . . . . .	70
5.1.1	Odvození rovnice kontinuity . . . . .	73
5.2	Odvození bilanční rovnice hybnosti a rovnice pro proudovou hustotu . . .	73
5.2.1	Teplota nosičů . . . . .	75
5.3	Odvození drift-difúzní rovnice . . . . .	75
5.4	Celková proudová hustota . . . . .	76
5.5	Elektrony a díry v nerovnovážném stavu . . . . .	77
5.5.1	Difúzní délka minoritních nosičů . . . . .	79
5.6	Poissonova rovnice . . . . .	80
5.7	Pohyb nosičů proudu v homogenním polovodiči . . . . .	81
5.7.1	Vedení proudu ve vakuu . . . . .	81
5.7.2	Vedení proudu v izolantu . . . . .	82
5.8	Ambipolární pohyblivost . . . . .	82
5.9	Vliv rekombinačních center — Shockleyův-Readův model . . . . .	84
<b>6</b>	<b>Nehomogenní systémy</b>	<b>87</b>
6.1	Slabě nehomogenní polovodič . . . . .	87
6.2	Přechod P–N . . . . .	88
6.2.1	Voltampérová charakteristika ideálního přechodu P–N . . . . .	88
6.3	Kontakt kov-polovodič (M–S) . . . . .	91
6.3.1	Kontakt M–S s polovodičem typu N . . . . .	92
6.3.2	Kontakt M–S s polovodičem typu P . . . . .	93

<i>OBSAH</i>	3
<b>7 Elektron v magnetickém poli</b>	<b>94</b>
7.1 Klasický pohled . . . . .	94
7.1.1 Elektron v magnetickém poli $\mathbf{B} \neq 0$ a v elektrickém poli $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$ . . .	98
7.2 Elektron v magnetickém poli — kvantové efekty . . . . .	102

# Seznam obrázků

1.1	Millerovy indexy . . . . .	10
1.2	Indexy roviny v přímé mřížce . . . . .	11
1.3	Vzdálenost rovin v reciproké mřížce . . . . .	12
1.4	Braggova difrakční podmínka . . . . .	13
1.5	Laueho formulace difrakční podmínky . . . . .	13
1.6	Difrakce na hranici Brillouinovy zóny . . . . .	14
2.1	Fermiho rozdělovací funkce . . . . .	16
2.2	Koncentrace elektronů ve vodivostním pásu . . . . .	17
2.3	Koncentrace elektronů ve vodivostním pásu-degenerovaný případ . . . . .	18
2.4	Aproximace Fermiho integrálu . . . . .	24
2.5	Energetické schéma homogenního polovodiče . . . . .	26
2.6	Pásové schéma monovalentního donoru . . . . .	28
2.7	Pásové schéma monovalentního akceptoru . . . . .	29
2.8	Klasifikace polovodiče podle stupně dotace a odpovídající poloha Fermiho hladiny . . . . .	32
2.9	Teplotní závislost polohy Fermiho hladiny . . . . .	33
2.10	Průběh koncentrace elektronů . . . . .	33
4.1	Elektrická vodivost — poloha vzorku v poli . . . . .	56
4.2	Termoelektrická síla - schéma jevu . . . . .	57
4.3	Termoelektrická síla — poloha vzorku . . . . .	57
4.4	Peltierův článek . . . . .	58
5.1	Ustálení koncentrace nosičů . . . . .	79
5.2	Pohyb nosičů v homogenním elektrickém poli . . . . .	82
5.3	Pásový model rekombinace na hlubokých rekombinačních centrech . . . . .	85
6.1	Vznik přechodu pn . . . . .	89
6.2	Pásové schéma kovu a polovodiče typu N před spojením . . . . .	92
6.3	Pásové schéma kovu a polovodiče typu N po spojení . . . . .	92
6.4	Pásové schéma kovu a polovodiče typu P před spojením . . . . .	93
6.5	Pásové schéma kovu a polovodiče typu P po spojení . . . . .	93

7.1	Trajektorie elektronu v magnetickém poli . . . . .	95
7.2	Kvantování energie elektronu v magnetickém poli . . . . .	103

# Seznam tabulek

2.1	Tabulka aproximací . . . . .	25
-----	------------------------------	----

# Kapitola 1

## Krystaly

### 1.1 Krystalická struktura

Krystalické látky uvažujeme jako periodické uspořádání základních stavebních jednotek.

Za počátek krystalografie se považuje experimentální důkaz krystalové struktury, který provedl William Lawrence Bragg (1913) pomocí RTG paprsků.

Základním konceptem libovolného krystalického tělesa je Bravaisova mřížka (Auguste Bravais), která specifikuje periodické uspořádání opakujících se základních stavebních jednotek (atomů, molekul, iontů).

Definice Bravaisovy mřížky: Bravaisova mřížka sestává z bodů určených v prostoru vektory

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (1.1)$$

kde  $\mathbf{a}_i$  jsou 3 vektory neležící v jedné rovině (nazývají se primitivní vektory),  $n_i$  jsou celá čísla.

Bravaisova mřížka charakterizuje geometrické uspořádání těchto jednotek nezávisle na typu jednotky (je to čistě geometrický pojem).

**Primitivní buňka** je část prostoru, která při translaci přes všechny vektory Bravaisovy mřížky vyplní celý prostor bez překryvů a beze zbytků.

**Elementární buňka** má vlastnosti primitivní buňky, ale může obsahovat více bodů Bravaisovy mřížky, tj. vyplní prostor beze zbytků a překryvů pro některé vektory Bravaisovy mřížky.

Volba primitivních vektorů ani primitivní buňky není jednoznačná, ale její objem ano. Primitivní buňka obsahuje právě jeden bod Bravaisovy mřížky. Je-li  $n$  hustota bodů v Bravaisovy mřížce a  $v$  objem primitivní buňky, pak platí:  $nv = 1$

Primitivní buňka nemusí mít symetrii Bravaisovy mřížky. Proto je z praktického hlediska vhodné najít takovou základní stavební jednotku, která symetrii Bravaisovy mřížky má.

Řešením tohoto problému je:



1. Výběr takové primitivní buňky, která symetrii Bravaisovy mřížky má — Wignerova-Seitzova buňka (oblast prostoru, která je bližší k danému bodu prostoru, než k jakémukoliv jinému mřížkovému bodu). Pro kubickou prostorově centrovanou mřížku (bcc) je Wignerova-Seitzova buňka osekáný osmistěn, pro kubickou plošně centrovanou mřížku (fcc) dvanáctistěn.
2. Definovat jako základní stavební jednotku dané krystalové struktury vhodně zvolenou elementární buňku.

**Koordinační číslo** — určuje počet nejbližších sousedů

Příklady počtu nejbližších sousedů:

- kubická prostá mřížka — 6
- kubická prostorově centrovaná mřížka (*body centered cubic*, bcc) — 8 (Fe, K, W)
- kubická plošně centrovaná mřížka (*face centered cubic*, fcc) — 12 (Au, Ag, Al, Pt, Ca)

**Krystalová struktura** je Bravaisova mřížka s bází. Je to struktura získaná identickými kopiemi stejných fyzikálních jednotek zasazených do všech bodů Bravaisovy mřížky.

- diamantová struktura — dvě kubické plošně centrované mřížky posunuté o  $1/4$  tělesové úhlopříčky; ve všech bodech je stejný atom (C, Si, Ge)
- sfaleritová struktura — dvě kubické plošně centrované mřížky posunuté o  $1/4$  tělesové úhlopříčky, body příslušející jedné fcc mřížce jsou obsazeny jedním typem atomů, body druhé druhým typem (GaAs, CdTe, InP, ZnTe, HgTe, ZnSe)
- hexagonální struktura — dvě hexagonální Bravaisovy mřížky posunuté takto: vertikálně o  $c/2$  a horizontálně tak, že body jedné leží nad středy trojúhelníků (první), tvořeny sousedními body roviny, třetí řada koulí přesně nad první, atd. (kulečnickové koule nad sebou — ABAB...) (Cd, Hg, Ti)
- struktura NaCl — kubická plošně centrovaná mřížka s bází tvořenou dvěma atomy, každý iont jednoho typu má 6 nejbližších sousedů typu druhého (NaCl, KCl)
- struktura CsCl — kubická prostá mřížka s bází tvořenou dvěma atomy.

Z hlediska symetrie je Bravaisova mřížka charakterizována všemi operacemi zachovávajícími vzdálenosti mezi body (operacemi symetrie), které převedou mřížku v sebe samu. Tento soubor operací se nazývá grupa symetrie Bravaisovy mřížky a sestává z

1. translace přes vektory Bravaisovy mřížky,
2. operace, které zachovávají nějaký pevný bod,

3. operace složené z prvních dvou.

Soubor operací typu 2 definuje tzv. bodovou grupa Bravaisovy mřížky (rotace, reflexe, inverze). Bylo zjištěno, že existuje celkem 7 bodových grup, které Bravaisova mřížka může mít. Těmto 7 bodovým grupám pak odpovídá 7 tzv. krystalových soustav.

Pokud se neomezujeme na bodovou grupu, ale na plně symetrickou grupu, dostaneme 14 grup, které může Bravaisova mřížka mít, tj. z hlediska symetrie existuje 14 Bravaisových mřížek (Bravais, 1845).

Přehled krystalových soustav (číslo v závorce udává počet Bravaisových mřížek příslušejících dané soustavě):

- kubická (3)
- tetragonální (2)
- ortorombická (4)
- monoklinická (2)
- triklinická (1)
- trigonální (1)
- hexagonální (1)

Provedení podrobné analýzy na reálné krystalové struktuře, tj. při zahrnutí báze, která nemusí mít maximální symetrii Bravaisovy mřížky, vede k výsledku, že existuje 230 grup symetrie (prostorových grup). V případě omezení se na netranslační symetrii pak existuje 32 krystalových bodových grup.

## 1.2 Zavedení Millerových indexů

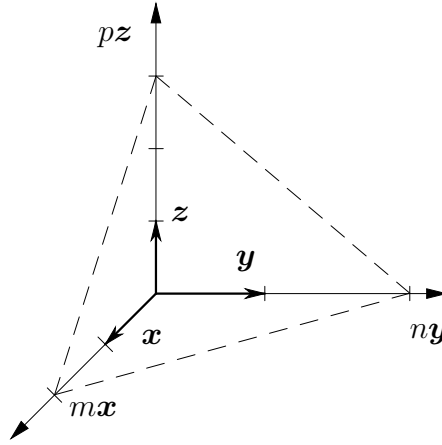
Millerovy indexy soustavy rovin (viz obrázek 1.1) jsou čísla  $h, k, l$ , pro něž platí:

$$h : k : l = \frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} \quad (1.2)$$

a  $h, k, l$  jsou nejmenší celá čísla splňující tento vztah. Kromě jedné nemají žádného společného dělitele a vztahují se k celé soustavě rovin, které jsou v krystale ekvivalentní.

## 1.3 Reciproká mřížka

Základní vlastnost krystalu je periodické uspořádání — při posunutí krystalu o vektor  $\mathbf{R}_n$  ( $\mathbf{R}_n = \sum_i n_i \mathbf{a}_i$ , kde  $\mathbf{a}_i$  jsou primitivní vektory přímé mřížky;  $n = (n_1, n_2, n_3)$ ,  $n_i \in \mathbb{Z}$ ) se krystal ztotožní sám se sebou, fyzikální vlastnosti se při translaci nemění (např.: koncentrace elektronů, elektrický potenciál  $V(\mathbf{r})$ ,  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ ).



Obrázek 1.1: Millerovy indexy, značení...

Pro periodické funkce  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  je výhodné (pro zkoumání jejich vlastností) provést Fourierovský rozklad:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} V_{\mathbf{b}} \exp[i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}], \quad (1.3)$$

kde  $\mathbf{b}$  je zatím neznámý vektor závislý na vlnovém vektoru  $\mathbf{k}$ .

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \sum_{\mathbf{b}} V_{\mathbf{b}} \exp[i\mathbf{b} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)] = \quad (1.4)$$

$$= \sum_{\mathbf{b}} V_{\mathbf{b}} \exp[i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}] \exp[i\mathbf{b} \cdot \mathbf{R}_n] = \sum_{\mathbf{b}} V_{\mathbf{b}} \exp[i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}] \Rightarrow \quad (1.5)$$

$$\Rightarrow \exp[i\mathbf{b} \cdot \mathbf{R}_n] = 1 = \exp[i2\pi m]; \quad m \in Z \quad (1.6)$$

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi m \quad (1.7)$$

$$n_1(\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}_1) + n_2(\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}_2) + n_3(\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}_3) = 2\pi m. \quad (1.8)$$

Hledáme vektory  $\mathbf{b}_i$  (primitivní vektory reciproké mřížky), splňující tento vztah. Definujme např.

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad (1.9)$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad (1.10)$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \quad (1.11)$$

Pro zkoušku musí platit  $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ . Pro libovolný vektor reciproké mřížky  $\mathbf{G}_R$  tedy

platí

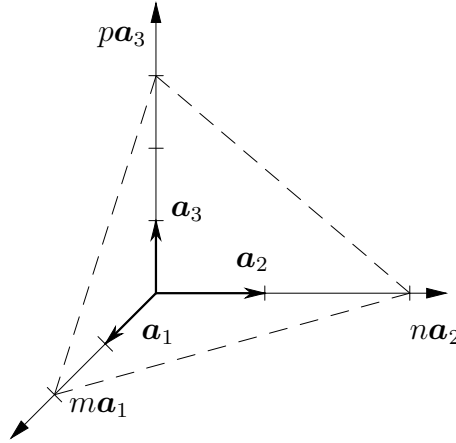
$$\mathbf{G}_R = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3, \quad (1.12)$$

$$\mathbf{G}_R \cdot \mathbf{R} = 2\pi(hn_1 + kn_2 + ln_3). \quad (1.13)$$

Výraz  $(hn_1 + kn_2 + ln_3)$  je celé číslo, pokud  $h, k, l$  jsou celé čísla. Z toho plyne, že podmínky periodicity jsou splněny, pokud  $h, k, l \in Z$  a reciproká mřížka je Bravaisova mřížka.

Vektory  $\mathbf{b}_i$  mají rozměr převrácené délky. Nekonečná periodická mřížka sestavená pomocí translačních vektorů  $\mathbf{b}_i$  se nazývá reciproká mřížka. Platí

$$\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}, \quad \text{kde } \Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3). \quad (1.14)$$



Obrázek 1.2: Indexy roviny v přímé mřížce

Hledáme vektor kolmý k rovině na obrázku 1.2. Musí pro něj platit

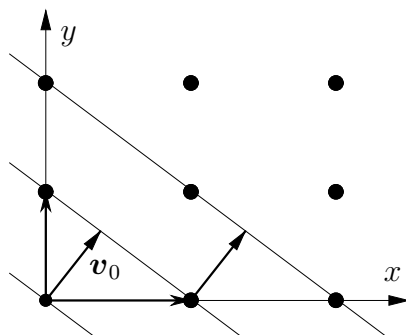
$$(h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3) \cdot (m\mathbf{a}_1 - n\mathbf{a}_1) = (hm - kn) = 0 \quad \Rightarrow \quad (1.15)$$

$$hm = kn, \quad hm = lp, \quad lp = kn \quad (1.16)$$

$$m = \frac{1}{h}, \quad n = \frac{1}{k}, \quad p = \frac{1}{l} \quad (1.17)$$

$h, k, l$  jsou Millerovy indexy roviny k níž je vektor  $\mathbf{G}_{hkl} = (h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3)$  kolmý, tj. vektor  $\mathbf{G}_{hkl}$  je kolmý k rovině  $(hkl)$ .

Dále ukážeme, že vzdálenost dvou sousedních rovin systému je  $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{hkl}|}$ .



Obrázek 1.3: Vzdálenost rovin v reciproké mřížce

K obrázku 1.3 (využijeme definici roviny):

$$\mathbf{n}_0 = \frac{\mathbf{G}_{hkl}}{|\mathbf{G}_{hkl}|}, \quad (1.18)$$

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}_0 = \text{konst}, \quad (1.19)$$

$$\frac{\mathbf{a}_1 (h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3)}{k |\mathbf{G}_{hkl}|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{hkl}|}. \quad (1.20)$$

Pro každé  $m$  je nejkratší vektor odpovídající vzdálenosti dvou sousedních rovin rovný  $\frac{\mathbf{a}_1}{h} = \mathbf{r}$ , kde  $h$  je Millerův index.

## 1.4 Difrakce

V roce 1913 W. L. Bragg pozoroval, že krystalické látky vykazují charakteristické obrazce při odrazu RTG paprsků. Předpokládal, že dochází k odrazu na rovinách a že paprsky odražené od sousedních rovin interferují konstruktivně. Braggova formulace (obrázek 1.4):

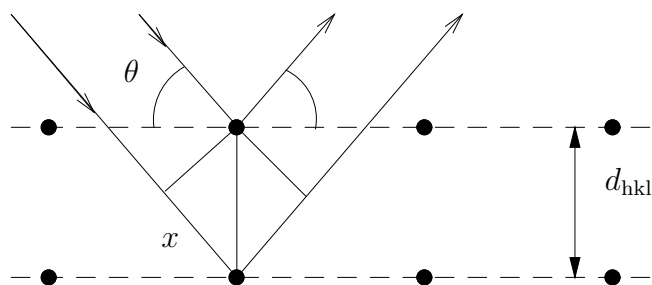
$$\sin \theta = \frac{x}{d_{hkl}}, \quad (1.21)$$

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda, \quad (1.22)$$

$n$  je řád odpovídající reflexe,

$$\frac{\lambda}{2d_{hkl}} \leq 1 \quad \Rightarrow \quad \lambda < 2d_{hkl} \quad \left( \frac{\lambda}{2} < d_{hkl} \right) \quad (1.23)$$

$d_{hkl}$  je obvykle  $2 \div 10 \text{ \AA} = 0,2 \div 1 \text{ nm}$  a tím vlnová délka  $\lambda$  odpovídá RTG paprskům, elektronům nebo neutronům.



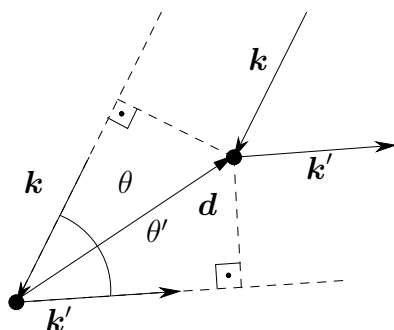
Obrázek 1.4: Braggova difrakční podmínka

## 1.5 Laueho formulace difrakční podmínky

Předpokládejme, že krystal se skládá z identických mikroskopických objektů (atomů, iontů) umístěných v bodech  $\mathbf{R}$  Bravaisovy mřížky. Každý z objektů může vyzářit dopadající záření v libovolném směru. Ostré píky budou pozorovány pouze ve směrech a při vlnových délkách, pro které paprsky rozptýlené z různých mřížkových bodů budou interferovat konstruktivně.

$$d \cos \theta + d \cos \theta' = \mathbf{d} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{d} \cdot \mathbf{n}' = \mathbf{d} \cdot (\mathbf{n} - \mathbf{n}') = m\lambda, \quad m \in Z, \quad (1.24)$$

$$\mathbf{d} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m. \quad (1.25)$$



Obrázek 1.5: Laueho formulace difrakční podmínky

Obecně

$$\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m, \quad (1.26)$$

$$\exp [i (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}] = 1, \quad (1.27)$$

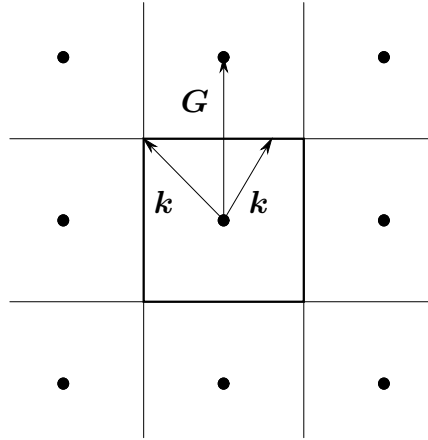
pro všechny Bravaisovy vektory  $\mathbf{R}$ . To odpovídá definici reciproké mřížky, tj.  $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$  je vektor reciproké mřížky,  $\mathbf{G} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ . Pokud je známa Bravaisova mřížka krystalu, lze určit Bravaisovou mřížku reciprokého krystalu.

Při pružném rozptylu platí  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k$

$$k^2 = k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + G^2, \quad (1.28)$$

$$G^2 = 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}, \quad (1.29)$$

$$\left(\frac{G}{2}\right)^2 = \mathbf{k} \cdot \left(\frac{\mathbf{G}}{2}\right) = |\mathbf{k}| \left|\frac{\mathbf{G}}{2}\right| \cos \theta = \left(\frac{G}{2}\right)^2. \quad (1.30)$$



Obrázek 1.6: Difrakce na hranici Brillouinovy zóny

Toto je jiná formulace difrakční podmínky. Každý vektor  $\mathbf{k}$  vedený z počátku a končící na rovině vedené jako kolmice v polovině spojnice dvou sousedních bodů, splňuje při pružném rozptylu difrakční podmínku. Takto popsaná rovina tvoří část hranice zóny. Svazek záření dopadající na krystal bude difraktovaný, jestliže jeho velikost a směr splňují podmínku

$$\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{G}}{2} = \left(\frac{1}{2}G\right)^2. \quad (1.31)$$

Směr difraktovaného paprsku je dán vektorem  $\mathbf{k} - \mathbf{G}$ . Oblast vyznačená jako prostor mezi počátkem a výše popsanými rovinami se nazývá Brillouinova zóna. Je to vlastně Wignerova-Seitzova buňka v reciproké mřížce.

## 1.6 Poruchová energie v přiblížení volných elektronů

Pomocí shora uvedené formulace difrakční podmínky lze vysvětlit vznik zakázaných pasů v polovodičích. Řešení energetického spektra elektronů v krystale při použití metody téměř volných elektronů vede k opravě v rámci prvního řádu poruchového počtu

$$\mathcal{E} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_{g \neq 0} \frac{|V_g|^2}{G^2 + 2\mathbf{G} \cdot \mathbf{k}}. \quad (1.32)$$

Tato oprava k energii volných elektronů je malá, pokud není jmenovatel zlomku roven nule. Když vlnový vektor elektronu  $\mathbf{k}$  splňuje pro některý vektor reciproké mříže  $\mathbf{G}$  podmínku  $G^2 + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = 0$ , je téměř volný pohyb elektronů silně porušen. Tato porucha má charakter zrcadlového odrazu elektronové vlny od atomové roviny kolmé k vektoru  $\mathbf{G}$  (Braggova difrakční podmínka).

Řešením rovnice pro přiblížení volných elektronů dostaneme v okolí první Brillouinovy zóny ( $k = \pm \frac{\pi}{a}$ )

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm |V_g|. \quad (1.33)$$

Energetické spektrum pak nabývá charakter pásů. V neporušených mřížích se elektron nemůže vyskytovat v zakázaném pásu.



# Kapitola 2

## Homogenní polovodič

### 2.1 Statistika elektronů

Elektrony se v tepelné rovnováze chovají jako soustava nabitých nerozlišitelných částic. Na dovolených energetických hladinách jsou rozděleny Fermiho statistikou.

Energetické stavy rozlišujeme:

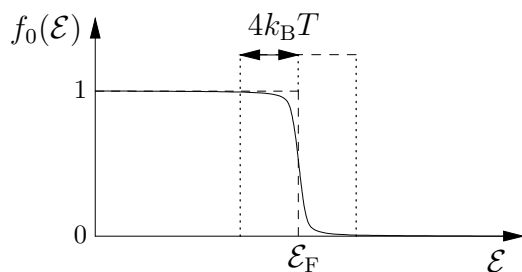
- spojité — kontinuum (vodivostní pás, příměsový pás a valenční pás),
- diskrétní (příměsi).

#### 2.1.1 Rozdělovací funkce elektronů

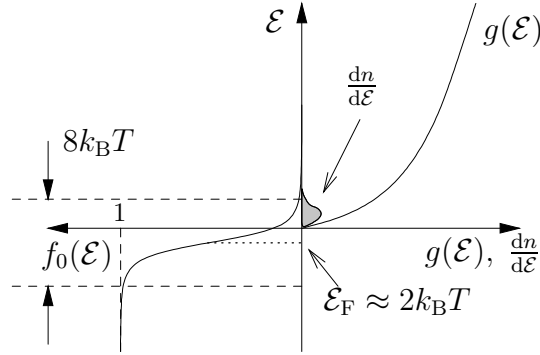
Rozdělovací funkce elektronů má tvar

$$f_0(\mathcal{E}_S) = \frac{n_S}{g_S} = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E}_S - \mathcal{E}_F}{k_B T}\right]}, \quad (2.1)$$

kde  $n_S$  je počet elektronů ve stavu s energií  $\mathcal{E}_S$ ,  $g_S$  počet stavů s energií  $\mathcal{E}_S$ ,  $\mathcal{E}_F$  Fermiho energie (chemický potenciál),  $k_B$  označuje Boltzmannovu konstantu a  $T$  teplotu.



Obrázek 2.1: Fermiho rozdělovací funkce



Obrázek 2.2: Koncentrace elektronů ve vodivostním pásu

### 2.1.2 Elektrony ve vodivostním pásu

Elektrony v tepelné rovnováze s krystalovou mříží se ve vodivostním pásu chovají jako volné částice s efektivní hmotností  $m_e^*$ . Pro rozdělovací funkci platí

$$f_0(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_F}{k_B T}\right]}. \quad (2.2)$$

### 2.1.3 Vlastnosti rozdělovací funkce

Na obr. 2.1 je znázorněn průběh rozdělovací funkce  $f_0(\mathcal{E}_{\mathbf{k}})$  pro  $T = 0$  a  $T > 0$ .

Podle polohy Fermiho energie při teplotě  $T$  se mohou elektrony v krystalu chovat jako:

**nedegenerovaný elektronový plyn** definovaný podmínkami

$$\exp\left(-\frac{\mathcal{E}_F}{k_B T}\right) \gg 1, \quad \text{při} \quad -\frac{\mathcal{E}_F}{k_B T} > 4. \quad (2.3)$$

V tomto případě Fermiho mez leží v zakázaném pásu alespoň  $4k_B T$  od vodivostního pásu. Fermiho rozdělení se redukuje na Boltzmannovo rozdělení. Tyto vztahy a další vztahy v textu platí za předpokladu, že položíme nulu energie do dna vodivostního pásu  $\mathcal{E}_C = 0$ . Energie elektronů ve vodivostním pásu jsou pak kladné, v zakázaném pásu pak záporné.

$$f_0(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}) = \exp\left[\frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}(\mathbf{k})}{k_B T}\right]. \quad (2.4)$$

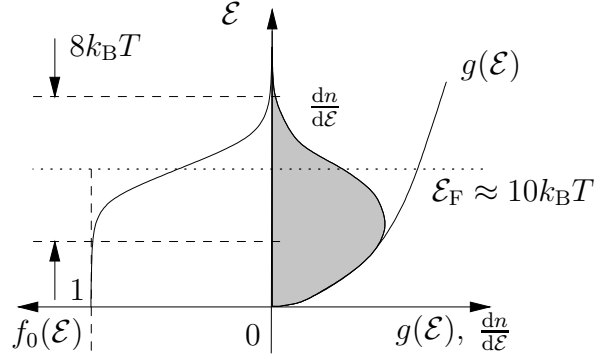
**silně degenerovaný elektronový plyn** vyhovující vztahům

$$\exp\left(\frac{\mathcal{E}_F}{k_B T}\right) \gg 1, \quad \text{při} \quad \frac{\mathcal{E}_F}{k_B T} > 10. \quad (2.5)$$

Fermiho mez leží hluboko ve vodivostním pásu (například u kovů).

částečně degenerovaný elektronový plyn

$$-4 < \frac{\mathcal{E}_F}{k_B T} < 10. \quad (2.6)$$



Obrázek 2.3: Koncentrace elektronů ve vodivostním pásu-degenerovaný případ

### 2.1.4 Rozdělovací funkce elektronů v krystalu

Při stanovení rozdělovací funkce elektronů budeme hledat počet rozlišitelných způsobů, kterým je možné daný počet částic rozdělit do určitého počtu krabiček. V našem případě částice představují elektrony a krabičkami jsou vlastní stavy systému. Těmi mohou být stavy v pásu, určené kvantovými čísly  $k_x$ ,  $k_y$ ,  $k_z$  nebo příměsové stavy, charakterizované vlastními kvantovými čísly. Důležitým předpokladem je, že elektron v jednom stavu (krabička) musí jen slabě interagovat s elektrony v ostatních stavech. V takovém případě je celkový Hamiltonián systému pouhým součtem individuálních Hamiltoniánů.

Elektrony v systému přicházejí z valenčního pásu nebo z donorových stavů. Tyto elektrony mohou být distribuovány mezi stavy ve valenčním pásu, vodivostním pásu a mezi donorová a akceptorová centra.

Vodivostní pás rozdělme na energetické úseky  $\Delta\mathcal{E}_C$ . Každý tento úsek obsahuje velké množství stavů, ale velikostně je menší než  $\Delta\mathcal{E}$  charakterizující přesnost měření. Předpokládejme, že  $i$ -tý úsek ( $\Delta\mathcal{E}_{C_i}$ ) obsahuje  $n_{C_i}$  elektronů rozmístěných do  $N_{C_i}$  stavů. Počet rozlišitelných způsobů, jak rozdělit  $n_{C_i}$  elektronů do  $N_{C_i}$  stavů je

$$W_{C_i} = \binom{N_{C_i}}{n_{C_i}} = \frac{N_{C_i}!}{n_{C_i}!(N_{C_i} - n_{C_i})!}. \quad (2.7)$$

Počet rozlišitelných způsobů, jak rozmístit všechny vodivostní elektrony je

$$W_C = \prod_i W_{C_i} = \prod_i \frac{N_{C_i}!}{n_{C_i}!(N_{C_i} - n_{C_i})!}. \quad (2.8)$$

Analogicky pro valenční pás platí

$$W_V = \prod_j W_{V_j} = \prod_j \frac{N_{V_j}!}{n_{V_j}!(N_{V_j} - n_{V_j})!}. \quad (2.9)$$

Zavedení příměsí do statistiky je relativně jednoduché za předpokladu, že každá příměs má jen jeden stav v zakázaném pásu (toto omezení v pozdějším výkladu již nebude uplatňováno). To znamená, že obsahuje-li konkrétní atom  $n_a + 1$  elektronů, je potřeba energie  $E_{I_k}$  k excitaci jednoho z elektronů ( $E_{I_k} < E_g$ ). Obsahuje-li atom  $n_a$  elektronů, je potřeba k excitaci jednoho elektronu energie větší než  $E_g$ . Bez degenerace je počet možných permutací.

$$\binom{N_{I_k}}{n_{I_k}} = \frac{N_{I_k}!}{n_{I_k}!(N_{I_k} - n_{I_k})!}. \quad (2.10)$$

Zde  $N_{I_k}$  je celkový počet atomů příměsí typu  $k$ , z nichž  $n_{I_k}$  obsahuje  $n_a + 1$  elektronů a zbytek  $n_a$  elektronů. Navíc příslušné elektrony ( $n_a$  nebo  $n_a + 1$ ) na každém atomu mohou být permutovány  $g$  způsoby, kde  $g$  je degenerace příslušného stavu. Například máme-li tři ekvivalentní elektrony v orbitalu, který může obsáhnout celkem elektronů šest, je degenerace  $g = \frac{6!}{3!3!} = 20$ . Předpokládáme, že  $g_1$  je degenerace stavu s  $n_a + 1$  elektrony a  $g_0$  degenerace stavu s  $n_a$  elektrony. Pak díky tomu, že stavy obsahující o jeden elektron navíc jsou obsazeny  $n_{I_k}$  elektrony a počet stavů s  $n_a$  elektrony je  $N_{I_k} - n_{I_k}$ , máme  $g_1^{n_{I_k}} g_0^{(N_{I_k} - n_{I_k})}$  extra permutací, takže nakonec

$$W_{I_k} = \frac{g_1^{n_{I_k}} g_0^{(N_{I_k} - n_{I_k})} N_{I_k}!}{n_{I_k}!(N_{I_k} - n_{I_k})!}. \quad (2.11)$$

Máme-li více příměsí (donorů či akceptorů), je výsledný počet jejich obsazení

$$W_I = \prod_k W_{I_k}. \quad (2.12)$$

Celkový počet rozlišitelných způsobů, jak rozdělit elektrony v systému, je

$$W = W_C W_V W_I. \quad (2.13)$$

**Věta:** (plynoucí z teorie pravděpodobnosti)

*Předpokládáme-li, že každá permutace, jejímž výsledkem je stejná celková energie, je stejně pravděpodobná, pak nejpravděpodobnější rozdělení mezi energetické úseky je to, které maximalizuje  $W$ .*

Nyní spolu se *Stirlingovým vzorcem*  $\ln N! = N \ln N - N$  tuto větu aplikujeme na náš případ. Vzhledem ke stejné monotonii  $W_i$  i  $\ln W$  můžeme studovat jednodušší linearizova-

nou závislost  $\ln W$ . Po rozepsání dostaneme

$$\begin{aligned} \ln W = & \sum_i N_{C_i} \ln N_{C_i} - n_{C_i} \ln n_{C_i} - (N_{C_i} - n_{C_i}) \ln(N_{C_i} - n_{C_i}) + \\ & + \sum_j N_{V_j} \ln N_{V_j} - n_{V_j} \ln n_{V_j} - (N_{V_j} - n_{V_j}) \ln(N_{V_j} - n_{V_j}) + \\ & + \sum_k N_{I_k} \ln N_{I_k} - n_{I_k} \ln n_{I_k} - (N_{I_k} - n_{I_k}) \ln(N_{I_k} - n_{I_k}) + \\ & + n_{I_k} \ln g_{1k} + (N_{I_k} - n_{I_k}) \ln g_{0k}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Při maximalizaci  $\ln W$  musí být zachován celkový počet elektronů a celková energie. Máme tedy dvě podmínky

$$F_1(n) = \sum_i n_{C_i} + \sum_j n_{V_j} + \sum_k n_{I_k} = N_e, \quad (2.15)$$

$$F_2(n, \mathcal{E}) = \sum_i n_{C_i} \mathcal{E}_{C_i} + \sum_j n_{V_j} \mathcal{E}_{V_j} + \sum_k n_{I_k} \mathcal{E}_{I_k} = \mathcal{E}_t \quad (2.16)$$

potřebné k užití metody Lagrangeových multiplikátorů

$$\frac{\partial}{\partial n_e} \{ \ln W + \alpha [N_e - F_1(n)] + \beta [\mathcal{E}_t - F_2(n, \mathcal{E})] \} = 0. \quad (2.17)$$

Nechť je postupně  $n_e = n_{C_e}, n_{V_e}, n_{I_e}$ , kde index  $e$  označuje vybraný elektron. Pak

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln W}{\partial n_{C_e}} &= -\ln n_{C_e} - 1 + \frac{N_{C_e}}{N_{C_e} - n_{C_e}} + \ln(N_{C_e} - n_{C_e}) - \frac{n_{C_e}}{N_{C_e} - n_{C_e}} = \\ &= \ln(N_{C_e} - n_{C_e}) - 1 - \ln n_{C_e} + 1 = \ln(N_{C_e} - n_{C_e}) - \ln n_{C_e}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial n_{C_e}} \alpha [N_e - F_1(n)] = 0 - \alpha \frac{\partial F_1(n)}{\partial n_{C_e}} = -\alpha, \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial n_{C_e}} \beta [\mathcal{E}_t - F_2(n, \mathcal{E})] = -\beta \mathcal{E}_{C_e}. \quad (2.20)$$

Tedy celkem

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial n_{C_e}} \{ \ln W + \alpha [N_e - F_1(n)] + \beta [\mathcal{E}_t - F_2(n, \mathcal{E})] \} = \\ = \ln(N_{C_e} - n_{C_e}) - \ln n_{C_e} - \alpha - \beta \mathcal{E}_{C_e} = 0. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Analogicky dostaneme

$$\ln(N_{V_e} - n_{V_e}) - \ln n_{V_e} - \alpha - \beta \mathcal{E}_{V_e} = 0 \quad (2.22)$$

a

$$\ln(N_{I_e} - n_{I_e}) - \ln n_{I_e} + \ln g_{1e} - \ln g_{0e} - \alpha - \beta \mathcal{E}_{I_e} = 0. \quad (2.23)$$

Z těchto vztahů zřejmě plyne

$$n_{C_e} = \frac{N_{C_e}}{1 + \exp(\alpha + \beta \mathcal{E}_{C_e})}, \quad (2.24)$$

$$n_{V_e} = \frac{N_{V_e}}{1 + \exp(\alpha + \beta \mathcal{E}_{V_e})} = N_{V_e} - \frac{N_{V_e}}{1 + \exp[-(\alpha + \beta \mathcal{E}_{V_e})]}, \quad (2.25)$$

$$n_{I_e} = \frac{N_{I_e}}{1 + \frac{g_0}{g_1} \exp(\alpha + \beta \mathcal{E}_{I_e})}. \quad (2.26)$$

Lze ukázat, že pro multiplikatory  $\alpha$  a  $\beta$  platí

$$\alpha = -\frac{\mathcal{E}_F}{k_B T}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (2.27)$$

V *obecném případě* necht'  $n_{klm}$  je počet center  $m$ -tého excitovaného stavu  $l$ -tého nábojového stavu  $k$ -té příměsi nebo energetického úseku vodivostního nebo valenčního pásu. Nultý stav rezonuje s valenčním pásem, tj. k excitaci elektronu z tohoto stavu do vodivostního pásu je potřebná energie větší než  $\mathcal{E}_g$ . Ať  $l_k$  je počet nábojových stavů (hladin) v zakázaném pásu pro  $k$ -té centrum  $l = 0, 1, \dots, l_k$ , kde  $l$  je počet ionizovatelných elektronů. Pro dané  $l$  je  $m_{kl}$  počet excitovaných stavů ( $m_l = 0, 1, \dots, m_{kl}$ ). Necht'  $g_{klm}$  je degenerace  $klm$ -tého stavu, pak

$$W = \prod_k \prod_{l=0}^{l_k} \prod_{m=0}^{m_{kl}} \frac{(g_{klm})^{n_{klm}} N_k!}{n_{klm}!}. \quad (2.28)$$

Hledání maxima této funkce je omezeno podmínkami

- zachování počtu elektronů na  $k$ -té příměsi

$$\sum_{l,m} n_{klm} = N_k. \quad (2.29)$$

Příslušný Lagrangeův multiplikátor označíme  $\gamma_k$ .

- zachování celkového počtu elektronů (každá příměs ve stavu  $klm$  má  $l$  ionizovatelných elektronů)

$$\sum_{k,l,m} n_{klm} l = N_e, \quad (2.30)$$

kde  $N_e$  je celkový počet elektronů. Zde Lagrangeův multiplikátor označíme  $\alpha$ .

- zachování celkové energie

$$\sum_{k,l,m} n_{klm} \mathcal{E}_{klm} = \mathcal{E}_F, \quad (2.31)$$

přičemž  $\beta$  bude odpovídající Lagrangeův multiplikátor.

Konečně můžeme psát

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial n_{klm}} \{ \ln W + \gamma_k [N_k - F_{1k}(n)] + \alpha [N_e - F_1(n)] + \beta [\mathcal{E}_F - F_2(n, \mathcal{E})] \} = \\ = \ln g_{klm} - \ln n_{klm} - \gamma_k - \alpha l - \beta \mathcal{E}_{klm} = 0. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Ve speciálním případě  $l = 0$  a  $m = 0$  máme

$$\ln g_{k00} - \ln n_{k00} - \gamma_k - \beta \mathcal{E}_{k00} = 0. \quad (2.33)$$

Kombinací rovnic (2.32) a (2.33) získáme

$$n_{klm} = \frac{g_{klm}}{g_{k00}} n_{k00} e^{-l\alpha - \beta(\mathcal{E}_{klm} - \mathcal{E}_{k00})} = \frac{g_{klm}}{g_{k00}} n_{k00} e^{-l\eta_F - (\eta_{klm} - \eta_{k00})}, \quad (2.34)$$

kde zavádíme *redukovanou energii*

$$\eta_{klm} = \frac{\mathcal{E}_{klm}}{k_B T}. \quad (2.35)$$

Pro počet elektronů na  $k$ -té příměsi dostáváme

$$\begin{aligned} N_k &= \sum_{l,m} n_{klm} = \frac{n_{k00}}{g_{k00}} \sum_{l,m} g_{klm} e^{-l\eta_F - (\eta_{klm} - \eta_{k00})} = \\ &= n_{klm} \left( 1 + \sum_{l' \neq l} \sum_{m' \neq m'} \frac{n_{kl'm'}}{n_{klm}} \right) = \\ &= n_{klm} \left( 1 + \sum_{l' \neq l} \sum_{m' \neq m'} \frac{g_{kl'm'}}{g_{klm}} e^{\eta_{klm} - \eta_{kl'm'} - (l-l')\eta_F} \right), \end{aligned} \quad (2.36)$$

z čehož pro počet elektronů ve stavu  $klm$  plyne

$$n_{klm} = \frac{N_k}{1 + \sum_{l' \neq l} \sum_{m' \neq m'} \frac{g_{kl'm'}}{g_{klm}} e^{\eta_{klm} - \eta_{kl'm'} - (l-l')\eta_F}}. \quad (2.37)$$

### 2.1.5 Výpočet koncentrace elektronů ve vodivostním pásu

Od této chvíle budeme normalizovat počty částic na jednotkový objem, takže se z nich stanou hustoty částic

$$n = \sum_{l(\text{vod. pás})} n_{C_l} = \sum_l \frac{N_{e_l}}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_F}{k_B T}\right]} = \sum_l \frac{g(\mathcal{E}_l) \Delta \mathcal{E}}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_F}{k_B T}\right]}, \quad (2.38)$$

kde  $g(\mathcal{E})$  je hustota stavů ve vodivostním pásu, pro kterou se započtením spinu platí

$$g(\mathcal{E}) = \frac{4\pi(2m_e^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{\mathcal{E}}. \quad (2.39)$$

Pak přechodem k integraci, tj. ke spojitému rozdělení energií, dostáváme

$$n = \int_{\mathcal{E}_{C_{\min}}}^{\mathcal{E}_{C_{\max}}} \frac{g(\mathcal{E})d\mathcal{E}}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{k_B T}\right]} = \frac{4\pi(2m_e^*)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\mathcal{E}}d\mathcal{E}}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{k_B T}\right]} = \int_0^\infty f_0(\mathcal{E})g(\mathcal{E})d\mathcal{E}. \quad (2.40)$$

V poslední úpravě jsme předpokládali, že na dně vodivostního pásu je  $\mathcal{E} = 0$  a vzhledem k tomu, že Fermiho funkce efektivně padá k nule už jen několik  $k_B T$  nad  $\mathcal{E}_F$ , je možné horní mez integrace položit rovnou nekonečnu, což značně usnadní řešení integrálu. V některých učebnicích se do funkce  $g(\mathcal{E})$  nezapočítává faktor 2 spinové degenerace — pak je

$$n = 2 \int_0^\infty f_0(\mathcal{E})g'(\mathcal{E})d\mathcal{E}. \quad (2.41)$$

Použijeme-li výše zavedenou redukovanou energii  $x = \frac{\mathcal{E}}{k_B T}$  a redukovanou Fermiho energii  $\eta = \frac{\mathcal{E}_F}{k_B T}$ , můžeme odvodit

$$n = \int_0^\infty f_0(\mathcal{E})g(\mathcal{E})d\mathcal{E} = \frac{\sqrt{2}(m_e^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\mathcal{E}}d\mathcal{E}}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{k_B T}\right]} = \quad (2.42)$$

$$= \frac{\sqrt{2}(m_e^* k_B T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x-\eta} + 1} dx. \quad (2.43)$$

Tento výsledek lze také zapsat pomocí tzv. *Fermiho integrálu*  $\mathcal{F}_r^*(\eta)$  definovaného vztahem

$$\mathcal{F}_r^*(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^r}{e^{x-\eta} + 1} dx \quad (2.44)$$

jako

$$n = \frac{\sqrt{2}(m_e^* k_B T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta). \quad (2.45)$$

Jestliže nyní vezmeme

$$N_C = 2 \frac{(2\pi m_e^* k_B T)^{3/2}}{h^3} \quad (2.46)$$

jako tzv. *efektivní hustotu stavů elektronů*, je možné **koncentraci elektronů**  $n$  napsat v ještě přehlednějším tvaru

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta). \quad (2.47)$$

Vedle právě ukázaného způsobu zavedení Fermiho integrálu existuje i alternativní postup:

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) k^3(\mathcal{E})d\mathcal{E} = \frac{1}{3\pi^2} \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^\infty \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \mathcal{E}^{3/2} d\mathcal{E}, \quad (2.48)$$



neboť

$$k^3 = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{\hbar^3} \mathcal{E}^{3/2}. \quad (2.49)$$

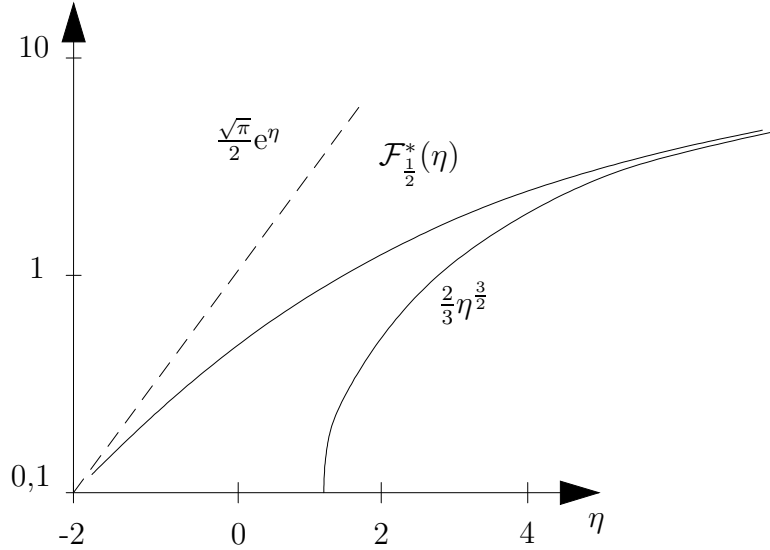
Pak po dosazení redukované energie, redukované Fermiho energie a efektivní hustoty stavů máme

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \int_0^\infty \left( -\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{3/2} dx, \quad (2.50)$$

kde výraz

$$\mathcal{F}_r(\eta) = \int_0^\infty \left( -\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^r dx \quad (2.51)$$

je tzv. *Fermiho-Diracův integrál*. Konečně **koncentrace elektronů**  $n$  nabývá přehledného



Obrázek 2.4: Aproximace Fermiho integrálu

zápisu

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{3/2}(\eta). \quad (2.52)$$

Místo  $\mathcal{F}_r(\eta)$  se někdy rovněž zavádí

$$\mathfrak{F}_r = \frac{\mathcal{F}_r(\eta)}{\Gamma(r+1)}, \quad (2.53)$$

přičemž  $\Gamma(r+1)$  je známá  $\Gamma$ -funkce s následujícími vlastnostmi :

$$\Gamma(r+1) = r\Gamma(r), \quad \Gamma(j+1) = j!, \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}, \quad (2.54)$$

takže pro **koncentraci elektronů** platí

$$\begin{aligned} n &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{3/2}(\eta) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \frac{3}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \mathfrak{F}_{3/2}(\eta) = \\ &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \frac{3}{2} \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \mathfrak{F}_{3/2}(\eta) = N_C \mathfrak{F}_{3/2}(\eta). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Pro některé oblasti je možné Fermiho integrály nahradit analytickou funkcí, například  $\mathcal{F}_{1/2}^*$  lze nahradit dle tabulky níže uvedené.

Aproximující funkce	Oblast platnosti	Relativní chyba
$\frac{\sqrt{\pi}}{2} e^\eta$	$\eta < -4$	1 %
$\frac{\sqrt{\pi}}{2} e^\eta (1 - 0,3e^\eta + 0,06e^{2\eta})$	$\eta < 0$	0,75 %
$\frac{\sqrt{\pi}}{2} e^\eta \frac{1}{1+0,27e^\eta}$	$\eta < 1,25$	3 %
$\frac{2}{3} \eta^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8\eta^2}\right)$	$\eta > 1,25$	1 %
$\frac{2}{3} \eta^{3/2}$	$\eta > 10$	1,5 %

Tabulka 2.1: Tabulka aproximací

Tyto aproximace použijeme pro dva limitní případy:

**nedegenerovaný polovodič** , kde  $\eta < -4$

Koncentraci elektronů lze pak vyjádřit

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^\eta = N_C e^\eta, \quad (2.56)$$

**silně degenerovaný polovodič** , pro který je  $\eta > 10$

Koncentrace elektronů má potom tvar

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \frac{2}{3} \eta^{3/2} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \eta^{3/2}, \quad (2.57)$$

přičemž zavádíme

$$\mathcal{E}_{F0} = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (3\pi^2 n)^{2/3}, \quad k_{F0} = (3\pi^2 n)^{1/3}. \quad (2.58)$$

Namísto započítávání počtu elektronů ve valenčním pásu se ukazuje jako výhodné počítat s chybějícími elektrony (které se v důsledku excitací nacházejí na energetických hladinách v zakázaném pásu nebo ve vodivostním pásu). Tyto chybějící elektrony ve valenčním pásu lze popsat jako místa s kladným nábojem, tzv. díry.

## 2.2 Statistika děr

Rozdělovací funkce pro díry je

$$\begin{aligned} f_{0h}(\mathcal{E}) &= 1 - f_0(\mathcal{E}) = 1 - \frac{1}{e^{(x-\eta)+1}} = \frac{e^{(x-\eta)+1}-1}{e^{(x-\eta)+1}} = \\ &= \frac{e^{(x-\eta)}}{e^{(x-\eta)+1}} = \frac{1}{1+e^{-(x-\eta)}}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Aby byly vztahy pro elektrony a díry obdobné, je nutné provést transformaci

$$\mathcal{E}' = -\mathcal{E} - \mathcal{E}_g, \quad x' = -x - \frac{1}{\beta}, \quad (2.60)$$

$$\mathcal{E}'_F = -\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_g, \quad \Rightarrow \quad \eta' = \frac{\mathcal{E}'_F}{k_B T}, \quad (2.61)$$

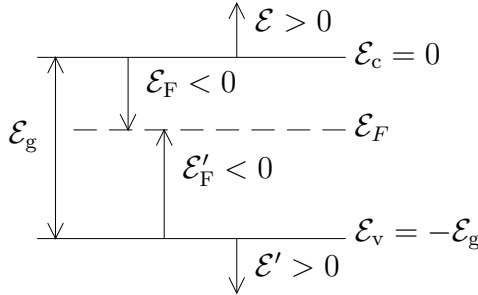
$$\beta = \frac{k_B T}{\mathcal{E}_g}, \quad \eta' = -\eta - \frac{1}{\beta}. \quad (2.62)$$

Pak

$$f_{0h}(x) = \frac{1}{1 + e^{-(x-\eta)}} = \frac{1}{e^{x'+\frac{1}{\beta}-\eta'-\frac{1}{\beta}} + 1} = \quad (2.63)$$

$$= \frac{1}{1 + e^{(x'-\eta')}} = f_0(x'), \quad (2.64)$$

kde  $\mathcal{E}'_F$  je Fermiho mez pro díry odečítaná od vrcholu valenčního pásu (viz obr. 2.5).



Obrázek 2.5: Energetické schéma homogenního polovodiče

Přejdeme-li tedy plně k dírákům, tj.

$$x \longrightarrow x', \quad \eta \longrightarrow \eta', \quad m_e^* \longrightarrow m_h^*, \quad (2.65)$$

získáme pro koncentraci děr

$$p = \int_0^{\infty} f_0(\mathcal{E}')g(\mathcal{E}')d\mathcal{E}' = \frac{2}{\sqrt{\pi}}N_V\mathcal{F}_{1/2}^*(\eta') = \frac{4}{3\sqrt{\pi}}N_V\mathcal{F}_{3/2}(\eta') = N_V\mathfrak{F}_{3/2}(\eta'), \quad (2.66)$$

kde

$$N_V = 2 \frac{(2\pi m_h^* k_B T)^{3/2}}{h^3} \doteq 4,84 \cdot 10^{15} \left( \frac{m_h^*}{m_0} \right)^{3/2} T^{3/2} \text{ cm}^{-3} \quad (2.67)$$

je *efektivní hustota stavů ve valenčním pásu*.

## 2.3 Příměsi

Nyní odvodíme konkrétní vztahy pro obsazení příměsových hladin monovalentních akceptorů a donorů. Z obecného vztahu (2.37) při zanedbání excitovaných stavů dostáváme

$$n_{kl} = \frac{N_k}{1 + \sum_{l' \neq l} \frac{g_{kl'}}{g_{kl}} e^{\frac{\mathcal{E}_{kl} - \mathcal{E}_{kl'}}{k_B T} - \frac{\mathcal{E}_F}{k_B T} l - l'}}, \quad (2.68)$$

kde  $k$  označuje typ centra (akceptor, donor),  $l$  nábojový stav (počet ionizovatelných donorů) a  $g_{kl}$  je stupeň degenerace daného stavu.  $\mathcal{E}_{kl}$  je energie potřebná k přenesení  $l$  elektronů z vrcholu valenčního pásu na energetický stav příměsi.

### 2.3.1 Monovalentní donor

Zde je  $\mathbf{l}=\mathbf{0}$  (žádný elektron na centru, donor je ionizován) nebo  $\mathbf{l}=\mathbf{1}$  (elektron je na centru, donor je elektricky neutrální). Potom, položíme-li nulovou hladinu energie na dno vodivostního pásu je  $\mathcal{E}_{k1} = \mathcal{E}_D$ . Dále platí  $\mathcal{E}_{D0} = 0$  (k přenesení 0 elektronů není potřebná žádná energie), tedy

$$n_{D0} = \frac{N_D}{1 + \frac{g_{D0}}{g_{D1}} e^{\frac{\mathcal{E}_D - \mathcal{E}_F}{k_B T}}}. \quad (2.69)$$

Vzhledem k tomu, že

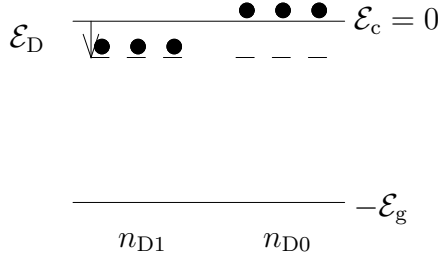
$$g_{D0} = \frac{2!}{0!2!} = 1, \quad g_{D1} = \frac{2!}{1!1!} = 2, \quad g_{D2} = \frac{2!}{2!} = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{g_{D1}}{g_{D0}} = 2, \quad (2.70)$$

platí pro  $n_{D0}$

$$n_{D0} = \frac{N_D}{1 + 2e^{\frac{-\mathcal{E}_D + \mathcal{E}_F}{k_B T}}} \quad (2.71)$$

a pro  $n_{D1}$

$$n_{D1} = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2}e^{\frac{\mathcal{E}_D - \mathcal{E}_F}{k_B T}}}. \quad (2.72)$$



Obrázek 2.6: Pásové schéma monovalentního donoru

### 2.3.2 Monovalentní akceptor

V základním (elektricky neutrálním) stavu chybí na akceptoru jeden elektron. V případě  $l=1$  ( $l'=0$ ) je elektron na akceptoru (akceptor je ionizován). Vztáhneme-li nulu energií ke dnu vodivostního pásu je  $\mathcal{E}_{A1} = \mathcal{E}_A$ . Stejně jako v případě monovalentního donoru je  $\mathcal{E}_{D0} = 0$ .

$$n_{A1} = \frac{N_A}{1 + \frac{g_{A0}}{g_{A1}} e^{\frac{\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_F}{k_B T}}}. \quad (2.73)$$

Vzhledem k tomu, že vrchol valenčního pásu je dvakrát degenerovaný (přítomny lehké i těžké díry), může být obsazen čtyřmi elektrony. Neionizovaný akceptor obsahuje tři elektrony, zatímco ionizovaný čtyři. Potom

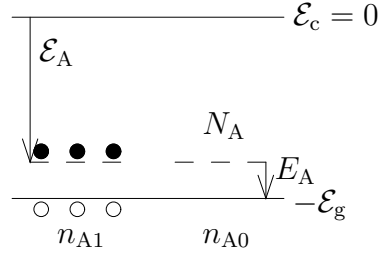
$$g_{A0} = \frac{4!}{3!1!} = 4, \quad g_{A1} = \frac{4!}{4!0!} = 1, \quad \Rightarrow \quad \frac{g_{A0}}{g_{A1}} = 4. \quad (2.74)$$

Počet elektronů na akceptoru  $n_{A1}$  je roven počtu děr ve valenčním pásu vzniklých v důsledku přechodu elektronů z valenčního pásu na akceptor. Celkem tedy máme

$$n_{A1} = \frac{N_A}{1 + 4e^{\frac{\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_F}{k_B T}}}. \quad (2.75)$$

Za předpokladu  $l=0$  ( $l'=1$ ) není na akceptoru žádný elektron, je tedy v neutrálním stavu. Pak při ponechání  $\mathcal{E}_{A0} = 0$  a  $\mathcal{E}_{A1} = \mathcal{E}_A$  plyne pro počet elektronů na akceptoru

$$n_{A0} = \frac{N_A}{1 + \frac{1}{4} e^{-\frac{\mathcal{E}_A + \mathcal{E}_F}{k_B T}}}. \quad (2.76)$$



Obrázek 2.7: Pásové schéma monovalentního akceptoru

## 2.4 Stanovení Fermiho meze

Uvažujme vlastní polovodič: podmínka elektrické neutrality dává

$$p = n, \quad (2.77)$$

$$\frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_V \mathcal{F}_{3/2}(\eta') = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{3/2}(\eta), \quad (2.78)$$

$$(m_h^*)^{3/2} \mathcal{F}_{3/2}(\eta') = (m_e^*)^{3/2} \mathcal{F}_{3/2}(\eta). \quad (2.79)$$

Tuto rovnici lze vyřešit pouze numericky nebo aproximativně například pro nedegenerovaný polovodič

$$(m_h^*)^{3/2} \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta') = (m_e^*)^{3/2} \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta), \quad (2.80)$$

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2} (m_h^*)^{3/2} e^{\eta'} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (m_e^*)^{3/2} e^{\eta}, \quad (2.81)$$

$$(m_h^*)^{3/2} e^{-\eta - \beta_g} = (m_e^*)^{3/2} e^{\eta}; \quad \beta_g = \frac{\mathcal{E}_g}{k_B T}, \quad (2.82)$$

$$e^{2\eta} = e^{-\beta_g} \left( \frac{m_h^*}{m_e^*} \right)^{3/2}, \quad (2.83)$$

$$\eta_i \stackrel{\text{def}}{=} \eta = -\frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_g}{k_B T} + \frac{3}{4} \ln \left( \frac{m_h^*}{m_e^*} \right). \quad (2.84)$$

Tímto jsme definovali tzv. *intrinsickou Fermiho mez*  $\eta_i$ . Je proto možné rozeznávat polovodiče typu N a P:

**N-typ**  $\eta > \eta_i$ ,

**P-typ**  $\eta < \eta_i$ .

Nyní ještě odvodíme *intrinsickou koncentraci nosičů*.

$$n_i = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \frac{\pi}{\sqrt{2}} e^{\eta_i} = \quad (2.85)$$

$$= N_C e^{\eta_i} = N_C e^{-\frac{\beta_g}{2}} \left( \frac{m_h^*}{m_e^*} \right)^{3/4} = (N_C N_V)^{1/2} e^{-\frac{\beta_g}{2}}. \quad (2.86)$$

Pro *nedegenerovaný polovodič* tedy platí

$$n_i^2 = np. \quad (2.87)$$

## 2.5 Podmínka elektrické neutrality

Pro extrinsický polovodič má *podmínka elektrické neutrality* tvar

$$p + n_{D0} = n + p_{A1} \qquad p + N_D^+ = n + N_A^-, \quad (2.88)$$

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} N_V \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta') + \frac{N_D}{1 + 2e^{\mathcal{E}_D^* + \eta}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta) + \frac{N_A}{1 + 4e^{E_A^* + \eta'}}, \quad (2.89)$$

kde

$$\eta' = -\eta - \mathcal{E}_g^*, \quad (2.90)$$

$$\mathcal{E}_g^* = \frac{\mathcal{E}_g}{k_B T}, \quad (2.91)$$

$$\mathcal{E}_D^* = \frac{\mathcal{E}_D}{k_B T}, \quad (2.92)$$

$$E_A^* = \frac{E_A}{k_B T}. \quad (2.93)$$

Řešením této rovnice dostaneme vždy *Fermiho mez*  $\eta$ , resp.  $\mathcal{E}_F$ .

### 2.5.1 Nedegenerovaný kompenzovaný N-tyt

Jako příklad ukážeme nyní výpočet Fermiho meze pro nedegenerovaný kompenzovaný polovodič typu n. Jak jsme uvedli výše, vyjdeme z podmínky elektrické neutrality

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} N_V \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta') + \frac{N_D}{1 + 2 \exp[\mathcal{E}_D^* + \eta]} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{1/2}^*(\eta) + \frac{N_A}{1 + 4 \exp[E_A^* + \eta']},$$

$$p + p_D = n + n_A. \quad (2.94)$$

Z vlastností uvažovaného polovodiče plyne

$$p \rightarrow 0, \qquad n = N_C e^\eta, \qquad n_A = N_A. \quad (2.95)$$

Dostáváme tedy

$$N_C e^\eta = \frac{N_D}{1 + 2e^{\mathcal{E}_D^* + \eta}} - N_A,$$

$$N_C e^\eta (1 + 2e^{\mathcal{E}_D^* + \eta}) = N_D - N_A (1 + 2e^{\mathcal{E}_D^* + \eta}). \quad (2.96)$$

Úpravou získáme

$$\begin{aligned}
N_C e^\eta + 2N_C e^{\varepsilon_D^*} e^{2\eta} - N_D + N_A + 2N_A e^{\varepsilon_D^*} e^\eta &= 0, \\
e^{2\eta} \cdot 2N_C e^{\varepsilon_D^*} + e^\eta (N_C + 2N_A e^{\varepsilon_D^*}) - (N_D - N_A) &= 0, \\
N_C^2 e^{2\eta} + \underbrace{N_C e^\eta}_{n} \left( N_A + \frac{1}{2} N_C e^{-\varepsilon_D^*} \right) - \frac{1}{2} N_C (N_D - N_A) e^{-\varepsilon_D^*} &= 0, \\
n^2 + n \underbrace{\left( N_A + \frac{1}{2} N_C e^{-\varepsilon_D^*} \right)}_b - \underbrace{\frac{1}{2} N_C (N_D - N_A) e^{-\varepsilon_D^*}}_c &= 0. \tag{2.97}
\end{aligned}$$

Stačí jen vyřešit tuto kvadratickou rovnici v proměnné  $n$ . Spočítáme-li diskriminant  $D = b^2 - 4ac$  ( $a = 1$ ), můžeme pro kořeny psát

$$n = -\frac{b}{2} + \sqrt{\left(\frac{b}{2}\right)^2 - c} = \frac{b}{2} \left[ \sqrt{1 - \frac{c}{\left(\frac{b}{2}\right)^2}} - 1 \right], \tag{2.98}$$

$$n = N_C e^\eta = \frac{1}{4} (2N_A + N_C e^{-\varepsilon_D^*}) \left[ \left( 1 + \frac{8(N_D - N_A) N_C e^{-\varepsilon_D^*}}{(2N_A + N_C e^{-\varepsilon_D^*})^2} \right)^{1/2} - 1 \right]. \tag{2.99}$$

Tento obecný vztah budeme diskutovat ve třech limitních případech

- a) Slabě kompenzovaný polovodič ( $N_A \ll N_D$ ) za nízkých teplot.

Dosazením předpokladů

$$2N_A \ll N_C e^{-\varepsilon_D^*} \ll 8N_D, \quad N_A \ll n \ll N_D \tag{2.100}$$

můžeme odvodit

$$\begin{aligned}
n &= \frac{1}{4} N_C e^{-\varepsilon_D^*} \left[ \left( 1 + \frac{8N_D N_C e^{-\varepsilon_D^*}}{N_C^2 e^{-2\varepsilon_D^*}} \right)^{1/2} - 1 \right] \\
&= \frac{1}{4} N_C e^{-\varepsilon_D^*} \left[ \left( 1 + \frac{8N_D}{N_C e^{-\varepsilon_D^*}} \right)^{1/2} - 1 \right] \\
&= \frac{1}{4} N_C e^{-\varepsilon_D^*} \left( \frac{8N_D}{N_C e^{-\varepsilon_D^*}} \right)^{1/2} = \left( \frac{N_C N_D}{2} \right)^{1/2} e^{-\frac{\varepsilon_D^*}{2}}. \tag{2.101}
\end{aligned}$$

- b) Kompenzovaný polovodič ( $N_A < N_D$ ) za nízkých teplot.

Ze vztahu

$$N_C e^{-\varepsilon_D^*} \ll 2N_A < 2N_D \tag{2.102}$$

platného pro takovýto polovodič plyne

$$n = \frac{N_D - N_A}{2N_A} N_C e^{-\varepsilon_D^*}. \tag{2.103}$$



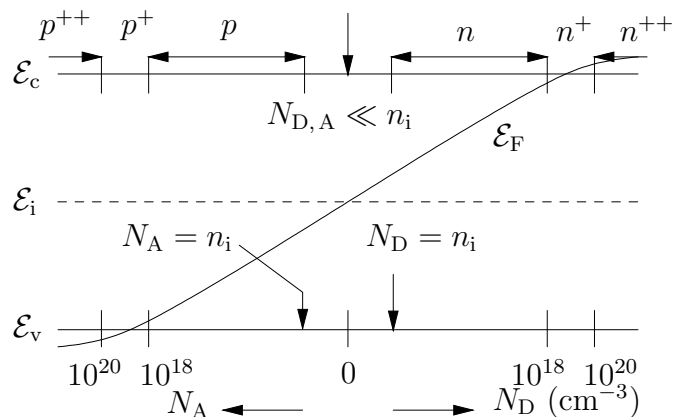
c) Kompenzovaný polovodič ( $N_A < N_D$ ) za vysokých teplot.

Použitím

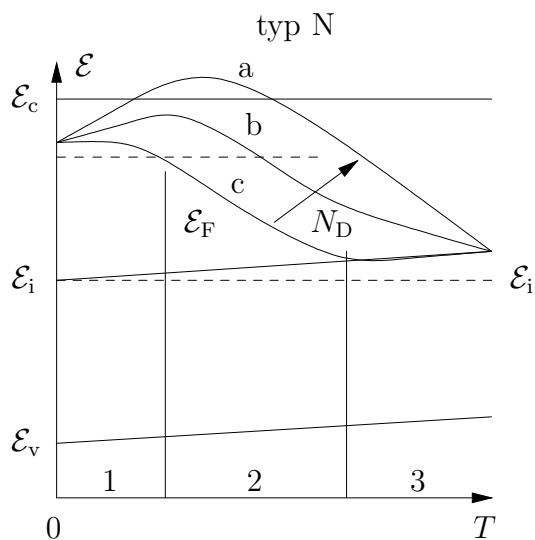
$$N_C e^{-\varepsilon_D^*} \gg 8(N_A - N_D) \tag{2.104}$$

dostaneme konstantní hustotu elektronů

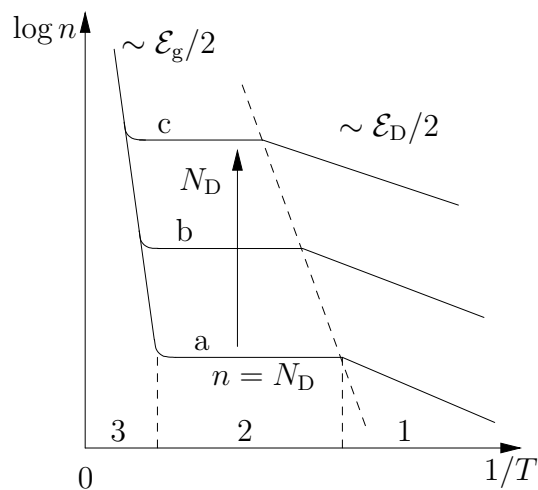
$$n = N_D - N_A. \tag{2.105}$$



Obrázek 2.8: Klasifikace polovodiče podle stupně dotace a odpovídající poloha Fermiho hladiny



Obrázek 2.9: Teplotní závislost polohy Fermiho hladiny pro polovodič s jedním typem příměsí (typu N)



Obrázek 2.10: Průběh koncentrace elektronů pro polovodič s jedním typem příměsí

# Kapitola 3

## Boltzmannova kinetická rovnice

Vedle popisu rovnovážných stavů má značný význam studium vodivostních elektronů a děr v nerovnovážném stavu, kdy se pohybují krystalem pod vlivem vnějších polí (elektrického, magnetického, teplotního). Takové jevy, spojené s přemísťováním elektronů a děr se nazývají transportní nebo kinetické.

### 3.1 Odvození Boltzmannovy kinetické rovnice

V termodynamické rovnováze jsou elektrony popsány funkcí

$$f_0(x) = \frac{1}{1 + e^{x-\eta}} \quad (3.1)$$

kde  $\eta = \frac{\mathcal{E}_F}{k_0T}$  a  $x = \frac{\mathcal{E}}{k_0T}$ . Systém elektronů, který není v termodynamické rovnováze je popsán funkcí (nejprve uvažujeme volné elektrony)

$$f(v_x, v_y, v_z, x, y, z, t) dv_x dv_y dv_z dx dy dz = f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d^3v d^3r \quad (3.2)$$

kde strany rovnice vyjadřují počet elektronů, které jsou v čase  $t$ , v bodě  $\mathbf{r}$  a s rychlostí  $\mathbf{x}$ , které souřadnice leží postupně v intervalech  $(v_x, v_x + dv_x)$ ,  $(v_y, v_y + dv_y)$  a  $(v_z, v_z + dv_z)$ , v objemu  $d^3r = dx dy dz$ . Známe-li  $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ , lze určit hustotu proudu v bodě  $\mathbf{r}$  a v čase  $t$ .

Počet elektronů s rychlostí  $\mathbf{v}$  uvnitř válce je  $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d^3v v_x dt$ . Tyto elektrony se za čas  $dt$  přemístí ve směru osy  $x$  o vzdálenost  $v_x dt$ . Tedy

$$dt \iiint_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) v_x dv_x dv_y dv_z$$

je celkový počet elektronů všech rychlostí, které projdou ploškou za čas  $dt$ . Pak proud ve směru osy  $x$  je dán vztahem:

$$j_x = -e \iiint_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) v_x dv_x dv_y dv_z \quad (3.3)$$

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = f_0(\mathcal{E}) + f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$$

kde  $f_0(\mathcal{E})$  je sudá (závisí na  $v_x^2$ ). Proto  $f_0 v_x$  je lichá funkce dle  $dv_x$ . Tím pádem

$$\int f_0 v_x dv_x = 0.$$

Potom rovnice (3.3) přechází na tvar:

$$j_x = -e \iiint_{-\infty}^{\infty} f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) v_x dv_x dv_y dv_z \quad (3.4)$$

Prostudujeme změnu počtu elektronů s rychlostí  $\mathbf{v}$  za čas  $dt$  v důsledku jejich pohybu v prostoru. Levou stěnou  $dy dz$  elektrony přicházejí, pravou odcházejí (předpokládáme  $v_x > 0$ ). Počet elektronů za čas  $dt$  vstupujících levou stěnou je  $f(\mathbf{v}, x, y, z, t) d^3v dy dz v_x dt$ , počet elektronů vystupujících pravou stěnou je  $f(\mathbf{v}, x + dx, y, z, t) d^3v dy dz v_x dt$ . Zvýšení počtu elektronů s rychlostí  $\mathbf{v}$  v objemu  $d^3r$  je

$$\begin{aligned} & f(\mathbf{v}, x, y, z, t) d^3v dy dz v_x dt - f(\mathbf{v}, x + dx, y, z, t) d^3v dy dz v_x dt = \\ & = -v_x \{f(\mathbf{v}, x + dx, y, z, t) - f(\mathbf{v}, x, y, z, t)\} dy dz d^3v dt = -v \frac{\partial f}{\partial x} dx dy dz d^3v dt \end{aligned}$$

Při zahrnutí všech stěn dostáváme

$$- \left( v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} \right) d^3v d^3r dt = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f d^3v d^3r dt = -\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} d^3v d^3r dt$$

Analogicky lze určit změnu počtu elektronů s rychlostí  $\mathbf{v}$  v objemu  $d^3v = dv_x dv_y dv_z$  v důsledku jejich pohybu ve  $\mathbf{v}$  prostoru, tj. v důsledku zrychlení

$$-\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} d^3v d^3r dt = -\frac{1}{m} (\mathbf{F} \nabla_{\mathbf{v}} f) d^3v d^3r dt$$

protože  $\dot{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{F}}{m}$ , kde  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$  je síla působící na elektron v bodě  $\mathbf{r}$  a v čase  $t$ . Počet elektronů s rychlostí  $\mathbf{v}$  se rovněž změní následkem srážek. Elektron s rychlostí  $\mathbf{v}$  se v důsledku srážky dostane z objemu  $d^3v$ , v důsledku změny jeho rychlosti. Budeme sledovat pouze pružné srážky, tj.  $v = v'$ . Pravděpodobnost, že se elektron s rychlostí  $\mathbf{v}$  za čas  $dt$  rozptýlí a stane se z něj elektron s rychlostí  $\mathbf{v}'$  je  $W(\mathbf{v}, \mathbf{v}') d^3v' dt$ .

Celkový počet elektronů, s rychlostí  $\mathbf{v}$  které ubudou za čas  $dt$  následkem srážek je roven

$$- \int_{(\mathbf{v}')} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) W(\mathbf{v}, \mathbf{v}') d^3v d^3r d^3v' dt \quad (3.5)$$

Počet elektronů s rychlostí  $\mathbf{v}$  bude růst, pokud se elektrony s rychlostí  $\mathbf{v}'$  změní vlivem srážek v elektrony s rychlostí  $\mathbf{v}$

$$\int_{(\mathbf{v}')} f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t) d^3v' d^3r W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) d^3v dt \quad (3.6)$$

úhrnná změna elektronů s rychlostí  $\mathbf{v}$  vlivem srážek je tedy

$$d^3v d^3r dt \int_{\mathbf{v}'} (f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')) d^3v' \quad (3.7)$$

Zvýšení počtu elektronů s rychlostí  $\mathbf{v}$  za čas  $dt$  lze psát jako

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t + dt) d^3v d^3r - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d^3v d^3r = \frac{\partial f}{\partial t} d^3v d^3r dt$$

Potom můžeme napsat Boltzmannovu kinetickou rovnici ve tvaru

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{1}{m} F(\nabla_{\mathbf{v}} f) + \int (f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')) d^3v' \quad (3.8)$$

## 3.2 Platnost Boltzmannovy kinetické rovnice

Protože Boltzmannova kinetická rovnice představuje základní východisko pro popis transportních jevů v polovodičích, je důležité pochopit její omezení. Boltzmannova rovnice je přibližná, neboť se jedná o jednočásticový popis mnohačásticového systému. Korelace mezi částicemi nejsou uvažovány. Další aproximací je semiklasický popis nosičů jako částic pohybujících se podle Newtonových zákonů.

Rozdělovací funkce definuje nejpravděpodobnější stav systému nosičů. Takový statistický popis je vhodný, pokud je počet částic velký<sup>1</sup>. Vzhledem k tomu, že částice reagují prostřednictvím elektrických polí, existuje korelace mezi částicemi. K určení pravděpodobnosti obsazení nějakého stavu je tedy principiálně nutné znát, jak jsou obsazeny ostatní stavy. K statistickému popisu  $N$ -částicového systému je tedy nutná  $N$ -částicová rozdělovací funkce. V případě nízkých koncentrací nosičů jsou ale vzájemné interakce slabé a místo  $N$ -částicové rozdělovací funkce je možno použít funkci jednočásticovou. Vliv ostatních nosičů je započten přes *self*-konzistentní elektrické pole.

BTR je rovněž přibližná proto, že popisuje nosiče jako částice podléhající Newtonovým zákonům. Kvantová mechanika je použita pouze pro popis srážek. To že použití rozdělovací funkce je klasický koncept je zřejmé z toho, že určuje jak souřadnici tak hybnost v jednom časovém okamžiku. Vzhledem k principu neurčitosti

$$\begin{aligned} \Delta p \Delta r &\geq \hbar & (3.9) \\ \Delta p &\simeq \sqrt{2m^*k_0T} \\ \Rightarrow \Delta r &\geq \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*k_0T}} = \lambda_B \end{aligned}$$

Vzhledem k tomu, že vlnová délka nosiče v tepelné rovnováze je  $\lambda_B = \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*k_0T}}$ , platí  $\Delta r \gg \lambda_B$ . Tento výsledek nám říká, že k tomu abychom mohli nosiče popisovat jako

<sup>1</sup>Extrémně malé součástky mohou obsahovat tak malé množství nosičů, že statistický popis není oprávněný.

částice, je nutné, aby nosič byl lokalizován vzhledem k  $\lambda_B$  (která je typicky 10 – 20 nm při pokojové teplotě). Rovnice je splněna, jestliže se potenciál mění pomalu ve srovnání s  $\lambda_B$ . V případě rychle se měnícího potenciálu je třeba řešit vlnovou rovnici.

Další omezení BTR vyplývá z další obměny principu neurčitosti, a to

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

který říká, že nosič musí zůstat v daném stavu dostatečně dlouho, aby měl dobře definovanou energii.

Předpokládejme, že  $\Delta t \approx \tau$  (doba mezi srážkami) a  $\Delta E \approx k_0 T$ . Pak  $\tau \gg \frac{\hbar}{k_0 T}$ , a vynásobením  $v_T$  dostáváme  $l = v_T \tau \gg \frac{\hbar v_T}{k_0 T} \approx \lambda_B$ . Tento vztah říká, že střední volná dráha musí být mnohem delší, než de Broglieho vlnová délka, aby platila BTR.

$$\tau \gg \frac{\hbar}{k_0 T} \quad \Rightarrow \quad \omega \ll \frac{k_0 T}{\hbar} \cdot 2\pi$$

Proto za pokojové teploty musí být  $\omega \ll 6 \cdot 10^{12}$  Hz. V součástkách v současnosti vyráběných je tato podmínka splněna s dostatečnou rezervou. Člen

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_P = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{1}{m} (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f)$$

se nazývá polní. Člen

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_S = \int \{f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')\} d^3 v'$$

se nazývá srážkový. Ve stacionárním případě

$$0 = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_P + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_S \quad (3.10)$$

dostáváme

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{1}{m} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \int \{f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')\} d^3 v' \quad (3.11)$$

Nyní přejdeme od volných elektronů k elektronům v krystalu.

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} \quad (3.12)$$

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = m^* \frac{v^2}{2} \quad (3.13)$$

Impuls nahradíme kvaziimpulsem

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \quad (3.14)$$

Za sílu  $\mathbf{F}$  dosadíme Lorentzovu sílu

$$\mathbf{F} = -e[\mathbf{E} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})] \quad (3.15)$$

a dostaneme

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_s = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k})\nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}} f \cdot [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (3.16)$$

Ve stacionárním případě je  $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ , tedy:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_s = +\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}} f \cdot [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (3.17)$$

Srážkový člen pak lze psát jako

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_s = \sum_{\mathbf{k}} \{W(\mathbf{k}', \mathbf{k})f(\mathbf{k}') (1 - f(\mathbf{k})) - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')f(\mathbf{k}) (1 - f(\mathbf{k}'))\} \quad (3.18)$$

kde jsme na rozdíl od volných elektronů přihlédli k Pauliho principu.

Z principu detailní rovnováhy plyne, že počet elektronů přicházejících ze stavu  $\mathbf{k}$  do stavu  $\mathbf{k}'$ , a naopak, se musí rovnat počtu ve stavu statistické rovnováhy.

$$W(\mathbf{k}', \mathbf{k})f_0(\mathcal{E}') [1 - f_0(\mathcal{E})] = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')f_0(\mathcal{E}) [1 - f_0(\mathcal{E}')] \quad (3.19)$$

tedy

$$W(\mathbf{k}', \mathbf{k})e^{\frac{\mathcal{E}}{k_0 T}} = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')e^{\frac{\mathcal{E}'}{k_0 T}} \quad (3.20)$$

při pružném rozptylu je  $\mathcal{E} = \mathcal{E}'$ , a proto

$$W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (3.21)$$

Potom platí

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_s = \sum_{\mathbf{k}'} \{W(\mathbf{k}', \mathbf{k})f(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')f(\mathbf{k})\} = \sum_{\mathbf{k}'} \{W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')(f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k}))\} \quad (3.22)$$

### 3.3 Stanovení nerovnovážné rozdělovací funkce

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathcal{E}) + f_1(\mathbf{k}) \quad (3.23)$$

$$f_1(\mathbf{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathcal{E}) \mathbf{k} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k}) &= f_0(\mathcal{E}') + f_1(\mathbf{k}') - f_0(\mathcal{E}) - f_1(\mathbf{k}) = f_1(\mathbf{k}') - f_1(\mathbf{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \\ &= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathcal{E})(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathcal{E}) \mathbf{k} (1 - \cos \theta) = -f_1(\mathbf{k})(1 - \cos \theta) \end{aligned} \quad (3.25)$$

kde  $\theta$  je úhel mezi  $\mathbf{k}$  a  $\mathbf{k}'$ . Dále můžeme psát

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_S = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \{-f_1(\mathbf{k})(1 - \cos \theta)\} = -f_1(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) \quad (3.26)$$

Zavedeme tzv. relaxační dobu

$$\tau(\mathbf{k}) = \left( \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) \right)^{-1} \quad (3.27)$$

Potom

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_S = -\frac{f_1(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (3.28)$$

### 3.4 Fyzikální význam relaxační doby

Předpokládejme, že v čase  $t = 0$  zrušíme všechny vnější pole. Pak

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_S &= -\frac{\partial(f - f_0)}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau} & (3.29) \\ \frac{d(f - f_0)}{f - f_0} &= -\frac{dt}{\tau} \Rightarrow \ln(f - f_0) = -\frac{t}{\tau} + C \\ \text{pro } t = 0, \quad \ln(f - f_0)_{t=0} &= C \Rightarrow \ln \frac{(f - f_0)}{(f - f_0)_{t=0}} = -\frac{t}{\tau} \\ (f - f_0) &= (f - f_0)_{t=0} e^{-\frac{t}{\tau}} \Rightarrow \text{pro } t = \tau, \quad \frac{(f - f_0)_{t=\tau}}{(f - f_0)_{t=0}} = \frac{1}{e} & (3.30) \end{aligned}$$

$\tau$  je tedy doba, za kterou se rozdíl  $(f - f_0)$  ze změní e-krát.

Budeme uvažovat

- rozptyl na podélných akustických kmitech mříže LA
- rozptyl na podélných optických kmitech mříže LO (jen v případě, kdy je pružný)
- rozptyl na ionizovaných příměsích  $N_I = D^\bullet + A'$
- rozptyl na neutrálních příměsích  $N_N = D^x + A^x$  odpovídající PP přechodu elektronu z  $\mathbf{k}$  do  $\mathbf{k}'$  za 1 s

Budeme mít tedy postupně tyto pravděpodobnosti:  $W_{LA}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ,  $W_{LO}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ,  $W_I(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  a  $W_N(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ . Vzhledem k tomu, že rozptylové procesy jsou alternativní (buď jeden nebo



druhý), můžeme napsat tzv. Matthiesenovo pravidlo

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) = \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} W_{\text{LA}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) + \sum_{\mathbf{k}'} W_{\text{LO}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) + \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}'} W_{\text{I}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) + \sum_{\mathbf{k}'} W_{\text{N}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) \end{aligned} \quad (3.31)$$

které můžeme zapsat také ve tvaru

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{LA}}} + \frac{1}{\tau_{\text{LO}}} + \frac{1}{\tau_{\text{I}}} + \frac{1}{\tau_{\text{N}}} \quad (3.32)$$

Zbývá stanovit jednotlivé relaxační doby.

Dále budeme předpokládat, že se při srážce nemění spin. Přejdeme od sečítání k integraci

$$\frac{1}{\tau_i} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}'} W_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) d\mathbf{k}' \quad (3.33)$$

kde  $i = \text{LA}, \text{LO}, \text{I}, \text{N}$ . Objem na jeden stav je  $\frac{(2\pi)^3}{V}$ . Počet stavů  $\mathbf{k}$  v elementu  $d\mathbf{k}'$  se rovná  $\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} d\mathbf{k}'$ , kde  $d\mathbf{k}' = k'^2 \sin \theta d\theta d\varphi dk'$

$$\frac{1}{\tau_i} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty W_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') k'^2 dk' (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (3.34)$$

Označme

$$W_i(k, \theta) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty W_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') k'^2 dk' \quad (3.35)$$

Fermiho zlaté pravidlo využijeme

$$W_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta(\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}(\mathbf{k}')) \quad (3.36)$$

kde  $|M_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|$  je maticový element poruchového potenciálu  $U_i$  při přechodu ze stavu  $\mathbf{k}$  do stavu  $\mathbf{k}'$

$$M_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \hat{U}_i \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.37)$$

- $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  — vlnová funkce elektronu a rozptylového centra

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})$$

- $\phi(\mathbf{r})$  — vlnová funkce rozptylového centra
- $\psi(\mathbf{r})$  — vlnová funkce elektronu

$$W_i(k, \theta) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^\infty |M_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta(\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}(\mathbf{k}')) k'^2 dk' \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}, & d\mathcal{E} &= \frac{\hbar^2 k dk}{m_e^*} \\ \frac{dk}{d\mathcal{E}} &= \frac{m_e^*}{\hbar^2 k} \Rightarrow & \frac{m_e^*}{\hbar^2} &= k \frac{dk}{d\mathcal{E}} \end{aligned}$$

$$g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \frac{(2m_e^*)^{3/2} \mathcal{E}^{1/2}}{2\pi^2 \hbar^3} = \frac{m_e^* k}{\pi^2 \hbar^2} = \frac{k^2 dk}{\pi^2} \quad (3.39)$$

$$W_i(k, \theta) = \frac{V}{4\pi} \int_0^\infty |M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 g(\mathcal{E}') \delta(\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}(\mathbf{k}')) d\mathcal{E}' = \frac{V}{4\pi} g(\mathcal{E}) |M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \quad (3.40)$$

kde  $g(\mathcal{E})$  je hustota stavů ve vodivostním pásu

$$\frac{1}{\tau_i} = \frac{\pi V}{2\hbar} g(\mathcal{E}) \int_0^{2\pi} |M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (3.41)$$

Pro rozptyl na podélných akustických fononech LA platí

$$|M_{\text{LA}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 = E_{1c}^2 k_0 T \frac{1}{\rho_a \langle n_e \rangle^2 V} \quad (3.42)$$

Pro rozptyl na podélných optických fononech LO platí

$$|M_{\text{LO}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2V \mathcal{E}_0} \left( \frac{1}{\mathcal{E}_\infty} - \frac{1}{\mathcal{E}_S} \right) \frac{1}{k^2} \left\{ \frac{n_q}{n_q + 1} \right\} F_q \quad (3.43)$$

kde  $n_q$  je počet fononů ve stavu  $q$  (případ absorpce fononu) a  $n_q + 1$  je pro případ emise fononu.

$$n_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_q}{kT}} - 1}. \quad (3.44)$$

Pro rozptyl na ionizovaných příměsích platí

$$|M_{\text{I}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 = N_{\text{I}} \left( \frac{Ze^2}{\mathcal{E}_0 \mathcal{E}_r V} \right)^2 \cdot \left( \frac{1}{R_S^2} + |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 \right)^{-2} \quad (3.45)$$

kde

$$n_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{kT}} - 1} \quad (3.46)$$

$$F_q^\pm = \left( \frac{k}{q^\pm} \right)^2 \cdot \left( \frac{1}{1 + t_q} \right)^2, \quad t_q = \frac{1}{q R_S} \quad (3.47)$$

$$R_S = \frac{ne^2}{2\mathcal{E}_0 \mathcal{E}_\infty k_0 T} \cdot \frac{\mathcal{F}_{-1/2}^*(\eta)}{\mathcal{F}_{1/2}(\eta)} \quad (3.48)$$

$$q^2 = k'^2 + k^2 - 2kk' \cos \theta$$

- $E_{1,c}$  — deformační potenciál vodivostního pásu
- $\rho_a$  — hustota
- $\langle n_e \rangle$  — střední rychlost šíření akustických vln

$$\langle n_e \rangle = \left( \frac{V_a}{\sigma \pi^2} \right)^{1/3} \omega_{\text{LA}} \quad (3.49)$$

kde  $V$  je objem krystalu a  $V_A$  je objem elementární buňky.

### 3.4.1 Relaxační doba - rozptyl na podélných akustických fononech

Dále provedeme výpočet relaxační doby pro rozptyl na podélných akustických fononech  $\tau_{\text{LA}}$

$$\frac{1}{\tau_{\text{LA}}} = \frac{\pi V}{2\hbar} g(\mathcal{E}) \int_0^\pi |M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (3.50)$$

$$\frac{1}{\tau_{\text{LA}}} = \frac{\pi V}{2\hbar} \cdot \frac{2m_e^{*3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \mathcal{E}^{1/2} E_{1c}^2 k_0 T \frac{1}{\rho_a \langle n_e \rangle^2 V} \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (3.51)$$

$$\frac{1}{\tau_{\text{LA}}} = \frac{(m_e^*)^{3/2}}{\sqrt{2} \hbar^4 \pi} \cdot \frac{E_{1c}^2 k_0 T}{\rho_a \langle n_e \rangle^2} \mathcal{E}^{1/2} \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (3.52)$$

s využitím rovnosti

$$g(\mathcal{E}) = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\mathcal{E}} \quad (3.53)$$

Dále uvážením substituce  $\cos \theta = x$  dostáváme

$$\int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta = - \int_1^{-1} (1 - x) \, dx = \int_{-1}^1 (1 - x) \, dx = [x]_{-1}^1 - \left[ \frac{x^2}{2} \right]_{-1}^1 = 2 - 0 = 2 \quad (3.54)$$

$$\frac{1}{\tau_{\text{LA}}} = \frac{\sqrt{2} (m_e^*)^{3/2} E_{1c}^2}{\hbar^4 \rho_a \langle n_e \rangle^2 \pi} \frac{1}{k_0 T} \mathcal{E}^{1/2} \quad (3.55)$$

$$\tau_{\text{LA}} = \frac{\pi \hbar^4 \rho_a \langle n_e \rangle^2}{\sqrt{2} (m_e^*)^{3/2} E_{1c}^2} (k_0 T) \mathcal{E}^{-1/2} \quad (3.56)$$

$$\tau_{\text{LA}} = \tau_{\text{LA}}^0 \mathcal{E}^{-1/2} \quad (3.57)$$

### 3.4.2 Relaxační doba - rozptyl na ionizovaných příměsích

Pro relaxační dobu v případě rozptylu na ionizovaných příměsích  $\tau_I$  platí

$$\frac{1}{\tau_I} = \frac{\pi V}{2\hbar} \cdot \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \mathcal{E}^{1/2} \int_0^\pi N_I \left( \frac{Ze^2}{\mathcal{E}_0 \mathcal{E}_r V} \right)^2 \cdot \frac{(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta}{\left( \left( \frac{1}{R_s^2} \right)^2 + |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 \right)^2} \quad (3.58)$$

Definujeme:

$$n_I = \frac{N_I}{V} \quad (3.59)$$

$$\frac{1}{\tau_I} = \frac{(m_e^*)^{3/2}}{\sqrt{2\pi}\hbar^4} \mathcal{E}^{1/2} n_I Z^2 \left( \frac{e^2}{\mathcal{E}_0 \mathcal{E}_r} \right)^2 \int_0^\pi \frac{(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta}{\left( \frac{1}{R_s^2} + |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 \right)^2} \quad (3.60)$$

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{k}')(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2k^2(1 - \cos \theta) = \frac{4m_e^*}{\hbar^2} \mathcal{E}(1 - \cos \theta) \quad (3.61)$$

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{R_s^2} + (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \right)^2 &= \left( \frac{1}{R_s^2} + \frac{4m_e^*}{\hbar^2} \mathcal{E}(1 - \cos \theta) \right)^2 = \\ &= \left( \frac{4m_e^* \mathcal{E}}{\hbar^2} \right)^2 \left( \frac{\hbar}{4m_e^*} \cdot \frac{1}{\mathcal{E} R_s^2} + 1 - \cos \theta \right)^2 \end{aligned} \quad (3.62)$$

přičemž

$$\frac{\hbar}{4m_e^*} \cdot \frac{1}{\mathcal{E} R_s^2} = b \quad (3.63)$$

Tedy

$$\left( \frac{1}{R_s^2} + (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \right)^2 = \left( \frac{4m_e^*}{\hbar^2} \right)^2 (b + 1 - \cos \theta)^2 \quad (3.64)$$

Potom dostaneme

$$\frac{1}{\tau + I} = \frac{n_I Z^2}{\pi \sqrt{2}} \cdot \left( \frac{e^2}{\mathcal{E}_0 \mathcal{E}_r} \right)^2 \cdot \frac{1}{16m_e^{*1/2}} \cdot \mathcal{E}^{-3/2} \int_0^2 \frac{t dt}{(b+t)^2} \quad (3.65)$$

kde vnitřek integrálu označíme jako  $\alpha_I$ ,

$$t = 1 - \cos \theta$$

$$dt = \sin \theta d\theta$$

$$\begin{aligned} \alpha_I &= \left\{ \frac{b}{t+b} + \ln(t+b) \right\}_0^2 = \frac{b}{2+b} + \ln(2+b) - 1 - \ln b = \\ &= \frac{b}{2+b} - 1 + \ln \frac{(b+2)}{2} = \frac{b+b-2}{b+2} + \ln \frac{(b+2)}{b} = -\frac{2}{b+2} + \ln \frac{b+2}{2} \end{aligned} \quad (3.66)$$

Konečně

$$\frac{1}{\tau_I} = \frac{n_I Z^2}{\pi \sqrt{2}} \cdot \left( \frac{e^2}{\mathcal{E}_0 \mathcal{E}_r} \right)^2 \cdot \frac{1}{16m_e^{*1/2}} \mathcal{E}^{-3/2} \alpha_I, \quad \tau_I = \tau_{I0} \mathcal{E}^{3/2} \quad (3.67)$$

### 3.4.3 Relaxační doba - rozptyl na podélných optických fononech

Pro vysoké teploty lze rozptyl na podélných optických fononech považovat přibližně za pružný, tj.  $k = k'$ .  $T \gg \Theta$ ,  $\Theta = \frac{\hbar\omega_{\text{LO}}}{k}$ .

Zanedbáme dále stínění

$$F(q) = \frac{k^2}{q^2} \quad (3.68)$$

dostáváme tedy

$$\begin{aligned} |M_{\text{LO}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 &= \pm \left( \frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2V \mathcal{E}_0} \right) \left( \frac{1}{\mathcal{E}_\infty} - \frac{1}{\mathcal{E}_0} \right) \frac{1}{k^2} F_q \left\{ \begin{matrix} n_q \\ n_q + 1 \end{matrix} \right\} = \\ &= \pm \left( \frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2V \mathcal{E}_0} \right) \left( \frac{1}{\mathcal{E}_\infty} - \frac{1}{\mathcal{E}_0} \right) \frac{1}{q^2} \left\{ \begin{matrix} n_q \\ n_q + 1 \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (3.69)$$

kde  $n_q$  odpovídá absorpci a  $n_q + 1$  emisi.

$$\frac{1}{\tau_1} = \frac{\pi V (2m_e^*)^{3/2}}{2\hbar} \sqrt{\mathcal{E}} \int_0^\pi \frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2V \mathcal{E}_0} \left( \frac{1}{\mathcal{E}_\infty} - \frac{1}{\mathcal{E}_S} \right) \left\{ \begin{matrix} n_q \\ n_{q+1} \end{matrix} \right\} \frac{1}{q^2} (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (3.70)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \mathbf{k} - \mathbf{k}' & q^2 &= k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta = 2k^2(1 - \cos \theta) \\ \mathcal{E} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} & \frac{1}{q^2} &= \frac{1}{2k^2} \frac{1}{1 - \cos \theta} = \frac{\hbar^2}{4m_e^* \mathcal{E}} \frac{1}{1 - \cos \theta} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{LO}}} &= \frac{V (m_e^*)^{3/2} \mathcal{E}^{1/2}}{\sqrt{2\pi} \hbar^2} \left( \frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2V \mathcal{E}_0} \right) \left( \frac{1}{\mathcal{E}_\infty} - \frac{1}{\mathcal{E}_S} \right) \frac{\hbar^2}{4m_e^* \mathcal{E}} \int_0^\pi \frac{1 - \cos \theta}{1 - \cos \theta} \sin \theta \, d\theta = \\ &= \frac{m_e^{*1/2}}{\sqrt{2\pi} \hbar^2} \mathcal{E}^{-1/2} \left( \frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2\mathcal{E}_0} \right) \left( \frac{1}{\mathcal{E}_\infty} - \frac{1}{\mathcal{E}_S} \right) \frac{1}{4} 2(2n_q + 1) = \\ &= \frac{m_e^{*1/2}}{\sqrt{2\pi} \hbar^2} \left( \frac{e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{2\mathcal{E}_0} \right) \left( \frac{1}{\mathcal{E}_\infty} - \frac{1}{\mathcal{E}_S} \right) n_q \mathcal{E}^{-1/2} \end{aligned} \quad (3.71)$$

Platí

$$2n_q + 1 \approx 2n_q$$

z toho plyne

$$\tau_{\text{LO}} = \frac{2\sqrt{2\pi} \hbar^2 \mathcal{E}_0}{m_e^{*1/2} e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}} \left( \frac{1}{\mathcal{E}_\infty} - \frac{1}{\mathcal{E}_S} \right)^{-1} \left( e^{\frac{\mathcal{E}}{T}} - 1 \right) \quad (3.72)$$

kde

$$\Theta = \frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{k} \quad (3.73)$$

Pro  $T \sim \Theta$  nelze řešit BTR v aproximaci relaxační doby — je nutné numerické řešení.

### 3.5 Řešení Boltzmannovy kinetické rovnice

Stacionární případ:

Boltzmannovu rovnici budeme řešit pro slabá pole

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] \nabla_{\mathbf{k}} f = -\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{f_1}{\tau} = \frac{1}{\tau} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} (\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{k}), \quad (3.74)$$

kde

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{1}{m^*} \hbar \mathbf{k} \quad (3.75)$$

$$f_1(\mathbf{k}) = \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \cdot (\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{k}). \quad (3.76)$$

$$f = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = f_0(\mathcal{E}) + f_1(\mathbf{k}), \quad f_0(\mathcal{E}) = \left( \exp \left[ \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_0 T} + 1 \right] \right)^{-1} \quad (3.77)$$

Takže můžeme psát

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= f_0(\mathbf{k} - \Delta \mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{k}} (-\Delta \mathbf{k}) = \\ &= f_0(\mathbf{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{\hbar^2}{m^*} \Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = f_0(\mathbf{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} (\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{k}) \\ \boldsymbol{\chi} &= \frac{\hbar^2 \Delta \mathbf{k}}{m_e^*} \end{aligned} \quad (3.78)$$

Zde  $\Delta \mathbf{k}$ , resp.  $\boldsymbol{\chi}$  reprezentují odchylku od rovnováhy v důsledku síly, a to pro slabá pole (1. řád Taylorova rozvoje).

$$\nabla_{\mathbf{r}} f = \nabla_{\mathbf{r}} f_0(\mathcal{E}) + \nabla_{\mathbf{r}} f_1(\mathbf{k}), \quad (3.79)$$

$$f_0(\mathcal{E}, \mathcal{E}_F, T), \quad \mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}(\mathbf{k}), \quad \mathcal{E}_F = \mathcal{E}_F(\mathbf{r}), \quad T = T(\mathbf{r}) \quad (3.80)$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} f_0 = -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{E}_F + \frac{\partial f_0}{\partial T} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} T \quad (3.81)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_F} = -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} = \frac{1}{k_B T} \frac{\exp \left[ \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T} \right]}{\left( \exp \left[ \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T} \right] + 1 \right)^2} \quad (3.82)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T^2} \frac{\exp \left[ \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T} \right]}{\left( \exp \left[ \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T} \right] + 1 \right)^2} = -\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{T} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \quad (3.83)$$

kde  $k_B$  je Boltzmannova konstanta.

$$\Rightarrow \nabla_r f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left\{ \frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}}{T} \nabla_r T - \nabla_r \mathcal{E}_F \right\} \quad (3.84)$$

$$\begin{aligned} \nabla_r f_1 &= \nabla_r \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = -\frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} (\nabla_r f_0) \chi(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} \left[ \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left\{ \frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}}{T} \nabla_r T - \nabla_r \mathcal{E}_F \right\} \right] \chi(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = \\ &= -\frac{\partial^2 f_0}{\partial \mathcal{E}^2} \left\{ \frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}}{T} \nabla_r T - \nabla_r \mathcal{E}_F \right\} + \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{\nabla_r T}{T} \chi(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} \end{aligned} \quad (3.85)$$

První člen můžeme zanedbat, protože i na pravé straně Boltzmannovy kinetické rovnice počítáme s přesností do prvního řádu.

$$\nabla_r f \approx \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left\{ \frac{\mathcal{E}_F - (\mathcal{E} - (\chi \cdot \mathbf{k}))}{T} \nabla_r T - \nabla_r \mathcal{E}_F \right\} \quad (3.86)$$

$$\chi \cdot \mathbf{k} = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} 2(\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{k}), \quad \chi \cdot \mathbf{k} \ll \mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (3.87)$$

V prvním řádu tedy máme

$$\begin{aligned} \nabla_r f &= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left\{ \frac{-(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)}{T} \nabla_r T - \nabla_r \mathcal{E}_F \right\} = \nabla_r f_0 \\ \nabla_{\mathbf{k}} f &= \nabla_{\mathbf{k}} f_0(\mathcal{E}) + \nabla_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}), \\ \nabla_{\mathbf{k}} f_0 &= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E} = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \hbar \mathbf{v} \\ \nabla_{\mathbf{k}} f_1 &= \nabla_{\mathbf{k}} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} (\chi \cdot \mathbf{k}) \right) = \\ &= \nabla_{\mathbf{k}} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) (\chi \cdot \mathbf{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \nabla_{\mathbf{k}} (\chi \cdot \mathbf{k}) = \\ &= \frac{\partial^2 f_0}{\partial \mathcal{E}^2} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E} (\chi \cdot \mathbf{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left( \mathbf{k} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathcal{E}} \right) \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E} = \\ &= \frac{\partial^2 f_0}{\partial \mathcal{E}^2} \mathbf{v} \cdot (\chi \cdot \mathbf{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left( \mathbf{k} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathcal{E}} \right) \hbar \mathbf{v} \end{aligned} \quad (3.88)$$

$$\begin{aligned} -\frac{e}{\hbar} \{ \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B} \} \nabla_{\mathbf{k}} f &\approx -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \hbar - \frac{e}{\hbar} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi = \\ &= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} e \nabla_r \varphi \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{e}{\hbar} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \cdot \chi = \\ &= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} e \left( \nabla_r \varphi + \frac{e}{\hbar} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \cdot \chi \end{aligned} \quad (3.89)$$

Aproximace byla provedena pro členy s  $\mathbf{E}$  s přesností do prvního řádu a s využitím vztahu  $[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \cdot \mathbf{v} = 0$ . Dosazením do Boltzmannovy kinetické rovnice dostaneme :

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \left\{ \frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T - \nabla_{\mathbf{r}} (\mathcal{E}_F - e\varphi) + \frac{e}{\hbar} [\mathbf{B} \times \boldsymbol{\chi}] \right\} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{\tau} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{v} \frac{m_e^*}{\hbar} \quad (3.90)$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{\chi} = -\frac{\hbar}{m_e^*} \tau (\mathbf{k}) \left\{ \frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T - \nabla_{\mathbf{r}} (\mathcal{E}_F - e\varphi) + \frac{e}{\hbar} [\mathbf{B} \times \boldsymbol{\chi}] \right\} \quad (3.91)$$

Pro  $\boldsymbol{\chi}$  máme vektorovou rovnici typu

$$\boldsymbol{\chi} = \mathbf{a} + [\mathbf{b} \times \boldsymbol{\chi}] \quad (3.92)$$

jejíž řešení je

$$\boldsymbol{\chi} = \frac{\mathbf{a} + [\mathbf{b} \times \boldsymbol{\chi}] + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{b}}{1 + b^2} \quad (3.93)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\chi} = & -\frac{\hbar \tau}{m_e^*} \left[ \frac{\left\{ -\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T + \nabla_{\mathbf{r}} (\mathcal{E}_F - e\varphi) \right\}}{1 + \left( \frac{e\tau}{m_e^* B} \right)^2} + \right. \\ & + \frac{\frac{e\tau}{m_e^*} [\mathbf{B} \times \left\{ -\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T + \nabla_{\mathbf{r}} (\mathcal{E}_F - e\varphi) \right\}]}{1 + \left( \frac{e\tau}{m_e^* B} \right)^2} + \\ & \left. + \frac{\left( \frac{e\tau}{m_e^*} \right)^2 [\mathbf{B} \cdot \left\{ -\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T + \nabla_{\mathbf{r}} (\mathcal{E}_F - e\varphi) \right\}] \mathbf{B}}{1 + \left( \frac{e\tau}{m_e^* B} \right)^2} \right] \quad (3.94) \end{aligned}$$

Pro zjednodušení si zavedeme označení

$$\boldsymbol{\chi} = -\frac{\hbar e}{m_e^*} \boldsymbol{\chi}^* \quad (3.95)$$

$$\mathbf{P} = \frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}}{eT} \nabla_{\mathbf{r}} T + \nabla_{\mathbf{r}} \left( \frac{\mathcal{E}}{e} - \varphi \right) \quad (3.96)$$

$$\gamma = \frac{e}{m_e^*} \quad (3.97)$$

$$\boldsymbol{\chi}^* = \frac{\tau \mathbf{P} + \gamma \tau^2 [\mathbf{B} \times \mathbf{P}] + \gamma^2 \tau^3 (\mathbf{B} \cdot \mathbf{P}) \mathbf{B}}{1 + (\gamma \tau B)^2} \quad (3.98)$$

Analogický vztahy platí pro díry po provedení následující transformace

$$\begin{aligned} \mathcal{E} & \rightarrow \mathcal{E}' \\ m_e^* & \rightarrow m_h^* \\ \mathcal{E}_F & \rightarrow \mathcal{E} = -\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_g \\ -e & \rightarrow +e \end{aligned} \quad (3.99)$$



Při přechodu do bezrozměrných veličin

$$x = \frac{\mathcal{E}}{k_{\text{B}}T}, \quad \eta = \frac{\mathcal{E}_{\text{F}}}{k_{\text{B}}T} \quad (3.100)$$

$$\mathbf{P}(x) = \frac{k_{\text{B}}}{e}(x - \eta)\nabla_{\mathbf{r}}T + \frac{k_{\text{B}}T}{e}\nabla_{\mathbf{r}}\eta - \nabla_{\mathbf{r}}\varphi \quad (3.101)$$

$\varphi$  je vnější napětí.

### 3.6 Hustota elektrického proudu a hustota proudu energie bez vnějšího magnetického pole

Počet elektronů ve stavu  $\mathbf{k}$  připadajících na  $1 \text{ cm}^3$  je

$$\frac{1}{V}2f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \frac{d\mathbf{k}}{\frac{(2\pi)^3}{V}} = \frac{1}{4\pi^3}f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{k}, \quad (3.102)$$

kde poslední zlomek je počet stavů v  $d\mathbf{k}$ , jeho jmenovatel označuje objem na jeden stav, dvojnásobek udává počet spinů a tím počet elektronů v každém stavu, a  $(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$  udává střední počet elektronů ve stavu  $\mathbf{k}$  (distribuční funkce). Při přechodu od sumace k integraci je nutné vydělit integrál objemem  $\mathbf{k}$  prostoru připadajícím na 1 stav, tj. vynásobit faktorem  $\frac{1}{4\pi^3}$  (viz. 3.102). Elektrický proud lze psát

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{1}{V}2 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \mathbf{v}(-e) = -\frac{e}{4\pi^3} \int f(\mathbf{k}) \mathbf{v} \cdot d\mathbf{k} = \\ &= -\frac{e}{4\pi^3} \int f_0 \mathbf{v} \cdot d\mathbf{k} - \frac{e}{4\pi^3} \int f_1(\mathbf{k}) \mathbf{v} \cdot d\mathbf{k} = \\ &= -\frac{e\hbar}{4\pi^3 m_e^*} \int f_1(\mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot d\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (3.103)$$

Integrál  $\int f_0 \mathbf{v} \cdot d\mathbf{k}$  je roven nule v důsledku lichosti funkce  $f_0 \mathbf{v}$ . Tok energie lze psát

$$\mathbf{w} = \frac{1}{V}2 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathcal{E} - e\varphi) = \mathbf{w} = \frac{\hbar}{4\pi^3 m_e^*} \int f_1(\mathbf{k}) (\mathcal{E} - e\varphi) \mathbf{k} \cdot d\mathbf{k} \quad (3.104)$$

$$\mathbf{j} = -\frac{e\hbar}{4\pi^3 m_e^*} \int \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) (\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot d\mathbf{k} \quad (3.105)$$

Víme, že  $\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}$  je funkcí  $k$  a také  $\boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{\chi}(k)$ . V souřadné kartézském systému souřadnic a úhlů platí

$$\begin{aligned} k_x &= k \sin \vartheta \cos \varphi \\ k_y &= k \sin \vartheta \sin \varphi \end{aligned} \quad (3.106)$$

$$\begin{aligned} k_z &= k \cos \vartheta \\ k &= |\mathbf{k}| \end{aligned} \quad (3.107)$$

$$\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{k} = \chi k \cos \vartheta \quad (3.108)$$

$$d\mathbf{k} = d^3k = k^2 dk \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \quad (3.109)$$

$$\begin{aligned} & \int - \left( \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) (\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot d\mathbf{k} = \\ & = \int - \left( \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi [\mathbf{i}_0 k \sin \vartheta \cos \varphi + \mathbf{j}_0 k \sin \vartheta \sin \varphi + \mathbf{k}_0 k \cos \varphi] \times \\ & \quad \times k^3 dk \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \end{aligned} \quad (3.110)$$

Složky s vektory  $\mathbf{i}_0$  a  $\mathbf{j}_0$  jsou rovny 0 (integruje se podle  $\varphi$  a uvedené členy obsahují  $\cos \varphi$  nebo  $\sin \varphi$ ), zbude pouze složka s  $\mathbf{k}_0$

$$\begin{aligned} & \int - \left( \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) (\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot d\mathbf{k} = \\ & = \int - \left( \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi \mathbf{k}_0 k^4 dk \frac{4}{3} \pi = \frac{4}{3} \pi \int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi k^4 dk \end{aligned} \quad (3.111)$$

protože

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = \frac{4}{3} \pi \quad (3.112)$$

$$\mathbf{j} = - \frac{e\hbar}{4\pi^3 m_e^*} \int \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) (\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot d\mathbf{k} = - \frac{e\hbar}{4\pi^3 m_e^*} \int_0^\infty \chi \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) k^4 dk \quad (3.113)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} & \Rightarrow & \quad k^4 = \frac{2(m_e^*)^2}{\hbar^4} \mathcal{E}^2, \\ d\mathcal{E} &= \frac{\hbar^2}{2m_e^*} 2k dk & dk &= \frac{m_e^*}{\hbar^2} \frac{1}{k} d\mathcal{E} = \frac{m_e^*}{\hbar^2} \frac{\hbar}{(2m_e^*)^{\frac{1}{2}}} \mathcal{E}^{-\frac{1}{2}} d\mathcal{E} \end{aligned} \quad (3.114)$$

$$k^4 dk = \frac{(2m_e^*)^2}{\hbar^4} \mathcal{E}^2 \frac{(m_e^*)^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{E}^{-\frac{1}{2}} d\mathcal{E} = \frac{2^{\frac{3}{2}} m_e^{*\frac{5}{2}}}{\hbar^5} \mathcal{E}^{\frac{3}{2}} d\mathcal{E} \quad (3.115)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= - \frac{e\hbar}{3\pi^2 m_e^*} \frac{2^{\frac{3}{2}} m_e^{*\frac{5}{2}}}{\hbar^5} \int \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi \mathcal{E}^{\frac{3}{2}} d\mathcal{E} = - \frac{e(2m_e^*)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi \mathcal{E}^{\frac{3}{2}} d\mathcal{E} = \\ &= \frac{2^{\frac{3}{2}} e^2 (2m_e^*)^{\frac{1}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi^* \mathcal{E}^{\frac{3}{2}} d\mathcal{E} = \frac{(2k_{\text{BT}})^{\frac{3}{2}} e^2 (2m_e^*)^{\frac{1}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi^* x^{\frac{3}{2}} dx \end{aligned} \quad (3.116)$$

Definujme střední hodnotu funkce  $\chi^*$ , funkci  $\langle \chi^* \rangle$ .

$$\langle \chi^* \rangle = \frac{\int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \chi^* \mathcal{E}^{\frac{3}{2}} d\mathcal{E}}{\int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \mathcal{E}^{\frac{3}{2}} d\mathcal{E}} = \frac{\int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \chi^* x^{\frac{3}{2}} dx}{\int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{\frac{3}{2}} dx} = \frac{\int_0^\infty \left( - \frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \chi^* x^{\frac{3}{2}} dx}{\mathcal{F}_{\frac{3}{2}}(\eta)} \quad (3.117)$$

Dále budeme potřebovat

$$\langle \chi^* x \rangle = \frac{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) \chi^* x^{\frac{5}{2}} dx}{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) x^{\frac{3}{2}} dx} \quad (3.118)$$

Platí

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) \frac{dx}{d\mathcal{E}} = -\frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{1}{k_B T} \quad \Longleftrightarrow \quad x = \frac{\mathcal{E}}{k_B T} \quad (3.119)$$

$$\mathcal{E}^{\frac{3}{2}} d\mathcal{E} = (k_B T)^{\frac{3}{2}} x^{\frac{3}{2}} (k_B T) dx = (k_B T)^{\frac{5}{2}} x^{\frac{3}{2}} dx \quad (3.120)$$

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \mathcal{F}_{\frac{3}{2}}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{2}} N_C \mathcal{F}_{\frac{1}{2}}^*(\eta) \quad N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.121)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= \frac{\hbar}{4\pi^3 m_e^*} \int f_1(\mathbf{k}) (\mathcal{E} - e\varphi) \mathbf{k} \cdot d\mathbf{k} = \\ &= \frac{\hbar}{4\pi^3 m_e^*} \int f_1(\mathbf{k}) k_B T \left(x - \frac{e\varphi}{k_B T}\right) \mathbf{k} \cdot d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (3.122)$$

Na závěr vychází poměrně jednoduchý vztah:

$$\mathbf{j} = \frac{e^2 n}{m_e^*} \langle \chi^* \rangle = \frac{(-e)(-e)n}{m_e^*} \langle \chi^* \rangle \quad (3.123)$$

$$\mathbf{w} = -\frac{enk_B T}{m_e^*} \left\{ \langle \chi^* x \rangle - \frac{e\varphi}{k_B T} \langle \chi^* \rangle \right\} = -\frac{enk_B T}{m_e^*} \langle \chi^* x \rangle + \mathbf{j}\varphi \quad (3.124)$$

Přechod pro díry

$$\begin{aligned} x &\rightarrow x' \\ \eta &\rightarrow \eta' = -\eta - \frac{\mathcal{E}_g}{k_B T} \\ m_e^* &= m_h^* \\ n &\rightarrow p \\ -e &\rightarrow +e \\ N_C &\rightarrow N_V \end{aligned} \quad (3.125)$$

Obecně platí

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \mathbf{j}_e + \mathbf{j}_h \\ \mathbf{w} &= \mathbf{w}_e + \mathbf{w}_h \end{aligned} \quad (3.126)$$

To vše platí pro případ kulových isoenergetických ploch,  $\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ .

### 3.7 Hustota elektrického proudu a hustota proudu energie pro magnetické pole s jednou nenulovou složkou

V dalším textu položíme bez újmy na obecnosti magnetické pole do osy  $z$ ,  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . Pak

$$\boldsymbol{\chi}^* = \frac{\tau \mathbf{P} + \gamma \tau^2 [\mathbf{B} \times \mathbf{P}] + \gamma^2 \tau^3 (\mathbf{B} \cdot \mathbf{P}) \mathbf{B}}{1 + (\gamma \tau B)^2} \quad (3.127)$$

$$\mathbf{P}(x) = \frac{k_B T}{e} (x - \eta) \nabla_r T + \frac{k_B T}{e} \nabla_r \eta - \nabla_r \varphi = \frac{k_B T}{e} (x - \eta) \nabla_r T - \left( \nabla_r \varphi - \frac{k_B T}{e} \right) \quad (3.128)$$

V homogenním vodiči je

- $\varphi$  elektrostatický potenciál a
- $\frac{\mathcal{E}_F}{e} = \frac{k_B T \eta}{e}$  chemický potenciál
- $\varphi^* = \varphi - \frac{k_B T \eta}{e}$  elektrochemický potenciál
- $\nabla_r \varphi^* = \mathbf{E}^*$  intenzita elektrického pole ve vzorku
- $\nabla_r \varphi = \mathbf{E}$  intenzita elektrického pole vnějšího

Takže

$$\mathbf{P}(x) = \mathbf{E}^* + \frac{k_B T}{e} (x - \eta) \nabla_r T \quad (3.129)$$

Dále si definujeme

$$\nu = \gamma \tau \mathbf{B} \quad (3.130)$$

Pro vektorový součin bude platit

$$\mathbf{B} \times \mathbf{P} = \begin{vmatrix} \mathbf{i}_0 & \mathbf{j}_0 & \mathbf{k}_0 \\ 0 & 0 & B \\ P_x & P_y & P_z \end{vmatrix} = \mathbf{i}_0(-BP_y) + \mathbf{j}_0(-1)^3(-BP_x) = -\mathbf{i}_0BP_y + \mathbf{j}_0BP_x \quad (3.131)$$

$$(\mathbf{B} \cdot \mathbf{P}) \mathbf{B} = BP_z \mathbf{B} = \mathbf{k}_0 P_z B^2 \quad (3.132)$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\chi}^* &= \frac{1}{1+\nu^2} \left\{ \mathbf{i}_0(\tau P_x - \tau^2 \gamma B P_y) + \right. \\
&\quad \left. + \mathbf{j}_0(\tau P_y + \tau^2 \gamma B P_x) + \mathbf{k}_0(\tau P_z + \tau^3 \gamma^2 B^2 P_z) \right\} = \\
&= \frac{1}{1+\nu^2} \left\{ \mathbf{i}_0(\tau P_x - \tau \nu P_y) + \mathbf{j}_0(\tau P_y + \tau \nu P_x) + \mathbf{k}_0 \tau P_z (1 + \nu^2) \right\} \\
\chi_x^* &= \frac{\tau}{1+\nu^2} E_x^* - \frac{\tau \nu}{1+\nu^2} E_y^* + \frac{k_0 (x - \eta) \tau}{e (1 + \nu^2)} \nabla_x T - \frac{k_0 (x - \eta) \tau \nu}{e (1 + \nu^2)} \nabla_y T \\
\chi_y^* &= \frac{\tau \nu}{1+\nu^2} E_x^* + \frac{\tau}{1+\nu^2} E_y^* + \frac{k_0 (x - \eta) \tau \nu}{e (1 + \nu^2)} \nabla_x T + \frac{k_0 (x - \eta) \tau}{e (1 + \nu^2)} \nabla_y T \\
\chi_z^* &= \tau E_z^* + \frac{k_0}{e} (x - \eta) \tau \nabla_z T
\end{aligned} \tag{3.133}$$

$$\mathbf{j} = \frac{e^2 n}{m_e^*} \langle \boldsymbol{\chi}^* \rangle = (j_x, j_y, j_z) \tag{3.134}$$

Po dosazení 3.132 do 3.133 dostaneme

$$j_x = \sigma_{xx} E_x^* - \sigma_{xy} E_y^* - \beta_{xx} \nabla_x T + \beta_{xy} \nabla_y T \tag{3.135}$$

$$j_y = \sigma_{xy} E_x^* + \sigma_{xx} E_y^* - \beta_{xy} \nabla_x T - \beta_{xx} \nabla_y T \tag{3.136}$$

$$j_z = \sigma_{zz} E_z^* - \beta_{zz} \nabla_z T \tag{3.137}$$

kde

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= \frac{e^2 n}{m_e^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + \nu^2} \right\rangle & \sigma_{xy} &= \frac{e^2 n}{m_e^*} \left\langle \frac{\tau \nu}{1 + \nu^2} \right\rangle \\
\sigma_{zz} &= \frac{e^2 n}{m_e^*} \langle \tau_z \rangle
\end{aligned} \tag{3.138}$$

$$\begin{aligned}
\beta_{xx} &= -\frac{en k_0}{m_e^*} \left\langle \frac{\tau (x - \eta)}{1 + \nu^2} \right\rangle & \beta_{xy} &= -\frac{en k_0}{m_e^*} \left\langle \frac{\tau \nu (x - \eta)}{1 + \nu^2} \right\rangle \\
\beta_{zz} &= -\frac{en k_0}{m_e^*} \langle \tau (x - \eta) \rangle
\end{aligned} \tag{3.139}$$

Všimneme si, že

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= f(B) & \sigma_{xy} &= f(B) & \sigma_{zz} &\neq f(B) \\
\beta_{xx} &= f(B) & \beta_{xy} &= f(B) & \beta_{zz} &\neq f(B)
\end{aligned} \tag{3.140}$$

Závislost elektrického proudu tekoucího vzorkem na vnitřním elektrickém poli a gradientu teploty můžeme psát

$$\mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}^* + \boldsymbol{\beta} \nabla_r T \tag{3.141}$$

kde

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} -\beta_{xx} & \beta_{xy} & 0 \\ -\beta_{xy} & -\beta_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & -\beta_{zz} \end{pmatrix} \tag{3.142}$$

Platí

$$\begin{aligned}\varphi^* &= \varphi - \frac{k_0 T}{e} \eta \\ \frac{k_0 T}{e} \varphi^* &= \frac{k_0 T}{e} \varphi - \eta\end{aligned}\tag{3.143}$$

$$\begin{aligned}\frac{k_0 T}{e} \varphi &= \frac{k_0 T}{e} \varphi^* + \eta \\ \mathbf{w} &= -\frac{en k_0 T}{m_e^*} \langle \boldsymbol{\chi}^* x \rangle + \varphi \mathbf{j}\end{aligned}\tag{3.144}$$

Značku středování  $\langle \cdot \rangle$  dále psát nebudeme

$$\begin{aligned}w_x &= -\frac{en k_0 T}{m_e^*} \frac{\tau x}{1 + \nu^2} E_x^* + \frac{en k_0 T}{m_e^*} \frac{\tau x \nu}{1 + \nu^2} E_y^* - \\ &\quad - \frac{n k_0^2 T}{m_e^*} \frac{x(x - \eta) \tau}{1 + \nu^2} \nabla_x T + \frac{n k_0^2 T}{m_e^*} \frac{x(x - \eta) \tau \nu}{1 + \nu^2} \nabla_y T + \\ &\quad + \left( \varphi^* + \frac{k_0 T}{e} \eta \right) \left\{ \frac{e^2 n}{m_e^*} E_x^* - \frac{e^2 n}{m_e^*} \frac{\tau \nu}{1 + \nu^2} E_y^* \right\} + \\ &\quad + \frac{en k_0}{m_e^*} \frac{(x - \eta) \tau}{1 + \nu^2} \nabla_x T - \frac{en k_0}{m_e^*} \frac{(x - \eta) \tau \nu}{1 + \nu^2} \nabla_y T = \\ &= -\frac{en k_0 T}{m_e^*} \frac{\tau(x - \eta)}{1 + \nu^2} E_x^* + \frac{en k_0 T}{m_e^*} \frac{\tau \nu(x - \eta)}{1 + \nu^2} E_y^* - \\ &\quad - \frac{n k_0^2 T \tau}{m_e^*} \frac{(x - \eta)^2 \tau}{1 + \nu^2} \nabla_x T + \frac{n k_0^2 T}{m_e^*} \frac{(x - \eta)^2 \tau \nu}{1 + \nu^2} \nabla_y T + \varphi^* j_x\end{aligned}\tag{3.145}$$

$$w_x = T \beta_{xx} E_x^* - T \beta_{xy} E_y^* - (\kappa_{xx} + \kappa_\varphi) \nabla_x T + \kappa_{xy} \nabla_y T + \varphi^* j_x\tag{3.146}$$

$$w_y = T \beta_{xy} E_x^* + T \beta_{xx} E_y^* - \kappa_{xy} \nabla_x T - (\kappa_{xx} + \kappa_\varphi) \nabla_y T + \varphi^* j_y\tag{3.147}$$

$$w_z = T \beta_{zz} E_z^* - (\kappa_{zz} + \kappa_\varphi) \nabla_z T + \varphi^* j_z\tag{3.148}$$

Zde  $\kappa_\varphi$  představuje tepelnou vodivost krystalové mřížky. Tuto veličinu jsme do vztahů doplnili dodatečně, neboť předchozí odvození se týkalo pouze systému volných nosičů (v tomto případě elektronů). Dále

$$\kappa_{xx} = \frac{n}{T} \frac{(k_0 T)^2}{m_e^*} \left\langle \frac{\tau(x - \eta)^2}{1 + \nu^2} \right\rangle\tag{3.149}$$

$$\kappa_{xy} = \frac{n}{T} \frac{(k_0 T)^2}{m_e^*} \left\langle \frac{\tau \nu(x - \eta)^2}{1 + \nu^2} \right\rangle\tag{3.150}$$

$$\kappa_{zz} = \frac{n}{T} \frac{(k_0 T)^2}{m_e^*} \langle \tau(x - \eta)^2 \rangle\tag{3.151}$$

Obecně je tedy hustota toku energie přenášená elektrony a dírami:

$$\mathbf{w} = T\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}^* + \kappa \nabla_r T + \varphi^* \mathbf{j} \quad (3.152)$$

$$\kappa = \begin{pmatrix} -\kappa_{xx} - \kappa_\varphi & \kappa_{xy} & 0 \\ \kappa_{xy} & -\kappa_{xx} - \kappa_\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa_{zz} - \kappa_\varphi \end{pmatrix} \quad (3.153)$$

kde  $\kappa_\varphi$  je mřížková tepelná vodivost, která je způsobena prouděním fononů z míst s vyšší teplotou na místa s nižší teplotou. Elektronová složka tepelné vodivosti pochází od volných elektronů, které difundují z míst s vyšší teplotou na místa s nižší teplotou. Elektrony přitom transportují jak náboj, tak i energii.

# Kapitola 4

## Transportní jevy a transportní koeficienty

Transportní jevy jsou takové jevy, při nichž dochází k transportu náboje a přenosu energie v krystalu.

### 4.1 Transportní jevy bez magnetického pole

V tomto případě je homogenní vodivé prostředí charakterizováno třemi kinetickými koeficienty — elektrickou vodivostí, termoelektrickou silou a tepelnou vodivostí. Tyto tři případy postupně odděleně probereme.

#### 4.1.1 Elektrická vodivost

Po přiložení vnějšího elektrického pole ve směru  $x$  vzniká v témž směru elektrický proud charakterizovaný proudovou hustotou  $\mathbf{j}$ . Empirický zákon (Ohmův zákon) zní

$$\mathbf{j} = \sigma_0 \mathbf{E}, \quad (4.1)$$

kde pro vodivost  $\sigma_0$  z experimentu plyne

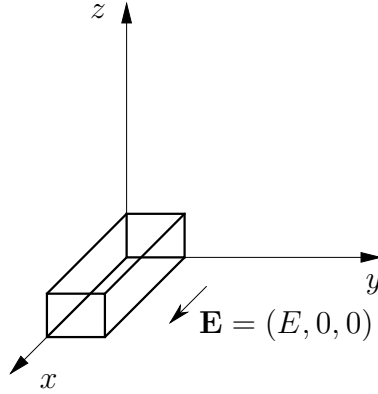
$$\sigma_0 = \frac{1}{\rho_0} = \frac{I S}{U l}, \quad (4.2)$$

kde  $S$  je plocha stěny vzorku ve tvaru kvádrů,  $l$  je jeho délka,  $U$  je přiložené napětí a  $I$  proud tekoucí vzorkem. Neboť pro elektrický odpor  $R$  platí

$$R = \rho_0 \frac{l}{S} = \frac{U}{I}. \quad (4.3)$$

Budeme předpokládat (viz obr. 4.4)





Obrázek 4.1: Elektrická vodivost — el. proud teče ve směru přiloženého elektrického napětí

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E} &= (E, 0, 0), \\
 \mathbf{B} &= (0, 0, 0) \quad \Rightarrow \quad \nu = 0, \\
 \nabla_{\mathbf{r}} T &= 0, \\
 \nabla_{\mathbf{r}} \eta &= 0 \quad (\text{homogenní polovodič}).
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Vzhledem k tomu je pro vnější pole  $\mathbf{E}$  a pole ve vzorku  $\mathbf{E}^*$  splněno

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^*. \tag{4.5}$$

Za učiněných předpokladů z Boltzmannovy rovnice plyne

$$\mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}, \tag{4.6}$$

$$\mathbf{j} = \sigma_{xx}(0) \mathbf{E} = \underbrace{\frac{e^2 n}{m_e^*} \langle \tau \rangle}_{\sigma_0} \mathbf{E} = \sigma_0 \mathbf{E}, \tag{4.7}$$

protože

$$\sigma_0 = \frac{e^2 n}{m_e^*} \langle \tau \rangle. \tag{4.8}$$

Dále zavedeme tzv. *driftovou pohyblivost*  $\mu$ .

$$\sigma_0 = en\mu \quad \Rightarrow \quad \mu = \frac{e}{m_e^*} \langle \tau \rangle, \tag{4.9}$$

kde  $\mu$  charakterizuje transport elektronů elektrickým polem.

Dále definujeme driftovou rychlost  $\mathbf{v}_d$

$$\mathbf{j} = en\mathbf{v}_d = en\mu\mathbf{E} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v}_d = \mu\mathbf{E}, \tag{4.10}$$

což znamená, že pohyblivost odpovídá střední rychlosti v jednotkovém elektrickém poli.

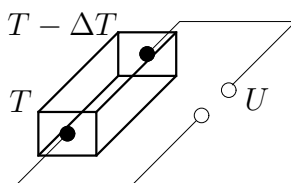
### 4.1.2 Termoelektrická síla (Seebeckův jev)

Je známo, že rozdělení volných nosičů v polovodiči závisí na teplotě. Proto jestliže podél vzorku existuje gradient teploty, pak je rozdělení rychlostí nosičů na teplém a chladném konci rozdílné. Jelikož se systém snaží dostat do rovnováhy, vzniká v polovodiči difúzní proud úměrný gradientu teploty. V důsledku difúze vznikne mezi oběma konci vzorku koncentrační rozdíl a s ním spojené elektrické pole. Výsledný elektrický proud pak vyrovná difúzní proud v důsledku gradientu teploty a ve vzorku se ustaví stacionární stav.

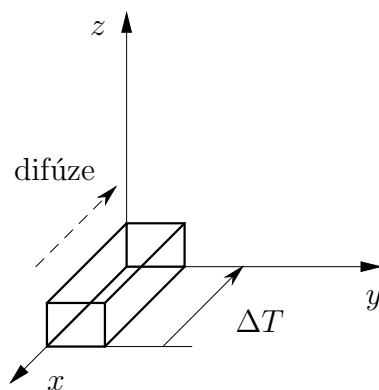
Empirický zákon (viz obr. 4.2) říká

$$U = \alpha(0)\Delta T. \quad (4.11)$$

Výchozí situace (viz obr. 4.2):



Obrázek 4.2: Termoelektrická síla - schéma jevu



Obrázek 4.3: Termoelektrická síla — v důsledku gradientu teploty dochází k difúzi a tím k vzniku termoelektrického napětí

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}} T &= (\nabla_x T, 0, 0), \\ \mathbf{B} &= (0, 0, 0) \Rightarrow \nu = 0, \\ \nabla_{\mathbf{r}} \eta &\neq 0, \\ \mathbf{j} &= (0, 0, 0). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Z Boltzmannovy kinetické rovnice (3.134) dostáváme

$$j_x = \sigma_{xx}(0)E_x^* - \beta_{xx}(0)\nabla_x T = 0, \quad (4.13)$$

$$E_x^* = \frac{\beta_{xx}(0)}{\sigma_{xx}(0)}\nabla_x T, \quad (4.14)$$

$$-\nabla_x \left( \varphi - \frac{k_0 T}{e} \eta \right) = \frac{\beta_{xx}(0)}{\sigma_{xx}(0)}\nabla_x T, \quad (4.15)$$

$$\underbrace{\nabla_x \left( \frac{k_0 T}{e} \eta - \varphi \right)}_{\text{Měřené napětí}} = \frac{\beta_{xx}(0)}{\sigma_{xx}(0)}\nabla_x T, \quad (4.16)$$

$$dU = \frac{\beta_{xx}(0)}{\sigma_{xx}(0)}\nabla_x T, \quad (4.17)$$

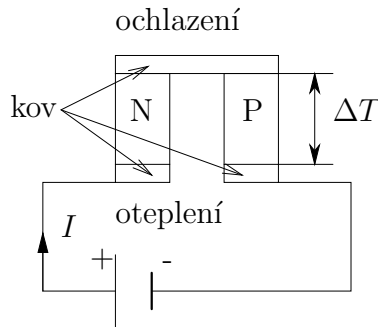
$$U = \frac{\beta_{xx}(0)}{\sigma_{xx}(0)}\Delta_x T. \quad (4.18)$$

Pro termoelektrickou sílu pak platí

$$\alpha(0) = \frac{\beta_{xx}(0)}{\sigma_{xx}(0)} = -\frac{enk_0}{m_e^*} \frac{m_e^*}{e^2 n} \frac{\langle \tau(x - \eta) \rangle}{\langle \tau \rangle} = -\frac{k_0}{e} \left( \frac{\langle \tau x \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta \right). \quad (4.19)$$

K Seebeckovu jevu, t.j. vytvoření gradientu elektrického potenciálu následkem teplotního gradientu existuje opačný Peltierův jev, t.j. vytvoření tepelného proudu o hustotě  $\mathbf{w}$  následkem elektrického proudu o hustotě  $\mathbf{j}$ . Matematicky je jev popsán pomocí rovnice (4.41), která bude odvozena v další části.

Na obr.4.4. je znázorněno schéma Peltierova článku, t.j. termoelektrického článku, kterým protéká elektrický proud z vnějšího zdroje, takže na jednom konci polovodičových článků dochází k ochlazení, na druhém k oteplení.



Obrázek 4.4: Peltierův článek

### 4.1.3 Tepelná vodivost

Dalším jevem ,který vzniká v důsledku pohybu náboje, je tepelná vodivost.

Empirický zákon říká, že tok tepla je přímo úměrný gradientu teploty.

$$w = -\varkappa \nabla T, \quad (4.20)$$

kde  $\varkappa_e = L_0 \sigma(0)T$  ( $L_0$  je tzv. Lorentzovo číslo) je tepelná vodivost elektronů, ke které je nutno připočítat tepelnou vodivost fononů  $\varkappa_\varphi$ .

Předpokládáme-li

$$\begin{aligned} \nabla_r T &= (\nabla_x T, 0, 0), \\ \mathbf{B} &= (0, 0, 0) \quad \Rightarrow \quad \nu = 0, \\ \mathbf{E}^* &= (E_x^*, 0, 0), \\ \mathbf{w} &= (w_x, 0, 0), \\ \mathbf{j} &= (0, 0, 0), \end{aligned} \quad (4.21)$$

pak z Boltzmannovy kinetické rovnice (3.134) dostáváme

$$j_x = \sigma_{xx}(0)E_x^* - \beta_{xx}(0)\nabla_x T = 0, \quad (4.22)$$

$$w_x = T\beta_{xx}(0)E_x^* - (\varkappa_{xx}(0) + \varkappa_\phi)\nabla_x T = 0, \quad (4.23)$$

$$E_x^* = \frac{\beta_{xx}(0)}{\sigma_{xx}(0)}\nabla_x T, \quad (4.24)$$

$$w_x = \left\{ T \frac{\beta_{xx}^2(0)}{\sigma_{xx}(0)} - \varkappa_{xx}(0) - \varkappa_\phi \right\} \nabla_x T. \quad (4.25)$$

Pro tepelnou vodivost  $\varkappa$  tedy platí

$$\varkappa = \varkappa_\phi + \varkappa_{xx}(0) - T \frac{\beta_{xx}^2(0)}{\sigma_{xx}(0)} = \varkappa_\phi + L_0 \sigma(0)T = \varkappa_\phi + \varkappa_e, \quad (4.26)$$

kde

$$L_0 = \left( \frac{k_0}{e} \right)^2 \left( \frac{\langle x^2 \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - \frac{\langle x \tau \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right). \quad (4.27)$$

Zatímco člen  $\varkappa_\phi \propto \frac{1}{T}$ , je člen  $\varkappa_e \propto T$ . Výsledná tepelná vodivost vznikne součtem  $\varkappa_\phi$  a  $\varkappa_e$ , pro polovodič je však vždy splněno  $\varkappa_\phi \gg \varkappa_e$ .

## 4.2 Transportní jevy při nenulovém magnetickém poli

Zatím jsme odvodili tenzorové vyjádření pro  $\mathbf{j}$  a  $\mathbf{w}$

$$\mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}^* + \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla_r T, \quad (4.28)$$

$$\mathbf{w} = T \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}^* + \boldsymbol{\varkappa} \cdot \nabla_r T + \varphi^* \mathbf{j}. \quad (4.29)$$

Toto vyjádření však pro porovnání s experimentálně zjištěnými zákony není příliš praktické, protože často měříme  $\mathbf{E}^*$  a  $\mathbf{w}$  v závislosti na  $\mathbf{j}$  a  $\nabla_r T$ . Proto provedeme transformaci výše uvedených tenzorů tak, abychom získali závislosti

$$\mathbf{E}^* = f(\mathbf{j}, \nabla_r T), \quad (4.30)$$

$$\mathbf{w} = f(\mathbf{j}, \nabla_r T). \quad (4.31)$$

Vydeme-li z Boltzmannovy kinetické rovnice, můžeme příslušnými operacemi vyloučit  $\mathbf{E}^*$  a  $\mathbf{w}$

$$\mathbf{E}^* = (\boldsymbol{\sigma})^{-1} \cdot \mathbf{j} - (\boldsymbol{\sigma})^{-1} \cdot \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla_r T, \quad (4.32)$$

$$\mathbf{w} = [-T\boldsymbol{\beta} \cdot (\boldsymbol{\sigma})^{-1} + \varphi^* \mathbf{I}] \cdot \mathbf{j} + [\boldsymbol{\varkappa} + T\boldsymbol{\beta} \cdot (\boldsymbol{\sigma})^{-1} \cdot \boldsymbol{\beta}] \cdot \nabla_r T. \quad (4.33)$$

Po algebraické úpravě dostaneme vztahy

$$\begin{aligned} E_x^* &= \rho_{xx} j_x + \rho_{xy} j_y + \alpha_{xx} \nabla_x T + \alpha_{xy} \nabla_y T, \\ E_y^* &= -\rho_{xy} j_x + \rho_{xx} j_y - \alpha_{xy} \nabla_x T + \alpha_{xx} \nabla_y T, \\ E_z^* &= \rho_{zz} j_z + \alpha_{zz} \nabla_z T, \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} w_x &= (\pi_{xx} + \varphi^*) j_x + \pi_{xy} j_y + (\lambda_{xx} + \boldsymbol{\varkappa}_\phi) \nabla_x T + \lambda_{xy} \nabla_y T, \\ w_y &= -\pi_{xy} j_x + (\pi_{yy} + \varphi^*) j_y - \lambda_{xy} \nabla_x T - (\lambda_{xx} + \boldsymbol{\varkappa}_\phi) \nabla_y T, \\ w_z &= (\pi_{zz} + \varphi^*) j_z - (\lambda_{zz} + \boldsymbol{\varkappa}_\phi) \nabla_z T, \end{aligned} \quad (4.35)$$

kde pro složky tenzorů specifického elektrického odporu  $\boldsymbol{\rho}$ , absolutní termosíly  $\boldsymbol{\alpha}$ , Peltierova jevu  $\boldsymbol{\pi}$  a tepelné vodivosti  $\boldsymbol{\lambda}$  platí

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad \rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad \rho_{zz} = \frac{1}{\sigma_{zz}}, \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{xx} &= \rho_{xx} \beta_{xx} + \rho_{xy} \beta_{xy} = \frac{\sigma_{xx} \beta_{xx} + \sigma_{xy} \beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \\ \alpha_{xy} &= \rho_{xy} \beta_{xx} - \rho_{xx} \beta_{xy} = \frac{\sigma_{xy} \beta_{xx} - \sigma_{xx} \beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \\ \alpha_{zz} &= \rho_{zz} \beta_{zz} = \frac{\beta_{zz}}{\sigma_{zz}}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} \pi_{xx} &= T \alpha_{xx} = T \frac{\sigma_{xx} \beta_{xx} + \sigma_{xy} \beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \\ \pi_{xy} &= T \alpha_{xy} = T \frac{\sigma_{xy} \beta_{xx} - \sigma_{xx} \beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \\ \pi_{zz} &= T \alpha_{zz} = T \frac{\beta_{zz}}{\sigma_{zz}}, \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned}
\lambda_{xx} &= \varkappa_{xx} - \pi_{xx}\beta_{xx} - \pi_{xy}\beta_{xy} = \varkappa_{xx} - T \frac{\sigma_{xx}(\beta_{xx}^2 - \beta_{xy}^2) + 2\sigma_{xy}\beta_{xx}\beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \\
\lambda_{xy} &= \varkappa_{xy} - \pi_{xx}\beta_{xy} + \pi_{xy}\beta_{xx} = \varkappa_{xy} - T \frac{\sigma_{xy}(\beta_{xy}^2 - \beta_{xx}^2) + 2\sigma_{xx}\beta_{xx}\beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \\
\lambda_{zz} &= \varkappa_{zz} - \pi_{zz}\beta_{zz} = \varkappa_{zz} - T \frac{\beta_{zz}^2}{\sigma_{zz}}.
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Obecně

$$\mathbf{E}^* = \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{j} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla_r T, \tag{4.40}$$

$$\mathbf{w} = \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{j} + \boldsymbol{\lambda} \cdot \nabla_r T, \tag{4.41}$$

kde

$$\boldsymbol{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & -\rho_{xy} & 0 \\ \rho_{xy} & \rho_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{zz} \end{pmatrix}, \tag{4.42}$$

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & 0 \\ -\alpha_{xy} & \alpha_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{zz} \end{pmatrix}, \tag{4.43}$$

$$\boldsymbol{\pi} = \begin{pmatrix} \pi_{xx} + \varphi^* & \pi_{xy} & 0 \\ -\pi_{xy} & \pi_{xx} + \varphi^* & 0 \\ 0 & 0 & \pi_{zz} + \varphi^* \end{pmatrix}, \tag{4.44}$$

$$\boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} -(\lambda_{xx} - \varkappa_\phi) & \lambda_{xy} & 0 \\ -\lambda_{xy} & -(\lambda_{xx} - \varkappa_\phi) & 0 \\ 0 & 0 & -(\lambda_{zz} - \varkappa_\phi) \end{pmatrix}. \tag{4.45}$$

#### Transportní jevy

---

adiabatické — vzorek odizolován od prostředí ( $T \neq \text{konst.}$ )

isotermické — vzorek a okolí na stejné teplotě ( $T = \text{konst.}$ )

---

### 4.2.1 Podélné jevy v magnetickém poli

Nejdříve se budeme zabývat speciálním případem, kdy magnetické pole  $\mathbf{B}$  a elektrický proud  $\mathbf{j}$  nebo gradient teploty  $\nabla_r T$ , popř. tepelný tok  $\mathbf{w}$  mají tentýž směr.

**Změna elektrického odporu v podélném magnetickém poli**

Předpokládáme :

$$\begin{aligned}
 \nabla_{\mathbf{r}} T &= (0, 0, 0), \\
 \mathbf{B} &= (0, 0, B), \\
 \nabla_{\mathbf{r}} \eta = 0 &\Rightarrow \mathbf{E}^* = \mathbf{E}, \\
 \mathbf{j} &= (0, 0, j),
 \end{aligned} \tag{4.46}$$

Z rovnice (4.40) plyne

$$\begin{aligned}
 E_z^* &= \rho_{zz}(B)j_z + \alpha_{zz}\nabla_z T, \\
 E_z^* &= \rho_{zz}(B)j, \\
 \rho_{zz}(B) &= \frac{E_z}{j}.
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

Elektrický odpor  $\rho_{zz}(B)$  se tedy v magnetickém poli nemění.

**Změna termosíly v podélném magnetickém poli**

Výchozí situace :

$$\begin{aligned}
 \nabla_{\mathbf{r}} T &= (0, 0, \nabla_z T), \\
 \mathbf{B} &= (0, 0, B), \\
 \nabla_{\mathbf{r}} \eta = 0 &\Rightarrow \mathbf{E}^* = \mathbf{E}, \\
 \mathbf{j} &= (0, 0, 0),
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

Dle (4.40)

$$E_z^* = \alpha_{zz}\nabla_z T, \tag{4.49}$$

$$E_z = \frac{\beta_{zz}}{\sigma_{zz}}\nabla_z T. \tag{4.50}$$

Vzhledem k tomu, že  $\beta_{zz}$ ,  $\sigma_{zz}$  nezávisí na  $\nu$ , tedy nejsou funkcemi magnetického pole  $\mathbf{B}$ , platí

$$\Delta\alpha_{\parallel} = \alpha_{zz}(B) - \alpha_{zz}(0) = 0, \tag{4.51}$$

což znamená, že pro standardní zónu ( $\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ ) se termosíla v podélném magnetickém poli nemění.

### Změna tepelné vodivosti

Ponechme uspořádání stejné jako v předešlém případě, tj.:

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{r}} T &= (0, 0, \nabla_z T), \\ \mathbf{B} &= (0, 0, B), \\ \nabla_{\mathbf{r}} \eta &= 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E}^* = \mathbf{E}, \\ \mathbf{j} &= (0, 0, 0),\end{aligned}\tag{4.52}$$

Vzhledem k (4.40) pro tepelný tok dostáváme

$$w_z = (\pi_{zz} + \varphi^*)j_z - (\lambda_{zz} + \varkappa_\phi)\nabla_z T,\tag{4.53}$$

$$w_z = -(\lambda_{zz} + \varkappa_\phi)\nabla_z T.\tag{4.54}$$

Protože

$$\lambda_{zz} = \varkappa_{zz} - T \frac{\beta_{zz}^2}{\sigma_{zz}}\tag{4.55}$$

a pro standardní zónu jsou  $\varkappa_{zz}$ ,  $\beta_{zz}$ ,  $\sigma_{zz}$  nezávislé na magnetickém poli  $\mathbf{B}$ , platí

$$\Delta \varkappa_{\parallel} = \lambda_{zz}(B) - \lambda_{zz}(0) = 0.\tag{4.56}$$

V podélném magnetickém poli tedy nepozorujeme změnu tepelné vodivosti. Je-li experimentálně pozorovaná např. podélná magnetorezistence, tj. změna elektrického odporu, pak je to projev nestandardní zóny.

### 4.2.2 Příčné jevy v magnetickém poli

O příčných jevech hovoříme tehdy, je-li magnetické pole  $\mathbf{B}$  kolmé na elektrický proud  $\mathbf{j}$  nebo gradient teploty  $\nabla_{\mathbf{r}} T$ , popř. tepelný tok  $\mathbf{w}$ . Dělíme je na *galvanometrické* a *termomagnetické*.

#### Hallův jev

Jestliže umístíme homogenní polovodič, ve kterém teče podél osy  $x$  elektrický proud, do příčného magnetického pole (ve směru osy  $z$ , budou se nosiče vlivem Lorentzovy síly odklánět podle znaménka náboje k jedné z hran vzorku kolmých k ose  $y$ . Díky tomu se budou na jedné ze stěn hromadit náboje jednoho typu, přičemž na opačné stěně zůstanou nezkompenzované náboje opačného znaménka. To vede ke vzniku příčného elektrického pole  $\mathbf{E}_y$ . Proces hromadění náboje na jedné ze stěn bude pokračovat tak dlouho, dokud pole  $\mathbf{E}_y$  nevyrovná vliv Lorentzovy síly. Pak se ustaví rovnovážný stav charakterizovaný podmínkou  $j_y = 0$  Experiment ukazuje, že

$$E_y \propto jB,\tag{4.57}$$



proto můžeme definovat *Hallovu konstantu*  $R_H$

$$R_H = \frac{E_y}{jB}, \quad (4.58)$$

protože

$$E_y = R_H j B. \quad (4.59)$$

Předpokládejme tedy:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}} T &= (0, 0, 0), \\ \mathbf{B} &= (0, 0, B), \\ \nabla_{\mathbf{r}} \eta = 0 &\Rightarrow \mathbf{E}^* = \mathbf{E}, \\ \mathbf{j} &= (j, 0, 0). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Potom z (4.40) plyne

$$E_y = -\rho_{xy} j, \quad (4.61)$$

$$\frac{E_y}{j} = -\rho_{xy}, \quad (4.62)$$

$$R_H = -\rho_{xy} \frac{1}{B}, \quad (4.63)$$

$$R_H = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \frac{1}{B}. \quad (4.64)$$

Po dosazení

$$R_H = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \frac{1}{B} = -\frac{m_e^*}{e^2 n} \frac{1}{D} \frac{1}{B} \left\langle \frac{\tau \nu}{1 + \nu^2} \right\rangle, \quad (4.65)$$

kde

$$D = \left\langle \frac{\tau}{1 + \nu} \right\rangle^2 + \left\langle \frac{\tau \nu}{1 + \nu} \right\rangle^2. \quad (4.66)$$

Definujeme *Hallův faktor*  $r_H$  vztahem

$$R_H = -r_H \frac{1}{en}, \quad (4.67)$$

takže

$$r_H = \frac{m_e^*}{e} \frac{1}{D} \frac{1}{B} \left\langle \frac{\tau \nu}{1 + \nu^2} \right\rangle, \quad (4.68)$$

a *Hallovu pohyblivost*  $\mu_H$  vztahem

$$\mu_H = |R_H \sigma_0|, \quad (4.69)$$

který po dosazení  $\sigma_0 = en\mu_D$  dává

$$\mu_H = r_H \frac{1}{en} en\mu_D = r_H \mu_D, \quad (4.70)$$

kde  $\mu_D$  je driftová pohyblivost elektronů. Běžně se Hallův faktor přibližně pohybuje v rozmezí 0,8 – 1,8.

*Hallův jev pro dva typy nosičů: elektrony a díry.*

Pro jeden typ nosičů jsme odvodili

$$R_H = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \frac{1}{B}. \quad (4.71)$$

Při započtení obou typů nosičů má Hallova konstanta tvar

$$R_H = -\frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}^{(1)} + \sigma_{xy}^{(2)}}{\left(\sigma_{xx}^{(1)} + \sigma_{xx}^{(2)}\right)^2 + \left(\sigma_{xy}^{(1)} + \sigma_{xy}^{(2)}\right)^2}. \quad (4.72)$$

Označme

$$R_1 = -\frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}^{(1)}}{\left(\sigma_{xx}^{(1)}\right)^2 + \left(\sigma_{xy}^{(1)}\right)^2}, \quad (4.73)$$

$$R_2 = -\frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}^{(2)}}{\left(\sigma_{xx}^{(2)} + \sigma_{xy}^{(2)}\right)^2}, \quad (4.74)$$

$$\sigma_1 = \frac{\left(\sigma_{xx}^{(1)}\right)^2 + \left(\sigma_{xy}^{(1)}\right)^2}{\sigma_{xx}^{(1)}}, \quad (4.75)$$

$$\sigma_2 = \frac{\left(\sigma_{xx}^{(2)}\right)^2 + \left(\sigma_{xy}^{(2)}\right)^2}{\sigma_{xx}^{(2)}}. \quad (4.76)$$

Po úpravě dostaneme pro Hallovu konstantu

$$R_H = \frac{1}{D_0} \left[ R_1 \sigma_1^2 + R_2 \sigma_2^2 + B^2 R_1 R_2 \sigma_1^2 \sigma_2^2 (R_1 + R_2) \right], \quad (4.77)$$

kde

$$D_0 = (\sigma_1 + \sigma_2)^2 + H^2 \sigma_1^2 \sigma_2^2 (R_1 + R_2)^2. \quad (4.78)$$

V slabém magnetickém poli (přibližně do 1 T) se tento výraz značně redukuje

$$R_{H0} = \frac{R_1 \sigma_1^2 + R_2 \sigma_2^2}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2}. \quad (4.79)$$

Navíc pro případ elektronů a děr

$$R_{Hn} = -\frac{r_H}{ne}, \quad R_{Hp} = \frac{r_H}{pe}, \quad (4.80)$$

$$R_{\text{H}0} = \frac{R_{\text{Hn}}\sigma_{\text{n}}^2 + R_{\text{Hp}}\sigma_{\text{p}}^2}{(\sigma_{\text{n}} + \sigma_{\text{p}})^2}, \quad (4.81)$$

$$R_{\text{H}0} = \frac{r_{\text{H}}}{e} \frac{p\mu_{\text{p}}^2 - n\mu_{\text{n}}^2}{(p\mu_{\text{p}} + n\mu_{\text{n}})^2}. \quad (4.82)$$

### Příčná magnetorezistence (změna elektrického odporu v magnetickém poli)

Transversální magnetické pole má vliv na dráhy pohybujících se nosičů. Tím se mění podmínky rozptylu a elektrická vodivost se změní.

Definujeme magnetorezistenci jako

$$\frac{\Delta\rho_{\perp}}{\rho(0)} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)}. \quad (4.83)$$

Označíme-li  $\rho = \rho_{xx}$  a uvažujeme-li stejnou situaci jako výše :

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}} T &= (0, 0, 0), \\ \mathbf{B} &= (0, 0, B), \\ \nabla_{\mathbf{r}} \eta &= 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E}^* = \mathbf{E}, \\ \mathbf{j} &= (j, 0, 0), \end{aligned} \quad (4.84)$$

vychází z rovnice (4.40)

$$\rho_{xx}(B) = \frac{E_x}{j_x} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad (4.85)$$

$$\sigma_{xy} = 0 \quad \Rightarrow \quad \rho_{xx}(0) = \frac{E_x}{j_x} = \frac{1}{\sigma_{xx}}. \quad (4.86)$$

Pro magnetorezistenci pak máme

$$\frac{\Delta\rho_{\perp}}{\rho_0} = \frac{\rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)}{\rho_{xx}(0)} = \frac{\rho_{xx}(B)}{\rho_{xx}(0)} - 1 = \quad (4.87)$$

$$= \frac{\sigma_{xx}^2}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} - 1 = -\frac{\sigma_{xy}^2}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} = \quad (4.88)$$

$$= -\frac{1}{D} \frac{1}{B} \left\langle \frac{\tau\nu}{1 + \nu^2} \right\rangle^2. \quad (4.89)$$

Při zapnutí příčného magnetického pole je tedy možné pozorovat změnu elektrického odporu.

### Nernst-Ettingshausejův jev

Tento jev je analogem Hallova jevu. Jestliže umístíme vzorek, podél jehož osy  $x$  existuje gradient teploty, do příčného magnetického pole ve směru osy  $z$ , vznikne elektrické pole ve směru osy  $y$ . Z experimentu plyne, že

$$E_y^* \propto B \nabla_x T, \quad (4.90)$$

lze tedy definovat faktor  $Q$

$$Q = -\frac{E_y^*}{B\nabla_x T}, \quad (4.91)$$

protože

$$E_y^* = -QB\nabla_x T. \quad (4.92)$$

Uvažujme proto výchozí situaci :

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}} T &= (\nabla_x T, 0, 0), \\ \mathbf{B} &= (0, 0, B), \\ \nabla_{\mathbf{r}} \eta = 0 &\Rightarrow \mathbf{E}^* = \mathbf{E}, \\ \mathbf{j} &= (0, 0, 0). \end{aligned} \quad (4.93)$$

Podle rovnice (4.40) se na vzorku objeví složka  $E_y^*$

$$E_y^* = -\alpha_{xy} \nabla_x T, \quad (4.94)$$

$$\frac{E_y^*}{\nabla_x T} = -\alpha_{xy}, \quad (4.95)$$

Takže pro faktor  $Q$  platí

$$Q = \alpha_{xy} \frac{1}{B} = \frac{\sigma_{xy}\beta_{xx} - \sigma_{xx}\beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \frac{1}{B} \quad (4.96)$$

Vedle Hallova napětí do měření příčného napětí tedy ještě vstupuje teplotní (Nernst-Ettingshausenovo) napětí. Výsledky experimentu ukazují, že velikost tohoto jevu se v jednotlivých materiálech řádově liší. Zatímco v kovech a degenerovaných polovodičích je Nernst-Ettingshausenův jev zanedbatelný, v nedegenerovaných polovodičích může mít značný vliv.

### Změna termosíly v příčném magnetickém poli

Změnu termosíly v příčném magnetickém poli je možno vyjádřit jako

$$\Delta\alpha = \alpha(B) - \alpha(0). \quad (4.97)$$

Výchozí situace :

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}} T &= (\nabla_x T, 0, 0), \\ \mathbf{B} &= (0, 0, B), \\ \nabla_{\mathbf{r}} \eta = 0 &\Rightarrow \mathbf{E}^* = \mathbf{E}, \\ \mathbf{j} &= (0, 0, 0). \end{aligned} \quad (4.98)$$

Ze vztahů (4.40) plyne

$$E_x^* = \alpha_{xx} \nabla_x T, \quad (4.99)$$

$$\alpha_{xx} = \frac{E_x^*}{\nabla_x T}, \quad (4.100)$$

a pro změnu termosíly tudíž platí

$$\Delta\alpha = \alpha_{xx}(B) - \alpha_{xx}(0) = \frac{\sigma_{xx}\beta_{xx} + \sigma_{xy}\beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} - \frac{\beta_{xx}}{\sigma_{xx}} \quad (4.101)$$

Termosíla se tedy v příčném magnetickém poli změní, narozdíl od případu podélného pole.

### Změna tepelné vodivosti v příčném magnetickém poli

Experimentálně

$$\Delta\kappa = \kappa(B) - \kappa(0). \quad (4.102)$$

Předpokládejme

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}} T &= (\nabla_x T, 0, 0), \\ \mathbf{B} &= (0, 0, B), \\ \nabla_{\mathbf{r}} \eta = 0 &\Rightarrow \mathbf{E}^* = \mathbf{E}, \\ \mathbf{j} &= (0, 0, 0). \end{aligned} \quad (4.103)$$

Užitím rovnic (4.40) dostáváme

$$w_x = -(\lambda_{xx} + \kappa_\phi) \nabla_x T, \quad (4.104)$$

$$\lambda_{xx} + \kappa_\phi = -\frac{w_x}{\nabla_x T} = \kappa(B), \quad (4.105)$$

a pro změnu tepelné vodivosti tedy platí

$$\begin{aligned} \Delta\kappa &= \kappa(B) - \kappa(0) = \lambda_{xx}(B) + \kappa_\phi - \lambda_{xx}(0) - \kappa_\phi = \lambda_{xx}(B) - \lambda_{xx}(0) = \\ &= \kappa_{xx}(B) - T \frac{\sigma_{xx}(\beta_{xx}^2 - \beta_{xy}^2) + 2\sigma_{xy}\beta_{xx}\beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} - \kappa_{xx}(0) + T \frac{\beta_{xx}^2(0)}{\sigma_{xx}(0)} \end{aligned} \quad (4.106)$$

## 4.3 Polovodiče se smíšenou elektrickou vodivostí

Pro proudovou hustotu  $\mathbf{j}$  a hustotu toku energie  $\mathbf{w}$  v polovodiči se smíšenou elektrickou vodivostí platí:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}^{(e)} + \mathbf{j}^{(h)} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}^* + \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} T, \quad (4.107)$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}^{(e)} + \mathbf{w}^{(h)} = T\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}^* + \kappa \cdot \nabla_{\mathbf{r}} T + \varphi^* \mathbf{j}, \quad (4.108)$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= \sigma_{xx}^{(e)} + \sigma_{xx}^{(h)}, & \sigma_{xy} &= \sigma_{xy}^{(e)} + \sigma_{xy}^{(h)}, \\
\beta_{xx} &= \beta_{xx}^{(e)} + \beta_{xx}^{(h)}, & \beta_{xy} &= \beta_{xy}^{(e)} + \beta_{xy}^{(h)}, \\
\chi_{xx} &= \chi_{xx}^{(e)} + \chi_{xx}^{(h)}, & \chi_{xy} &= \chi_{xy}^{(e)} + \chi_{xy}^{(h)}.
\end{aligned} \tag{4.109}$$

Vztahy pro  $\sigma_{ik}^{(e)}$ ,  $\beta_{ik}^{(e)}$ ,  $\chi_{ik}^{(e)}$  jsme odvodili, výrazy pro  $\sigma_{ik}^{(h)}$ ,  $\beta_{ik}^{(h)}$ ,  $\chi_{ik}^{(h)}$  dostaneme, provedeme-li přechod od elektronů k dířám :

$$x \longrightarrow x', \quad -e \longrightarrow +e, \quad \tau_e \longrightarrow \tau_h, \quad N_C \longrightarrow N_V, \tag{4.110}$$

$$\eta \longrightarrow \eta' = -\eta - \frac{\mathcal{E}_g}{k_0 T}, \quad n \longrightarrow p, \quad \nu_e \longrightarrow -\nu_h, \quad m_e^* \longrightarrow m_h^*, \tag{4.111}$$

tedy

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}^{(h)} &= \frac{e^2 p}{m_h^*} \left\langle \frac{\tau_h}{1 + \nu_h^2} \right\rangle, & \sigma_{xy}^{(h)} &= -\frac{e^2 p}{m_h^*} \left\langle \frac{\tau_h \nu_h}{1 + \nu_h^2} \right\rangle, \\
\beta_{xx}^{(h)} &= \frac{epk_0}{m_h^*} \left\langle \frac{\tau_h (x' - \eta')}{1 + \nu_h^2} \right\rangle, & \beta_{xy}^{(h)} &= -\frac{epk_0}{m_h^*} \left\langle \frac{\tau_h \nu_h (x' - \eta')}{1 + \nu_h^2} \right\rangle, \\
\chi_{xx}^{(h)} &= \frac{p (k_0 T)^2}{T m_h^*} \left\langle \frac{\tau_h (x' - \eta')^2}{1 + \nu_h^2} \right\rangle, & \chi_{xy}^{(h)} &= -\frac{p (k_0 T)^2}{T m_h^*} \left\langle \frac{\tau_h \nu_h (x' - \eta')^2}{1 + \nu_h^2} \right\rangle,
\end{aligned} \tag{4.112}$$

V případě nulového magnetického pole se vztahy výrazně zjednoduší

$$\sigma_{zz}^{(h)} = \frac{e^2 p}{m_h^*} \langle \tau_h \rangle, \tag{4.113}$$

$$\beta_{zz}^{(h)} = \frac{epk_0}{m_h^*} \langle \tau_h (x' - \eta') \rangle, \tag{4.114}$$

$$\chi_{zz}^{(h)} = \frac{p (k_0 T)^2}{T m_h^*} \langle \tau_h (x' - \eta')^2 \rangle. \tag{4.115}$$

# Kapitola 5

## Kinetika nosičů

### 5.1 Rovnice kontinuity elektronů

Řešení Boltzmannovy kinetické rovnice (Boltzmannova kinetická rovnice) je značně obtížné, proto se často používají jednodušší přístupy, tzv. bilanční rovnice odvozené z původní Boltzmannovy kinetické rovnice. Například rovnice kontinuity elektronů

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_n + G_n - R_n = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j} + G_n - R_n, \quad (5.1)$$

kde  $n$  značí koncentraci elektronů,  $\mathbf{J}_n$  elektronový tok, zatímco  $\mathbf{j} = -e\mathbf{J}_n$  elektrický proud. Rovnice kontinuity elektronů říká, že změna koncentrace elektronů v daném objemu je dána tokem elektronů do objemu a z objemu a změnou koncentrace v důsledku jejich generace a rekombinace. Předpokládejme, že  $\Phi(\mathbf{k})$  je obecně nějaká funkce  $\mathbf{k}$  na čase nezávislá. Hodnota nějaké fyzikální veličiny spjaté s funkcí  $\Phi(\mathbf{k})$  je dána jako

$$n_\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t), \quad (5.2)$$

tj. jedná se o vážený průměr přes všechny stavy. Tok této veličiny lze rovněž definovat

$$\mathbf{F}_\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \mathbf{v} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t), \quad (5.3)$$

kde  $\mathbf{v}$  označuje rychlost. Při vhodné volbě  $\Phi(\mathbf{k})$  reprezentuje  $n_\Phi(\mathbf{r}, t)$  například koncentraci elektronů, jejich hybnost nebo energii:

- $\Phi(\mathbf{k}) = 1$  — koncentrace elektronů,
- $\Phi(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$  — hybnost,
- $\Phi(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})$  — energie.

Abychom našli  $n_\Phi(\mathbf{r}, t)$  vynásobíme Boltzmannovu kinetická rovnici  $\Phi(\mathbf{k})$  a sečteme přes všechna  $\mathbf{k}$  (integrace a normalizace na  $V$ )

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \left( \frac{-e}{\hbar} \right) \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f &= S(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \left( \frac{\partial}{\partial t} f \right)_{\text{srážky}} \quad \Big/ \cdot \frac{\Phi(\mathbf{k})}{V} \Big/ \sum_{\mathbf{k}}, \\ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial t} f + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \left( \frac{-e}{\hbar} \right) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f &= \\ = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) S(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \left( \frac{\partial}{\partial t} f \right)_{\text{Srážky}}. & \end{aligned} \quad (5.4)$$

Čtvrtý člen této rovnosti můžeme interpretovat jako zdroj (*source*) nebo zánik (*sink*) elektronů<sup>1</sup>. Nyní budeme jednotlivé členy rovnosti upravovat:

**1. člen** Vzhledem k tomu, že  $\Phi(\mathbf{k})$  nezávisí na čase, můžeme psát

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial t} f = \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) f}_{n_\Phi(\mathbf{r}, t)} = \frac{\partial n_\Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (5.5)$$

**2. člen** Protože jak  $\Phi(\mathbf{k})$ , tak  $\mathbf{v}$  jsou nezávislé na souřadnici, platí pro tento člen

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \underbrace{\left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \mathbf{v} f \right)}_{\mathbf{F}_\Phi(\mathbf{r}, t)} = \nabla \cdot \mathbf{F}_\Phi(\mathbf{r}, t), \quad (5.6)$$

kde  $\mathbf{F}_\Phi(\mathbf{r}, t)$  je tok spojený s veličinou  $n_\Phi(\mathbf{r}, t)$ . Je-li například  $n_\Phi(\mathbf{r}, t)$  koncentrace nosičů, je  $\mathbf{F}_\Phi(\mathbf{r}, t)$  tok nosičů.

**3. člen**

$$\left( \frac{-e}{\hbar} \right) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left( \frac{-e}{\hbar} \right) \frac{1}{V} \mathbf{E} \cdot \sum_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} [\Phi(\mathbf{k}) f] + \left( \frac{e}{\hbar} \right) \frac{1}{V} \mathbf{E} \cdot \sum_{\mathbf{k}} f \nabla_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \quad (5.7)$$

S využitím vztahu

$$\nabla_{\mathbf{k}} (f \Phi(\mathbf{k})) = f \nabla_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) + \Phi(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} f \quad (5.8)$$

Druhý člen této rovnosti lze zanedbat, protože funkce  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$  rychle klesá k nule s rostoucím  $\mathbf{k}$ . Dále definujme generační člen

$$G_\Phi = \frac{e}{\hbar} \frac{1}{V} \mathbf{E} \cdot \sum_{\mathbf{k}} f \nabla_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}). \quad (5.9)$$

<sup>1</sup>V důsledku vnějšího působení (např. generace volných elektronů v důsledku ozáření vzorku zdrojem světla)



Tato definice byla zvolena proto, že elektrické pole zvyšuje hybnost nosičů, a tím i  $n_{\Phi}(\mathbf{r}, t)$ . Generační člen tohoto typu tedy nepřináší nové nosiče.

- 4. člen** Kromě generace vlivem elektrického pole se  $n_{\Phi}(\mathbf{r}, t)$  zvyšuje i v důsledku generace nosičů (jiného než polního, například optického) a snižuje v důsledku jejich rekombinace. Tyto změny popisuje veličina

$$S_{\Phi}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) S(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t). \quad (5.10)$$

- 5. člen** Srážky destruuji hybnost a působí proti odchylkám od rovnováhy, proto definujeme veličinu popisující ztráty nosičů pouze změnami v energii, přitom počet částic zůstává nezměněn

$$R_{\Phi}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \left( \frac{\partial}{\partial t} f \right)_{\text{Srážky}} = \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_{\Phi}} \right\rangle \right\rangle [n_{\Phi}(\mathbf{r}, t) - n_{\Phi}^0(\mathbf{r}, t)], \quad (5.11)$$

kde  $n_{\Phi}^0(\mathbf{r}, t)$  je rovnovážná hodnota  $n_{\Phi}(\mathbf{r}, t)$  a  $\left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_{\Phi}} \right\rangle \right\rangle$  je relaxační doba souboru nosičů.

Dále budeme hledat  $\left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_{\Phi}} \right\rangle \right\rangle$ :

Nechť  $W(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  udává pravděpodobnost rozptylu z počátečního stavu  $\mathbf{k}'$  do koncového stavu  $\mathbf{k}$  a předpokládejme rozptyl nosičů do volných stavů (tj. zanedbáme faktor  $(1 - f(\mathbf{k}))$  u jednotlivých sčítanců), pak po záměně volných sčítacích indexů  $\mathbf{k}'$  a  $\mathbf{k}$  v prvním sčítanci na pravé straně, dostaneme

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \left( \frac{\partial}{\partial t} f \right)_{\text{Srážky}} &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}') W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}) - \Phi(\mathbf{k}) W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}) = \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'} \left( \frac{\Phi(\mathbf{k}')}{\Phi(\mathbf{k})} - 1 \right) W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\ &= - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Phi(\mathbf{k}) f(\mathbf{k})}{\tau_{\Phi}(\mathbf{k})}, \end{aligned} \quad (5.12)$$

kde

$$\frac{1}{\tau_{\Phi}(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} \left( 1 - \frac{\Phi(\mathbf{k}')}{\Phi(\mathbf{k})} \right) W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (5.13)$$

je míra přechodu z  $\mathbf{k}$  do  $\mathbf{k}'$  vážená zlomkovou změnou  $\Phi(\mathbf{k})$  a sečtená přes všechny stavy  $\mathbf{k}'$ , do kterých se nosič může rozptýlit. Při úpravě jsme použili výsledku detailní rovnováhy,  $W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ .

Z předchozích rovnic plyne, že

$$\left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_{\Phi}} \right\rangle \right\rangle [n_{\Phi}(\mathbf{r}, t) - n_{\Phi}^0(\mathbf{r}, t)] = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Phi(\mathbf{k}) f(\mathbf{k})}{\tau_{\Phi}(\mathbf{k})}, \quad (5.14)$$

takže

$$\left\langle\left\langle \frac{1}{\tau_{\Phi}} \right\rangle\right\rangle = \frac{\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Phi(\mathbf{k})f(\mathbf{k})}{\tau_{\Phi}(\mathbf{k})}}{[n_{\Phi}(\mathbf{r}, t) - n_{\Phi}^0(\mathbf{r}, t)]}, \quad (5.15)$$

přičemž u  $\frac{1}{\tau_{\Phi}(\mathbf{k})}$  záleží jen na fyzikálních procesech rozptylu daných  $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ , zatímco  $\left\langle\left\langle \frac{1}{\tau_{\Phi}} \right\rangle\right\rangle$  závisí jak na fyzice rozptylu, tak na tom, jaké je rozložení nosičů (na hladinách) z hlediska  $\mathbf{k}$ .

Po sečtení předešlých členů můžeme konečně psát

$$\frac{\partial n_{\Phi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{F}_{\Phi} + G_{\Phi} - R_{\Phi} + S_{\Phi}, \quad (5.16)$$

kde  $G_{\Phi}$  odpovídá generaci vlivem pole,  $R_{\Phi}$  úbytku vlivem srážek a  $S_{\Phi}$  jinému typu generace nebo rekombinace.

### 5.1.1 Odvození rovnice kontinuity

V dalším budeme předpokládat  $\Phi(\mathbf{k}) = 1$ .

Pro tok veličiny  $\Phi(\mathbf{k})$  v tomto případě dostáváme

$$\mathbf{F}_{\Phi} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v} f = n \mathbf{v}_D = -\frac{\mathbf{j}_e}{e}, \quad (5.17)$$

$\mathbf{v}_D$  označuje průměrnou rychlost elektronů a  $\mathbf{j}_e$  elektrický proud.

Vzhledem k tomu, že  $\nabla_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} (1) = 0$ , je  $G_{\Phi} = 0$ , a že

$$\frac{1}{\tau_{\Phi}(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} \left(1 - \frac{\Phi(\mathbf{k}')}{\Phi(\mathbf{k})}\right) W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{k}'} \left(1 - \frac{1}{1}\right) W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 0, \quad (5.18)$$

je

$$R_{\Phi}(\mathbf{r}, t) = \left\langle\left\langle \frac{1}{\tau_{\Phi}} \right\rangle\right\rangle [n_{\Phi}(\mathbf{r}, t) - n_{\Phi}^0(\mathbf{r}, t)] = 0. \quad (5.19)$$

Rovnice kontinuity elektronů má pak jednoduchý tvar

$$\frac{\partial n_{\Phi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{F}_{\Phi} + G_{\Phi} - R_{\Phi} + S_{\Phi} = \frac{\mathbf{j}_e}{e} + S_{\Phi}. \quad (5.20)$$

## 5.2 Odvození balanční rovnice hybnosti a rovnice pro proudovou hustotu

Budeme se zabývat  $z$ -ovou složkou  $p_z$  hybnosti. V dalším proto zaměníme index  $\mathbf{k}$  za index  $\mathbf{p}$ . Za funkci  $\Phi(\mathbf{p})$  dosadíme  $p_z$ , pro  $n_{\Phi}(\mathbf{r}, t)$  tedy dostaneme

$$n_{\Phi}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} p_z f = P_z = n m_e^* v_{Dz}, \quad (5.21)$$

kde  $P_z$  je  $z$ -ová složka celkové hybnosti  $\mathbf{P}$  a  $v_{Dz}$  je  $z$ -ová složka průměrné rychlosti.

Pro tok  $z$ -ové složky hybnosti platí

$$F_{\Phi i} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} v_i p_z f = 2W_{iz}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (5.22)$$

Tímto jsme zavedli *tenzor kinetické energie*  $\mathbf{W}$ .

Protože elektrické pole urychluje nosiče, generuje hybnost. Příslušný člen má pak tvar

$$G_{\Phi} = -e\mathbf{E} \cdot \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} f \nabla_{\mathbf{p}} \Phi(\mathbf{p}) = -e\mathbf{E} \cdot \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} f \nabla_{\mathbf{p}} p_z = -enE_z, \quad (5.23)$$

neboť  $\nabla_{\mathbf{p}} p_z = 1$ .

Srážky způsobující rozptyl hybnosti charakterizujeme veličinou  $R_{\Phi}$ , pro niž v tomto případě dostáváme

$$R_{\Phi} = \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle P_z. \quad (5.24)$$

Dosadíme-li tyto výsledky do rovnice 5.16 a předpokládáme-li  $S_{\Phi} = 0$ , můžeme psát

$$\frac{\partial n_{\Phi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{F}_{\Phi} + G_{\Phi} - R_{\Phi} + S_{\Phi}, \quad (5.25)$$

$$\frac{\partial P_j}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} 2W_{ij} - neE_j - \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle P_j, \quad (5.26)$$

kde  $W_{ij} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}} v_i p_j f$  definuje  $ij$ -tou složku tenzoru kinetické energie  $\mathbf{W}$ .

**Rovnice toku hybnosti** tedy zní

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -2\nabla \cdot \mathbf{W} - ne\mathbf{E} - \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle \mathbf{P}. \quad (5.27)$$

Stopa tenzoru má jasný fyzikální význam

$$W_{ii} = \sum_i W_{ii} = \sum_i \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{2} m_e^* v_i^2 f(\mathbf{p}) = nu = W, \quad (5.28)$$

kde  $W$  je střední hodnota kinetické energie a  $u$  je střední kinetická energie připadající na jeden nosič. Pro standardní zónu, kdy  $m^* \mathbf{v} = \hbar \mathbf{k} = \mathbf{p}$ , lze psát

$$\mathbf{j}_{\mathbf{e}} = -en\mathbf{v}_D = -\frac{e\mathbf{p}}{m_e^*}. \quad (5.29)$$

Tím dostáváme **rovnici pro proudovou hustotu**

$$\frac{\partial \mathbf{j}_{\mathbf{e}}}{\partial t} = \frac{2e\nabla \cdot \mathbf{W}}{m_e^*} + \frac{ne^2 \mathbf{E}}{m_e^*} - \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle \mathbf{j}_{\mathbf{e}}. \quad (5.30)$$

### 5.2.1 Teplota nosičů

Pro  $ii$ -tou složku tenzoru  $\mathbf{W}$  platí

$$W_{ii} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}} p_i v_i f = \frac{m_e^*}{2V} \sum_{\mathbf{p}} v_i^2 f = \frac{nm_e^*}{2} \langle v_i^2 \rangle. \quad (5.31)$$

Vzhledem k tomu, že  $\mathbf{v} = \mathbf{v}_D + \mathbf{c}$ , kde  $\mathbf{v}_D$  je *driftová rychlost*, tj. rychlost spojená s vnějším polem a  $\mathbf{c}$  je *tepelná rychlost*, která souvisí s náhodným pohybem nosičů, pro stopu tenzoru  $\mathbf{W}$  plyne

$$\begin{aligned} W_{ii} &= \sum_i \left( \frac{1}{2} nm_e^* \langle v_{Di}^2 \rangle + \frac{1}{2} nm_e^* \langle c_i^2 \rangle \right) = \\ &= \frac{1}{2} nm_e^* v_D^2 + \frac{1}{2} nm_e^* \langle c^2 \rangle, \end{aligned} \quad (5.32)$$

neboť  $\langle c_i \rangle = 0$ . Protože  $\mathbf{W}$  je tenzor, definujeme pomocí vztahu

$$\begin{aligned} W_{ij} &= \frac{1}{2} nm_e^* v_{Di} v_{Dj} + \frac{1}{2} nm_e^* \langle c_i c_j \rangle = \\ &= \frac{1}{2} nm_e^* v_{Di} v_{Dj} + \frac{1}{2} nk T_{ij} \end{aligned} \quad (5.33)$$

tenzor teploty  $\mathbf{T}$  charakterizující tepelný pohyb nosičů. Platí pro něj

$$\frac{1}{2} nk T_{ij} = \frac{1}{2} nm_e^* \langle c_i c_j \rangle. \quad (5.34)$$

Tenzor  $\mathbf{W}$  pak můžeme psát ve tvaru

$$W_{ij} = K_{ij} + \frac{nk}{2} T_{ij}, \quad (5.35)$$

kde složku  $K_{ij} = \frac{nm_e^*}{2} v_{Di} v_{Dj}$  lze pro slabá pole zanedbat. Tím je tenzor kinetické energie  $\mathbf{W}$  rozložen do součtu tenzoru  $\mathbf{K}$ , spojeným se středním pohybem nosičů ve vnějším poli, a tenzoru teploty  $\mathbf{T}$ , který je určen náhodným pohybem nosičů. Celkem tedy máme

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -\nabla \cdot (2\mathbf{K} + nk\mathbf{T}) - ne\mathbf{E} - \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle \mathbf{P}. \quad (5.36)$$

## 5.3 Odvození drift-difúzní rovnice

Nejprve upravíme dříve odvozenou rovnici

$$\frac{\partial \mathbf{j}_e}{\partial t} = \frac{2e\nabla \cdot \mathbf{W}}{m_e^*} + \frac{ne^2 \mathbf{E}}{m_e^*} - \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle \mathbf{j}_e, \quad (5.37)$$

$$\mathbf{j}_e + \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle \frac{\partial \mathbf{j}_e}{\partial t} = \frac{ne^2 \mathbf{E}}{m_e^* \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle} + \frac{2e\nabla \cdot \mathbf{W}}{m_e^* \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \right\rangle}. \quad (5.38)$$

Definujeme *pohyblivost nosičů* jako

$$\mu_e = \frac{e}{m_e^* \left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle}. \quad (5.39)$$

Poznamenejme, že obecně

$$\left\langle \frac{1}{\tau_m} \right\rangle \neq \frac{1}{\langle \tau_m \rangle}. \quad (5.40)$$

Lze rozumně předpokládat, že proud se silně nemění za relaxační dobu momentu hybnosti, tj. zanedbáme druhý člen na levé straně ve výše odvozené rovnici. Pak dostáváme

$$\mathbf{j}_e = e\mu_e n \mathbf{E} + 2\mu_e \nabla \cdot \mathbf{W}. \quad (5.41)$$

Dále zanedbáme (v aproximaci Boltzmannovy kinetická rovnice zcela oprávněně) driftovou složku  $\mathbf{W}$  a předpokládáme, že tento tenzor je diagonální (například pro kubický krystal)

$$W_{ij} = \frac{nk_0 T_C}{2} \delta_{ij} = \frac{W}{3} \delta_{ij}, \quad (5.42)$$

přičemž  $W = \frac{3}{2}nk_0 T_C$  je hustota energie za předpokladu, že driftová složka je malá, a  $T_C$  je teplota nosičů. Označíme-li  $\mathbf{I}$  tenzor identity, lze psát

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_e &= e\mu_e n \mathbf{E} + 2\mu_e \nabla \cdot \mathbf{W} = \\ &= e\mu_e n \mathbf{E} + \mu_e \nabla \cdot 2\mathbf{W} = \\ &= e\mu_e n \mathbf{E} + \mu_e \nabla \cdot nk_0 T_C \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (5.43)$$

**Drift-difúzní rovnice** tedy zní

$$\mathbf{j}_e = e\mu_e n \mathbf{E} + \mu_e k_0 T_C \nabla n + \mu_e k_0 n \nabla T_C. \quad (5.44)$$

První člen odpovídá driftu elektrickým polem, zatímco druhý je důsledek difúze. Třetí člen odpovídá pohybu v důsledku gradientu teploty. V souvislosti s touto rovnicí se zavádí *difúzní koeficient*  $D_e$

$$D_e = \frac{k_0 T_C}{e} \mu_e \quad (5.45)$$

a *Soretův koeficient*  $S$

$$S = n\mu_e \left( \frac{k_0}{e} \right). \quad (5.46)$$

## 5.4 Celková proudová hustota

Nyní započítáme do našich úvah kromě elektronů ještě díry, dostáváme

$$\mathbf{j}_{e\text{drift}} = en\mu_e \mathbf{E}, \quad \mathbf{j}_{h\text{drift}} = ep\mu_h \mathbf{E}, \quad (5.47)$$

$$\mathbf{j}_{e\text{dif}} = -e\mathbf{J}_e = eD_e \nabla_r n, \quad \mathbf{j}_{h\text{dif}} = e\mathbf{J}_h = -eD_h \nabla_r p. \quad (5.48)$$

Z posledních dvou vztahů plyne **první Fickův zákon** pro elektrony

$$\mathbf{J}_e = -D_e \nabla_r n \quad (5.49)$$

a pro díry

$$\mathbf{J}_h = D_h \nabla_r p. \quad (5.50)$$

Pro celkovou proudovou hustotu platí

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_e + \mathbf{j}_h, \quad (5.51)$$

přičemž

$$\mathbf{j}_e = e\mu_e n \mathbf{E} + eD_e \nabla n, \quad (5.52)$$

$$\mathbf{j}_h = e\mu_h p \mathbf{E} - eD_h \nabla p. \quad (5.53)$$

V případě nehomogenního polovodiče, ve kterém existuje vnitřní pole  $\mathbf{E}^*$  (kompenzované gradientem koncentrace nosičů), je celkový proud nulový. Pak

$$e\mu_e n \mathbf{E}^* + eD_e \nabla n = 0. \quad (5.54)$$

Vyjádříme-li  $\nabla_r n$  v závislosti na  $\mathbf{E}^*$ , tj. odvodíme-li **Einsteinův vztah** vyjadřující ekvivalenci koncentračního gradientu a elektrického pole, tedy

$$\nabla_x n = \frac{dn}{dx} = N_C e^{\frac{\varepsilon_F}{kT}} \frac{d\varepsilon_F}{dx} \frac{1}{kT} = \frac{ne}{kT} \frac{dU_F}{dx} = -\frac{ne}{kT} E_x^*, \quad (5.55)$$

můžeme x-ovou složku rovnice (5.54) psát jako

$$e\mu_e n E_x^* + eD_e \nabla_x n = 0, \quad (5.56)$$

$$e\mu_e n E_x^* - \frac{ne^2 D_e}{kT} E_x^* = 0, \quad (5.57)$$

$$D_e = \frac{kT}{e} \mu_e. \quad (5.58)$$

Podobně můžeme postupovat i v případě děr. Pak dostaneme

$$D_h = \frac{k_0 T_C}{e} \mu_h. \quad (5.59)$$

To je zcela v souladu s původními definicemi difúzních koeficientů.

## 5.5 Elektrony a díry v nerovnovážném stavu

Jestliže je v termodynamické rovnováze koncentrace elektronů  $n_0$  a děr  $p_0$ , můžeme docílit odchylky od této rovnováhy vnějším způsobem (např. absorbcí světla), přičemž je zachována elektrická neutralita. Fotoelektrická generace znamená vytržení elektronu z valenčního pásu do vodivostního pásu, přičemž vznikají páry elektron-díra bez porušení elektrické neutrality. Při konstantním osvětlení se po určité době vytvoří nový rovnovážný

stav s nadbytečnou koncentrací nosičů. Pro odchylku od termodynamické rovnováhy při zachování nábojové neutrality platí

$$\begin{aligned} \Delta n &= n - n_0 & n &= n_0 + \Delta n, \\ \Delta p &= p - p_0 & p &= p_0 + \Delta p, \end{aligned} \quad (5.60)$$

kde

$n_0, p_0$  — rovnovážný stav

$\Delta n, \Delta p$  — odchylka od rovnováhy

a  $\Delta n = \Delta p$ , například v důsledku absorpce světla.

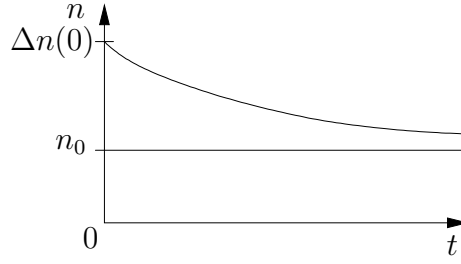
Nejdříve se zaměříme na rekombinaci. Nechť  $g$  vyjadřuje vždy přítomnou termickou generaci. Nadbytečná koncentrace nosičů se časem změní zvýšenou rekombinací  $R > g$ .

$$\begin{aligned} -\frac{d \Delta n}{d t} &= R - g = rnp - rn_0p_0 = r(np - n_i^2), \\ -\frac{d \Delta n}{d t} &= r[(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) - n_i^2] = \\ &= r[(n_0p_0 + n_0\Delta p + p_0\Delta n + \Delta n\Delta p) - n_i^2], \end{aligned} \quad (5.61)$$

kde  $n_i$  je intrinzičná koncentrace (v rovnováze). Předpokládáme polovodič typu P. Zde je  $p_0 \gg n_0 > \Delta n = \Delta p$  (v případě slabé generace). Z toho vidíme

$$\begin{aligned} -\frac{d \Delta n}{d t} &= rp_0\Delta n, \\ \ln \Delta n &= -rp_0t + C, \\ n &= \Delta n(0) \exp \left[ -\frac{t}{\tau_c} \right], \quad \tau_c = \frac{1}{p_0r}, \end{aligned} \quad (5.62)$$

$\tau_c$  je doba života nadbytečných minoritních nosičů proudu. Je zřejmé, že návrat k termodynamické rovnováze probíhá podle exponenciální funkce, a to ihned po skončení vnějšího vlivu, který odchylku od rovnováhy způsobil. Hovoříme o době života nadbytečných minoritních nosičů proudu, ačkoliv po celou dobu platí  $\Delta n = \Delta p$ . Důvodem je to, že odchylka od rovnováhy je pro majoritní nosiče zanedbatelná ve srovnání s rovnovážnou koncentrací a v experimentech se nikterak neprojeví. Jestliže vnější vliv způsobující odchylku od rovnováhy působí trvale (stacionární stav), vytvoří se nový rovnovážný stav. V tomto případě ale součin  $n \cdot p > n_i^2$  a Fermiho energie přestává mít význam střední energie společného souboru elektronů a děr. Pro popis takového systému je třeba zavést tzv. zdánlivé (kvazi) Fermiho energie zvlášť pro soubor elektronů a děr. Tyto kvazienergie pak vystupují v dříve odvozených vztazích pro koncentrace nosičů.



Obrázek 5.1: Ustálení koncentrace nosičů

### 5.5.1 Difúzní délka minoritních nosičů

Při zvýšení koncentrace nadbytečných nosičů v tenké vrstvě u povrchu polovodiče se tyto šíří difúzí do hloubky. Samotná trvalá generace od fotonů ( $G$ ) probíhá jen u povrchu. Ve vzorku je jen termická generace ( $g$ ).

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - R - \nabla \cdot \mathbf{j}_e = G - R + \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_e. \quad (5.63)$$

V objemu polovodiče (tedy mimo povrchovou vrstvu) je  $G = g$ ,  $R = R_0 + R'$ ,  $R_0 = g = rn_0p_0$ ,  $R'$  je příspěvek rekombinace nadbytečných nosičů

$$R' = rp_0 \Delta n = \frac{\Delta n}{\tau} \quad \text{pro typ P,} \quad (5.64)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\Delta n}{\tau} + \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_e. \quad (5.65)$$

Ve stacionárním stavu (za stálého svícení) je  $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$

$$\frac{\Delta n}{\tau} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_e = \frac{1}{e} \frac{d \mathbf{j}_e}{d x}, \quad (5.66)$$

$$\mathbf{j}_e(x) = e D_e \frac{d n}{d x} \quad \text{první Fickův zákon,} \quad (5.67)$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta n}{\tau} = D n \frac{d^2 n}{d x^2} \quad \text{difúzní rovnice.} \quad (5.68)$$

Z toho lze spočítat místní rozložení koncentrace minoritních nosičů.

Řešení je ve tvaru

$$\begin{aligned} \Delta n &= C_1 \exp\left(\frac{x}{\sqrt{D_e \tau_e}}\right) + C_2 \exp\left(\frac{-x}{\sqrt{D_e \tau_e}}\right), \\ \Delta n &= 0, \quad x \rightarrow \infty \quad (\text{tlustý vzorek}) \quad \Rightarrow \quad C_1 = 0, \\ \Delta n_0 &= \text{konst} \quad \Rightarrow \quad C_2 = \Delta n_0, \\ \Delta n &= \Delta n_0 \exp\left(\frac{-x}{\sqrt{D_e \tau_e}}\right). \end{aligned} \quad (5.69)$$



Nadbytečná koncentrace elektronů klesá exponenciálně z povrchu do hloubky.

Veličina

$$L_e = \sqrt{D_e \tau_e} \quad (5.70)$$

se nazývá difúzní délka elektronů v polovodičích typu P (obdobně pro typ N —  $L_h = \sqrt{D_h \tau_h}$ ). Vždy se vztahuje k minoritním nosičům.

Působí-li současně elektrické pole  $\mathbf{E}$ , pohybují se elektrony rychlostí  $\mathbf{v}_{D_e} = \mu_e \mathbf{E}$  — driftová rychlost

$$\mathbf{v}_D = \frac{l}{t} \quad (5.71)$$

Je-li v době  $t = \tau$ ,  $l(x) = \mu \mathbf{E} \tau$  — driftová délka.

## 5.6 Poissonova rovnice

Je to další rovnice jejíž řešení potřebujeme brát v úvahu, jestliže se v polovodiči nachází prostorový náboj (další jsou: rovnice kontinuity a drift-difúzní rovnice).

V případě vstřikování majoritních nosičů do polovodiče nebo v případě existence nepohyblivých nekompensovaných nábojů ionizovaných příměsí se vytvoří oblast prostorového náboje a s ní spojené elektrické pole.

Základní vztah spojující náboj  $Q$  s elektrickým polem  $\mathbf{E}$  je

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E} \quad D = \frac{Q}{A}, \quad (5.72)$$

kde  $A$  je plocha.

V místě  $x$  mějme náboj  $Q(x)$  na ploše  $A$ , v místě  $x + dx$  je pak náboj  $Q(x + dx)$ . Pro změnu  $\mathbf{D}$  ve směru  $x$  pak platí

$$\frac{D(x + dx) - D(x)}{(x + dx) - x} = \frac{1}{A} \frac{Q(x + dx) - Q(x)}{(x + dx) - x}, \quad (5.73)$$

$$\frac{dD}{dx} = \frac{1}{A} \frac{dQ}{dx} = \frac{\Delta Q}{\Delta V} = \rho, \quad (5.74)$$

kde  $\rho$  je hustota prostorového náboje

$$\rho = -e(p - n + N_A^- - N_D^+) \quad (5.75)$$

$$\frac{dD}{dx} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{dE}{dx} = \rho. \quad (5.76)$$

Obecně

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (5.77)$$

$$\nabla \cdot \nabla_r \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} = \Delta \varphi. \quad (5.78)$$

Elektrické pole spojené s prostorovým nábojem hustoty  $\rho$  způsobí jeho rozplynutí  $\sim \exp[-\frac{t}{\tau_{\text{rel}}}]$ , kde  $\tau_{\text{rel}}$  je tzv. dielektrická relaxační doba.

$\tau_{\text{rel}}$  — vybíjecí doba kondenzátoru (kapacity  $C$ ). Uvažujme jej jako krychličku o hraně  $a$ :

$$RC = \frac{1}{\sigma} \frac{a}{a^2} \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{aL}{a} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{\sigma} = \tau_{\text{rel}}. \quad (5.79)$$

$$C = S \frac{\varepsilon_0}{a}, \quad S = a^2 \quad (5.80)$$

## 5.7 Pohyb nosičů proudu v homogenním polovodiči

Intenzita elektrického pole  $\mathbf{E}$  je definována jako záporný gradient potenciálu

$$C = S \frac{\varepsilon_0}{a}, \quad S = a^2 \quad (5.81)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{r}} \phi, \quad (5.82)$$

a síla působící na elektron je

$$\mathbf{F} = -e\mathbf{E}, \quad (5.83)$$

Celková energie elektronu je dána součtem kinetické a potenciální energie; potenciál je určen až na libovolnou aditivní konstantu.

$$w = \frac{p^2}{2m_e} - eU, \quad (5.84)$$

Pro snazší zapamatování je možné si osvojit následující názornou představu (obr. 5.2):

- elektrony jsou kuličky, které se koulejí po nakloněné ploše dolů;
- díry jsou bublinky, které plavou v kapalině po nakloněné ploše nahoru;
- kladný směr potenciálu je směrem dolů(!).

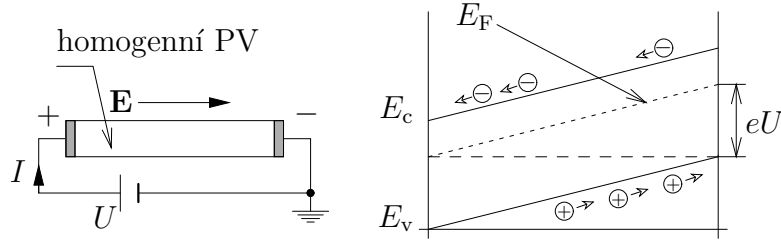
Směr elektrického pole je od plus k minus. tj. směr působící síly je pro záporný elektron opačný než směr pole  $\mathbf{E}$ . Místní rozdíl  $E_F$  na koncích polovodiče odpovídá přiloženému napětí,  $E_F = eU$ .

### 5.7.1 Vedení proudu ve vakuu

Ačkoliv elektron ve vakuu není brzděn srážkami jako v polovodiči, je v důsledku působení oblasti prostorového náboje vodivost v tomto případě ještě menší než v polovodiči. Z řešení Poissonovy rovnice plyne Schottky-Langmuirův zákon

$$I = \frac{8}{9} A \varepsilon_0 \left( \frac{e}{2m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{U^{\frac{3}{2}}}{w^2}, \quad (5.85)$$

kde  $w$  je vzdálenost mezi anodou a katodou.



Obrázek 5.2: Pohyb nosičů v homogenním elektrickém poli

### 5.7.2 Vedení proudu v izolantu

V izolantu dochází na rozdíl od vakua navíc ke srážkám, takže

$$v_x = \mu E_x = \frac{w}{t} \quad (5.86)$$

$$t = \frac{w}{\mu E_x} = \frac{w^2}{\mu U}, \quad \Leftarrow \quad U = E_x w \quad (5.87)$$

kde  $w$  je délka krystalu. Přenesený náboj je tedy

$$Q = CU = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{A}{w} U, \quad (5.88)$$

$$I = \frac{Q}{t} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{A}{w} U \frac{\mu U}{w^2} = \varepsilon_0 \varepsilon_r A \mu \frac{U^2}{w^3}, \quad (5.89)$$

$$\Rightarrow \quad I \sim \frac{U^2}{w^3} \quad \text{je tzv. Childův zákon} \quad (5.90)$$

## 5.8 Ambipolární pohyblivost

Úpravami drift-difúzní a Poissonovy rovnice je možné dospět k definici tzv. ambipolární pohyblivosti a ambipolární difúzní délky. Tyto veličiny popisují situaci, kdy polovodič není ani silný p-typ ani n-typ, tj. proud je ovlivňován i minoritními nosiči. Drift-difúzní rovnice:

$$\mathbf{j}_e = en\mu_e \mathbf{E} + eD_e \nabla_r n, \quad (5.91)$$

$$\mathbf{j}_h = en\mu_h \mathbf{E} - eD_h \nabla_r n. \quad (5.92)$$

Rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - R + \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_e, \quad (5.93)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - R - \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_h. \quad (5.94)$$

Po dosazení ( $\mathbf{j}_e$ ,  $\mathbf{j}_h$  vyloučíme)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - R + \mu_e \nabla \cdot (n \mathbf{E}) + D_e \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n, \quad (5.95)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - R - \mu_h \nabla \cdot (p \mathbf{E}) + D_h \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} p, \quad (5.96)$$

$$\Delta n = \Delta p \quad (5.97)$$

Dále studujeme jen nadbytečnou koncentraci,  $\nabla \cdot (n \mathbf{E}) = \nabla_{\mathbf{r}} n \mathbf{E} + n \nabla \cdot \mathbf{E}$

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = G - R + \mu_e \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) + \mu_e \Delta n \nabla \cdot \mathbf{E} + D_e \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n), \quad (5.98)$$

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = G - R - \mu_h \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) - \mu_h \Delta n \nabla \cdot \mathbf{E} + D_h \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n), \quad (5.99)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \left( \frac{\partial \Delta n}{\partial t} - G - R - \mu_e \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) - D_e \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) \right) \cdot \left( \frac{1}{\mu_e n} \right), \quad (5.100)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \left( \frac{\partial \Delta n}{\partial t} - G + R - \mu_h \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) - D_h \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) \right) \cdot \left( -\frac{1}{\mu_h p} \right), \quad (5.101)$$

porovnáním dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta n}{\partial t} &= \frac{1}{\left( \frac{1}{\mu_e n} + \frac{1}{\mu_h p} \right)} \cdot \left[ \left( \frac{1}{\mu_e n} + \frac{1}{\mu_h p} \right) (G - R) + \frac{1}{n} \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{p} \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) + \frac{1}{\mu_e n} D_e \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) + \frac{1}{\mu_h p} D_h \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) \right] = \\ &= G - R + \frac{(p - n) \mu_e \mu_h}{\mu_h p + \mu_e n} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) + \frac{\mu_h p D_e + \mu_e n D_h}{\mu_h p + \mu_e n} \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) = \\ &= G - R + \mu^* \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n) + D^* \nabla \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\Delta n), \end{aligned} \quad (5.102)$$

kde

$$D^* = \frac{(p + n) D_e D_h}{D_h p + D_e n}, \quad (5.103)$$

$$n^* = \frac{(p - n) \mu_e \mu_h}{\mu_h p + \mu_e n}, \quad (5.104)$$

$$D_h = \frac{kT}{e} \mu_h, \quad (5.105)$$

$$D_e = \frac{kT}{e} \mu_e, \quad (5.106)$$

$$(5.107)$$

$\mu^*$  je ambipolární pohyblivost a  $D^*$  ambipolární difúzní konstanta.

## 5.9 Vliv rekombinačních center — Schockleyův-Readův model

Účinnost rekombinace přes příměsově centrum je primárně určena pravděpodobností záchytu elektronu nebo díry tímto centrem. Tato pravděpodobnost však neurčuje pravděpodobnost rekombinace jednoznačně. Pro zachycený elektron (díru) mohou nastat dvě možnosti — buď může rekombinovat s volnou dírou (elektronem), nebo může být vrácen zpět do vodivostního (valenčního) pásu termálním pohybem. V případě, že záchytné průřezy elektronů a děr jsou blízké, centrum se chová jako rekombinační, protože elektron nemusí čekat na díru a naopak a dojde rychle k jejich rekombinaci. V případě, že jsou záchytné průřezy výrazně odlišné, chová se centrum jako past. Je-li např záchytný průřez pro elektrony větší než pro díry, je větší pravděpodobnost, že se elektron vrátí termálním pohybem do vodivostního pásu, než že rekombinuje s dírou. Takové centrum se chová jako elektronová past.

Zavedeme některé pojmy potřebné pro kvantitativní popis uvedeného modelu:

- $S_e$  — záchytní průřez pro elektrony, [ $\text{cm}^2$ ]
- $S_h$  — záchytní průřez pro díry, [ $\text{cm}^2$ ]
- $E_t$  — energie centra, [eV]
- $N_t$  — koncentrace center, [ $\text{cm}^{-3}$ ]
- $n_t$  — koncentrace elektronů na centrech, [ $\text{cm}^{-3}$ ]

Míra záchytu elektronu na centru je

$$\gamma_e(N_t - n_t)n, \quad [(\text{cm s})^{-1}], \quad \gamma_e = S_e v_e \quad [\text{cm}^3 \text{s}^{-1}], \quad (5.108)$$

$v_e$  je rychlost elektronu. Míra záchytu díry na centru je (zachycují se na centrech obsazených elektrony)

$$\gamma_h(N_t - n_t)n, \quad \gamma_h = S_h v_h \quad (5.109)$$

$v_h$  je rychlost díry.

Doba života volného elektronu z pohledu záchytu na centru

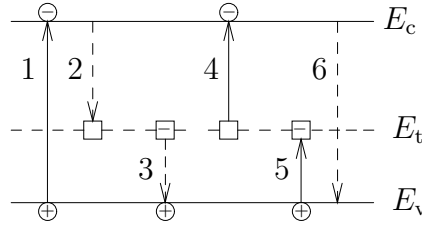
$$\tau_{et} = \frac{1}{\gamma_e(N_t - n_t)}, \quad [\text{s}] \quad (5.110)$$

To samé při pohledu na díry

$$\tau_{ht} = \frac{1}{\gamma_h(N_t - n_t)} \quad (5.111)$$

Dále uvažujeme termodynamickou rovnováhu,  $n_0$  — koncentrace rovnovážných elektronů

$$\frac{dn_0}{dt} = \alpha_e n_{t0} - \gamma_e n_0 (N_t - n_{t0}) \quad (5.112)$$



Obrázek 5.3: Pásový model rekombinace s hlubokými rekombinačními centry 1-vnější generace, 2-záchyt elektronu na centru, 3-záchyt díry na centru, 4-uvolňování elektronu z centra, 5-uvolňování díry z centra, 6-mezipásová rekombinace

$\alpha_e$  je pravděpodobnost uvolnění elektronu z centra do vodivostního pásu,  $\gamma_e(N_t - n_t)$  je pravděpodobnost záchytu elektronu na centru.

V rovnováze  $\frac{dn_0}{dt} = 0$

$$n_{t0} = \frac{N_t}{\frac{\alpha_e}{\gamma_e n_0} + 1} \quad (5.113)$$

současně platí

$$n_{t0} = N_t f = \frac{N_t}{1 + \exp\left[\frac{E_t - E_F}{kT}\right]}, \quad (5.114)$$

$$\Rightarrow \alpha_e = \gamma_e n_0 \exp\left[\frac{E_t - E_F}{kT}\right], \quad n_0 = N_c \exp\left[\frac{E_F}{kT}\right], \quad (5.115)$$

$$\alpha_e = \gamma_e N_c \exp\left[\frac{E_t}{kT}\right], \quad (5.116)$$

$$\alpha_e n_t = \gamma_e n_t N_c \exp\left[\frac{E_t}{kT}\right] = \gamma_e n_t n_1, \quad (5.117)$$

$$\alpha_h(N_t - n_t) = \gamma_h(N_t - n_t)N_v \exp\left[\frac{-E_t + E_g}{kT}\right] = \gamma_h(N_t - n_t)p_1. \quad (5.118)$$

Dále platí

$$\frac{dn}{dt} = G + \gamma_e n_t n_1 - \gamma n(N_t - n_t), \quad (5.119)$$

$$\frac{dp}{dt} = G + \gamma_h(N_t - n_t)p_1 - \gamma p n_t, \quad (5.120)$$

$$\frac{dn}{dt} = \gamma_e n(N_t - n_t) - \gamma_e n_t n_1 + \gamma_h(N_t - n_t)p_1 - \gamma_h p n_t, \quad (5.121)$$

$$\Delta n + \Delta n_t = \Delta p \quad (5.122)$$

Dle záchytného průřezu rozeznáváme

- $S_e \approx S_h$  — rekombinační centrum

- $S_e > S_h$  — past pro elektrony
- $S_e < S_h$  — past pro díry

Všechny hladiny pod Fermiho mezí jsou obsazené a proto působí jako pasti děr. Hladiny nad Fermiho mezí jsou prázdné, a proto mají vysokou pravděpodobnost záchytu elektronů (elektronová past).

# Kapitola 6

## Nehomogenní polovodičové systémy a polovodičové struktury

### 6.1 Slabě nehomogenní polovodič

Doposud jsme předpokládali existenci homogenního polovodiče, kde rozložení příměsí bylo v objemu studovaného vzorku rovnoměrné. Dále se zaměříme na situaci, kdy rozložení příměsí je funkcí prostorové souřadnice.

Předpokládejme, že se koncentrace donorů mění podél osy  $x$ . Pak platí

$$\begin{aligned}n(x) &= N_c e^\eta & n_i &= N_c e^{\eta_i}, \\ \eta &= \frac{E_F}{kT} & \eta_i &= \frac{E_i}{kT}, \\ n(x) &= n_i e^{\eta - \eta_i}, \\ \ln \frac{n}{n_i} &= \eta - \eta_i = \frac{E_F - E_i}{kT} = \Psi, \\ \Rightarrow U &= \frac{kT}{e} \Psi,\end{aligned}\tag{6.1}$$

$\Psi$  je tzv. redukovaný potenciál. Definujme si:  $n/n_i = \bar{n}$  — redukovaná koncentrace (podobně  $\bar{p} = p/n_i$ )

$$\Psi = \ln \bar{n} = -\ln \bar{p}\tag{6.2}$$

Tato rovnice vyjadřuje tzv. Boltzmannovu rovnováhu elektronů a děr. Pro elektrické pole platí

$$\mathbf{E} = -\frac{kT}{e} \nabla_r \Psi = \frac{kT}{e} \frac{1}{n} \nabla_r \bar{n} = \frac{kT}{e} \frac{1}{p} \nabla_r \bar{p}\tag{6.3}$$

V každém nehomogenním polovodiči tedy existuje vnitřní elektrické pole. Elektrický proud přitom neteče, protože Fermiho energie je všude stejná. Elektrické pole tedy kompenzuje difúzní proud, který by měl být přítomen v důsledku gradientu koncentrace. (Protože se tam vyrovnává difúzní a driftový proud.)



V případě existence prostorového náboje pak podle Poissonovy rovnice platí

$$\Delta U = -\frac{Q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \Rightarrow \Delta \Psi = -\frac{Q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{e}{kT} = -\frac{1}{L_i^2} (\bar{p} - \bar{n} + \bar{N}), \quad (6.4)$$

kde

$$\bar{N} = \frac{N_D - N_A}{n_i} \quad \text{a} \quad L_i^2 = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r kT}{e^2 n_i} \quad (6.5)$$

je tzv. intrinzická Debyeova délka.

## 6.2 Přechod P–N

Krystal má oblast s vodivostí typu N, na kterou navazuje oblast s vodivostí typu P (obr. 6.1). Fermiho energie ( $E_F$ ) v krystalu typu N je výše než v typu P. Po spojení (myšlenkovém) musí být  $E_F$  všude stejná - proud neteče. Toho se dosáhne tím, že

1. část elektronů z typu N přejde do typu P (gradient koncentrace);
2. část děr z typu P přejde do typu N (gradient koncentrace);
3. v důsledku těchto přechodů vzniká kladný prostorový náboj v typu N (nekompenzované donorové ionty) a záporný v typu P (akceptorové ionty);
4. vzniklé elektrické pole zabrání další difúzi nosičů;
5. v důsledku vyrovnání  $E_F$  vzniká mezi částí N a částí P potenciálový schod  $eV_D$ , kde  $V_D$  je tzv. difúzní napětí.

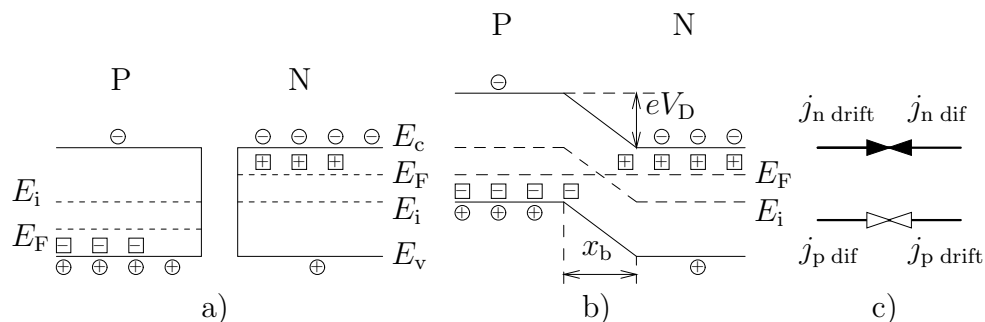
$$U = \frac{kT}{e} \Psi + \text{konst} = \frac{kT}{e} \ln \bar{n} + \text{konst}, \quad (6.6)$$

$$V_D = U_2 - U_1 = \frac{kT}{e} (\ln \bar{n}_2 - \ln \bar{n}_1) = \frac{kT}{e} \ln \frac{\bar{n}_{n0}}{\bar{n}_{p0}} = \frac{kT}{e} \ln \frac{\bar{p}_{p0}}{\bar{p}_{n0}}. \quad (6.7)$$

### 6.2.1 Voltampérová charakteristika ideálního přechodu P–N

Po přiložení vnějšího zdroje napětí na přechod P–N (kladné napětí na P, záporné na N) dojde ke snížení difúzního napětí na hodnotu ( $V_D - U$ ). V důsledku toho se zvýší difúzní proudy elektronů na stranu P a děr na stranu N. Oblast prostorového náboje je zaplavena nosiči a proud prochází v přímém směru. V závěrném směru (kladné napětí na N, záporné na P) jsou majoritní nosiče odpuzovány od přechodu a proud téměř neprochází.

1. Propustný směr ("+" na typ P, "-" na typ N)
  - elektrony z N jsou přetaženy do P;



Obrázek 6.1: Vznik přechodu pn

- díry z P jsou přetaženy do N;
- dochází k injekci nosičů;
- oblasti prostorového náboje jsou zaplaveny nosiči;
- injektované nosiče jsou menšinové (elektrony v P, díry v N);
- rekombinují s majoritními nosiči
- žijí průměrně čas  $\tau$ , což je doba života menšinových nosičů;
- pronikají průměrně do vzdálenosti difúzní délky.

## 2. Závěrný směr

- elektrony v N i díry v P jsou odpuzovány od přechodu, procházejí pouze proudy minoritních nosičů (elektrony z P do N, díry z N do P);

V rovnováze (bez vnějšího napětí) je difúzní napětí rovno

$$V_D = \frac{kT}{e} \ln \left( \frac{n_{n0}}{n_{p0}} \right) = \frac{kT}{e} \ln \frac{p_{p0}}{p_{n0}}. \quad (6.8)$$

V přímém směru platí

$$V_D - U = \frac{kT}{e} \ln \frac{p_1}{p_2}, \quad (6.9)$$

$$\frac{p_1}{p_2} = \exp \left[ \frac{e(V_D - U)}{kT} \right] = \frac{p_{p0}}{p_{n0}} \exp \left( \frac{eU}{kT} \right), \quad (6.10)$$

$$p_1 = p_{p0} + \Delta p_1, \quad (6.11)$$

$$p_2 = p_{n0} + \Delta p_2, \quad (6.12)$$

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{p_{p0} + \Delta p_2}{p_{n0} + \Delta p_1} = \frac{p_{n0}}{p_{p0}} \exp \left( \frac{eU}{kT} \right), \quad (6.13)$$

$$p_{p0} \gg \Delta p_1 \quad \Rightarrow \quad p_2 = p_{n0} \exp \left( \frac{eU}{kT} \right), \quad (6.14)$$

$$\Delta p_2 = p_{n0} \left[ \exp \left( \frac{eU}{kT} \right) - 1 \right] \quad (6.15)$$

Analogicky dostáváme

$$\Delta n_2 = n_{p0} \left[ \exp \left( \frac{eU}{kT} \right) - 1 \right] \quad (6.16)$$

Koncentrace injektovaných nosičů závisí na napětí na přechodu a na rovnovážné koncentraci menšinových nosičů, kam se vstříkují.

Za přechodem se menšinové nosiče pohybují difúzí. 1. Fickův zákon říká

$$\mathbf{j}_e = -eD_e \nabla_r (\Delta n) = -eD_e \frac{d(\Delta n)}{dx}, \quad (6.17)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - R + \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_e. \quad (6.18)$$

Ve stacionárním stavu je  $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$  i  $G = 0$ . Je tedy  $R = \frac{\Delta n}{\tau}$  a

$$\frac{1}{e} \frac{\Delta \mathbf{j}_e}{\Delta x} = \frac{\Delta n}{\tau} \quad (6.19)$$

Z toho dostaneme difúzní rovnici

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n}{\tau} &= D_e \frac{d^2 n}{dx^2} \quad \Rightarrow \\ \Delta n &= D_e \tau \frac{d^2 n}{dx^2} = L_e^2 \frac{d^2 n}{dx^2}, \\ L_e &= \sqrt{D_e \tau_e}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Řešení difúzní rovnice pro tlustý krystal je

$$\begin{aligned} \Delta n &= \Delta n_1 \exp \left( -\frac{x}{L_e} \right), \\ \mathbf{j}_e &= -eD_e \frac{d(\Delta n)}{dx} = \frac{eD_e}{L_e} \Delta n_1 \exp \left( -\frac{x}{L_e} \right) = \frac{eD_e}{L_e} \Delta n. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Pro díry platí analogické vztahy. Celkově je proudová hustota

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = \mathbf{j}_e + \mathbf{j}_h &= e \left[ \frac{D_e}{L_e} \Delta n + \frac{D_h}{L_h} \Delta p \right] = e \left[ \frac{D_e}{L_e} n_{p0} + \frac{D_h}{L_h} p_{n0} \right] \left[ \exp \left( \frac{eU}{kT} \right) - 1 \right], \\ \Rightarrow I &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{j} = I_0 \left[ \exp \left( \frac{eU}{kT} \right) - 1 \right] \end{aligned} \quad (6.22)$$

Tato rovnice je voltampérovou charakteristikou diody.

### 6.3 Kontakt kov-polovodič (M–S)

Kontakt kov-polovodič představuje základní strukturu při každé konstrukci polovodivých součástek. Obecně dělíme kontakty do dvou skupin - usměrňující a ohmické. Ohmické kontakty neomezují na rozdíl od usměrňujících proud v závislosti na jeho směru. Naproti tomu usměrňující (Schottkyho) kontakty obsahují potenciálové bariéry generující oblast prostorového náboje v polovodiči, a tak brání toku proudu v jednom směru. To vede k asymetrické V-A charakteristice kontaktu.

Kontakt kov-polovodič:

**Usměrňující kontakt** — Pozorován 1874 (Braun). Teorii navrhli v roce 1938 Schottky, Mott a Davis.

Pro pochopení teorie je nutné zavést tyto veličny:

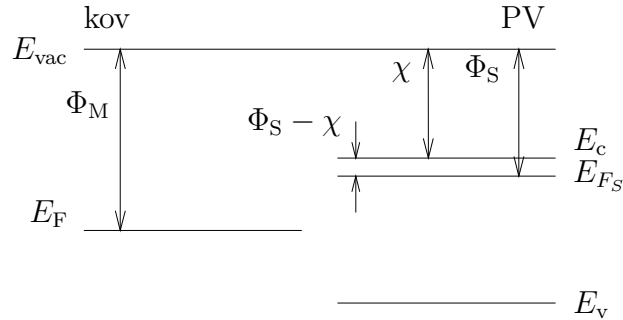
#### 1. Kov

- $\phi_M$  — výstupní práce elektronů z kovu

#### 2. Polovodič

- $\chi$  — Elektronová afinita — práce potřebná k přenesení elektronu na lokální hladinu vakua  $E_{vac}$
- $\phi_S$  — Výstupní práce elektronů z polovodiče
- $\phi_B = \phi_M - \chi$  — Potenciálová bariéra
- $\phi_K$  — Difuzní potenciál. Vytvořen pot. nábojem šířky  $\chi_B$  a zakřivením pásů pro zachování podmínky el. neutrality.

$$\begin{aligned} \phi_K &= eV_D \\ \phi_K &= \phi_M - \phi = \phi - (\chi + \varepsilon_F) \end{aligned}$$



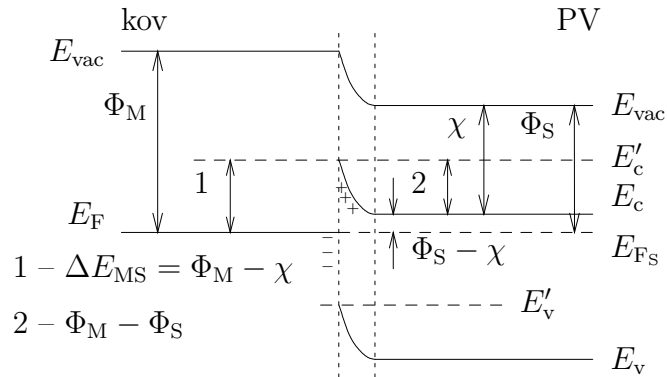
Obrázek 6.2: Pásové schéma kovu a polovodiče typu N před spojením

### 6.3.1 Kontakt M–S s polovodičem typu N

V případě, že

$$\phi_M > \phi_S \quad (6.23)$$

$\Delta E_{SM}$  — energetická bariéra z kovu do polovodiče. Je definována jako energetický rozdíl mezi  $E_{FM}$  na rozhraní a nejvyšší hodnotou  $E_C$  (pro n-tyt), resp. nejnižší hodnotou  $E_V$  (pro p-tyt) v polovodiči.



Obrázek 6.3: Pásové schéma kovu a polovodiče typu N po spojení

$\Delta E_{MS}$  — energetická bariéra z polovodiče do kovu. Definujeme ji jako energetický rozdíl mezi nejnižší a nejvyšší hodnotou  $E_C$  (pro n-tyt), resp. nejnižší a nejvyšší hodnotou  $E_V$  (pro p-tyt)

$$\Delta E_{SM} = \phi_M - \phi_S > 0$$

$$\Delta E_{MS} = \phi_M - \chi > 0$$

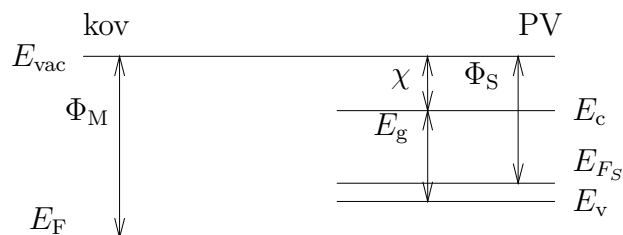
Elektrony tečou z polovodiče do kovu. Jedná se o Schottkyho diodu. V případě, že

$$\phi_M < \phi_S \quad (6.24)$$

přecházejí elektrony z kovu do polovodiče. V důsledku toho vzniká vrstva elektronů pod kontaktem. Mezi polovodičem a kovem není žádná bariéra a vzniká ohmický kontakt.

### 6.3.2 Kontakt M–S s polovodičem typu P

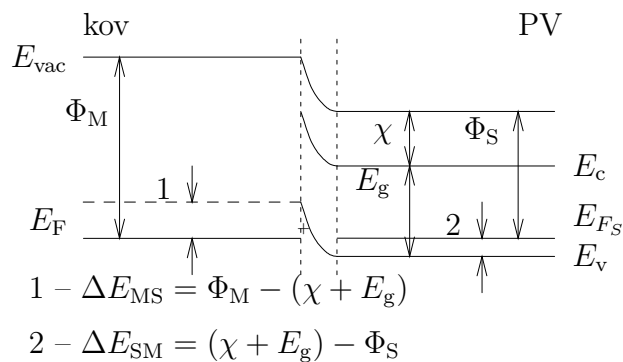
$$\phi_M > \phi_S \tag{6.25}$$



Obrázek 6.4: Pásové schéma kovu a polovodiče typu P před spojením

Nastává stejná situace jako pro N-typ při  $\phi_M < \phi_S$ . Vzniká ohmický kontakt.

$$\phi_M < \phi_S \tag{6.26}$$



Obrázek 6.5: Pásové schéma kovu a polovodiče typu P po spojení

Nastává stejná situace jako pro N-typ při  $\phi_M > \phi_S$ . Vzniká Schottkyho dioda.

# Kapitola 7

## Elektron v magnetickém poli

### 7.1 Klasický pohled

Vyjdeme nyní z Newtonova zákona:

$$m_e^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (7.1)$$

kde  $m_e^* v = \hbar k$  a  $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$ . Dále pak  $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k})$  a  $|\mathbf{e}_z| = 1$ . Uvažujeme magnetické pole ve směru osy  $z$ . Tedy  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . Potom:

$$\hbar \frac{dk_z}{dt} = \mathbf{e}_z (v_x B_y - v_y B_x) = 0 \quad (7.2)$$

Z čehož plyne že  $k_z = konst$  a

$$\frac{d\mathcal{E}(\mathbf{k})}{dt} = \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E} \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E} \cdot \frac{1}{\hbar} (-e [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]) = 0 \quad (7.3)$$

Tedy  $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = konst$ .

V  $\mathbf{k}$  prostoru se pohybuje elektron po křivce (kružnice), kterou dostaneme jako průsečík plochy konstantní energie (koule) s rovinou  $k_z = konst$ . (tj. v rovině  $\parallel$  s  $(k_x k_y)$ ). V rovině  $(k_x k_y)$  pro jednoduchost volíme  $k_z = 0$ . Pak:

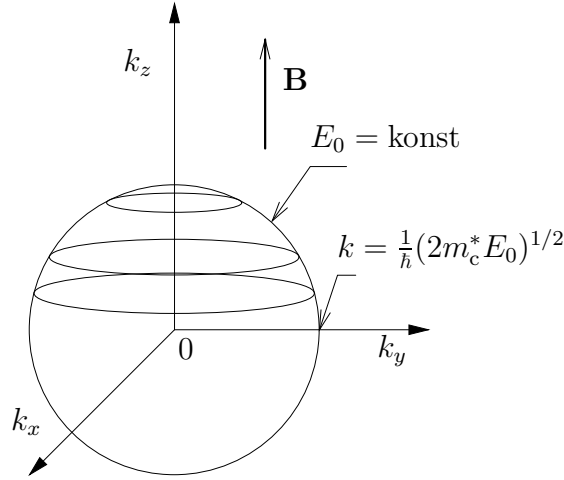
$$\hbar \frac{dl}{dt} = -evB \quad (7.4)$$

kde  $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ . Pro kružnici je  $v_y = v_x$ .

Jestliže trajektorie je uzavřená křivka, potom pro periodu oběhu elektronu  $T_e$  platí

$$T_e = \oint dt = \frac{\hbar}{eB} \int \frac{dl}{v} \quad (7.5)$$

$$S = \iint dk_x dk_y = \iint dl dk_{\perp} \quad (7.6)$$



Obrázek 7.1: Trajektorie elektronu v magnetickém poli

kde  $dk_{\perp}$  je element normály  $kdl$ . Ze vztahu

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}}{dk} \quad (7.7)$$

si vyjádříme  $dk$ :

$$dk = \frac{1}{\hbar v} d\mathcal{E} \quad (7.8)$$

Po dosazení do (7.6) dostáváme

$$S = \frac{1}{\hbar} \iiint \frac{1}{v} dl d\mathcal{E} = \frac{1}{\hbar} \int d\mathcal{E} \oint \frac{dl}{v} \quad (7.9)$$

Tedy

$$dS = \frac{1}{\hbar} d\mathcal{E} \oint \frac{dl}{v} \quad (7.10)$$

Úpravou a porovnáním s (7.5) dostáváme

$$\hbar \frac{dS}{d\mathcal{E}} = \oint \frac{dl}{v} = T_e \frac{eB}{\hbar} \quad (7.11)$$

Platí  $S = \pi k^2 = \pi \cdot \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \mathcal{E}$ , tedy  $\frac{dS}{d\mathcal{E}} = \pi \cdot \frac{2m_e^*}{\hbar^2}$

Porovnáním s (7.11) dostáváme

$$\frac{\pi \cdot 2m_e^*}{\hbar^2} = \frac{T_e eB}{\hbar^2} \quad (7.12)$$

Z (7.12) plyne

$$m_e^* = \frac{T_e eB}{2\pi} \quad (7.13)$$



Pokud si definujeme  $\omega_c$  vztahem  $\omega_c = \frac{2\pi}{T_e}$  dostaneme výsledný vztah

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e^*} \quad (7.14)$$

Pro  $m_e^* = -0.1m_0$  a  $B = 15$  je cyklotronová frekvence  $f = 2.78 \times 10^{11} \text{ Hz}$

Jestliže určíme  $\omega_c$  můžeme stanovit  $m_e^*$ . Měřením  $m_e^*$  při libovolném disperzním zákoně  $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{k})$  a při různých orientacích magnetického pole  $\mathbf{B}$  vůči krystalu lze stanovit tvar plochy  $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \text{konst.}$

Celý problém řešíme pro případ, že oprava k rozdělovací funkci elektronů je velmi malá:  $f_1 \ll f_0$ . Proto je systém po vypnutí polí v rovnováze již po několika srážkách (popsán funkcí  $f_0$ ). Znamená to, že relaxační doba  $\tau$  je řádově rovna době volného pohybu elektronu mezi srážkami  $\tau_0$ .

Pro střední volnou dráhu elektronu tedy platí

$$\langle l \rangle = \langle v \rangle \tau_0 \quad (7.15)$$

$$\tau_0 \approx \tau = \tau(v) = \tau(\mathcal{E}) \quad (7.16)$$

$\langle v \rangle$  je střední tepelná rychlost elektronu.

$$\langle v \rangle = \frac{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) v x^{3/2} dx}{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) x^{3/2} dx} \quad (7.17)$$

kde

$$x = \frac{\mathcal{E}}{k_0 T}$$

a

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

tedy

$$x = \frac{\hbar^2}{2m_e^* k_0 T} \cdot k^2$$

Vyjádríme  $k$ :

$$k^2 = \frac{2m_e^* k_0 T}{\hbar^2} \cdot x$$

pak

$$k = \sqrt{\frac{2m_e^* k_0 T}{\hbar^2}} \cdot x^{1/2}$$

Ze vztahu pro rychlost  $m_e^* v = \hbar k$  pak dostaneme

$$v = \sqrt{\frac{2k_0 T}{m_e^*}} \cdot x^{1/2} \quad (7.18)$$

Dosazením do (7.17) dostáváme

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{2k_0T}{m_e^*}} \cdot \frac{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) x^2 dx}{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) x^{3/2} dx} \quad (7.19)$$

Což je

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{2k_0T}{m_e^*}} \cdot \frac{F_2(\eta)}{F_{3/2}(\eta)} \quad (7.20)$$

Pro případ nedegenerovaného plynu

$$\left(-\frac{\partial f_0}{\partial x}\right) = e^{\eta-x} = e^\eta e^{-x}$$

$$f_0 = e^{\eta-x}$$

Potom

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{2k_0T}{m_e^*}} \cdot \frac{e^\eta}{e^\eta} \cdot \frac{\int_0^\infty x^2 e^{-x} dx}{\int_0^\infty x^{3/2} e^{-x} dx} \quad (7.21)$$

S uvážením

$$\Gamma(r) = \int_0^\infty x^{r-1} e^{-x} dx$$

$$\Gamma(r+1) = r\Gamma(r)$$

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma(j+1) = j!$$

a dosazením do (7.21) dostáváme

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{2k_0T}{m_e^*}} \cdot \frac{\Gamma(3)}{\Gamma(5/2)} = \frac{2}{\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\pi}} \cdot \sqrt{\frac{2k_0T}{m_e^*}} \quad (7.22)$$

$$\langle v \rangle = \frac{8}{3} \cdot \sqrt{\frac{2k_0T}{m_e^*}} = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{8k_0T}{\pi m_e^*}} \quad (7.23)$$

$$\langle v \rangle = 2,62 \cdot 10^6 \sqrt{T} \text{ cm/s} \quad (7.24)$$

Což je vztah pro střední tepelnou rychlost elektronu.

$$\begin{array}{ll} \langle v \rangle = 5,24 \cdot 10^6 \text{ cm/s} & \text{pro } T = 4 \text{ K} \\ \langle v \rangle = 4,54 \cdot 10^7 \text{ cm/s} & \text{pro } T = 300 \text{ K} \end{array}$$

### 7.1.1 Elektron v magnetickém poli $\mathbf{B} \neq 0$ a v elektrickém poli $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$

Elektron pohybující se v mříži = volný elektron s efektivní hmotou  $m_e^*$  na který působí stálá síla tření  $\mathbf{F}_R$  směřující proti jeho pohybu. Tato síla zahrnuje srážky elektronu s rozptylovými centry. Určíme ji podle toho, jak rychle po vypnutí pole zrelaxuje rychlost elektronu.

Předp. že rychlost  $\mathbf{v}$  zrelaxuje jako funkce  $f_1$  (oprava k rozdělovací funkci).

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

$v_0$  v čase  $t = 0$ .

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{\mathbf{v}}{\tau}$$

Síla tření je dána vztahem

$$\mathbf{F}_r = m_e^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -m_e^* \frac{\mathbf{v}}{\tau} \quad (7.25)$$

Při započtení vlivu  $\mathbf{B}$  a  $\mathbf{E}$

$$m_e^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -m_e^* \frac{\mathbf{v}}{\tau} + e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (7.26)$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e^*}$$

Položíme elektrické pole ve směru osy  $x$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v} e^{i\omega t}$$

$$x : \quad m_e^* \left( i\omega + \frac{1}{\tau} \right) v_x = eE_x + ev_y B$$

$$y : \quad m_e^* \left( i\omega + \frac{1}{\tau} \right) v_y = -ev_x B$$

$$v_y = \frac{1}{eB} [-eE_x + m_e^* v_x (i\omega + \frac{1}{\tau})] \quad (7.27)$$

$$v_y = \frac{-ev_x B}{m_e^* (i\omega + \frac{1}{\tau})} \quad (7.28)$$

Dále použijeme následujících vztahů pro elektrický proud

$$j = \sigma E_x = nev_x$$

$$\sigma = \frac{nev_x}{E_x}$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e^*}$$

$$eB = \omega_c m_e^*$$

a upravíme

$$\frac{1}{\omega_c m_e^*} \cdot [-eE_x + \frac{m_e^* v_x}{\tau} (1 + i\omega\tau)] = -\frac{\omega_c m_e^* v_x \tau}{m_e^* (1 + i\omega\tau)}$$

$$\frac{eE_x}{\omega_c m_e^*} - \frac{m_e^* v_x}{m_e^* \omega_c \tau} (1 + i\omega\tau) = \frac{v_x \omega_c \tau}{1 + i\omega\tau}$$

$$\frac{eE_x}{\omega_c m_e^*} (1 + i\omega\tau) = v_x [\omega_c \tau + \frac{1}{\omega_c \tau} (1 + i\omega\tau)^2]$$

$$\frac{v_x}{E_x} = \frac{e}{\omega_c m_e^*} \cdot \frac{1 + i\omega\tau}{\frac{1}{\omega_c \tau} [\omega_c^2 \tau^2 + (1 + i\omega\tau)^2]}$$

$$\frac{v_x}{E_x} = \frac{e\tau}{m_e^*} \cdot \frac{1 + i\omega\tau}{\omega_c^2 \tau^2 + 1 + 2i\omega\tau - (\omega\tau)^2}$$

$$\frac{v_x}{E_x} = \frac{e\tau}{m_e^*} \cdot \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau + 2i\omega\tau}$$

$$\sigma = \frac{ne}{E_x} v_x = \frac{ne^2 \tau}{m_e^*} \cdot \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau + 2i\omega\tau}$$

$$\sigma = \sigma_0 \cdot \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau + 2i\omega\tau} \quad (7.29)$$

kde  $\sigma_0 = \frac{ne^2 \tau}{m_e^*} = ne\mu$ ,  $\mu = \frac{e\tau}{m_e^*}$

Reálná část  $\sigma$  je dána vztahem

$$\sigma_{Re} = \sigma_0 \cdot \frac{1 + \nu^2 + \nu_c^2}{(1 + \nu_c^2 - \nu^2)^2 + 4\nu^2} \quad (7.30)$$

kde  $\nu = \omega\tau$ ,  $\nu_c = \omega_c \tau = \mu B$

Absorbční koeficient elektromagnetického pole  $\alpha$  je pak úměrný  $\alpha \sim \frac{\sigma_{Re}}{\sigma_0}$

Pokud  $\nu_c = \nu$  pak nastává rezonance.

Aby bylo možno sledovat cyklotronovou rezonanci, musí být splněno

$$\langle l \rangle \gg r$$

$$v\tau_0 \gg \frac{v}{\omega_c}$$

$$\tau_0 \gg \frac{1}{\omega_c} = \frac{m_e^*}{eB}$$

Z toho plyne podmínka

$$\omega_c < \tau > \gg 1 \quad \text{tj.} \quad \nu_c \gg 1 \quad (7.31)$$

a tedy

$$\mu B \gg 1 \quad (7.32)$$

Silné magnetické pole

Ukazuje se, že stačí, aby  $\omega_c < \tau > \approx 3$ . Dále platí pro speciální případy

1.  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0$  stejnosměrné pole;  $\mathbf{B} = 0$ . Pak

$$\sigma = \sigma_0$$

2.  $\nu_c \gg \nu; \nu_c \ll 1$  (nizkofrekvenční pole  $\mathbf{E}$ , slabé pole  $\mathbf{B}$ )

$$\begin{aligned} \sigma_{Re} &\approx \sigma_0(1 - \nu_c^2) \\ \frac{1}{1 + \nu_c^2} &\approx 1 - \nu_c^2 \end{aligned}$$

3.  $\nu \gg 1; \nu_c = 0$  (vysokofrekvenční pole  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B} = 0$ )

$$\sigma_{Re} = \sigma_0 \frac{1}{\nu^2}$$

koeficient absorpce je úměrný  $\frac{1}{\nu^2}$

4.  $\nu = \nu_c \gg 1$ ; (cyklotronová rezonance, silné pole  $\mathbf{B}$ )

$$\sigma_{Re} \approx \sigma_0 \cdot \frac{1}{2}$$

Elektrická vodivost je poloviční.

Obecně je efektivní hmota tenzor

$$\mathbf{m} \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\mathbf{m}\mathbf{v}}{\tau} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (7.33)$$

za předp.  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$  a  $\mathbf{v} = \mathbf{v} e^{i\omega t}$

$$\left(-i\omega + \frac{1}{\tau}\right) \mathbf{m}\mathbf{v} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (7.34)$$

Definujeme  $\omega' = \omega + i\frac{1}{\tau}$

Pro jednoduchost předpokládejme (platí pro Ge, Si), že efektivní hmota má pouze diagonální složky.

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{m_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_3} \end{bmatrix}$$

a  $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z) = B(\alpha, \beta, \gamma)$

Potom

$$i\omega' m_1 v_x + e(v_y B_z - v_z B_y) = 0$$

$$i\omega' m_2 v_x + e(v_z B_x - v_x B_z) = 0$$

$$i\omega' m_3 v_x + e(v_x B_y - v_y B_x) = 0$$

za předpokladu, že  $\mathbf{E} = 0$

Z toho dostáváme, že

$$\begin{vmatrix} i\omega' m_1 & eB\gamma & -eB\beta \\ -eB\gamma & i\omega' m_2 & eB\alpha \\ eB\beta & -eB\alpha & i\omega' m_3 \end{vmatrix} = 0$$

Pro podmínku jasné rezonance ( $\omega_c \tau \gg 1$ ) platí  $\omega' \approx \omega_c$ . Můžeme proto položit  $\omega = \omega' = \omega_0$ .

Z toho plyne

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} = eB \sqrt{\frac{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}{m_1 m_2 m_3}} \quad (7.35)$$

kde  $m^*$  je tzv. cyklotronová hmota.

Proměření cyklotronové rezonance v závislosti na magnetickém poli a na směru  $\mathbf{B}$  slouží k analýze pásové struktury. Jak z měření cyklotronové rezonance, tak z teoretických výpočtů bylo zjištěno, že minima vodivostního pásu Ge se nacházejí v  $L$  bodě (směr  $\langle 111 \rangle$ , hranice BZ), minima vodivostního pásu Si jsou v  $\Delta$  bodě (15% od  $X$  bodu — směr  $\langle 100 \rangle$ ).

Pokud tyto osy vezmeme jako hlavní osy  $\mathbf{k}$  — vektoru a položíme  $\mathbf{k} = 0$  na dno vodivostního pásu, dostaneme

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2m_t} \cdot (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_z^2 \quad (7.36)$$

Pomocí  $\mathbf{k}\mathbf{p}$  aproximace se započtením spin — orbitální interakce dostaneme

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [Ak^2 \mp \sqrt{B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)}] \quad (7.37)$$

kde  $A, B, C$  jsou konstanty, které lze získat teoreticky i experimentálně. Izoenergetické plochy nejsou koule — nazývají se deformované koule.

Při volbě polární osy ve směru  $k_z$  a po vystředování úhlových závislostí dostaneme

$$\mathcal{E}_1 \approx -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left( A \mp \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}} \right) \quad (7.38)$$

což lze psát jako

$$\mathcal{E}_1(\mathbf{k}) \approx -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \quad (7.39)$$

$$\mathcal{E}_2(\mathbf{k}) \approx -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} \quad (7.40)$$

kde efektivní hmoty

$$m_1 = m\hbar h^* = -A - \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}$$

pro těžké díry a

$$m_2 = m\hbar h^* = -A + \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}$$

pro lehké díry.

## 7.2 Elektron v magnetickém poli — kvantové efekty

Dále se budeme zabývat případem silného magnetického pole —  $\nu_c \gg 1$  a  $\mu B \gg 1$

Platí  $\nu_c = \omega_c \tau$  a  $\omega_c = \frac{eB}{m_e^*}$ . Pak tedy  $\omega_c > k_0 T$  a  $\frac{eB}{m_e^* k_0} > T$ . Pro  $m_e^* = 0.1m_0$  pak  $B > 4.2T$ . Pohyb elektronu v magnetickém poli na základě kvantové mechaniky vyšetřil v roce 1930 Landau.

Pro kvantový popis vyjdeme ze základních vztahů kvantové mechaniky.

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= \mathcal{E}\psi \\ \mathbf{p} &= i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} \end{aligned}$$

a

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

Hamiltonián je dán vztahem( neuvažujeme spin)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e^*}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \quad (7.41)$$

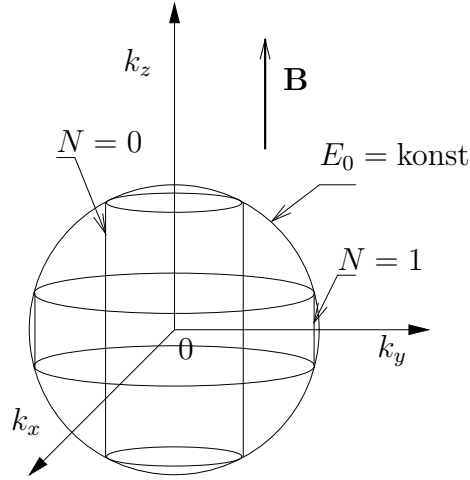
Zde  $\mathbf{A}$  je vektorový potenciál magnetického pole  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . Zvolíme kalibraci  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ .

Po úpravách operátoru  $\hat{H}$  dospějeme k rovnici

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(x)e^{-i(k_y y + k_z z)} \quad (7.42)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{1}{2} m_e^* \omega_c^2 (x - x_0)^2 \varphi = \mathcal{E}_N \varphi \quad (7.43)$$

kde  $x_0 = -\frac{\hbar k_y}{\omega_c m_e^*}$  a  $\mathcal{E}_N = \mathcal{E} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*}$  Což je rovnice lineárního harmonického oscilátoru.



Obrázek 7.2: Magnetické kvantování sférické plochy konstantní energie v k-prostoru na diskrétní, koncentrické válce s osami paralelními se směrem magnetického pole

Platí

$$\begin{aligned} \text{rot}_x \mathbf{A} &= \frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \\ \text{rot}_y \mathbf{A} &= \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \\ \text{rot}_z \mathbf{A} &= \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \end{aligned}$$

Jelikož  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$  a  $\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A}$  platí

$$B = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = \frac{\partial A_y}{\partial x} \quad (7.44)$$

Potom

$$\varphi(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{R_B}} H_N \left( \frac{x - x_0}{R} \right) \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x - x_0}{R} \right)^2 \right] \quad (7.45)$$

Kde  $H_N$  je Hermitův polynom stupně  $N$ ,  $\mathcal{E}_N = (N + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c$  a  $R = (\frac{\hbar}{eB})^{1/2}$  je tzv. magnetická délka.  $x_0 = -R^2 k_y$

Uvažujme standartní zónu pro elektrony.

**v  $r$ -prostoru platí**

$$\mathbf{B} = (0, 0, B) \quad (7.46)$$



$$\begin{aligned}\mathcal{E}_\perp &= \frac{1}{2}m_e^*v_\perp^2 = \frac{1}{2}m_e^*\omega_c^2r^2 \\ \mathcal{E} &= (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*}k_z^2 \\ \mathcal{E}_\perp &= (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c \\ \frac{1}{2}m_e^*\omega_c^2r^2 &= (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c\end{aligned}$$

Potom

$$r_N = (2N + 1)^{1/2}R, N = 0.1.2$$

$$r_0 = R, r_1 = \sqrt{3}R, r_2 = \sqrt{5}R.$$

Rovina  $z = konst.$ . Ve směru osy  $z$  je elektron volný.  $v_z = \frac{\hbar}{m_e^*}k_z$ .

V rovině  $(xy)$  jsou elektrony na orbitě  $r_0$  až  $r_{max}$ . Při přechodu z orbity na orbitu je třeba dodat energii  $\hbar\omega_c$ .

### v $k$ -prostoru platí

$B = 0$  všechny elektrony v kouli s poloměrem  $k = \frac{1}{\hbar}(2m_e^* + \mathcal{E}_0)^{1/2}$

$B \neq 0$

- klasicky — všechny elektrony se pohybují na kružnicích  $k_z = konst.$

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= konst. \\ \mathcal{E} &= \frac{\hbar^2}{2m_e^*}k_z^2 + \frac{\hbar^2}{2m_e^*}k_\perp^2\end{aligned}$$

- kvantově — ne všechny dráhy jsou povoleny

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= \frac{\hbar^2k_z^2}{2m_e^*} + (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c \\ \mathcal{E}_\perp &= (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c = \frac{\hbar^2}{2m_e^*}k_\perp^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e^*}(k_x^2 + k_z^2) \\ k_\perp \rightarrow k_{\perp N} &= (2N + 1)^{1/2} \cdot \frac{1}{R}, \quad N = 0, 1, 2 \\ k_\perp(N = 0) &= \frac{1}{R}\end{aligned}$$

Všechny elektrony se pohybují na koaxiálních válcích s osou rovnoběžnou s  $k_z$  a výšce  $k_{zN}$  (obr. 7.2).

$$k_{zN} = 2\sqrt{k_0^2 - k_{\perp N}^2}$$

tedy

$$k_{zN} = \left[ 2(2m_e^*)^{1/2} \frac{1}{\hbar} \right] \cdot \left[ \mathcal{E}_0 - \left( N + \frac{1}{2} \hbar \omega_c \right) \right]^{1/2} \quad (7.47)$$

Žádný válec nemůže vyběhnout z koule. Proto existuje maximální počet válců

$$N_{max} = \left( \frac{\mathcal{E}_0 - \frac{\hbar \omega_c}{2}}{\hbar \omega_c} \right) \quad (7.48)$$

Spinové rozštěpení Landauových hladin

Mějme operátor spinu  $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ . Potom

$$\mathcal{E}(N, k_z, \sigma) = \left( N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} + \sigma g_0 \mu_0 B \quad (7.49)$$

představují energie tzv. Landauových hladin a  $g_0$  je faktor spektrálního rozštěpení. Vyjádříme  $k_z$  z rovnice (7.49)

$$k_z(\mathcal{E}, N, \sigma) = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar}} \sqrt{\mathcal{E} - \left( N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c - \sigma g_0 \mu_0 B} \quad (7.50)$$

K určení degenerace Landauových hladin předpokládejme, že systém je uzavřen v pravoúhlém boxu o rozměrech  $L_\alpha$ ,  $\alpha = x, y, z$ . Počet dovolených hodnot  $K_\alpha$ ,  $|\alpha = x, y, z|$  je

$$\frac{K_\alpha}{\frac{2\pi}{L_\alpha}} = L_\alpha \cdot \frac{K_\alpha}{2\pi} \quad (7.51)$$

Hodnoty  $k_y$  jsou navíc povolené pouze v případě, že střed orbity  $x_0$  leží uvnitř boxu, tj.

$$\begin{aligned} -\frac{L_x}{2} &\leq x_0 \leq \frac{L_x}{2} \\ \omega_c &= \frac{eB}{m_e^*} \\ -\frac{L_x}{2} &\leq \frac{\hbar k_y}{\omega_c m_e^*} \leq \frac{L_x}{2} \\ -\frac{L_x \omega_c m_e^*}{2 \hbar} &\leq k_y \leq \frac{L_x \omega_c m_e^*}{2 \hbar} \\ -\frac{eBL_x}{2\hbar} &\leq k_y \leq \frac{eBL_x}{2\hbar} \end{aligned}$$

Počet stavů v Landauově hladině (při pevném  $k_z$ ) je

$$\frac{L_y K_y}{2\pi} = \frac{L_y L_x eB}{2\pi \hbar} \quad (7.52)$$

Vlnový vektor ve směru  $z$   $k_z$  je dán

$$k_z = \frac{2\pi}{L_z}, (n = 0; \pm 1; \pm 2; \dots) \quad (7.53)$$

$$\Sigma_{k_z} = \frac{L_z}{2\pi} \int_{-k_0}^{k_0} dk_z \quad (7.54)$$

kde  $k_0 = \frac{2\pi}{L_z} \left(\frac{N}{2}\right)$ .

$$\begin{aligned} \Sigma_{K_z} &= \frac{L_z}{\pi} \int_0^{k_0} dk_z = \frac{L_z}{\pi} K_0 L_x \frac{\sqrt{2m^* \mathcal{E} k_0}}{\pi \hbar} \\ \mathcal{E}' &= \mathcal{E} - \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} \end{aligned}$$

Z toho

$$\begin{aligned} k_z &= \sqrt{\frac{2m_e^* \mathcal{E}'}{\hbar}} \\ dk_z &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar}} \mathcal{E}'^{-1/2} d\mathcal{E}' = \frac{L_z}{2\pi \hbar} \cdot \sqrt{2m_e^*} \cdot \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}'}} d\mathcal{E}' \end{aligned}$$

Celkový počet elektronových stavů pro elektron v magnetickém poli je dán součinem počtu stavů v Landauově hladině při pevném  $z$  a počtem stavů ve směru  $z$ , tj.

$$N(\mathcal{E}') = \frac{L_x L_y L_z e B}{2\pi \hbar} \cdot \frac{\sqrt{2m_e^*}}{2\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}'}} = \frac{L_x L_y L_z e B \sqrt{2m_e^*}}{(2\pi \hbar)^2 \sqrt{\mathcal{E}'}} \quad (7.55)$$

Hustota stavů  $g(\mathcal{E}, B_z)$  na jednotkový objem v intervalu energií  $\mathcal{E}$  a  $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$  je dán výrazem

$$g(\mathcal{E}, B_z) = \frac{e B_z \sqrt{2m_e^*}}{(2\pi \hbar)^2} \sum_n \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E} - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}} \quad (7.56)$$

kde se sčítá, pokud je výraz pod odmocninou kladný.

# Rejstřík

- číslo
  - koordinační, 8
- akceptor, 27
  - divalentní, 30
  - monovalentní, 28
- Bragg, W. L., 7
- Bravais, A., 7
- buňka
  - elementární, 7
  - primitivní, 7
  - Wignerova-Sietzova, 14
- difrakce, 12
  - Braggova, 12
  - von Laueho, 13, 14
- doba
  - relaxační, 41
- donor, 27
  - divalentní, 29
  - monovalentní, 27
- energie
  - Fermiho, 16, 17
  - poruchová, 14
  - redukováná, 22
- funkce
  - rozdělovací, 17
    - děr, 26
    - elektronů, 16
  - nerovnovážná, 40
- grupa
  - bodová, 9
  - plně symetrická, 9
  - symetrie, 8
- hladina
  - příměsí, 27
- hmotnost
  - efektivní, 17
- hustota
  - proudu
    - elektrického, 50, 53
    - energie, 50, 53
  - stavů, 23
  - stavů, efektivní, 27
  - toku
    - energie, 56
- hustota stavů, 22
- index
  - Millerův, 9
- integrál
  - Fermiho, 23
  - Fermiho-Diracův, 24
- jev
  - transportní, 57
- koncentrace
  - děr, 26
  - elektronů, 24, 25
- krystalografie, 7
- krystaly, 7
- mez
  - Fermiho, 30
  - intrinsická, 31
- mříže

- Bravaisova, 7
- reciproká, 10
- operace symetrie, 8
- plyn
  - elektronový
    - degenerovaný silně, 17
    - degenerovaný částečně, 18
    - nedegenerovaný, 17
- podmínka
  - neutrality
    - elektrické, 30–32
- polovodič
  - degenerovaný silně, 25
  - extrinický, 31
  - homogenní, 16
  - nedegenerovaný, 25
  - typu N, 31
    - kompensovaný nedegenerovaný, 32
  - typu P, 31
- potenciál
  - chemický, 16
  - elektrostatický, 53
- proud
  - elektrický, 50
- pás
  - valenční, 26, 28
  - valenčný, 19
  - vodivostní, 22
  - vodivostný, 17, 18
- příměs, 19
- rovnice
  - Boltzmannova kinetická, 36, 38, 47
  - Braggova, 12
- schéma
  - energetické
    - homogenního polovodiče, 26
- statistika
  - Fermiho, 16
- statistika elektronů, 16
- stav
  - energetický, 16
  - excitovaný, 21
- stavy
  - energetické, 16
  - diskrétní, 16
  - spojité, 16
  - hustota, 22
- struktura
  - krystalová, 8
- transport, 57
- zóna
  - Brilliounova, 14