

Løsningsforslag til øving 9

Veiledning fredag 21. mars

Oppgave om tetthet av elektroner og hull i halvleder

a) Vi skal bestemme antall elektroner i ledningsbåndet,

$$N_c = \int_{E_c}^{\infty} D_c(E) f(E) dE$$

Innsetting av det oppgitte fritt-elektron-uttrykket for $D_c(E)$ samt det tilnærmede uttrykket for $f(E)$ gir

$$N_c = \frac{V}{2\hbar^3 \pi^2} (2m_c)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} (E - E_c)^{1/2} \exp\left(\frac{\mu - E}{k_B T}\right) dE$$

Integralet løses ved å substituere

$$x = \frac{E - E_c}{k_B T}$$

slik at integrasjonsgrensene med x som variabel blir 0 og ∞ , og $dE = k_B T dx$. Integralet i uttrykket for N_c blir

$$(k_B T)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_c}{k_B T}\right) \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx$$

Verdien av dette integralet er oppgitt til $\sqrt{\pi}/2$, så antall elektroner i ledningsbåndet blir

$$N_c = \frac{V}{2\hbar^3 \pi^2} (2m_c)^{3/2} k_B^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} T^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_c}{k_B T}\right)$$

og tettheten av "ledningselektroner" er

$$n = \frac{N_c}{V} = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_c k_B}{\hbar^2 \pi} \right)^{3/2} T^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_c}{k_B T}\right)$$

Konstanten A_n er altså

$$A_n = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_c k_B}{\hbar^2 \pi} \right)^{3/2}$$

For $E \gg E_c$ er ikke fritt-elektron-tilnærmelsen for tilstandstettheten lenger brukbar. Imidlertid vil hele integranden, dvs $D_c(E)f(E)$, avta eksponentielt mot null for økende verdier av E . (Alternativt kan vi si: Tilstander i energiområdet der fritt-elektron-modellen ikke lenger er gyldig er heller ikke okkupert av elektroner.) Dermed gjør vi en neglisjerbar feil når vi erstatter øvre integrasjonsgrense med ∞ . Fordelen er selvsagt at vi ender opp med et integral som er eksakt løsbart.

b) For å bestemme tettheten av hull i valensbåndet, $p = N_v/V$, gjør vi en tilsvarende tilnærming som i punkt a) ved at vi integrerer produktet $D_v(E)[1 - f(E)]$ fra $E = -\infty$ til $E = E_v$. Begrunnelsen er den samme: For $E \ll E_v$ er riktignok ikke fritt-elektron-tilnærmelsen for $D_v(E)$ lenger gyldig, men for slike energier er heller ingen tilstander okkupert av hull. Vi får:

$$\begin{aligned} N_v &= \int_{-\infty}^{E_v} D_v(E)[1 - f(E)]dE \\ &\simeq \frac{V}{2\hbar^3 \pi^2} (2m_v)^{3/2} \int_{-\infty}^{E_v} (E_v - E)^{1/2} \exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) dE \end{aligned}$$

Her substituerer vi

$$x = \frac{E_v - E}{k_B T}$$

så integrasjonsgrensene med x som variabel blir også her 0 (øvre grense) og ∞ (nedre grense), mens $dE = -k_B T dx$. Vi blir kvitt minustegnet ved å bytte om på integrasjonsgrensene og har for integralet ovenfor:

$$(k_B T)^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - \mu}{k_B T}\right) \int_0^\infty x^{1/2} e^{-x} dx$$

Altså blir tettheten av hull i valensbåndet

$$p = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_v k_B}{\hbar^2 \pi} \right)^{3/2} T^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - \mu}{k_B T}\right)$$

Konstanten A_p blir:

$$A_p = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_v k_B}{\hbar^2 \pi} \right)^{3/2}$$

c) Produktet $n \cdot p$ får vi ved å multiplisere sammen de to beregnede uttrykkene. Det kjemiske potensialet inngår med motsatt fortegn oppe i eksponenten i n og p og blir dermed borte i produktet. I eksponenten overlever kombinasjonen $E_v - E_c$, og det er jo nettopp båndgapet med negativt fortegn:

$$n \cdot p = \frac{1}{16} \left(\frac{4m_c m_v k_B^2}{\hbar^4 \pi^2} \right)^{3/2} T^3 \exp \left(-\frac{E_g}{k_B T} \right)$$

Den temperaturuavhengige prefaktoren er

$$A = A_n A_p = \frac{1}{16} \left(\frac{4m_c m_v k_B^2}{\hbar^4 \pi^2} \right)^{3/2}$$

d) Med $n = p = n_i$ kan vi skrive

$$A_n T^{3/2} \exp \left(\frac{\mu_i - E_c}{k_B T} \right) = A_p T^{3/2} \exp \left(\frac{E_v - \mu_i}{k_B T} \right)$$

dvs

$$\begin{aligned} \exp \left(\frac{2\mu_i}{k_B T} \right) &= \frac{A_p}{A_n} \exp \left(\frac{E_v + E_c}{k_B T} \right) \\ \Rightarrow \frac{2\mu_i}{k_B T} &= \frac{E_v + E_c}{k_B T} + \ln \frac{A_p}{A_n} \\ \Rightarrow \mu_i &= \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{A_p}{A_n} \\ \Rightarrow \mu_i &= \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln \frac{m_v}{m_c} \end{aligned}$$

Her er det første leddet på høyre side nettopp midten av båndgapet. Med mindre de effektive massene (dvs de inverse krumningene til funksjonen $E(k)$, se oppgaveteksten) for henholdsvis valensbånd (m_v) og ledningsbånd (m_c) er ekstremt forskjellige, vil det andre leddet på høyre side være av størrelsesorden $k_B T$ (eller mindre). Ved romtemperatur er den termiske energien $k_B T$ ca 25 meV, mens båndgapet er av størrelsesorden 1 eV, slik at det kjemiske potensialet blir liggende nær midten av båndgapet, altså ikke nær verken bunn av ledningsbånd eller topp av valensbånd.

For $T = 0$ ligger μ_i midt i båndgapet. For endelige temperaturer ligger det kjemiske potensialet midt i båndgapet dersom de effektive massene m_c og m_v er like store.

e) Vi har for det første at

$$n_i = A_n T^{3/2} \exp\left(\frac{\mu_i - E_c}{k_B T}\right)$$

for en intrinsikk halvleder, mens generelt er

$$n = A_n T^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_c}{k_B T}\right)$$

Kombinerer vi disse to, har vi

$$n = n_i \exp\left(\frac{\mu - \mu_i}{k_B T}\right)$$

som skulle vises.

Det oppgitte uttrykket for μ kan vi finne på følgende vis, med utgangspunkt i at $n \cdot p = n_i^2$ og $p = N_A$:

$$\begin{aligned} n N_A &= n_i^2 \\ \Rightarrow \frac{n}{n_i} &= \frac{n_i}{N_A} \\ \Rightarrow \exp\left(\frac{\mu - \mu_i}{k_B T}\right) &= \frac{n_i}{N_A} \\ \Rightarrow \mu &= \mu_i + k_B T \ln \frac{n_i}{N_A} \\ &= \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln \frac{m_v}{m_c} + k_B T \ln \frac{n_i}{N_A} \\ &= \frac{E_v + E_c}{2} - k_B T \ln \left[\frac{N_A}{n_i} \left(\frac{m_c}{m_v} \right)^{3/4} \right] \end{aligned}$$

Her har vi brukt generelle egenskaper for logaritmefunksjonen: $\ln a + \ln b = \ln(ab)$ og $b \ln a = \ln(a^b)$.

Utgangspunktet for vår beregning av n og p var at det kjemiske potensialet ikke skulle ligge for nær kanten av verken valens- eller ledningsbånd. Denne forutsetningen holder dersom det siste leddet i uttrykket for μ er (en del) mindre enn $E_g/2 \simeq 0.3 - 0.7$ eV. Med $k_B T = 0.025$ eV ved romtemperatur betyr det at dopekonsentrasjonen N_A kan være opp mot 10 størrelsesordner større enn den intrinsiske ladningskonsentrasjonen n_i før uttrykket for μ mister sin gyldighet. For Si, med $n_i \simeq 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, kan vi altså bruke dette uttrykket for verdier av N_A opp mot 10^{20} cm^{-3} .