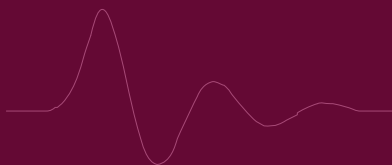


Jelena Radovanović, Vitomir Milanović

FIZIČKA ELEKTRONIKA ČVRSTOG TELA



UNIVERZITET U BEOGRADU - ELEKTROTEHNIČKI FAKULTET
BEOGRAD, 2010.

Jelena Radovanović, Vitomir Milanović

Fizička elektronika čvrstog tela

Recenzenti

dr Dejan Gvozdić

dr Milan Tadić

Odlukom Nastavno-naučnog veća Elektrotehničkog fakulteta broj 1349 od 02. 06. 2010. godine ova knjiga je odobrena kao udžbenik na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu

Izdavač

Elektrotehnički fakultet

ISBN 978-86-7255-044-2

PREDGOVOR

Fizička elektronika čvrstog tela je savremena naučna disciplina koja je u intenzivnom usponu, sudeći po istraživačkoj aktivnosti i broju publikacija objavljenih na godišnjem nivou. Fizika čvrstog stanja počela je da se formira kao posebna oblast na početku XX veka, a ubrzan razvoj doživela je u njegovoj drugoj polovini, prvenstveno zahvaljujući praktičnim potrebama za sintezom materijala sa unapred zadatim karakteristikama. Sa otkrićem tranzistora, 1948. godine rađa se poluprovodnička elektronika, kao deo fizičke elektronike čvrstog tela koji će odigrati ogromnu ulogu u naučnom i tehničkom napretku

Ovaj udžbenik nastao je na osnovu dugogodišnjih predavanja u okviru kursa Fizička elektronika čvrstog tela na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu. Nivo složenosti i način izlaganja materije podrazumeva da su čitaoci već upoznati sa osnovama kvantne mehanike na nivou osnovnog univerzitetskog kursa. Radi prilagođavanja novom nastavnom planu i programu kursa, kao i radi boljeg i lakšeg usvajanja izložene problematike, u udžbenik je uključeno preko 60 rešenih problema i zadataka koji su dati na kraju svake oblasti. Knjiga je prevashodno namenjena studentima Odseka za Fizičku Elektroniku na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu koji prate pomenuti kurs Fizičke elektronike čvrstog tela, ali može biti korisna i slušaocima predmeta na višim godinama osnovnih studija, master i doktorskim studijama smera za Nanoelektroniku, optoelektroniku i lasersku tehniku. S obzirom da fizika čvrstog stanja predstavlja osnovu za dublje proučavanje mnogih pravaca u savremenoj nauci i tehnici, nadamo se da će tekst biti koristan i odgovarajućem krugu istraživača i inženjera.

Zahvaljujemo se profesorima Elektrotehničkog fakulteta u Beogradu Dejanu Gvozdiću i Milanu Tadiću na izvršenoj recenziji i korisnim sugestijama koje su dali.

Beograd, maj 2010.

Autori

SADRŽAJ

1. ZONSKA TEORIJA ČVRSTOG TELA	1
1.1. DOZVOLJENE I ZABRANJENE ZONE	1
1.1.1. Rešenja Schrödinger-ove jednačine u dozvoljenim i zabranjenim zonama	9
1.1.2. Oblik zavisnosti $E(k)$ i određivanje granica zona	13
1.2. GUSTINA STANJA, KONCENTRACIJA ELEKTRONA	15
1.2.1. Pojam efektivne mase	23
1.2.2. Gustina stanja za slučaj elipsoidnih i sfernih ekvivalentnih površina	27
1.2.3. Koncentracija elektrona u slučaju elipsoidnih i sfernih ekvivalentnih površina	30
1.3. BRZINA ELEKTRONA U PROVODNOJ ZONI	35
1.3.1. Kretanje elektrona u spojašnjem polju	38
1.4. POJAM ŠUPLJINA	40
1.4.1. Izračunavanje koncentracije šupljina	44
1.5. SOPSTVENI POLUPROVODNIK	48
1.6. ČVRSTO TELO KONAČNIH DIMENZIJA. POVRŠINSKA STANJA	53
1.6.1. Tamovska stanja	55
1.7. PRIMESNI POLUPROVODNIK	58
1.7.1. Koncentracija nosilaca u primesnom poluprovodniku	62
1.8. ODABRANI PROBLEMI	70
2. TRANSPORTNI PROCESI	135
2.1. BOLTZMANN-OVA KINETIČKA JEDNAČINA	135
2.2. GUSTINA STRUJE NAELEKTRISANJA I GUSTINA STRUJE ENERGJE	141
2.2.1. Gustina struje naelektrisanja	141
2.2.2. Gustina struje energije	142
2.3. KINETIČKI KOEFICIENTI	143
2.3.1. Termoelektrične pojave	143
2.3.2. Struja u poluprovodniku. Einstein-ova relacija	153
2.3.3. Galvanomagnetne pojave	156
2.4. ODABRANI PROBLEMI	167

3. GENERACIONO-REKOMBINACIONI I DIFUZNI PROCESI	191
3.1. GENERACIJA I REKOMBINACIJA	191
3.1.1. Direktna rekombinacija	192
3.1.2. Indirektna rekombinacija	202
3.2. JEDNAČINA KONTINUITETA	210
3.3. ODABRANI PROBLEMI	219
4. POVRŠINSKE I KONTAKTNE POJAVE, HETEROSPOJEVI	237
4.1. HETEROSPOJ METAL-VAKUUM. TERMOELEKTRONSKA EMISIJA	237
4.2. HETEROSPOJ METAL-POLUPROVODNIK. SCHOTTKY-JEVA APROKSIMACIJA	241
4.3. HETEROSPOJ POLUPROVODNIK-POLUPROVODNIK	250
4.4. NEHOMOGENI POLUPROVODNIK	256
4.4.1. Kapacitivnost p-n spoja	268
4.4.2. Određivanje profila primesa na osnovu merenja kapacitivnosti p-n spoja	270
4.1.3. Proboj p-n spoja	272
4.5. ODABRANI PROBLEMI	279
LITERATURA	297
INDEKS POJMOVA	301

1. ZONSKA TEORIJA ČVRSTOG TELA

Pod čvrstim telima podrazumevaju se materijali koji imaju sposobnost suprotstavljanja spoljašnjim promenama (oblika, zapremine) i odgovara im najveći stepen uredenosti osnovnih strukturnih elemenata. Najčešće imaju kristalnu strukturu za koju je karakterističan pravilan raspored i periodičnost najmanjih građivnih elemenata u svim pravcima. S druge strane, kod amorfnihi čvrstih tela raspored osnovnih strukturnih jedinica je promenljiv i različit u okviru uzorka zbog čega ovakvi materijali nemaju fiksnu temperaturu topljenja. Čvrsta tela kristalne strukture sreću se u vidu odvojenih, pojedinačnih kristala – monokristala, ili u vidu polikristala koji predstavljaju klustere nasumično orijentisanih malih kristalita tj. zrna koja su po strukturi bliska monokristalima.

Proučavanje osobina materijala u okviru fizičke elektronike čvrstog tela uobičajeno je započeti razmatranjem idealizovanog modela u vidu savršenog besprimesnog monokristala beskonačno velikih dimenzija. Pojave defekata, primesa i granica strukture se zatim razmatraju kao mali poremećaji (perturbacije). Taj opšte prihvaćeni pristup usvojićemo i ovde, započinjući analizu elektronske strukture čvrstih tela uz sledeće pretpostavke:

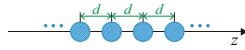
- 1) pri kretanju elektrona, joni koji su raspoređeni tačno u čvorovima idealne kristalne rešetke tretiraju se kao nepokretni izvori polja koje deluje na elektrone
- 2) uzajamno dejstvo elektrona između sebe, kao i sa jonima kristalne rešetke, zamenjuje se efektivnim poljem tj. pretpostavlja se skup nezavisnih elektrona koji se kreću u datom polju (jednoelektronska aproksimacija)

1.1 DOZVOLJENE I ZABRANJENE ZONE

U skladu sa prethodnim pretpostavkama, posmatraćemo idealno, homogeno i beskonačno čvrsto telo kristalne strukture. Zahvaljujući idealnoj periodičnosti, podrazumevamo da translacijom jedne elementarne ćelije možemo preklopiti čitavu ovu kristalnu strukturu. Ovakva periodičnost kristalne strukture ima za posledicu periodičnost potencijalne energije elektrona koji se nalazi u polju kristala. Koristićemo **jednoelektronsku aproksimaciju**, koja podrazumeva da su svi slobodni elektroni u čvrstom telu ekvivalentni, prema tome, ono što važi za jedan posmatrani elektron, važiće i za sve ostale. Efektivno, u okviru ove aproksimacije uzimamo da su jezgra nepokretna i posmatramo jedan "reprezentativni" elektron koji "vidi" kristalnu strukturu kao periodični potencijal. On ima nerelativističku masu slobodnog elektrona i naziva se provodni elektron.

Podrazumeva se da je svako (idealno) čvrsto telo trodimenzionalno (3D), međutim direktna analiza trodimenzionalnog problema je izuzetno složena. Zbog toga je uobičajeno da se razmatranje započinje polazeći od jednodimenzionalne (1D) strukture (ilustrovane na Sl. 1.1), čija konstanta periodičnosti iznosi d , a da se odgovarajući izrazi za 3D slučaj navedu

uopštavanjem, bez dokaza. U današnje vreme opravdanost 1D modela je sve očiglednija, što se može videti na primeru superrešetke kod koje se potencijalna energija (u smislu profila dna provodne zone) menja samo duž jedne koordinate, pa se kompletna analiza svodi na rešavanje problema jednodimenzionalnog čvrstog tela.

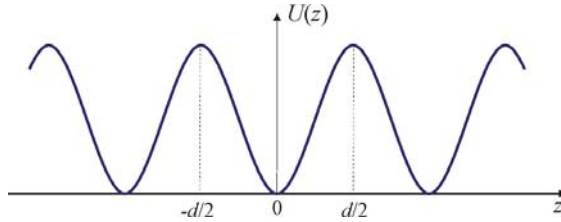


Sl. 1.1 Idealizovani jednodimenzionalni kristal

Pretpostavićemo takođe da zavisnost potencijalne energije od rastojanja predstavlja parnu funkciju u okviru jedne periode, a ilustrovana je na Sl. 1.2, dakle

$$U(z) = U(z+d) \quad \text{periodična funkcija} \quad (1.1a)$$

$$U(z) = U(-z) \quad \text{parna funkcija} \quad (1.1b)$$



Sl. 1.2 Periodična potencijalna energija kristalne strukture

Schrödinger-ova jednačina koja opisuje kretanje provodnog elektrona u periodičnom potencijalu $U(z)$ je oblika:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + U(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (1.2)$$

gde je m_0 masa slobodnog elektrona. Ako je $\Psi(z)$ jedno rešenje gornje jednačine, tada naprosto izvršimo smenu promenljive $z \rightarrow z+d$ i posmatrajmo Schrödinger-ovu jednačinu za funkciju $\Psi(z+d)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\Psi(z+d)}{dz^2} + U(z+d)\Psi(z+d) = E\Psi(z+d) \quad (1.3)$$

Pošto je $U(z) = U(z+d)$, ova jednačina postaje

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\Psi(z+d)}{dz^2} + U(z)\Psi(z+d) = E\Psi(z+d) \quad (1.4)$$

Vidimo, dakle, da su jednačine (1.2) i (1.4) istog oblika, što znači da njihova rešenja moraju biti linearno zavisna, odnosno da se razlikuju samo na nivou multiplikativne konstante:

$$\Psi(z+d) = \lambda\Psi(z) \quad (1.5)$$

Posmatraćemo dalje talasnu funkciju samo na domenu $z \in [-d/2, d/2]$. Pošto u svakoj tački talasna funkcija mora biti neprekidna i diferencijabilna, to važi i za tačku $z = d/2$:

$$\Psi\left(\frac{d}{2}^-\right) = \Psi\left(\frac{d}{2}^+\right) \quad (1.6a)$$

$$\Psi'\left(\frac{d}{2}^-\right) = \Psi'\left(\frac{d}{2}^+\right) \quad (1.6b)$$

Koristeći relacije (1.5), i (1.6) možemo pisati:

$$\Psi\left(\frac{d}{2}\right) = \lambda\Psi\left(-\frac{d}{2}\right) \quad (1.7a)$$

$$\Psi'\left(\frac{d}{2}\right) = \lambda\Psi'\left(-\frac{d}{2}\right) \quad (1.7b)$$

U posmatranom domenu $z \in [-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}]$, pretpostavićemo talasnu funkciju u sledećem obliku:

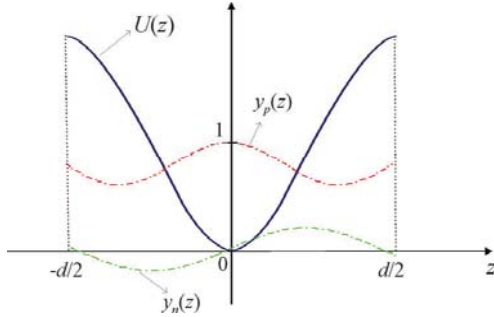
$$\Psi(z) = Ay_p(z) + By_n(z) \quad (1.8)$$

odnosno, dato rešenje rešenje Schrödinger-ove jednačine prikazaćemo u formi linearne kombinacije dve realne funkcije, od kojih je $y_p(z)$ parna funkcija koordinate a $y_n(z)$ neparna funkcija (Sl. 1.3). Funkcije $y_p(z)$ i $y_n(z)$ su rešenja koja ispunjavaju **fundamentalne granične uslove** u obliku:

$$y_p(0) = 1, \quad y_p'(0) = 0 \quad (1.9a)$$

$$y_n(0) = 0, \quad y_n'(0) = 1 \quad (1.9b)$$

Ovo važi za sve energije $E \in [0, +\infty)$. Ako $U(z)$ ne bi bila parna funkcija, onda ni fundamentalna rešenja $y_p(z)$ i $y_n(z)$ ne bi imala definisanu parnost.



SI. 1.3 Ilustracija parnog i neparnog dela talasne funkcije

Napisaćemo sada relacije (1.7a) i (1.7b) sa talasnom funkcijom datom u formi (1.8):

$$Ay_p\left(\frac{d}{2}\right) + By_n\left(\frac{d}{2}\right) = \lambda \left[Ay_p\left(-\frac{d}{2}\right) + By_n\left(-\frac{d}{2}\right) \right] \quad (1.10a)$$

$$Ay_p'\left(\frac{d}{2}\right) + By_n'\left(\frac{d}{2}\right) = \lambda \left[Ay_p'\left(-\frac{d}{2}\right) + By_n'\left(-\frac{d}{2}\right) \right] \quad (1.10b)$$

Koristeći osobine parnosti $y_p(z)$ i $y_n(z)$, tj.

$$y_p\left(\frac{d}{2}\right) = y_p\left(-\frac{d}{2}\right), \quad y_p'\left(\frac{d}{2}\right) = -y_p'\left(-\frac{d}{2}\right) \quad (1.11a)$$

$$y_n\left(\frac{d}{2}\right) = -y_n\left(-\frac{d}{2}\right), \quad y_n'\left(\frac{d}{2}\right) = y_n'\left(-\frac{d}{2}\right) \quad (1.11b)$$

gornje jednačine se mogu izraziti u obliku

$$Ay_p + By_n = \lambda [Ay_p - By_n] \quad (1.12a)$$

$$Ay_p' + By_n' = \lambda [-Ay_p' + By_n'] \quad (1.12b)$$

gde je $y_p \equiv y_p\left(\frac{d}{2}\right)$, $y_n \equiv y_n\left(\frac{d}{2}\right)$, $y_p' \equiv y_p'\left(\frac{d}{2}\right)$ i $y_n' \equiv y_n'\left(\frac{d}{2}\right)$. Posle sređivanja, ove jednačine poprimaju sledeću formu:

$$A[y_p(1-\lambda)] + B[y_n(1+\lambda)] = 0 \quad (1.13a)$$

$$A[y_p'(1+\lambda)] + B[y_n'(1-\lambda)] = 0 \quad (1.13b)$$

Da bi ovaj sistem imao netrivialno rešenje, potrebno je da determinanta sistema bude jednaka nuli:

$$\begin{vmatrix} y_p(1-\lambda) & y_n(1+\lambda) \\ y_p'(1+\lambda) & y_n'(1-\lambda) \end{vmatrix} = 0 \quad (1.14)$$

$$\Rightarrow y_p y_n'(1-\lambda)^2 - y_p' y_n(1+\lambda)^2 = 0 \quad (1.15)$$

odnosno,

$$\lambda^2 [y_p y_n' - y_p' y_n] - 2\lambda [y_p y_n' + y_p' y_n] + [y_p y_n' - y_p' y_n] = 0 \quad (1.16)$$

Dakle, u opsegu energija $E \in [0, +\infty)$ rešavamo Schrödinger-ovu jednačinu uz fundamentalne granične uslove a dobijena fundamentalna rešenja su realna za sve vrednosti energije, tj. $y_p, y_n, y_p', y_n' \in \mathbb{R}$, pri čemu koeficijent λ može biti i kompleksan. Lako se može pokazati da je Wronski-jeva determinanta, odnosno Wronskian, za dati oblik Schrödinger-ove jednačine konstantan duž z -ose:

$$W = y_p(z)y_n'(z) - y_p'(z)y_n(z) = Const \quad (1.17)$$

Za fundamentalne početne uslove (1.9a) i (1.9b) Wronskian sistema je jednak jedinici:

$$W = y_p y_n' - y_p' y_n = 1 \quad (1.18)$$

Imajući u vidu (1.18), sada jednačinu (1.16) možemo napisati u obliku:

$$\lambda^2 - 2\lambda [y_p y_n' + y_p' y_n] + 1 = 0 \quad (1.19)$$

Neka su rešenja ove kvadratne jednačine λ_1 i λ_2 . Na osnovu Viet-ovih pravila postoje sledeće veze između njih:

$$\lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1 \quad (1.20a)$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 2(y_p y_n' + y_p' y_n) \quad (1.20b)$$

Pošto su y_p, y_n, y_p', y_n' uvek realni, to je realan i izraz $(y_p y_n' + y_p' y_n)$ i obeležićemo ga sa $f(E)$ jer je funkcija energije:

$$f(E) \triangleq (y_p y_n' + y_p' y_n) \in \mathfrak{R} \quad (1.21)$$

Uslove (1.20a) i (1.20b) pišemo sada u obliku:

$$\lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1 \quad (1.22a)$$

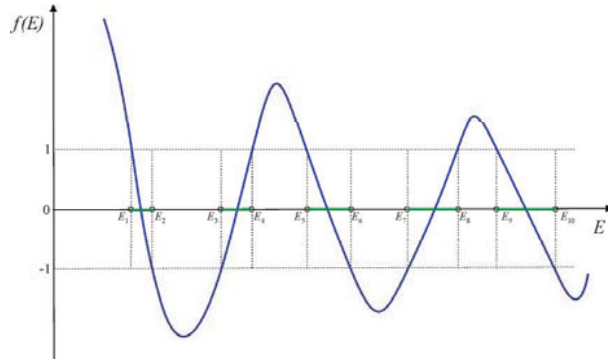
$$\lambda_1 + \lambda_2 = 2f(E) \quad (1.22b)$$

Rešenja u formi

$$\lambda_1 = e^{ikd} \quad (1.23a)$$

$$\lambda_2 = e^{-ikd} \quad (1.23b)$$

očigledno zadovoljavaju prvi uslov (1.20a), pri čemu je k u najopštijem slučaju kompleksna veličina. Funkcija $f(E)$ za periodični potencijal koji se razmatra, izgleda kvalitativno kao na Sl. 1.4.



Sl. 1.4 Kvalitativni oblik funkcije $f(E)$ sa označenim oblastima dozvoljenih i zabranjenih zona

Dalje ćemo posebno razmotriti dva moguća slučaja:

$$1) |f(E)| = |y_p y_n' + y_p' y_n| \leq 1 \quad (1.24a)$$

$$2) |f(E)| = |y_p y_n' + y_p' y_n| > 1 \quad (1.24b)$$

$$1) |f(E)| = |y_p y_n' + y_p' y_n| \leq 1 \text{ (dozvoljene zone)}$$

U ovom slučaju je talasni vektor k u rešenjima λ_1 i λ_2 (datim izrazima (1.23a) i (1.23b)) realan, tj. $k \in \mathbb{R}$. Ovo je očigledno pošto na osnovu (1.22b) sledi $\cos(kd) = f(E)$, a kako je $|f(E)| \leq 1$, to proizvod kd mora biti realan, a samim tim i k . Prema tome, nema nikakvih prepreka da se elektron nađe u ovim stanjima, odnosno njegova talasna funkcija zadovoljava potrebne uslove, kao što ćemo pokazati kasnije. Ukoliko bismo pretpostavili u jednoelektronskoj aproksimaciji da je posmatrani provodni elektron potpuno slobodan (što odgovara graničnom slučaju $E \gg U(z)$), tada bi zavisnost energije od talasnog vektora bila parabolična:

$$E(\vec{k}) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (1.25)$$

gde je m_0 masa slobodnog elektrona. U svim ostalim slučajevima moramo posebno odrediti zavisnost $E(k)$ za datu kristalnu strukturu. Oblasti energija u kojima je ispunjen uslov (1.24a) nazivaju se **dozvoljene zone** i sa Sl. 1.4 se vidi da su dozvoljene energije u oblastima (E_1, E_2) , (E_3, E_4) , (E_5, E_6) , ... Dozvoljene zone su sa porastom energije sve šire, jer elektron sve manje "vidi" zavisnost $U(z)$, što se takođe može videti sa Sl. 1.4.

Uslov (1.22b) sa rešenjima za λ_1 i λ_2 datim izrazima (1.23a) i (1.23b), za $k \in \mathbb{R}$, postaje:

$$\lambda_1 + \lambda_2 = e^{ikd} + e^{-ikd} = 2\cos(kd) \quad (1.26)$$

Poređenjem izraza (1.25) i (1.22b) zaključujemo da je

$$f(E) = \cos(kd), \quad k \in \mathbb{R} \quad (1.27)$$

odakle jednostavno sledi da je $E(k) = E(-k)$. Izraz (1.27) naziva se **dispersiona relacija za energije u dozvoljenim zonama**.

2) Razmotrimo sada drugi slučaj:

$$|f(E)| = |y_p y_n' + y_p' y_n| > 1 \quad (1.28)$$

U ovom slučaju je talasni vektor kompleksan ($k \in \mathbb{C}$), kako bi rešenja λ_1 i λ_2 mogla da zadrže istu formu datu izrazima (1.23a) i (1.23b). Oblasti energija elektrona za koje je talasni vektor kompleksan nazivaju se **zabranjene zone**. Na Sl. 1.4 zabranjene zone nalaze se u intervalima energija $(0, E_1)$, (E_2, E_3) , (E_4, E_5) , ... Pošto je $k \in \mathbb{C}$, napisaćemo ovaj talasni vektor u obliku

$$k = k_R + ik_I \quad (1.29)$$

gde je k_R realni, a k_I imaginarni deo (bez gubitka opštosti uzimamo da je $k_I > 0$). Rešenja za λ_1 i λ_2 sada možemo napisati u formi

$$\lambda_1 = e^{i(k_R + ik_I)d} \quad (1.30a)$$

$$\lambda_2 = e^{-i(k_R + ik_I)d} \quad (1.30b)$$

Na osnovu ovoga, uslov (1.22b) postaje:

$$e^{i(k_R + ik_I)d} + e^{-i(k_R + ik_I)d} = f(E) \quad (1.31)$$

tj.

$$[\cos(k_R d) + i \sin(k_R d)]e^{-k_I d} + [\cos(k_R d) - i \sin(k_R d)]e^{k_I d} = f(E) \quad (1.32)$$

Pošto je $f(E)$ realna funkcija, tj. $f(E) \in \mathbb{R}$, imaginarni deo izraza na levoj strani mora biti jednak nuli pa zaključujemo da mora važiti:

$$\sin(k_R d) = 0 \quad (1.33)$$

$$\Rightarrow k_R d = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.34)$$

Uz uslov (1.34), realni deo izraza (1.32) se može napisati u obliku:

$$\cos(n\pi) \cdot \cosh(k_I d) = f(E) \quad (1.35)$$

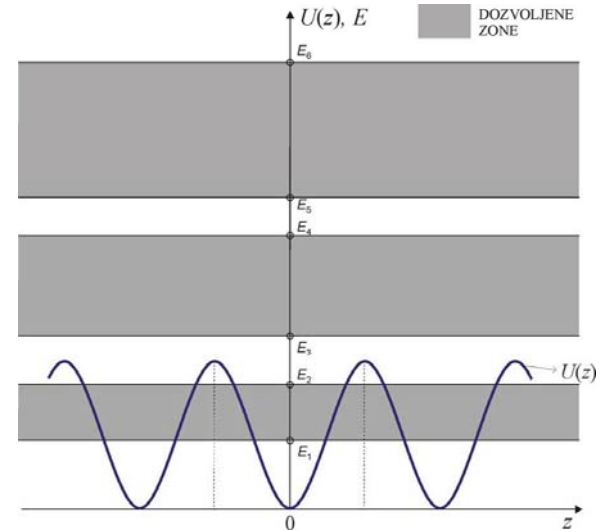
odakle dobijamo **dispersionu relacija za energije u zabranjenim zonama** u konačnom obliku:

$$(-1)^n \cosh(k_I d) = f(E) \quad (1.36)$$

Talasni vektor u zabranjenim zonama možemo napisati u obliku:

$$k = k_R + ik_I = \frac{n\pi}{d} + ik_I \quad (1.37)$$

Iz izraza (1.36) sledi da je $E(k) = E(-k)$, kao kod dozvoljenih zona. Dakle, energetski spektar elektrona u kristalu koji predstavljamo periodičnim potencijalom je **trakast**, sa dozvoljenim i zabranjenim zonama. Poreklo zonskog, odnosno trakastog spektra, možemo objasniti na sledeći način: svaka potencijalna jama obezbeđuje jednu energiju elektrona (diskretno stanje izolovane jame), odnosno jednu liniju u spektru energije. Ako imamo dve spregnute potencijalne jame, onda imamo dve bliske linije, a sa porastom broja potencijalnih jama raste i broj linija u spektru, pa diskretni spektar prelazi u trakasti kada ovaj broj teži beskonačnosti. Ovo važi za energije elektrona manje od visine potencijalne barijere, ali interesantno je da važi i za energije veće od visine barijere što je malo složenije objasniti, a potiče od rezonantnih stanja u kontinualnom delu spektra pojedinačnih jama. Na Sl. 1.5 prikazan je dijagram energije i potencijal kristalne rešetke.



Sl. 1.5. Zonski (trakasti) spektar

1.1.1 REŠENJA SCHRÖDINGER-OVE JEDNAČINE U DOZVOLJENIM I ZABRANJENIM ZONAMA

Analiziramo posebno slučajeve kada je $k \in \mathbb{R}$ i $k \in \mathbb{C}$, odnosno tražićemo rešenja Schrödinger-ove jednačine u dozvoljenim i zabranjenim zonama.

1) Kada je $k \in \mathbb{R}$, u dozvoljenim zonama imamo rešenja λ_1 i λ_2 u obliku $\lambda_1 = e^{ikd}$ i $\lambda_2 = e^{-ikd}$. Njima odgovaraju dve talasne funkcije $\Psi_1(z)$ i $\Psi_2(z)$. Napišimo talasnu funkciju elektrona u dozvoljenoj zoni u obliku:

$$\Psi_k(z) = u_k(z)e^{ikz} \quad (1.38)$$

i odredimo osobine funkcije $u_k(z)$. Prema relaciji (1.5),

$$\Psi_k(z+d) = \lambda \Psi_k(z) \quad (1.39)$$

pa je

$$u_k(z+d)e^{ik(z+d)} = \lambda u_k(z)e^{ikz} \quad (1.40)$$

odnosno,

$$u_k(z+d)e^{ikd} = \lambda u_k(z) \quad (1.41)$$

Ako je $\lambda = \lambda_1 = e^{ikd}$, onda je

$$u_k(z+d) = u_k(z) \quad (1.42)$$

što dalje znači da je ta funkcija periodična, sa osnovnim periodom koji je isti kao osnovni period kristalne rešetke (dokaz da je funkcija $u_k(z)$ periodična predstavlja Bloch-ovu teoremu u fizici čvrstog stanja). Dakle, talasna funkcija koja odgovara rešenju λ_1 je oblika

$$\Psi_1(z) = u_k(z)e^{ikz} \quad (1.43)$$

i ima formu modulisanog ravanskog talasa¹ koji se prostire u pravcu z-ose, u pozitivnom smeru. Formirajmo sada drugu talasnu funkciju

$$\Psi_2(z) = u_{-k}(z)e^{-ikz} \quad (1.44)$$

Istim postupkom kao u prethodnom slučaju može se pokazati da je $u_{-k}(z+d) = u_{-k}(z)$, uzimajući u razmatranje rešenje $\lambda_2 = e^{-ikd}$. Schrödinger-ova jednačina za talasnu funkciju $\Psi_k(z)$ je oblika:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi_k(z)}{dz^2} + U(z) \Psi_k(z) = E_k \Psi_k(z) \quad (1.45)$$

s tim da je, ponovimo, $\Psi_k(z) = u_k(z)e^{ikz}$. Ako ovu jednačinu konjugujemo, vodeći računa da su $U(z)$ i E_k realne veličine, dolazimo do izraza

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi_k^*(z)}{dz^2} + U(z) \Psi_k^*(z) = E_k \Psi_k^*(z) \quad (1.46)$$

odnosno, pošto je $\Psi_k^*(z) = u_k^*(z)e^{-ikz}$ (k je realno jer analiziramo elektrone u dozvoljenim zonama), dolazimo do jednačine po $u_k^*(z)$:

¹ U slučaju da je $U(z) = \text{Const}$, onda je $u_k(z) = \text{const}$, pa je $\Psi_1(z) = e^{ikz}$ što odgovara ravanskom talasu

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{d^2 u_k^*(z)}{dz^2} - 2ik \frac{du_k^*(z)}{dz} - k^2 u_k^*(z) \right] + U(z) u_k^*(z) = E_k u_k^*(z) \quad (1.47)$$

Ako sada u jednačini (1.45) zamenimo k sa $-k$, vodeći računa da je $\Psi_{-k}(z) = u_{-k}(z)e^{-ikz}$, kao i da je $E_k = E_{-k}$ (što je jasno iz (1.27)), dolazimo do jednačine koja je potpuno ista kao (1.47), samo je umesto $u_k^*(z)$ funkcija $u_k(z)$. Odavde se može zaključiti da je

$$u_{-k}(z) = u_k^*(z) \quad (1.48)$$

sa tačnošću do multiplikativne konstante. Napomenimo da ova relacija važi **ako i samo ako je k realno**. Dalje možemo zaključiti da je

$$\Psi_2(z) = \Psi_1^*(z) \quad (1.49)$$

Na osnovu prethodnih izraza jasno sledi:

$$|\Psi_1(z)|^2 = |u_k(z)|^2 \quad (1.50)$$

kao i

$$|\Psi_2(z)|^2 = |u_{-k}(z)|^2 = |u_k^*(z)|^2 \quad (1.51)$$

odnosno, kao što je očigledno i iz (1.49),

$$|\Psi_1(z)|^2 = |\Psi_2(z)|^2 \quad (1.52)$$

Možemo zaključiti da je za $k \in \mathbb{R}$ a) talasna funkcija periodična, b) kvadrat modula talasne funkcije takođe periodičan i da je c) talasna funkcija konačna u celom opsegu $z \in (-\infty, +\infty)$.

2) U zabranjenim zonama je talasni vektor kompleksan, tj.

$$k = \frac{\pi \tau}{d} + ik_j \in \mathbb{C}, \quad (1.53)$$

gde ćemo, kao što je već napomenuto, pretpostavljati da je $k_j > 0$ (bez umanjnja opštosti). I u ovom slučaju su rešenja Schrödinger-ove jednačine date prema Bloch-ovoj teoremi, tj. u formi:

$$\Psi_1(z) = u_k(z) e^{i(k_k + ik_j)z} \quad (1.54a)$$

$$\Psi_2(z) = u_{-k}(z) e^{-i(k_k + ik_j)z} \quad (1.54b)$$

gde je takođe $u_{-k}(z+d) = u_{-k}(z)$, što se pokazuje na isti način kao kod dozvoljenih zona. Prema tome, možemo pisati:

$$\Psi_1(z+d) = \Psi_1(z)e^{i(k_x + ik_y)d} \quad (1.55a)$$

$$\Psi_2(z+d) = \Psi_2(z)e^{-i(k_x + ik_y)d} \quad (1.55b)$$

S obzirom da je k kompleksna veličina, tada jednačina za $u_k^*(z)$ analogna jednačini (1.47), dobija oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{d^2 u_k^*(z)}{dz^2} - 2ik^* \frac{du_k^*(z)}{dz} - k'^2 u_k^*(z) \right] + U(z)u_k^*(z) = E_k u_k^*(z) \quad (1.56)$$

dok je jednačina za $u_{-k}(z)$ oblika:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{d^2 u_{-k}(z)}{dz^2} - 2ik^* \frac{du_{-k}(z)}{dz} - k'^2 u_{-k}(z) \right] + U(z)u_{-k}(z) = E_k u_{-k}(z) \quad (1.57)$$

Iz prethodna dva izraza se vidi da u slučaju kada je k kompleksno ($k \neq k^*$, $k^2 \neq k'^2$), ne važi uslov (1.48), tj.

$$u_{-k}(z) \neq u_k^*(z), \quad k \in \mathbb{C} \quad (1.58)$$

pa ne važi ni veza (1.49), tj.

$$\Psi_2(z) \neq \Psi_1^*(z) \quad (1.59)$$

Proverimo da li su i u ovom slučaju kvadrati modula odgovarajućih rešenja Schrödinger-ove jednačine ograničene funkcije na celom domenu (što je uslov za normiranost).

$$\Psi_1(z) = u_k(z)e^{ik_x z} e^{-k_y z}, \Rightarrow |\Psi_1(z)|^2 = |u_k(z)|^2 e^{-2k_y z} \quad (1.60a)$$

$$\Psi_2(z) = u_{-k}(z)e^{-ik_x z} e^{k_y z}, \Rightarrow |\Psi_2(z)|^2 = |u_{-k}(z)|^2 e^{2k_y z} \quad (1.60b)$$

Vidimo iz izraza (1.55a) da kada $z \rightarrow -\infty$, $|\Psi_1(z)|^2 \rightarrow +\infty$, a na osnovu (1.60b) sledi da kada $z \rightarrow \infty$, $|\Psi_2(z)|^2 \rightarrow +\infty$, što znači da se ove funkcije uopšte ne mogu normirati. Zbog toga te funkcije ne mogu biti talasne funkcije elektrona i zato smo ovakve intervale energija kojima one odgovaraju nazvali zabranjene zone.

1.1.2 OBLIK ZAVISNOSTI $E(k)$ I ODREĐIVANJE GRANICA ZONA

Zavisnost $E(k)$ za slobodan elektron je parabolična i data izrazom (1.25). U graničnom slučaju kada su energije elektrona u kristalu veoma velike, on se praktično ponaša kao slobodan i njegova disperziona relacija se približava navedenoj funkciji, tj.

$$E(k) \xrightarrow{E \gg U(z)} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (1.61)$$

gde je m_0 masa slobodnog elektrona. Uočimo da je energija u ovom slučaju parna funkcija talasnog vektora, što znači da je dijagram $E(k)$ simetričan. Granice zona se na osnovu izraza (1.24a) i (1.27) izračunavaju iz jednakosti

$$f(E) = \cos(kd) = \pm 1 \quad (1.62)$$

odnosno odgovaraju vrednostim talasnog vektora

$$k_E = \frac{n\pi}{d}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.63)$$

Potražimo izvod relacije (1.27) po k :

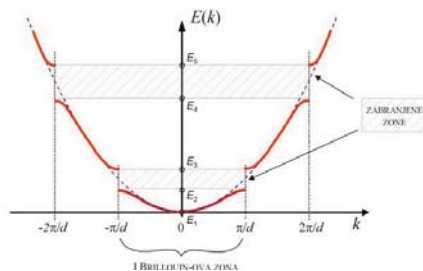
$$-d \sin(kd) = \frac{df(E)}{dE} \frac{dE}{dk} \quad (1.64)$$

Na granicama zona (gde je $\cos(kd) = \pm 1$), leva strana izraza (1.64) je jednaka nuli. S obzirom da sa Sl. 1.4 možemo zaključiti da je $df(E)/dE \neq 0$ u ovim tačkama, sledi:

$$\left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=k_E} = 0 \quad (1.65)$$

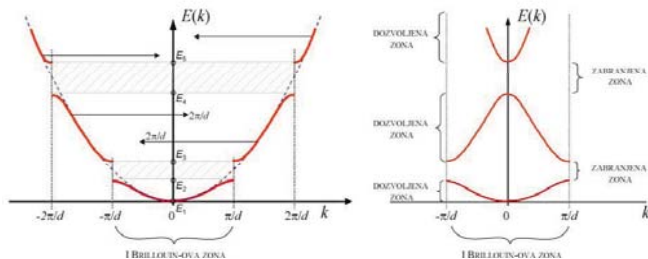
odnosno, u tim tačkama funkcija $E(k)$ ima ekstremume. Na osnovu prethodnih razmatranja, možemo ilustrovati zavisnost funkcije $E(k)$ na način prikazan na Sl. 1.6.

S obzirom na periodičnost funkcije $\cos(kd)$ po talasnom vektoru, očigledno je da vrednosti k i $k + \frac{2n\pi}{d}$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ daju ekvivalentan rezultat i da je dovoljan jedan osnovni opseg talasnih vektora širine $\frac{2\pi}{d}$ da se "pokriju" sve moguće vrednosti $\cos(kd)$, odnosno prema (1.27), funkcije $f(E)$.



Sl. 1.6 Opšti oblik zavisnosti energije od talasnog vektora u periodičnoj kristalnoj strukturi

Za ovaj osnovni skup neekvivalentnih talasnih vektora uzima se opseg $k \in [-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}]$ i on se naziva **prva Brillouin-ova zona**. Analogno tome, oblast $k \in [-\frac{2\pi}{d}, -\frac{\pi}{d}] \cup [\frac{\pi}{d}, \frac{2\pi}{d}]$ predstavljala bi II Brillouin-ovu zonu, itd. Zbog ovih osobina periodičnosti, može se izvršiti pomeranje celokupnog dijagrama prikazanog na Sl. 1.6 u I Brillouin-ovu zonu, transliranjem odgovarajućih segmenata za $\frac{(n-1)\pi}{d}$ levo i desno, ukoliko je n neparno, gde je n broj zone, a ako je n parno onda transliranje treba izvršiti za $\frac{n\pi}{d}$. Ovakav dijagram redukovan na I Brillouin-ovu zonu prikazan je na desnom delu Sl. 1.7.

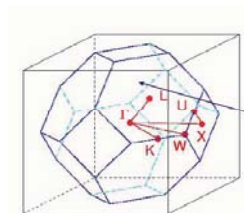


Sl. 1.7 Redukovanje dijagrama $E(k)$ na I Brillouin-ovu zonu

Napomenimo da i za trodimenzionalnu strukturu važi parnost energije u odnosu na talasni vektor, tj.:

$$E(\vec{k}) = E(-\vec{k}) \quad (1.66)$$

I u ovom slučaju se po analogiji definiše prva Brillouin-ova zona, koja sada predstavlja geometrijsko telo (videti primer na Sl. 1.8), a za određivanje njenih granica izvedena su u literaturi odgovarajuća pravila.



Sl. 1.8 Ilustracija I Brillouin-ove zone kod nekih materijala

1.2 GUSTINA STANJA. KONCENTRACIJA ELEKTRONA

Posmatrajmo jednodimenzionalni model kristala prikazanog u obliku kruga, kao što je ilustrovano na Sl. 1.9. Beskonačni 1D kristal predstavili smo lancem ćelija (tj. čvorova na rastojanju d) koji se zatvara sam u sebe. Neka se u tom lancu nalazi N ćelija, gde $N \rightarrow \infty$.



Sl. 1.9 Beskonačni 1D kristal u formi prstena

Koristićemo **Born-von-Karman-ove** granične uslove prema kojima se 0.-ta i N -ta ćelija poklapaju, tj. ekvivalentne su. Tada su očigledno i talasne funkcije 0.-te i N -te ćelije identične.

Zbog periodičnosti strukture, talasne funkcije uzimamo u Bloch-ovoj formi:

$$\begin{aligned}\Psi(0) &= u_k(0)e^{ik \cdot 0}, \text{ talasna funkcija u } 0.\text{-tom čvoru} \\ \Psi(1) &= u_k(1)e^{ikd}, \text{ talasna funkcija u prvom čvoru, ...} \\ \Psi(2) &= u_k(2)e^{ik2d}, \\ &\vdots \\ \Psi(N) &= u_k(N)e^{ikNd}\end{aligned}\quad (1.67)$$

Na osnovu Born-von-Karman-ovih graničnih uslova imamo

$$\Psi(0) = \Psi(N) \quad (1.68)$$

a zbog periodičnosti funkcije $u_k(z)$ važi

$$u_k(0) = u_k(N) \quad (1.69)$$

Prema tome,

$$\begin{aligned}u_k(0) \cdot 1 &= u_k(0)e^{ikNd} \\ \Rightarrow e^{ikNd} &= 1\end{aligned}\quad (1.70)$$

odakle zaključujemo da je

$$\begin{aligned}k_n Nd &= 2n\pi \\ \Rightarrow k_n &= n \frac{2\pi}{d} \frac{n}{N}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N-1\end{aligned}\quad (1.71)$$

Sa $L = Nd$ obeležićemo ukupnu dužinu kristala, pa je

$$k_n = n \frac{2\pi}{L}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (1.72)$$

Dužina u k -prostoru koja odgovara jednoj mogućoj vrednosti vektora \vec{k} određena je kao:

$$\Delta k = k_{n+1} - k_n = \frac{2\pi}{L} \quad (1.73)$$

Gustina stanja u k -prostoru se definiše kao broj stanja u elementu prostora dk , podeljen sa veličinom tog elementa prostora. U našem primeru se na dužini Δk u k -prostoru nalazi jedno k -stanje, pa će gustina stanja iznositi:

$$g(k) = \frac{1}{\Delta k} = \frac{L}{2\pi} \quad (1.74)$$

U trodimenzionalnom slučaju, u zapremini k -prostora ΔV_k se nalazi jedno stanje. Pri tome je

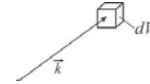
$$\Delta V_k = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \quad (1.75a)$$

$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}; \quad \Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y}; \quad \Delta k_z = \frac{2\pi}{L_z} \quad (1.75b)$$

pa sledi

$$\Delta V_k = \frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z} = \frac{8\pi^3}{V} \quad (1.76)$$

gde je V zapremina celog kristala. Gustina stanja sada predstavlja broj stanja dN_k^* u elementarnoj zapremini dV_k podeljen veličinom te zapremine, tj.



$$g(\vec{k}) = \frac{dN_k^*}{dV_k} = \frac{1}{\Delta V_k} = \frac{V}{8\pi^3} \quad (1.77)$$

Broj elektrona koji imaju talasni vektor k (u 1D slučaju) u intervalu $(k, k + dk)$ dobijamo kada pomnožimo verovatnoću da elektron ima talasni vektor u intervalu $(k, k + dk)$, odnosno energiju u intervalu $(E(k), E(k + dk))$ sa brojem stanja u $(k, k + dk)$, što iznosi:

$$dN_e(k) = f_{FD}(E(k))g(k)dk \quad (1.78)$$

gde je $f_{FD}(E(k))$ Fermi-Dirac-ova funkcija koja određuje verovatnoću da elektron ima talasni vektor u intervalu $(k, k + dk)$ i data je izrazom:

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (1.79)$$

pri čemu je E_F energija Fermi-jevog nivoa, T je temperatura, a k_B je Boltzmann-ova konstanta. Ako zamenimo izraz za gustinu stanja (1.74) u (1.78) dobijamo:

$$dN_e(k) = \frac{L}{2\pi} f_{FD}(E(k))dk \quad (1.80)$$

Ukupan broj elektrona u 1D slučaju dobijamo integracijom po svim vrednostima k , što daje

$$N_e = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_{FD}(E(k)) dk \quad (1.81)$$

s obzirom da važi $g(-k) = g(k) = \frac{L}{2\pi}$. Koncentracija elektrona se može izračunati kao

$$n = 2 \frac{N_e}{L} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_{FD}(E(k)) dk \quad (1.82)$$

gde je izraz (1.81) dodatno pomnožen faktorom 2 da bi se uračunala činjenica da elektroni mogu imati dve različite orijentacije spina. U prethodnim izrazima postojanje spina nije bilo uzeto u obzir, odnosno analiza je sprovedena samo za elektrone sa jednom vrednošću spina, pa je zbog toga ovakva multiplikativna korekcija neophodna. Naravno, smatra se da se elektroni obe orijentacije spina ponašaju ekvivalentno.

U prethodnom izvođenju, koje je opšteprihvaćeno i standardno u literaturi duži niz godina, pretpostavljeno je da koncentracija elektrona ne zavisi od koordinate z , što nije najegzaktnija pretpostavka. Naime, broj elektrona koji imaju talasni vektor u intervalu $(k, k + dk)$, a verovatnoća za to je $f_{FD}[E(k), E_F]$, i koji se nalaze na poziciji između z i $z + dz$ (za šta je verovatnoća $|\Psi(k, z)|^2 dz$) iznosi:

$$dN_{e,k}(z) = f_{FD}[E(k), E_F] |\Psi(k, z)|^2 dz \quad (1.83)$$

Zadržaćemo se na modelu prikazanom na Sl. 1.9., kod koga su sve vrednosti talasnog vektora pozitivne. Ukupan broj elektrona u intervalu $(z, z + dz)$ dobija se sumiranjem po svim mogućim vrednostima k u opsegu $(0, +\infty)$. Svakoј vrednosti k odgovaraju dve talasne funkcije: $\Psi_1(k, z)$ i $\Psi_1^*(k, z) = \Psi_1(-k, z)$, pa se izraz za broj elektrona $dN_e(z)$ u opsegu $(z, z + dz)$ može zapisati u formi:

$$dN_e(z) = \sum_{k=0}^{+\infty} f_{FD}[E(k), E_F] |\Psi_1(k, z)|^2 dz \quad (1.84)$$

Pošto elektron može imati dve orijentacije spina, ako pretpostavimo da su talasne funkcije $\Psi(k, z)$ i energije $E(k, E_F)$ nezavisne od orijentacije spina, koncentraciju elektrona na poziciji z možemo pisati u formi

$$n(z) = \frac{dN_e(z)}{dz} = 2 \sum_{k=0}^{+\infty} f_{FD}[E(k), E_F] |\Psi(k, z)|^2 \quad (1.85)$$

Kao što je već navedeno, u izrazima (1.83)-(1.85) veličina $|\Psi(k, z)|^2 dz$ predstavlja verovatnoću da se elektron nalazi u intervalu $(z, z + dz)$, što dalje znači da se talasna funkcija mora normirati na jedinicu:

$$\int_0^L |\Psi(k, z)|^2 dz = 1 \quad (1.86)$$

pri čemu $L \rightarrow +\infty$ ($L = Nd$), kao što je ranije objašnjeno. Podelimo ceo domen na ćelije dužine d , gde je d period jednodimenzionalnog kristala. Vodeći računa da je $\Psi(k, z) = C_k e^{ikz} u_k(z)$, gde je C_k konstanta koja se određuje pomoću uslova normiranja, izraz (1.86) može se napisati u obliku:

$$|C_k|^2 \int_0^L |u(k, z)|^2 dz = 1 \quad (1.87)$$

Napišimo promenljivu z u obliku $z = z' + ld$, gde $z' \in [0, d]$, a $l = 0, 1, 2, \dots, N-1$. Tada (1.87) dobija formu:

$$|C_k|^2 \sum_{l=0}^{N-1} \int_0^d |u_k(z)|^2 dz = 1 \quad (1.88)$$

odnosno

$$|C_k|^2 \int_0^d |u_k(z)|^2 dz \cdot N = 1 \quad (1.89)$$

Kako je $L = Nd$, konačno se može zapisati:

$$|C_k|^2 = \frac{d}{L} \frac{1}{\int_0^d |u(k, z)|^2 dz} \quad (1.90)$$

odnosno:

$$|\Psi(k, z)|^2 = \frac{d}{L} \frac{|u(k, z)|^2}{\int_0^d |u(k, z)|^2 dz} \quad (1.91)$$

pa je

$$n(z) = 2 \sum_{k=0}^{+\infty} f_{FD}[E(k), E_F] \frac{d}{L} \frac{|u(k, z)|^2}{\int_0^d |u(k, z)|^2 dz} \quad (1.92)$$

Ako se sada pređe sa sumiranja na integraljenje (uz $\Delta k = 2\pi / L$), izraz za koncentraciju dobija konačni oblik:

$$n(z) = \frac{d}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_{FD}[E(k), E_F] \frac{h^3(k, z)^2 dz}{\int_0^d |h(k, z)|^2 dz} dk \quad (1.93)$$

Iz izraza (1.93) vidi se da koncentracija zavisi od koordinate z i da je ta zavisnost periodična, sa osnovnim periodom d , što je posledica periodične zavisnosti potencijalne energije.

Uvedimo sada srednju koncentraciju n_{SR} u okviru osnovnog perioda dužine d :

$$n_{SR} = \frac{1}{d} \int_0^d n(z) dz = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_{FD}[E(k), E_F] \frac{d \int_0^d |h(k, z)|^2 dz}{\int_0^d |h(k, z)|^2 dz} dk \quad (1.94)$$

odnosno:

$$n_{SR} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_{FD}[E(k), E_F] dk \quad (1.95)$$

što se u potpunosti poklapa sa izrazom (1.82). Imajući u vidu da d iznosi nekoliko desetih delova nanometra, ovo usrednjavanje se vrši na vrlo maloj dužini. U daljem tekstu će n_{SR} biti označeno sa n .

U 3D slučaju broj elektrona koji imaju talasni vektor u intervalu $(k_x, k_x + dk_x)$, $(k_y, k_y + dk_y)$, $(k_z, k_z + dk_z)$ je

$$N_e = \int_{(\vec{k})} g(\vec{k}) f_{FD}(E(\vec{k})) d^3 k \quad (1.96a)$$

gde je $g(\vec{k}) = V / (8\pi^3)$ po analogiji sa 1D slučajem, pa dalje imamo

$$N_e = \frac{V}{8\pi^3} \int_{(\vec{k})} f_{FD}(E(\vec{k})) d^3 k \quad (1.96b)$$

$$n = \frac{N_e}{V} = \frac{1}{8\pi^3} \int_{(\vec{k})} f_{FD}(E(\vec{k})) d^3 k \quad (1.96c)$$

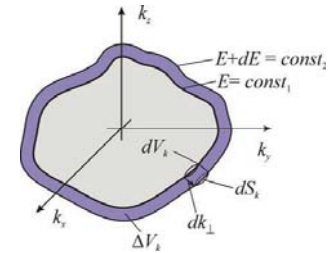
Kao i kod (1.82), zbog postojanja spina elektrona poslednji izraz neophodno je pomnožiti sa 2, čime dobijamo izraz za koncentraciju u obliku:

$$n = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(\vec{k})} f_{FD}(E(\vec{k})) d^3 k \quad (1.97)$$

Određimo sada energetska gustinu stanja, odnosno broj stanja u intervalu energije $(E, E + dE)$. Broj stanja u zapremini V , u intervalu energije $(E, E + dE)$ je jednak broju stanja u onoj zapremini u k -prostoru koja odgovara ovom intervalu energije

$$g^*(E) dE = g(\vec{k}) \Delta V_k \quad (1.98)$$

gde je $g^*(E)$ energetska gustina stanja, a ΔV_k je odgovarajuća zapremina u k -prostoru. Da bi odredili ΔV_k posmatračemo dve ekvienigetske površi u k -prostoru, koje su definisane sa $E = \text{Const}_1$ i $E + dE = \text{Const}_2$ (kao što je prikazano na Sl. 1.10). Ekvienigetske površi predstavljaju skup tačaka u k -prostoru koje odgovaraju konstantnoj vrednosti energije.



Sl. 1.10 Ekvienigetske površi u k -prostoru

Uvešćemo komponentu talasnog vektora normalnu na ekvienigetska površ \vec{k}_\perp i element površine dS_k na toj površi. Tada možemo odrediti elementarnu zapreminu šupljeg tela u k -prostoru između dve uočene ekvienigetske površi:

$$dV_k = dS_k dk_\perp \quad (1.99)$$

gde je dk_\perp promena komponente talasnog vektora normalne na ekvienigetska površ. Tražena zapremina u k -prostoru koja odgovara promeni energije između E i $E + dE$ iznosi:

$$\Delta V_k = \int_{(E \rightarrow E+dE)} dV_k \quad (1.100)$$

Pošto je vektor \vec{k}_\perp uveden kao normala na ekvieniernu površ u k -prostoru, možemo pisati:

$$dk_\perp = \frac{dE}{|\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})|} \quad (1.101)$$

Tada je

$$dV_k = \frac{dS_k}{|\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})|} dE \quad (1.102)$$

Konačno, zamenom u (1.98) dobijamo broj stanja u zapremini V , u intervalu energije $(E, E + dE)$:

$$g^*(E)dE = g(\vec{k}) \int_{(E \rightarrow E+dE)} \frac{dS_k}{|\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})|} dE \quad (1.103)$$

Skraćujući konstantu dE sa obe strane izraza (1.103) dobijamo izraz za energetsku gustinu stanja u zapremini V :

$$g^*(E) = \frac{V}{8\pi^3} \int_{(E \rightarrow E+dE)} \frac{dS_k}{|\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})|} \quad (1.104)$$

Deljenjem zapreminom dobijamo konačnu formu:

$$g(E) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{(E \rightarrow E+dE)} \frac{dS_k}{|\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})|} \quad (1.105)$$

gde je $g(E) = g^*(E)/V$. Ukupan broj elektrona u posmatranom kristalu zapremine V je:

$$N_e = 2 \int_{(E)} g^*(E) f_{FD}(E) dE = 2V \int_{(E)} g(E) f_{FD}(E) dE \quad (1.106)$$

a koncentracija elektrona iznosi:

$$n = 2 \int_{(E)} g(E) f_{FD}(E) dE \quad (1.107)$$

Koncentracija se može izračunavati na osnovu izraza (1.107) i (1.97), oba izraza daće naravno isti rezultat. Ako se koristi izraz (1.97), potrebno je znati zavisnost $E(\vec{k})$, pa zatim izvršiti trostruku integraciju. Izraz (1.107) je pogodan ako je poznata zavisnost $g(E)$ jer izračunavanje zahteva samo jednostruku integraciju. Ako se međutim zna samo $E(\vec{k})$, tada je broj potrebnih integracija isti kod oba izraza pošto određivanje $g(E)$ zahteva dvostruku integraciju.

1.2.1 POJAM EFEKTIVNE MASE

Posmatrajmo prvo jednodimenzionalni kristal. Neka je k_0 tačka u k -prostoru u kojoj funkcija $E(k)$ ima ekstremum. Sa Sl. 1.7 (desni, redukovani dijagram) vidimo da je $k_0 = 0$ ili $k_0 = \pm\pi/d$.

$$\left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=k_0} = 0 \quad (1.108)$$

Izvršimo razvoj funkcije $E(k)$ u Taylor-ov red u odnosu na tačku ekstremuma k_0 :

$$E(k) = E(k_0) + \left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \dots \quad (1.109)$$

Imajući u vidu uslov ekstremuma (1.108) i zanemarujući sabirke višeg reda, dobijamo:

$$E(k) \approx E(k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^2 \quad (1.110)$$

Slobodnom elektronu odgovara parabolična zavisnost $E(k)$ pa u tom slučaju možemo pisati:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \Rightarrow \frac{d^2 E(k)}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m_0} \quad (1.111)$$

Po analogiji sa drugim delom izraza (1.111), formulu (1.110) možemo prikazati na sledeći način:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=k_0} &= \frac{\hbar^2}{m^*} \\ \Rightarrow \frac{1}{m^*} &= \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=k_0} \end{aligned} \quad (1.112)$$

Odnosno, mozemo pisati:

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k - k_0)^2 \quad (1.113)$$

gde je m^* veličina koju nazivamo **efektivna masa** i ona je pozitivna ako funkcija $E(k)$ ima minimum u tački k_0 . Za $k_0 = 0$, funkcija $E(k)$ dobija oblik parabolične zavisnosti koji je

potpuno analogan odgovarajućem izrazu za slobodnu česticu:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.114)$$

ukoliko se kao referentni nivo za energiju uzme baš tačka minimuma, tj. $E(k_0) = 0$. Napomenimo da Schrödinger-ova jednačina za elektron u potencijalu $U(z)$ glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi_0}{dz^2} + U(z) \Psi_0 = E \Psi_0 \quad (1.115)$$

gde je m_0 masa slobodnog elektrona, dok u aproksimaciji efektivnim masama ima oblik

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \Psi}{dz^2} = E \Psi \quad (1.116)$$

što znači da je u ovom slučaju elektron slobodan ($U(z) = 0$), ali sa efektivnom masom $m^* \neq m_0$. Pored toga je $\Psi_0(z) \neq \Psi(z)$. Kao što se vidi iz Schrödinger-ove jednačine u aproksimaciji efektivnim masama, potencijalna energija je konstantna pa je i $u_x(z)$ konstanta, što dalje znači da je koncentracija nezavisna od z , tj. da je u ovoj aproksimaciji izraz za koncentraciju (1.97) potpuno tačan.

Ponovimo sada navedeni postupak za 3D slučaj. Neka se jedan od ekstrema funkcije $E(\vec{k})$ nalazi u tački $\vec{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y}, k_{0z})$. Tada će u posmatranoj tački ekstrema važiti:

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} = 0 \quad (1.117)$$

Razviciemo funkciju $E(\vec{k})$ u Taylor-ov red u okolini tačke ekstrema:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} (\vec{k} - \vec{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \in \{x, y, z\}} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}) + \dots \quad (1.118)$$

Zanemarujući članove višeg reda, zadržaćemo samo prva tri sabirka u ovom razvoju, imajući u vidu da je drugi sabirak jednak nuli zbog uslova ekstrema (1.117), pa dobijamo:

$$E(\vec{k}) \approx E(\vec{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \in \{x, y, z\}} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}) \quad (1.119)$$

Ponovo, po analogiji uvodimo:

$$\frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}) = \frac{\hbar^2}{m_{\alpha\beta}} (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}) \quad (1.120)$$

pa relaciju (1.119) možemo napisati u obliku:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \in \{x, y, z\}} \frac{\hbar^2}{m_{\alpha\beta}} (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}) \quad (1.121)$$

gde je $1/m_{\alpha\beta}$ komponenta **tenzora inverzne efektivne mase**. Iz (1.120) sledi da je odgovarajuća komponenta ovog tenzora jednaka

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \quad (1.122)$$

i vrlo važno je napomenuti da se koristi samo tenzor inverzne efektivne mase, tj. veličine $1/m_{\alpha\beta}$ koje jedine imaju odgovarajući smisao, a da tenzor efektivne mase ne bi imao fizički smisao. Prema tome, izraz (1.121) možemo napisati u formi:

$$\begin{aligned} E(\vec{k}) - E(\vec{k}_0) &= \frac{\hbar^2}{2} \begin{bmatrix} k_x - k_{0x} & k_y - k_{0y} & k_z - k_{0z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{m_{xx}} & \frac{1}{m_{xy}} & \frac{1}{m_{xz}} \\ \frac{1}{m_{yx}} & \frac{1}{m_{yy}} & \frac{1}{m_{yz}} \\ \frac{1}{m_{zx}} & \frac{1}{m_{zy}} & \frac{1}{m_{zz}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_x - k_{0x} \\ k_y - k_{0y} \\ k_z - k_{0z} \end{bmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \begin{bmatrix} \vec{k} - \vec{k}_0 \end{bmatrix}^T \frac{1}{\mathbf{m}} \begin{bmatrix} \vec{k} - \vec{k}_0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.123)$$

Kao što možemo videti na osnovu prethodnog izraza, tenzor inverzne efektivne mase u opštem slučaju ima oblik:

$$\frac{1}{\mathbf{m}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{m_{xx}} & \frac{1}{m_{xy}} & \frac{1}{m_{xz}} \\ \frac{1}{m_{yx}} & \frac{1}{m_{yy}} & \frac{1}{m_{yz}} \\ \frac{1}{m_{zx}} & \frac{1}{m_{zy}} & \frac{1}{m_{zz}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{bmatrix} \quad (1.124)$$

pri čemu komponente zadovoljavaju uslov $1/m_{\alpha\beta} = 1/m_{\beta\alpha}$ (simetričnost u odnosu na glavnu dijagonalu). Ovo je ispunjeno pod pretpostavkom da je posmatrani materijal beskonačan, homogen i izotropan, što je slučaj na koji smo se ograničili na početku izlaganja.

Ukoliko koordinatne ose u k -prostoru postavimo u pravcu glavnih osa **ekvienienergetskog elipsoida**, tada će vandijagonalni elementi biti jednaki nuli, tj. $1/m_{\alpha\beta} = 0$, $\alpha \neq \beta$, a tenzor inverzne efektivne mase dobiće formu

$$\left\| \frac{1}{m^*} \right\| = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_z} \end{pmatrix} \quad (1.125)$$

Ako je u pitanju beskonačni poluprovodnik ili dielektrik, uvek se može tenzor $\left\| \frac{1}{m^*} \right\|$ predstaviti u dijagonalnom obliku (1.125). Međutim ako to nije slučaj (npr. polubeskonačni materijal, spoj dva ili više materijala, ...), tada je $\left\| \frac{1}{m^*} \right\|$ dato izrazom (1.124), znači i sa vandijagonalnim elementima.

Pošto razmatramo beskonačni poluprovodnik, tada je zavisnost energije od talasnog vektora, na osnovu (1.125), data izrazom:

$$E(\vec{k}) - E(\vec{k}_0) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{zz}} \quad (1.126)$$

gde se podrazumeva i da je koordinatni početak u k -prostoru pomeren u tačku minimuma, tj. da je $k_{0x} = k_{0y} = k_{0z} = 0$. Ukoliko je ispunjeno $m_{xx} = m_{yy} = m_{zz} = m^*$, tada su **ekvienienergetske** površi **sfere**, tj. imamo paraboličnu zavisnost $E(k)$, tj.

$$E(\vec{k}) - E(\vec{k}_0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.127)$$

odnosno, u tom specijalnom slučaju efektivna masa postaje skalar:

$$\left\| \frac{1}{m^*} \right\| = \begin{pmatrix} \frac{1}{m^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m^*} \end{pmatrix} = \frac{1}{m^*} I \quad (1.128)$$

Smisao metoda efektivne mase ogleda se u tome da se složene funkcije $E(\vec{k})$ aproksimiraju tako da se elektron tretira kao slobodan ali umesto stvarne mase m_0 , pripisuje mu se efektivna masa m^* - parametar koji nosi informaciju u periodičnom potencijalu koji određuje kretanje elektrona. Validnost ove aproksimacije zavisi od posmatranog materijala i odabrane zone (provodna ili valentna). Kada su u pitanju elektroni, jasno je da aproksimacija važi samo za vrednosti energije u okolini minimuma zone.

1.2.2 GUSTINA STANJA ZA SLUČAJ ELIPSOIDNIH I SFERNIH EKVIENERGETSKIH POVRŠINA

U slučaju elipsoidnih ekvienienergetskih površina zavisnost energije od talasnog vektora je data izrazom (1.126), tj.

$$E(\vec{k}) - E(\vec{k}_0) = E^* = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{zz}} \quad (1.129)$$

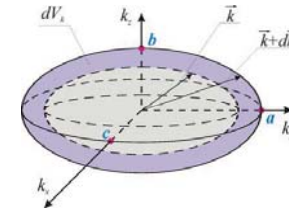
Ovaj izraz napisaćemo u sledećem obliku:

$$\frac{k_x^2}{\frac{2m_{xx}E^*}{\hbar^2}} + \frac{k_y^2}{\frac{2m_{yy}E^*}{\hbar^2}} + \frac{k_z^2}{\frac{2m_{zz}E^*}{\hbar^2}} = 1 \quad (1.130)$$

što predstavlja jednačinu elipsoida u normalnoj formi. Ovu jednačinu možemo zapisati skraćeno kao:

$$\frac{k_x^2}{a^2} + \frac{k_y^2}{b^2} + \frac{k_z^2}{c^2} = 1 \quad (1.131)$$

gde veličine $a = \sqrt{2m_{xx}E^*/\hbar^2}$, $b = \sqrt{2m_{yy}E^*/\hbar^2}$, i $c = \sqrt{2m_{zz}E^*/\hbar^2}$ predstavljaju poluose elipsoida (videti Sl. 1.11).



Sl. 1.11 Elipsoidne ekvienienergetske površi

Zapremina elipsoida u k -prostoru izračunava sa pomoću formule:

$$V_k = \frac{4\pi}{3} abc = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{m_{xx} m_{yy} m_{zz}} E^{*3/2} \quad (1.132)$$

Deo zapremine koji odgovara intervalu energije $(E, E + dE)$ nalazimo kao:

$$dV_k = \frac{4\pi\sqrt{2}}{\hbar^3} \sqrt{m_x m_y m_z} \sqrt{E^*} dE \quad (1.133)$$

Broj stanja u ovoj zapremini k -prostora izračunat preko energetske gustine stanja i preko gustine $g(\vec{k})$ mora biti isti, tako da možemo pisati:

$$g^*(E)dE = \frac{V}{(2\pi)^3} dV_k \quad (1.134)$$

Pri izboru referentnog nivoa za merenje energije $E(\vec{k}_0) = E_0 = 0$, iz (1.134) sledi:

$$g^*(E)dE = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\sqrt{2}}{\hbar^3} \sqrt{m_x m_y m_z} \sqrt{E} dE \quad (1.135)$$

Dakle, gustina stanja za elipsoidne ekvienigetske površine ima formu:

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{\sqrt{m_x m_y m_z}}{\hbar^3} \sqrt{E} \quad (1.136)$$

Kod materijala kojima odgovaraju elipsoidne ekvienigetske površi, u okviru I Brillouin-ove zone može postojati više ekvivalentnih minimuma funkcije $E(\vec{k})$ pa se izraz za gustinu stanja (1.136) mora pomnožiti brojem tih minimuma koji ćemo obeležiti sa A , kako bi se uračunali svi elektroni sa energijom u okolini posmatranog minimuma. Prema tome, konačan oblik izraza za gustinu stanja glasi:

$$g(E) = A g_{A=1}(E) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{(m_{g_s}^*)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E} \quad (1.137)$$

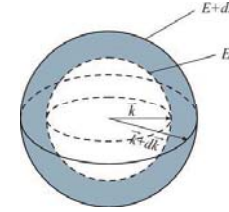
gde parameter $m_{g_s}^* = A^{2/3} \sqrt[3]{m_x m_y m_z}$ predstavlja **prividnu masu gustine stanja** i uvodi se radi analogije sa slučajem sfernih ekvienigetske površine (npr. $A_{Si} = 6$, $A_{Ge} = 4$). Naime, ako je $m_x = m_y = m_z = m^*$, funkcija $E(\vec{k})$ ne može imati više ekvivalentnih minimuma (tj. $A = 1$) i formula (1.136) postaje:

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{(m^*)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E} \quad (1.138)$$

Prethodni izraz mogli smo dobiti i polazeći od opšteg izraza za energetska gustinu stanja (1.105), tj.

$$g(E) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{(E \rightarrow \text{const})} \frac{dS_k}{|\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})|} \quad (1.139)$$

uzimajući u obzir da je sada $E(\vec{k}) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ (videti Sl. 1.12).



Sl. 1.12 Sferne ekvienigetske površi

Površina ekvienigetske sfera iznosi

$$S_k = 4\pi k^2 \quad (1.140)$$

a takođe je

$$|\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})| = \frac{\hbar^2 k}{m^*} \quad (1.141)$$

Zamenom u (1.139) dobijamo:

$$g(E) = \frac{1}{8\pi^3} \frac{m^*}{\hbar^2 k} \int_{(E \rightarrow \text{const})} dS_k = \frac{1}{8\pi^3} \frac{m^*}{\hbar^2 k} S_k \quad (1.142)$$

i konačno:

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{(m^*)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E} \quad (1.143)$$

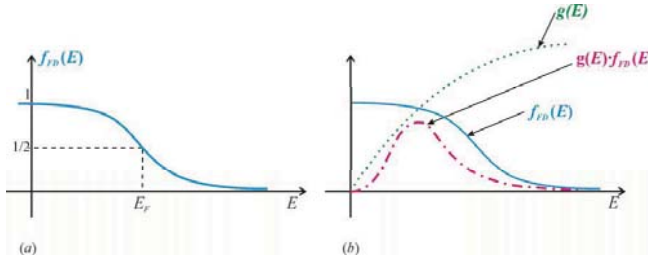
Napomenimo da se sferne ekvienigetske površine sreću npr. kod GaAs, a elipsoidne npr. kod Si i Ge, za dovoljno male vrednosti energija u okolini odgovarajućih minimuma.

1.2.3 KONCENTRACIJA ELEKTRONA U SLUČAJU ELIPSOIDNIH I SFERNIH EKVIENERGETSKIH POVRŠINA

Prilikom izračunavanja koncentracije polazimo od izraza (1.107), odnosno

$$n = 2 \int_{(E)} g(E) f_{FD}(E) dE \quad (1.144)$$

gde ćemo za gustinu stanja koristiti prethodno izvedenu formulu (1.137), ali uz napomenu da ovakva zavisnost, tj. srazmera sa \sqrt{E} , ima ograničenu oblast primene na energije u okolini minimuma funkcije $E(k)$. Dakle, ovaj izraz za gustinu stanja važi samo do onih vrednosti energija gde se u Taylor-ovom redu (1.118) mogu zanemariti članovi višeg reda od kvadratnog, a za veće energije, zavisnost $g(E)$ gubi oblik korene funkcije. Međutim, ono što nam omogućava da ipak izvršimo integraciju u izrazu (1.144) na celom opsegu energija od interesa, je činjenica da Fermi-Dirac-ova funkcija kojom množimo $g(E)$ jako brzo opada se porastom energije i praktično anulira podintegralnu funkciju pri većim energijama (videti Sl. 1.13). Prema tome, greška koju pravimo primenom formule (1.144) postaje veoma mala, a oblik podintegralne funkcije nam omogućava još jednu aproksimaciju – pomeranje gornje granice integracije u tačku $+\infty$ (strogo govoreći, gornju granicu treba da predstavlja maksimalna energija u posmatranoj zoni).



Sl. 1.13 Skica a) Fermi-Dirac-ove funkcije i b) podintegralne funkcije u izrazu za koncentraciju

Na osnovu prethodnog, izraz za koncentraciju možemo napisati u obliku

$$n = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(m_{gc})^3}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E}}{e^{x-\eta} + 1} dE \quad (1.145)$$

Zamenom sledećih bezdimenzionalnih veličina:

$$x = \frac{E}{k_B T}, \quad \eta = \frac{E_F}{k_B T} \quad (1.146)$$

u (1.145) dobijamo

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_{gc} k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\eta} + 1} dx \quad (1.147)$$

Ovaj izraz se uobičajeno zapisuje u obliku

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_c F_{1/2}(\eta) \quad (1.148)$$

gde konstanta

$$B_c = 2 \left(\frac{2\pi m_{gc} k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (1.149)$$

ima smisao gustine stanja svedene na dno provodne zone, a

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\eta} + 1} dx \quad (1.150)$$

predstavlja Fermi-jev integral indeksa $1/2$. U opštem slučaju, Fermi-jev integral indeksa i definiše se na sledeći način:

$$F_i(z_0) \triangleq \int_0^{\infty} \frac{z^i}{e^{z-z_0} + 1} dz \quad (1.151)$$

Detaljnije ćemo razmatrati dva karakteristična slučaja:

1) slučaj potpune nedegeneracije

U ovom slučaju smatramo da je ispunjen uslov

$$E_F < 0 \Rightarrow \eta < 0 \quad (1.152)$$

ali tako da je

$$e^{-\eta} \gg 1 \Rightarrow e^{x-\eta} \gg 1 \Rightarrow e^{x-\eta} + 1 \approx e^{x-\eta} \quad (1.153)$$

Praktično, potrebno je da je $\eta < -1$ da bi greška u izračunavanju $F_{1/2}(\eta)$ bila zanemarljiva (manja od 1%). Fermi-jev integral (1.150) na osnovu ovoga dobija oblik:

$$F_{1/2}(\eta) = e^{\eta} \int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{2}}{2} e^{\eta} \quad (1.154)$$

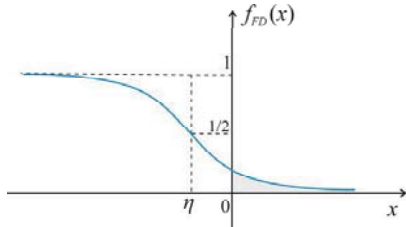
Zamenom u izraz za koncentraciju (1.148), dobijamo

$$n = B_c e^{\eta} \quad (1.155)$$

odnosno,

$$n = B_c e^{\frac{E_F}{k_B T}} \quad (1.156)$$

Uslov (1.152) je ispunjen kod izolatora, gde se Fermi-jev nivo E_F nalazi u zabranjenoj zoni ispod pomatrane dozvoljene zone, a takode i kod poluprovodnika koji nisu suviše jako dopirani. Fermi-Dirac-ova funkcija raspodele u ovom slučaju izgleda kao na Sl. 1.14.



Sl. 1.14 Slučaj potpune nedegeneracije

2) slučaj potpune degeneracije

U ovom slučaju smatramo da je ispunjen uslov

$$E_F > 0 \Rightarrow \eta > 0 \quad (1.157)$$

ali tako da možemo pretpostaviti

$$e^{-\eta} \ll 1 \quad (1.158)$$

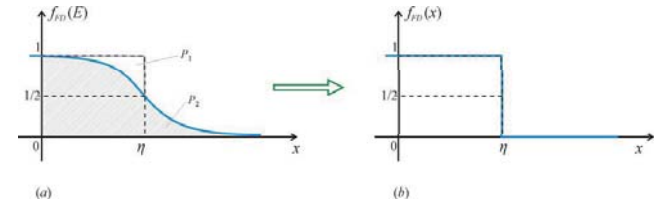
što je praktično ostvareno za $\eta > 5$. Tada se Fermi-Dirac-ova funkcija raspodele može aproksimirati kao na Sl. 1.15b), kao što će biti pokazano u nastavku.

Posmatrajmo integral

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\eta} + 1} dx \quad (1.159)$$

i uvedimo smenu $t = x - \eta$. Integral (1.159) sada postaje:

$$F_{1/2}(\eta) = \int_{-\eta}^{\infty} \frac{\sqrt{t+\eta}}{e^t + 1} dt \quad (1.160)$$



Sl. 1.15 Slučaj potpune degeneracije

Parcijalnom integracijom izraza (1.160) dobijamo:

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{3} \frac{(t+\eta)^{3/2}}{e^t + 1} \Big|_{-\eta}^{\infty} + \frac{2}{3} \int_{-\eta}^{\infty} \frac{(t+\eta)^{3/2}}{(e^t + 1)^2} dt \quad (1.161)$$

Prvi sabirak je naravno jednak nuli, dok ćemo u integralu aproksimirati član $(t+\eta)^{3/2}$ zaključno sa linearnim sabirkom po y . Za uticaj kvadratnog člana i opšti oblik podintegralne funkcije koji nam dozvoljava da donju granicu integracije pomerimo u $-\infty$ pogledati problem P.1.41. Dakle, uzimajući:

$$(t+\eta)^{3/2} \approx \eta^{3/2} + \frac{3}{2} \eta^{1/2} t \quad (1.162)$$

$$-\eta \rightarrow -\infty$$

dobijamo

$$F_{1/2}(\eta) \approx \frac{2}{3} \eta^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^t dt}{(e^t + 1)^2} + \eta^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^t t dt}{(e^t + 1)^2} \quad (1.163)$$

Oba integrala su analitički rešiva, prvi je jednak jedinici a drugi nuli (zbog neparnosti podintegralne funkcije), što daje:

$$F_{1/2}(\eta) \approx \frac{2}{3}\eta^{3/2} \quad (1.164)$$

a to je ekvivalentno kao da smo integraciju (1.159) izvršili samo za $x \leq \eta$, uzimajući u tom intervalu $f_{FD}(x) \approx 1$, a za $x > \eta$ uzimajući $f_{FD}(x) = 0$ (kao na Sl. 1.15b). Izraz za koncentraciju je sada oblika

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} B \eta^{3/2} \quad (1.165)$$

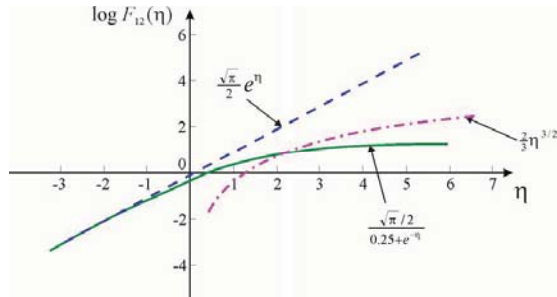
odnosno

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} B_s \left(\frac{E_F}{k_B T} \right)^{3/2} \quad (1.166)$$

Ovakva situacija, gde se Fermijev nivo nalazi u posmatranoj dozvoljenoj zoni tako da je ispunjen uslov (1.158) javlja se kod metala.

Postoje materijali koji se ne mogu svrstati ni u jedan od ova dva asimptotska slučaja i tada se moraju koristiti drugačije aproksimacije za Fermijev integral. Navodimo jedan od primera aproksimiranja Fermijevog integrala sa tačnošću do 1% (videti Sl. 1.16).

$$F_{1/2}(\eta) = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\eta}, & \eta \in (-\infty, -1) \\ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{0.25+e^{-\eta}}, & \eta \in [-1, 5] \\ \frac{2}{3}\eta^{3/2}, & \eta \in (5, +\infty) \end{cases} \quad (1.167)$$



Sl. 1.16 Aproksimacije Fermijevog integrala

1.3 BRZINA ELEKTRONA U PROVODNOJ ZONI

Označimo sa \hat{v} kvantno-mehanički operator brzine. U posmatranom kristalu zapremine V , kvantno-mehanička srednja vrednost ovog operatora definiše se na sledeći način:

$$\langle \hat{v} \rangle = \int_V \Psi^* \hat{v} \Psi dV \quad (1.168)$$

Operator brzine uvešćemo preko operatora impulsa:

$$\hat{v} = \frac{1}{m_0} \hat{p} \quad (1.169)$$

gde je m_0 masa slobodnog elektrona, a \hat{p} operator impulsa koji je po definiciji jednak

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla_r \quad (1.170)$$

Prema tome, srednja vrednost operatora brzine se izračunava kao

$$\langle \hat{v} \rangle = \frac{1}{m_0} \langle \hat{p} \rangle = -\frac{i\hbar}{m_0} \int \Psi^* \nabla_r \Psi dV \quad (1.171)$$

Talasan funkcije elektrona u kristalu sa periodničnim potencijalom $U(\vec{r})$ dobijaju se rešavanjem Schrödinger-ove jednačine u obliku:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (1.172)$$

odnosno,

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E(\vec{k}) - U(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (1.173)$$

Na osnovu Bloch-ove teoreme, talasna funkcija elektrona koji se kreće u ovakvom periodičnom potencijalu ima formu:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (1.174)$$

Diferencirajmo Schrödinger-ovu jednačinu (1.173) po komponenti talasnog vektora k_x :

$$\nabla^2 \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial k_x} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E(\vec{k}) - U(\vec{r})] \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial k_x} = 0 \quad (1.175)$$

Na osnovu (1.174) sledi:

$$\frac{\partial \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial k_x} = \frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial k_x} e^{i\vec{k}\vec{r}} + i x u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial k_x} e^{i\vec{k}\vec{r}} + i x \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.176)$$

Primenom Laplace-ovog operatora na (1.176) dobijamo:

$$\nabla^2 \left(\frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial k_x} e^{i\vec{k}\vec{r}} + i x \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right) = \nabla^2 \left(\frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial k_x} e^{i\vec{k}\vec{r}} \right) + i x \nabla^2 \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + 2i \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial x} \quad (1.177)$$

Uvešćemo sledeću oznaku

$$A \equiv \frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial k_x} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (1.178)$$

Sada jednačina (1.175) dobija oblik:

$$i x \nabla^2 \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + 2i \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial x} + \nabla^2 A + \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E(\vec{k}) - U(\vec{r})] A + i x \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = 0 \quad (1.179)$$

Pregrupisaćemo sabirke na sledeći način:

$$i x \left\{ \nabla^2 \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E(\vec{k}) - U(\vec{r})] \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right\} + \left\{ \nabla^2 A + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E(\vec{k}) - U(\vec{r})] A \right\} + 2i \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial x} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = 0 \quad (1.180)$$

U prvoj vitičastoj zagradi prepoznajemo izraz (1.173) pa je taj sabirak očigledno jednak nuli. Definišimo operator koji je sličan Hamiltonian-u i izveden je iz njega, u obliku:

$$\hat{H}'_0 \equiv \nabla^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E(\vec{k}) - U(\vec{r})] \quad (1.181)$$

Na osnovu toga izraz (1.180) možemo skraćeno zapisati u formi

$$i x \left\{ \hat{H}'_0 \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right\} + \hat{H}'_0 A + 2i \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial x} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = 0 \quad (1.182)$$

Pomnožimo prethodni izraz sa Ψ^* i potražimo integral po celoj zapremini V

$$\int_{(V)} \Psi_{\vec{k}}^* \hat{H}'_0 A dV + 2i \int_{(V)} \Psi_{\vec{k}}^* \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}}{\partial x} dV + \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} \int_{(V)} \Psi_{\vec{k}}^* \Psi_{\vec{k}} dV = 0 \quad (1.183)$$

Pošto je operator \hat{H}'_0 Hermite-ov operator, onda važi:

$$\int_{(V)} \Psi_{\vec{k}}^* \hat{H}'_0 A dV = \int_{(V)} (\hat{H}'_0 \Psi_{\vec{k}})^* A dV = 0 \quad (1.184)$$

s obzirom da je $\hat{H}'_0 \Psi_{\vec{k}} = 0$ na osnovu (1.173). Prema tome, jednačina (1.183) postaje

$$i \int_{(V)} \Psi_{\vec{k}}^* \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}}{\partial x} dV + \frac{m_0}{\hbar^2} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} = 0 \quad (1.185)$$

odnosno,

$$\frac{i\hbar}{m_0} \int_{(V)} \Psi_{\vec{k}}^* \frac{\partial \Psi_{\vec{k}}}{\partial x} dV = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} \quad (1.186)$$

Poređenjem sa (1.171) zaključujemo da leva strana gornjeg izraza predstavlja x -komponentu srednje vrednosti operatora brzine $\langle \hat{v} \rangle_x \equiv v_x$, pa je dakle

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} \quad (1.187)$$

Analogno se izvede odgovarajuću izrazi i za druge dve komponente v_y i v_z , pa je prema tome srednja vrednost operatora brzine jednaka

$$\langle \hat{v} \rangle \equiv \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}) \quad (1.188)$$

Izraz (1.188) važi za bilo kakvu zavisnost $E(\vec{k})$. U tačkama ekstremuma funkcije $E(\vec{k})$ ispunjen je uslov $\vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}) = 0$, što znači da je i srednja vrednost brzine elektrona u tim tačkama \vec{k} -prostora jednaka nuli.

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{v}(\vec{k}_0) = 0 \quad (1.189)$$

Izraz (1.188) izveden je polazeći od talasne funkcije $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$. Ako bi se pak pošlo od druge talasne funkcije $\Psi_{-\vec{k}}(\vec{r}) = u_{-\vec{k}}(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}}$, tada bi se došlo do izraza $\vec{v}_{-\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{-\vec{k}} E(-\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{-\vec{k}} E(\vec{k}) = -\frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}) = -\vec{v}_{\vec{k}}$, što je i očekivani rezultat.

² U daljem tekstu ćemo pod pojmom "brzina elektrona" podrazumevati kvantno-mehaničku srednju vrednost operatora brzine pa ćemo nadalje izostavljati oznaku operatora \hat{v} i oznaku za usrednjavanje $\langle \rangle$

1.3.1 KRETANJE ELEKTRONA U SPOLJAŠNJEM POLJU

U skladu sa Ehrenfest-ovom teoremom, možemo relacije između kvantno-mehaničkih srednjih vrednosti posmatranih veličina dovesti u formu analognu zakonima klasične mehanike. Npr., u klasičnoj fizici trenutna snaga izražava se kao proizvod spoljašnje sile i brzine elektrona, tj.

$$\frac{dE}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v} \quad (1.190)$$

U čvrstom telu energija elektrona predstavlja funkciju talasnog vektora \vec{k} , pa ćemo dakle analizirati funkciju $E = E(\vec{k})$ i izračunati njen totalni diferencijal:

$$dE(\vec{k}) = \frac{\partial E}{\partial k_x} dk_x + \frac{\partial E}{\partial k_y} dk_y + \frac{\partial E}{\partial k_z} dk_z \quad (1.191)$$

Na osnovu toga sledi:

$$\frac{dE(\vec{k})}{dt} = \frac{\partial E}{\partial k_x} \frac{dk_x}{dt} + \frac{\partial E}{\partial k_y} \frac{dk_y}{dt} + \frac{\partial E}{\partial k_z} \frac{dk_z}{dt} \quad (1.192)$$

odnosno

$$\frac{dE(\vec{k})}{dt} = \vec{v} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} \quad (1.193)$$

Zamenom izraza (1.188) u (1.193) dobijamo

$$\frac{dE(\vec{k})}{dt} = \hbar \vec{v} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{v} \cdot \frac{d(\hbar \vec{k})}{dt} = \vec{v} \cdot \frac{d(\vec{p})}{dt} = \vec{v} \cdot \vec{F} \quad (1.194)$$

gde $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ predstavlja impuls. Podsetimo se da podrazumevamo da su sve veličine predstavljene kvantno-mehaničkim srednjim vrednostima po celokupnom prostoru. Izraz (1.194) je u potpunosti saglasnosti sa izrazom (1.190).

S druge strane, posmatrajmo formulu za ubrzanje:

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (1.195)$$

koja na osnovu (1.188) postaje

$$\vec{a} = \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \right] \quad (1.196)$$

ili, razloženo na komponente

$$a_x = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right), \quad a_y = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial E}{\partial k_y} \right), \quad a_z = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial E}{\partial k_z} \right) \quad (1.197)$$

Ove izraze dalje možemo napisati u obliku:

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \frac{dk_x}{dt} + \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} \frac{dk_y}{dt} + \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \frac{dk_z}{dt} \right] \\ a_y &= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} \frac{dk_x}{dt} + \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \frac{dk_y}{dt} + \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \frac{dk_z}{dt} \right] \\ a_z &= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \frac{dk_x}{dt} + \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \frac{dk_y}{dt} + \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \frac{dk_z}{dt} \right] \end{aligned} \quad (1.198)$$

S obzirom na definiciju komponenti tenzora efektivne mase (1.122), dalje imamo

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{1}{m_{xx}} \frac{dp_x}{dt} + \frac{1}{m_{xy}} \frac{dp_y}{dt} + \frac{1}{m_{xz}} \frac{dp_z}{dt} \\ a_y &= \frac{1}{m_{yx}} \frac{dp_x}{dt} + \frac{1}{m_{yy}} \frac{dp_y}{dt} + \frac{1}{m_{yz}} \frac{dp_z}{dt} \\ a_z &= \frac{1}{m_{zx}} \frac{dp_x}{dt} + \frac{1}{m_{zy}} \frac{dp_y}{dt} + \frac{1}{m_{zz}} \frac{dp_z}{dt} \end{aligned} \quad (1.199)$$

Uzimajući u obzir da je $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$, konačno dobijamo izraz za ubrzanje u matricnoj formi:

$$\begin{bmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{m_{xx}} & \frac{1}{m_{xy}} & \frac{1}{m_{xz}} \\ \frac{1}{m_{yx}} & \frac{1}{m_{yy}} & \frac{1}{m_{yz}} \\ \frac{1}{m_{zx}} & \frac{1}{m_{zy}} & \frac{1}{m_{zz}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{bmatrix} \quad (1.200)$$

Odavde možemo uočiti analogiju sa II Newton-ovim zakonom iz klasične mehanike, ako formulu (1.200) kraće zapišemo kao:

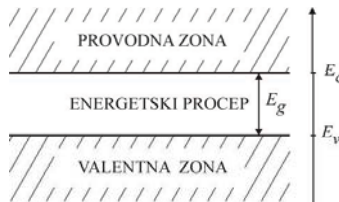
$$\vec{a} = \left\| \frac{1}{m^*} \right\| \vec{F} \quad (1.201)$$

Naglasimo da ovaj izraz ne možemo napisati u formi $\vec{F} = \|m^*\| \vec{a}$ s obzirom da samo veličina $\left\| \frac{1}{m^*} \right\|$ tj. tenzor inverzne efektivne mase ima odgovarajući fizički smisao, dok bi $\|m^*\|$ bila čisto matematička tvorevina, a u opštem slučaju $\left\| \frac{1}{m^*} \right\|^{-1}$ nije jednako $\|m^*\|$.

Ako posmatramo slučaj elipsoidnih ekvivalentnih površina (videti Sl. 1.11), tako da se koordinatne ose u \vec{k} -prostoru poklapaju sa glavnim osama elipsoida, tada će elementi van glavne dijagonale biti jednaki nuli (izraz (1.104)). Ukoliko su dijagonalni elementi međusobno jednaki (izraz 1.127), tj. ekvivalentne površine sfere, samo u tom (specijalnom) slučaju efektivna masa postaje skalar pa možemo napisati $\left\| \frac{1}{m^*} \right\| = \frac{1}{m^*} \cdot I$ gde je I jedinična matrica i tada se izraz (1.201), izuzetno, sme napisati u prepoznatljivom obliku $\vec{F} = \|m^*\| \vec{a}$.

1.4 POJAM ŠUPLJINA

U daljem razmatranju ograničićemo se na dve specifične energetske zone u poluprovodniku, i to poslednju zonu koja je u potpunosti popunjena elektronima na temperaturi apsolutne nule ($0K$) i prvu narednu zonu koja je potpuno prazna, videti Sl. 1.17. Najviša zona koja je u potpunosti popunjena elektronima na temperaturi apsolutne nule naziva se **valentna zona** (engl., valence band), dok se naredna viša zona koja je u istim uslovima potpuno prazna naziva **provodna zona** (engl., conduction band). Između ove dve zone nalazi se odgovarajuća zabranjena zona odnosno **energetski procep** (engl., energy gap). Najniža energija (dno) provodne zone obeležava se oznakom E_c , dok se najviša energija (vrh) valentne zone obeležava sa E_v . Razlika ove dve vrednosti energije daje veličinu energetskog procepa E_g , tj. $E_g = E_c - E_v > 0$.



Sl. 1.17 Šematski prikaz provodne i valentne zone u poluprovodniku

Na nekoj temperaturi $T > 0K$, deo elektrona iz valentne zone će zahvaljujući dovoljnoj termalnoj energiji uspeti da pređe u provodnu zonu čime će se situacija po pitanju popunjenosti zona promeniti. Smatraćemo da je ovakva termalna generacija trenutno jedini mehanizam prelaska elektrona iz valentne u provodnu zonu, pa je prema tome broj elektrona koji popunjava stanja u provodnoj zoni jednak broju upražnjenih mesta koja su oni ostavili u valentnoj zoni.

Definišaćemo gustinu struje koja potiče od jednog elektrona sa talasnim vektorom \vec{k} :

$$\vec{j}_k = -e\vec{v}_k = -\frac{e}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k}) \quad (1.202)$$

gde \vec{v}_k označava kvantno-mehaničku srednju vrednost brzine, a $e > 0$ je elementarno naelektrisanje. Podrazumevaćemo da se radi o jediničnoj zapremini pa otuda izostaje faktor $1/V$. Ukupna gustina struje dobija se sumiranjem po svim stanjima zauzetim od strane elektrona, odnosno po svim vrednostima talasnog vektora \vec{k} koje odgovaraju zauzetim stanjima:

$$\vec{J} = \sum_k \vec{j}_k = -e \sum_k \vec{v}_k \quad (1.203)$$

Podsetimo se da je energija parna funkcija talasnog vektora, tj. $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$, a brzina neparna funkcija, odnosno:

$$\vec{v}_{-\vec{k}} = -\vec{v}_k \quad (1.204)$$

kao što je objašnjeno posle izraza (1.189).

Pretpostavimo da izračunavamo vrednost izraza (1.203) za valentnu zonu koja je u potpunosti popunjena elektronima. Tada će suma po svim vrednostima talasnog vektora, s obzirom na simetričnost vrednosti \vec{k} (videti npr. Sl. 1.7 koja ilustruje jednodimenzionalni slučaj) biti jednaka nuli, tj. ukupna gustina struje biće jednaka nuli:

$$\vec{J} = -e \sum_k \vec{v}_k = 0 \quad (1.205)$$

S druge strane, posmatrajmo situaciju kada valentna zona nije u potpunosti popunjena ali je uzrok delimične nepopunjenosti isključivo termalna generacija (ne postoji nikakvo spoljašnje polje, već elektroni prelaze u provodnu zonu zahvaljujući dovoljnoj termalnoj energiji). Tada će simetrija popunjenosti stanja po \vec{k} ostati očuvana, tj. ako je popunjeno stanje koje odgovara nekoj vrednosti \vec{k} , biće popunjeno i stanje $-\vec{k}$, pa će ukupna gustina struje i dalje biti jednaka nuli. Međutim, ukoliko je prisutno spoljašnje polje koje doprinosi prelasku elektrona iz valentne u provodnu zonu, tada će ova simetričnost biti narušena i ukupna gustina struje

postaće različita od nule. Da bismo analizirali ovaj poslednji i najvažniji slučaj (delimično popunjena provodna zona, tj. postojanje nepopunjenih stanja u valentnoj zoni, ali u prisustvu spoljašnjeg polja), uvešćemo nekoliko pomoćnih veličina na sledeći način:

$$v_n(\vec{k}) = \begin{cases} 1, & \text{ako je stanje opisano sa } \vec{k} \text{ zauzeto elektronom} \\ 0, & \text{ako stanje opisano sa } \vec{k} \text{ nije zauzeto elektronom} \end{cases} \quad (1.206a)$$

$$v_p(\vec{k}) = \begin{cases} 0, & \text{ako je stanje opisano sa } \vec{k} \text{ zauzeto elektronom} \\ 1, & \text{ako stanje opisano sa } \vec{k} \text{ nije zauzeto elektronom} \end{cases} \quad (1.206b)$$

Ove dve veličine služe kao indikatori zauzetosti posmatranog stanja od strane elektrona i očigledno je da su to komplementarne veličine:

$$v_n(\vec{k}) + v_p(\vec{k}) = 1, \quad \forall \vec{k} \quad (1.207)$$

Ukupnu gustinu struje elektrona sada možemo da izrazimo na sledeći način:

$$\vec{J} = -e \sum_{\vec{k}} v_n(\vec{k}) \vec{v}_{\vec{k}} = -e \sum_{\vec{k}} (1 - v_p(\vec{k})) \vec{v}_{\vec{k}} \quad (1.208)$$

Na ovaj način se sumiranje vrši po svim mogućim stanjima tj. vrednostima \vec{k} , pri čemu nepopunjena stanja ulaze sa težinom 0, tako da ukupni zbir ostaje nepromenjen u odnosu na izraz (1.203) gde se sumiranje vrši samo po popunjenim stanjima.

Izraz (1.208) izraz možemo dalje razviti u obliku:

$$\vec{J} = -e \sum_{\vec{k}} \vec{v}_{\vec{k}}^0 + e \sum_{\vec{k}} v_p(\vec{k}) \vec{v}_{\vec{k}} = e \sum_{\vec{k}} v_p(\vec{k}) \vec{v}_{\vec{k}} \quad (1.209)$$

gde se sada sumiranje vrši po nepopunjenim stanjima uz promenu znaka naelektrisanja. Prvi sabirak u (1.182) se anulira iz razloga simetrije jer je analogan slučaju potpuno popunjene zone. Upoređujući (1.208) i (1.209) zaključujemo sledeće:

$$\vec{J} = -e \sum_{\vec{k}} v_n(\vec{k}) \vec{v}_{\vec{k}} = e \sum_{\vec{k}} v_p(\vec{k}) \vec{v}_{\vec{k}} \quad (1.210)$$

Dakle, sa stanovišta izračunavanja ukupne gustine struje potpuno je ekvivalentno da li sumiranje sprovodimo po stanjima koja su popunjena elektronima, uzimajući u obzir njihovo stvarno naelektrisanje $-e$, ili po nepopunjenim stanjima tretirajući ih kao da imaju pozitivno naelektrisanje. Jasno je da je ovaj drugi način izračunavanja daleko pogodniji za valentnu zonu jer je ona u praksi skoro potpuno popunjena elektronima, tj. broj "praznih" stanja je prilično mali pa ih je mnogo lakše "prebrojati" prilikom sumiranja. Ovakvo definisana nepopunjena

stanja možemo smatrati fiktivnim česticama čije je naelektrisanje suprotnog znaka od naelektrisanja elektrona dok im je brzina ista, a nazivamo ih **šupljine** (engl., hole). To su kvazičestice koje fizički ne postoje već predstavljaju model za jednostavnije tretiranje elektronskog transporta kroz valentnu zonu.

Definisaćemo sada fluks ukupne energije kako bismo uspostavili relaciju između totalne energije elektrona i šupljina, a zatim ćemo dati izraz za izračunavanje koncentracije šupljina. Fluks ukupne energije napisaćemo na sledeći način:

$$\vec{\Gamma} = \sum_{\vec{k}} v_n(\vec{k}) (E_{tot})_n \vec{v}_{\vec{k}} \quad (1.211)$$

U ovom izrazu član $(E_{tot})_n = E(\vec{k}) - e\varphi(\vec{r})$ označava totalnu energiju elektrona, gde drugi sabirak reprezentuje neku dodatnu potencijalnu energiju koja potiče od primene spoljašnjeg polja. Iskorišćemo sada vezu (1.207), što daje

$$\begin{aligned} \vec{\Gamma} &= \sum_{\vec{k}} (1 - v_p(\vec{k})) [E(\vec{k}) - e\varphi(\vec{r})] \vec{v}_{\vec{k}} = \\ &= \sum_{\vec{k}} [E(\vec{k}) - e\varphi(\vec{r})] \vec{v}_{\vec{k}} - \sum_{\vec{k}} v_p(\vec{k}) [E(\vec{k}) - e\varphi(\vec{r})] \vec{v}_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (1.212)$$

Zbog parnosti funkcije $E(\vec{k})$ i neparnosti brzine $\vec{v}_{\vec{k}}$, prilikom sumiranja po svim mogućim stanjima (simetrične granice po \vec{k}), prvi sabirak u gornjem izrazu se anulira. Ukupan fluks možemo sada predstaviti na sledeći način:

$$\vec{\Gamma} = -\sum_{\vec{k}} v_p(\vec{k}) [E(\vec{k}) - e\varphi(\vec{r})] \vec{v}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} v_p(\vec{k}) [- (E_{tot})_n] \vec{v}_{\vec{k}} \quad (1.213)$$

Pošto se sumiranje sada vrši po nepopunjenim stanjima (stanjima koja "zauzimaju" šupljine), sledi da i odgovarajuća energija u izrazu za fluks predstavlja totalnu energiju šupljina $(E_{tot})_p$, pa se gornji izraz može prikazati kao

$$\vec{\Gamma} = \sum_{\vec{k}} v_p(\vec{k}) (E_{tot})_p \vec{v}_{\vec{k}} \quad (1.214)$$

odakle jednostavno zaključujemo da je totalna energija šupljina jednaka negativnoj vrednosti totalne energije elektrona (u valentnoj zoni):

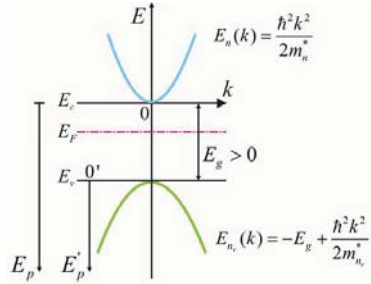
$$(E_{tot})_p = - (E_{tot})_n \quad (1.215)$$

1.4.1 IZRAČUNAVANJE KONCENTRACIJE ŠUPLJINA

Razmotrićemo slučaj kada su disperzione relacije (zavisnost energije elektrona od talasnog vektora) parabolične, i u provodnoj i u valentnoj zoni, kao što je prikazano na Sl. 1.18. Energiju elektrona u provodnoj zoni opisaćemo izrazom

$$E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (1.216)$$

uzimajući dno provodne zone kao referentni nivo za računanje energije. Veličina m_n^* predstavlja efektivnu masu elektrona u provodnoj zoni.



Sl. 1.18 Ilustracija parabolične zavisnosti $E(\vec{k})$ u provodnoj i valentnoj zoni poluprovodnika

U odnosu na isti referentni nivo, energija elektrona u valentnoj zoni može se izraziti kao

$$E_n(\vec{k}) = -E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (1.217)$$

gde E_g označava veličinu energetske procepa koja se uvek definiše kao $E_g = E_c - E_v$, tj. obavezno je pozitivna, dok je m_n^* efektivna masa elektrona u valentnoj zoni. S obzirom da valentna zona ima maksimum funkcije $E(\vec{k})$ u tački $\vec{k} = 0$ (videti Sl. 1.18), prema definiciji parametra efektivne mase (1.112), ova vrednost će biti negativna $m_n^* < 0$. Međutim, u

prethodnom izlaganju je zaključeno da je mnogo pogodnije valentnu zonu tretirati analizom šupljina, čija energija je suprotnog znaka od energije elektrona, pa se dakle izračunava u formi

$$E_p(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2(-m_n^*)} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \quad (1.218)$$

Parametar $m_p^* > 0$ predstavlja efektivnu masu šupljina u valentnoj zoni. Dakle, ova reprezentacija šupljinama podrazumeva "čestice" sa pozitivnom vrednošću naelektrisanja i efektivne mase. Radi jednostavnijeg izvođenja, tj. direktne analogije sa izračunavanjem koncentracije elektrona u provodnoj zoni, referentni nivo za energiju šupljina pomerićemo u vrh valentne zone (tačka $0'$ na Sl. 1.18), pa izraz za energiju šupljina postaje

$$E'_p(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \quad (1.219)$$

Napomenimo da ovakav opis valentne zone pomoću skalarne efektivne mase u praksi nije adekvatan i potrebno je čak i u gruboj aproksimaciji koristiti dva parametra (dve "parabole" koje bi reprezentovale tzv. lake i teške šupljine). Radi jednostavnosti izvođenja privremeno ćemo se zadržati na izrazu (1.219) a kasnije objasniti razlike koje nastaju kada se koristi složeniji izraz za opis valentne zone. Dalji postupak izračunavanja koncentracije šupljine obavlja se na identičan način kao u poglavlju 1.2. Po analogiji sa (1.107), za koncentraciju šupljina možemo napisati izraz

$$p = 2 \int_{(E)} g_p(E'_p) f_{FD}^p(E'_p) dE'_p \quad (1.220)$$

gde je $g_p(E'_p)$ energetska gustina stanja za šupljine, a $f_{FD}^p(E'_p)$ funkcija raspodele šupljina u valentnoj zoni. Gustina stanja ima formu ekvivalentnu sa (1.136)

$$g_p(E'_p) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{(m_p^*)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E'_p} \quad (1.221)$$

Pošto šupljine predstavljaju odsustvo elektrona, onda je i njihova funkcija raspodele komplementarna onoj za elektrone, tj.

$$f_{FD}^p(E'_p) = 1 - f_{FD}^n(E'_p) \quad (1.222)$$

odnosno,

$$f_{FD}^p(E'_p) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{E'_p - E_F}{k_B T}} + 1} = 1 - \frac{1}{e^{\frac{-E_g - E_p - E_F}{k_B T}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{E_p - E_g + E_F}{k_B T}} + 1} \quad (1.223)$$

Oznaka E_F predstavlja, kao i svuda do sada, Fermijev nivo za elektrone koji se uvek izražava u odnosu na energiju dna provodne zone. Prilikom analize provodne zone, pod Fermijevim nivoom smatrali smo veličinu $E_F - E_c$, uz referentni nivo $E_c = 0$. Ukoliko bismo hteli da definišemo analognu veličinu za šupljine tada bismo prethodni izraz preuredili na sledeći način:

$$f_{FD}^p(E_p) = \frac{1}{e^{\frac{E_p - E_F}{k_B T}} + 1} \quad (1.224)$$

gde bi $E_F^p \equiv -E_g - E_F$ predstavljao Fermijev nivo za šupljine, odnosno položaj Fermijevog nivo izražen u odnosu na vrh valentne zone (uzimajući referentni nivo energije $E_v = 0$, i usmeravajući energetska osu naniže, Sl. 1.18). Zamenom izraza (1.221) i (1.224) u (1.220) dobijamo:

$$p = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(m_p^*)^{3/2}}{\hbar^3} \int_{(E)} \frac{\sqrt{E_p}}{e^{\frac{E_p - E_F^p}{k_B T}} + 1} dE_p \quad (1.225)$$

Uvođenjem smena $x = E_p / k_B T$ i $\eta_p = E_F^p / k_B T$, prethodni izraz se svodi na

$$p = 4\pi \left(\frac{2m_p^* k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x - \eta_p} + 1} dx \quad (1.226)$$

a uobičajeno se zapisuje u obliku

$$p = \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_p F_{1/2}(\eta_p) \quad (1.227)$$

gde je veličina $B_p = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2}$ ima smisao gustine stanja svedene na vrh valentne zone.

Prema definicionom izrazu (1.151), $F_{1/2}(\eta_p)$ predstavlja Fermijev integral indeksa $1/2$:

$$F_{1/2}(\eta_p) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x - \eta_p} + 1} dx \quad (1.228)$$

koji se može aproksimirati na identičan način kao za elektrone. U slučaju potpune nedegeneracije, kada je ispunjeno $E_F^p < 0$, tj. $\eta_p < 0$ (u odnosu na referentni nivo i smer energetske ose za šupljine), imaćemo sledeće:

$$e^{-\eta_p} \gg 1 \Rightarrow e^{x - \eta_p} \gg 1 \Rightarrow e^{x - \eta_p} + 1 \approx e^{x - \eta_p} \quad (1.229)$$

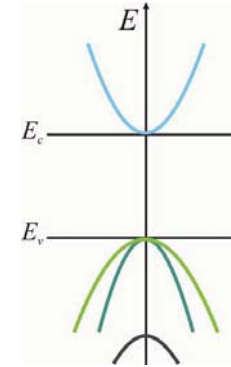
Prema tome, Fermijev integral se može aproksimirati vrednošću

$$F_{1/2}(\eta_p) = \frac{\sqrt{x}}{2} e^{\eta_p} \quad (1.230)$$

Konačno, izraz za koncentraciju u slučaju potpune nedegeneracije dobija oblik:

$$p = B_p e^{\eta_p} = B_p e^{\frac{E_F^p}{k_B T}} = B_p e^{-\frac{E_g + E_F}{k_B T}} \quad (1.231)$$

pri čemu se E_F računa u odnosu na referentni nivo "0" sa Sl. 1.18. Kao što je već naglašeno, opisivanje valentne zone izrazom oblika (1.219) je veoma neprecizno za uobičajene tipove poluprovodnika kao što su GaAs, Si, Ge, InSb. Aproksimacija efektivne mase za šupljine po pravilu nije adekvatna, ali se ipak koristi za kvalitativnu ocenu jer su drugi metodi analize daleko složeniji. Nešto precizniji opis zavisnosti $E(\vec{k})$ za npr. GaAs uključivao bi tri parametra tj. tri "parabolične zavisnosti", koje predstavljaju grane lakih i teških šupljina i otoplenu zonu koja potice od spin-orbitne interakcije (nalazi se ispod prethodne dve, kao što je prikazano na Sl. 1.19).



Sl. 1.19 Uprošćeni prikaz zavisnosti $E(\vec{k})$ u provodnoj i valentnoj zoni GaAs

Pošto kod najpoznatijih poluprovodnika i jedinjenja u valentnoj zoni imamo i lake i teške šupljine, ukoliko zanemarimo otoplenu zonu, efektivna masa m_p u izrazu za koncentraciju

šupljina iznosi

$$m_p^{3/2} = m_{p_i}^{3/2} + m_{p_h}^{3/2} \quad (1.232)$$

gde su m_{p_i} i m_{p_h} efektivna masa lakih i teških šupljina, respektivno.

1.5 SOPSTVENI POLUPROVODNIK

Kod sopstvenog (nedopiranog) poluprovodnika, koji se nalazi na nekoj temperaturi $T \neq 0K$, mehanizam termalne generacije dovede do prelaska određenog broja elektrona iz valentne u provodnu zonu. Jasno je da je u ovim uslovima koncentracija elektrona u provodnoj zoni jednaka koncentraciji šupljina u valentnoj zoni. Pretpostavimo da su ispunjeni uslovi potpune nedegeneracije, odnosno da se Fermijev nivo nalazi u energetskom procepu, i tada se koncentracije elektrona i šupljina mogu izraziti formulama:

$$n = B_c e^{\eta} \quad (1.233a)$$

$$p = B_v e^{\eta'} = B_v e^{-\eta} e^{\frac{E_g}{k_B T}} \quad (1.233b)$$

Kao što je objašnjeno, poluprovodnik je električno neutralan i ove koncentracije su međusobno jednake

$$n = p = n_i \quad (1.234)$$

a njihova vrednost zove se **sopstvena** (ili intrinzična, engl., intrinsic) **koncentracija** i obeležava se sa n_i . Izjednačavanjem izraza (1.233a) i (1.233b) dobijamo

$$B_c e^{\eta} = B_v e^{\eta'} \quad (1.235a)$$

odnosno,

$$\begin{aligned} B_c e^{\frac{E_F}{k_B T}} &= B_v e^{\frac{E_F'}{k_B T}} \\ \Rightarrow \frac{B_v}{B_c} &= e^{\frac{2E_F + E_g}{k_B T}} \quad (1.236) \\ \Rightarrow \left(\frac{m_p^*}{m_{g_e}^*} \right)^{3/2} &= e^{\frac{2E_F + E_g}{k_B T}} \end{aligned}$$

Odavde se direktno može izraziti vrednost energije Fermijevog nivoa u posmatranom slučaju

$$E_{F_i} = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_p^*}{m_{g_e}^*} \right) \quad (1.237)$$

gde indeks i služi da naglasi da se radi o sopstvenom poluprovodniku. Očigledno je da se na temperaturi apsolutne nule Fermijev nivo "nalazi" na sredini energetskog procepa i da od temperature zavisi na približno linearan način (s obzirom da i efektivne mase u principu zavise od temperature). Međutim, i na sobnoj temperaturi vrednost termalne energije je prilično mala, $k_B T \approx 26$ meV, a odnos efektivne mase za elektrone i šupljine je reda veličine 10, tako da ceo drugi sabirak u izrazu (1.237) ima vrednost koja je reda par desetina meV (npr. ~ 20 meV). S druge strane, veličina energetskog procepa kod većine standardnih poluprovodnika (Si, Ge, GaAs) je reda veličine 1eV (videti Tabelu 1), tako da se drugi sabirak čak i na sobnoj temperaturi praktično može zanemariti u odnosu na prvi³. Dakle, položaj Fermijevog nivoa kod sopstvenog poluprovodnika približno odgovara sredini između dna provodne zone i vrha valentne zone:

$$E_{F_i} \approx -\frac{E_g}{2} \quad (1.238)$$

kao što je ilustrovano na Sl. 1.20.



Sl. 1.20 Položaj Fermijevog nivoa kod sopstvenog poluprovodnika

Vrednost sopstvene koncentracije $n = p = n_i$, pod pretpostavkom da je poluprovodnik idealno čist (bez dodatka bilo kakvih primesa) i totalno nedegenerisan, izračunavamo množenjem izraza (1.205a) i (1.205b):

$$n_i^2 = B_c B_v e^{\eta + \eta'} = B_c B_v e^{\frac{E_g}{k_B T}} \quad (1.239)$$

³ Ovo je opravdano prilikom izračunavanja E_{F_i} ; međutim ako se u nekoj relaciji pojavljuje izraz tipa $e^{E_{F_i}/k_B T}$ tada se drugi sabirak ne sme automatski zanemariti.

gde se podrazumeva da je $E_g = E_c - E_v > 0$. Odavde sledi:

$$n_i = \sqrt{B_c B_v} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \quad (1.240)$$

odnosno,

$$n_i = 2 \left(\frac{2\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} (m_p^* m_n^*)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \quad (1.241)$$

Zavisnost sopstvene koncentracije od temperature je dominantno određena poslednjim činiocem, dakle približno eksponencijalno raste sa porastom temperature. S druge strane pošto se sopstvena koncentracija poluprovodnika može ekperimentalno izmeriti, na osnovu toga, preko izraza (1.241) moguće je odrediti veličinu energetske procepa na datoj temperaturi. Vrednosti energetske procepa, sopstvene koncentracije i efektivne mase elektrona za nekoliko najpoznatijih poluprovodnika prikazane su u Tabeli 1.1.

Iz izraza (1.241) vidi se da je sopstvena koncentracija proporcionalna sa $\exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$. Vrednosti energetske procepa za većinu poluprovodnika su reda 1 eV. Ako posmatramo vrednost $E_g = 1$ eV na određenoj temperaturi, tada će promena E_g od svega 1% prouzrokovati promenu n_i od ≈21% na sobnoj temperaturi, odnosno 210% (≈ dva puta veća vrednost) na temperaturi tečnog azota (77 K). Energetski procep se može odrediti sa konačnom tačnošću, pa je gornje izlaganje ujedno i objašnjenje zašto se podaci o sopstvenoj koncentraciji pojedinih poluprovodnika u literaturi značajno razlikuju.

Poluprovodnik	Energetski procep na 300 K, [eV]	Prividna masa gustine stanja $m_{g_n}^*$, [m_0]	Sopstvena koncentracija n_i na 300 K, [cm^{-3}]	Relativna dielektrična konstanta
Ge	0.66	0.55	$2.33 \cdot 10^{13}$	16
Si	1.12	1.08	$1.5 \cdot 10^{10}$	11.9
GaAs	1.42	0.067	$1.84 \cdot 10^6$	12.9

Tabela 1.1 Vrednosti odabranih parametara za Ge, Si i GaAs,⁴

Izvešćemo takođe i izraz za sopstvenu koncentraciju u slučaju kada je valentna zona opisana složenijom zavisnošću od one date izrazom (1.219). Prema takozvanom $\vec{k} \cdot \vec{p}$ modelu, zavisnost energije šupljina od talasnog vektora u blizini ekstremuma valentne zone u tački $\vec{k} = 0$, data je sledećom formulom:

⁴ Vrednosti parametara su preuzete iz 1) S.M.Sze and Kwok. K. Ng, "Physics of semiconductor devices", 3rd Ed., Wiley-Interscience, 2006. i 2) J. Singh, "Semiconductor Devices: basic principles", Wiley, 2000.

$$E_p(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\gamma_1 k^2 \pm \sqrt{4\gamma_2^2 k^4 + 12(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)} \right) \quad (1.242)$$

gde se znak "+" odnosi na lake a znak "-" na teške šupljine (videti Sl. 1.19). Problem je najjednostavnije rešavati u sfernom koordinatnom sistemu pa ćemo zameniti $k_x = k \sin \theta \cos \varphi$, $k_y = k \sin \theta \sin \varphi$, $k_z = k \cos \theta$, gde $\theta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi]$, $k \in [0, \infty)$. Na osnovu toga dobijamo:

$$E_{p1,2}(k, \theta, \varphi) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(\gamma_1 \pm 2\gamma_2 \sqrt{1 + \Omega(\sin^4 \theta \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^2 \theta \cos^2 \theta)} \right) \quad (1.243)$$

gde je $\Omega = 3(\gamma_3^2 / \gamma_2^2 - 1)$. Koncentraciju šupljina u jednoj grani valentne zone (za lake ili teške šupljine) izračunavamo na osnovu izraza

$$p_1 = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(\vec{k})} f_{FD}(\vec{k}) d\vec{k}_x d\vec{k}_y d\vec{k}_z \quad (1.244)$$

Pretpostavljajući slučaj totalne nedegeneracije $f_{FD}(\vec{k}) \approx e^{-\frac{E_p - E_i(\vec{k})}{k_B T}}$, gde je $E_p = -E_g - E_F$, a E_F Fermi-jev nivo izražen u odnosu na dno provodne zone, i prelazeći na sferne koordinate, dobijamo

$$p_1 = \frac{1}{4\pi^3} e^{-\frac{E_p}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} e^{-\frac{E_i(k, \theta, \varphi)}{k_B T}} k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi \quad (1.245)$$

Prema tome, ukupna koncentracija šupljina u valentnoj zoni po ovom modelu iznosi:

$$\begin{aligned} p &= p_1 + p_2 \\ &= \frac{1}{4\pi^3} e^{-\frac{E_p}{k_B T}} \left[\int_{k=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} e^{-\frac{E_i(k, \theta, \varphi)}{k_B T}} k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi + \int_{k=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} e^{-\frac{E_2(k, \theta, \varphi)}{k_B T}} k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi \right] \\ &= \frac{1}{4\pi^3} e^{-\frac{E_p}{k_B T}} [I_1 + I_2] \end{aligned} \quad (1.246)$$

Određićemo prvo vrednost integrala I_1 , zamenjivanjem zavisnosti energije od talasnog vektora u formi (1.243):

$$I_1 = \int_{k=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 k_B T} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \Phi(\theta, \varphi)} k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi \quad (1.246)$$

gde je $\Phi(\theta, \varphi) = \left[\gamma_1 + 2\gamma_2 \sqrt{1 + \Omega(\sin^4 \theta \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^2 \theta \cos^2 \theta)} \right] / (\gamma_1 + 2\gamma_2)$. Uzimajući u obzir da je $\int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^2 dx = \sqrt{\pi} / 4a^{3/2}$, $a > 0$, integracija po k će dati:

$$I_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{2m_0 k_B T}{\hbar^2 (\gamma_1 + 2\gamma_2)} \right)^{3/2} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{\sin \theta d\theta d\varphi}{[\Phi(\theta, \varphi)]^{3/2}} \quad (1.248)$$

Uvešćemo oznaku $m_{LH} \equiv m_0 / (\gamma_1 + 2\gamma_2)$ i zameniti rezultat (1.248) u (1.245), što daje

$$p_1 = 2 \left(\frac{m_{LH} k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} R_1 \quad (1.249a)$$

$$R_1 = \frac{1}{4\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{\sin \theta d\theta d\varphi}{[\Phi(\theta, \varphi)]^{3/2}} \quad (1.249b)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)^{3/2} \sin \theta d\theta d\varphi}{\left[\gamma_1 + 2\gamma_2 \sqrt{1 + \Omega(\sin^4 \theta \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^2 \theta \cos^2 \theta)} \right]^{3/2}}$$

Na sličan način dolazimo do izraza za koncentraciju u drugoj grani:

$$p_1 = 2 \left(\frac{m_{HH} k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} R_2 \quad (1.250a)$$

$$R_2 = \frac{1}{4\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)^{3/2} \sin \theta d\theta d\varphi}{\left[\gamma_1 - 2\gamma_2 \sqrt{1 + \Omega(\sin^4 \theta \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^2 \theta \cos^2 \theta)} \right]^{3/2}} \quad (1.250b)$$

gde je $m_{HH} \equiv m_0 / (\gamma_1 - 2\gamma_2)$. Ukupna koncentracija šupljina prema tome iznosi:

$$p = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{-E_g - E_F}{k_B T}} \left[(m_{LH})^{3/2} R_1 + (m_{HH})^{3/2} R_2 \right] \quad (1.251)$$

dok je koncentracija elektrona jednaka

$$n = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_{*c})^{3/2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} \quad (1.252)$$

Sopstvena koncentracija dobija se kao $n_i = \sqrt{np}$, što daje

$$n_i = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_{*c})^{3/4} \sqrt{(m_{LH})^{3/2} R_1 + (m_{HH})^{3/2} R_2} e^{\frac{E_F}{2k_B T}} \quad (1.253)$$

Ukoliko je $\gamma_2 = \gamma_3$, odnosno $\Omega = 0$, sledi $R_1 = R_2 = 1$, a izraz za sopstvenu koncentraciju dobija uobičajeni oblik. Interesantno je uporediti rezultate dobijene primenom izraza (1.253) sa rezultatima koji se dobijaju korišćenjem obične parabolične zavisnosti za valentnu zonu. Posmatrajmo količnik:

$$\Theta = \frac{n_i}{n_0} = \frac{\sqrt{(m_{LH})^{3/2} R_1 + (m_{HH})^{3/2} R_2}}{\sqrt{(m_{LH})^{3/2} + (m_{HH})^{3/2}}} \quad (1.254)$$

gde je n_i određeno na osnovu (1.253), a $n_0 = n_i (R_1 = R_2 = 1)$. Vrednosti Θ za neke od najčešće korišćenih poluprovodnika date su u Tabeli 1.2.

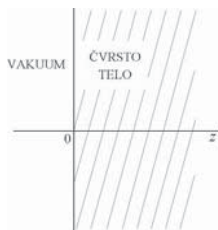
Poluprovodnik	Ge	Si	GaAs	AlAs	InAs	AlP	InP	GaSb	AlSb	InSb
Θ	1.44	1.34	1.47	1.38	1.32	1.34	1.37	1.55	1.37	1.38

Tabela 1.2 Vrednosti konstante Θ definisane izrazom (1.254) za nekoliko poluprovodnika

1.6 ČVRSTO TELO KONAČNIH DIMENZIJA. POVRŠINSKA STANJA

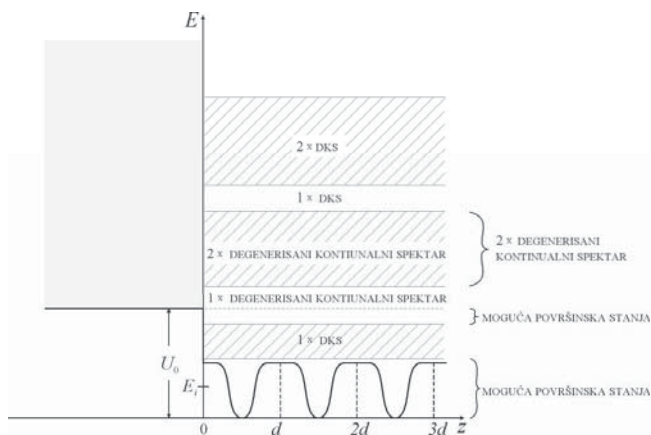
U dosadašnjim razmatranjima pretpostavljali smo da je čvrsto telo idealno, beskonačnih dimenzija i da je kristalna rešetka strogo periodična. Pokazuje se da bi svako narušavanje periodičnosti rezultovalo pojavom diskretnih stanja u zabranjenim zonama. Mi ćemo ovde analizirati samo jedan specifičan slučaj: polubeskonačni kristal – polubeskonačni vakuum.

Jasno je da u realnosti čvrsto telo ne može biti beskonačno i da je na graničnoj površini periodičnost narušena pa se moraju koristiti drugačiji granični uslovi. Razmotrićemo uticaj granične površine na elektronsku strukturu. Posmatraćemo čvrsto telo sa jednom graničnom površinom u ravni $z=0$, tj. "polubeskonačno čvrsto telo", kao što je prikazano na Sl. 1.21. Smatramo da se ovakvo čvrsto telo graniči sa vakuumom (leva polovina prostora, za vrednosti koordinate $z < 0$). Pretpostavićemo da se daleko od razdvojne površine (velike vrednosti $z > 0$) uticaj te površine ne oseća i da su u važnosti periodični granični uslovi, a naravno da je u okolini ravni $z=0$ situacija bitno izmenjena i mora se detaljnije razmatrati.



SI. 1.21 Polubeskonačno čvrsto telo

Ovakav model polubeskonačnog čvrstog tela kao što je prikazan na Sl. 1.21, analizirao je I. E. Tamm 1932. godine, polazeći od Kronig-Penney-jevog pravougaonog modela (videti probleme 1.1-1.5) i prikazao uticaj granične površine na elektronska stanja. Kao što ćemo pokazati, uticaj površine ogleda se u egzistenciji dodatnih diskretnih stanja u okviru određenih zabranjenih zona idealnog kristala. Potencijalnu energiju polubeskonačnog kristala šematski ćemo prikazati kao na Sl. 1.22.



SI. 1.22 Energetski spektar polubeskonačnog čvrstog tela

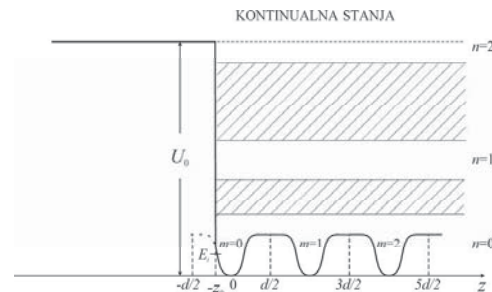
Pretpostavljamo da je daleko od površine energetski spektar elektrona zonski, sa istim položajem dozvoljenih i zabranjenih zona kao kod idealnog beskonačnog kristala iz ranijih razmatranja. Vakuum opisujemo konstantnom vrednošću potencijalne energije U_0 , a rezultujući spektar energija je ilustrovan na Sl. 1.22.

1.6.1 TAMOVSKA STANJA

Da bismo odredili dozvoljene energije elektrona u sistemu vakuum – polubeskonačni kristal, rešavaćemo standardnu Schrödinger-ovu jednačinu:

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U_0] \Psi(z) = 0 \quad (1.255)$$

Bitno je napomenuti da ćemo se u daljem razmatranju ograničiti isključivo na vrednosti energija ispod vakuumskeg nivoa, tj. $E < U_0$, i to na one oblasti energija koje odgovaraju zabranjenim zonama. Tretiranje svih oblasti je veoma složeno i izlazi iz okvira ovog teksta. Deo spektra koji razmatramo, u malo opštijoj formi od one sa Sl. 1.22, prikazan je na slici 1.23, gde sada smatramo da se granična površina nalazi u proizvoljnoj ravni $z = -z_0$, kao i da u se posmatranom opsegu energija može nalaziti više zabranjenih zona u zavisnosti od parametara strukture.



SI. 1.23 Profil potencijalne energije u modelu polubeskonačnog čvrstog tela za oblast energija ispod vakuumskeg nivoa; n je redni broj zabranjene zone, a m redni broj periode

Pretpostavimo u prvom trenutku da je 1D kristal idealno periodičan na celom domenu $(-\infty, +\infty)$. Tada je u opsegu $z \in [-d/2, d/2]$ talasna funkcija data izrazom (1.8):

$$\Psi(z) = Ay_p(z) + By_n(z) \quad (1.256)$$

Veza između konstanti A i B je prema (1.12a) oblika

$$Ay_p(d/2) + By_n(d/2) = e^{i\mu d} [Ay_p(d/2) - By_n(d/2)] \quad (1.257)$$

vodeći računa da je u zabranjenim zonama $k = \frac{n\pi}{d} + ik_j$, ($k_j > 0$), $n = 0, 1, 2, \dots$, kao što je već pokazano. Imajući u vidu prethodne izraze, talasna funkcija u domenu $z \in [-d/2, d/2]$ se može napisati u formi:

$$\Psi(z) = A \left[y_p(z) - \frac{y_n(d/2)}{y_n(d/2)} \cdot \left[\frac{\tanh\left(\frac{k_j d}{2}\right)}{\coth\left(\frac{k_j d}{2}\right)} \right] y_n(z) \right] \quad (1.258)$$

gde je $\left[\frac{\tanh\left(\frac{k_j d}{2}\right)}{\coth\left(\frac{k_j d}{2}\right)} \right]$ u parnim zabranjenim zonama ($n = 0, 2, 4, \dots$) jednako $\tanh\left(\frac{k_j d}{2}\right)$, a u neparnim zabranjenim zonama postaje $\coth\left(\frac{k_j d}{2}\right)$, dok je A kompleksna konstanta.

“Uključimo” sada vakuum u oblasti $z < -z_0$, ($z_0 > 0$). U tački $z = -z_0$ veličina logaritamskog izvoda talasne funkcije mora biti neprekidna

$$\frac{\Psi'(z)}{\Psi(z)} \Big|_{z=-z_0} = \frac{\Psi'(z)}{\Psi(z)} \Big|_{z=-z_0} \quad (1.259)$$

U oblasti $z < -z_0$ talasna funkcija je oblika

$$\Psi(z) = Ce^{kz}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0 - E)}, \quad E < U_0 \quad (1.260)$$

gde je C kompleksna konstanta. Uslov neprekidnosti logaritamskog izvoda (1.259) sada poprima oblik:

$$\kappa = - \frac{y_p'(z_0) + \frac{y_n(d/2)}{y_n(d/2)} \cdot (c) \tanh\left(\frac{k_j d}{2}\right) y_n'(z_0)}{y_p(z_0) + \frac{y_n(d/2)}{y_n(d/2)} \cdot (c) \tanh\left(\frac{k_j d}{2}\right) y_n(z_0)} \quad (1.261)$$

S druge strane, već je pokazano (relacija (1.36)) da je:

$$(-1)^n \cosh(k_j d) = f(E) \quad (1.262)$$

Pošto je $\tanh(x/2) = [(\cosh x - 1) / (\cosh x + 1)]^{1/2}$ za $x > 0$, jednostavno se dolazi do izraza:

$$\left[\frac{\tanh\left(\frac{k_j d}{2}\right)}{\coth\left(\frac{k_j d}{2}\right)} \right] = \sqrt{\frac{f(E) - 1}{f(E) + 1}} = F(E) \quad (1.263)$$

Kombinujući (1.261) i (1.263) dolazimo do transcendentne jednačine za energiju diskretnih stanja:

$$\kappa(E) = - \frac{y_p'(z_0, E) + \frac{y_n(d/2, E)}{y_n(d/2, E)} \sqrt{\frac{f(E) - 1}{f(E) + 1}} \cdot y_n'(z_0, E)}{y_p(z_0, E) + \frac{y_n(d/2, E)}{y_n(d/2, E)} \sqrt{\frac{f(E) - 1}{f(E) + 1}} \cdot y_n(z_0, E)} \quad (1.264)$$

Ovu jednačinu treba rešavati za sve energije $E \in [0, U_0]$, osim za energije koje pripadaju dozvoljenim zonama. Neka su rešenja jednačine (1.264) energije $E_0, E_1, \dots, E_i, \dots, E_{\max}$. Odredimo sada talasne funkcije koje odgovaraju energijama E_i . Veza između konstanti A i C dobija se iz uslova neprekidnosti talasne funkcije u $z = -z_0$:

$$Ce^{-\kappa z_0} = A \left[y_p(z_0) + \frac{y_n(d/2)}{y_n(d/2)} F(E_i) y_n(z_0) \right] \quad (1.265a)$$

$$\Rightarrow C = Ae^{\kappa z_0} \left[y_p(z_0, E_i) + \frac{y_n(d/2, E_i)}{y_n(d/2, E_i)} F(E_i) y_n(z_0, E_i) \right] = Ag(E_i) \quad (1.265b)$$

Konačno, talasna funkcija se može napisati u obliku:

$$\Psi(z) = \begin{cases} Ag(E_i) e^{kz}, & z < -z_0 \\ A \left[y_p(z - md, E_i) - \frac{y_n(d/2, E_i)}{y_n(d/2, E_i)} F(E_i) y_n(z - md, E_i) \right] e^{imz} e^{-k_j md}, & z \geq -z_0 \end{cases} \quad (1.266)$$

pri čemu je m redni broj periode ($m = 0, 1, 2, \dots$), kao što je prikazano na Sl. 1.23. Konstanta A se dobija na osnovu uobičajenog uslova normiranja:

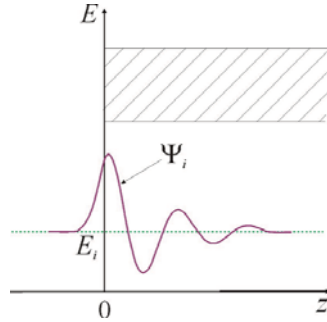
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(z)|^2 dz = 1 \quad (1.267)$$

Analizirajmo ponašanje talasne funkcije u oblasti $z > -z_0$. Kao što se vidi iz izraza (1.266)

$$\Psi(z) \sim p(z) (e^{-k_j d})^m \quad (1.268)$$

gde je $p(z)$ periodična funkcija sa periodom d . Faktor $(e^{-k_j d})^m$ određuje opadanje talasne funkcije u periodi sa rednim brojem m u odnosu na početnu periodu ($m = 0$). Jasno je da kada $z \rightarrow +\infty$ i $m \rightarrow +\infty$, pa i $(e^{-k_j d})^m \rightarrow 0$, što znači da je talasna funkcija kvadratno integrabilna i da odgovara diskretnom stanju.

Dakle, kao rezultat postojanja granične površine čvrstog tela (uključivanja vakuuma u tački $z = -z_0$) dolazi do promene u energetskom spektru elektrona i pojave dodatnih vezanih stanja u okviru zabranjenih zona, gde broj i raspored tih stanja zavisi od oblika posmatranog periodičnog potencijala. Talasne funkcije ovih stanja su lokalizovane u okolini granične površine (kao što se ilustrirano na Sl. 1.24 za slučaj $z_0 = 0$), a sama stanja nose naziv **površinska ili tamovska stanja** (engl., surface states).



Sl. 1.24 Talasna funkcija koja odgovara površinskom stanju

Kao što je već objašnjeno, stepen lokalizacije stanja u okolini ravni $z = 0$ na osnovu (1.266) zavisi od veličine parametara κ i k_i koji diktiraju brzinu eksponencijalnog opadanja talasne funkcije u vakuumu, odnosno brzinu amortizacije oscilujuće funkcije u čvrstom telu, respektivno.

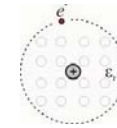
Treba naglasiti da do pojave diskretnih stanja u zabranjenim zonama dolazi uvek kada je narušena idealna periodičnost kristalne strukture (odnosno potencijalne energije), a da su talasne funkcije takvih stanja lokalizovane u okolini “nesavršenosti” koja je narušila periodičnost.

1.7 PRIMESNI POLUPROVODNIK

Prilikom analize sopstvenog poluprovodnika, pokazali smo kako se izračunava sopstvena koncentracija i utvrdili formu njene zavisnosti od spoljašnje temperature. Numeričke vrednosti pokazuju da je ova koncentracija prilično mala (nekoliko redova veličine manja nego kod metala) i vrlo osetljiva na promene temperature. U cilju povećanja koncentracije elektrona u

provodnoj zoni i šupljina u valentnoj zoni poluprovodniku se dodaju odgovarajuće primese. Polazi se od idealnog (čistog) materijala, a primesni atomi se ugrađuju u kristalnu rešetku u međuprostor između atoma tog osnovnog materijala, narušavajući na taj način idealnost kristalne strukture. Koncentracija primesnih atoma je veoma mala u poređenju sa koncentracijom atoma osnovnog poluprovodnika ali se pomoću njih postiže značajno povećanje koncentracije elektrona ili šupljina, u zavisnosti od toga koji tip primesa se koristi.

Pretpostavimo da je osnovni materijal poluprovodnik koji pripada IV grupi periodnog sistema (Si, Ge,...), a da su atomi primesa koje ubacujemo petovalentni (npr. P, As, Sb). Dakle, primesni atomi imaju u svojoj poslednjih ljusci jedan (valentni) elektroni više u odnosu na osnovne atome i ovaj tip primesa nazivamo **donorskim primesama**. Atom primese modelovaćemo po uzoru na model atoma vodonika (videti Sl. 1.25), dok ćemo sopstveni poluprovodnik u kome se ta primesa nalazi tretirati kao kontinuum.



Sl. 1.25 Elektron u atomu primese koji se kreće u sredini koju čini osnovni poluprovodnik

Kod ovakvog modela, dodatni elektron atoma primese kreće se u Coulomb-ovom potencijalu oblika $V(r) = e / (4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r)$, (potencijalna energija iznosi $U(r) = -e^2 / (4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r)$, $e > 0$), gde je ϵ_r relativna dielektrična konstanta osnovnog materijala, a r je radialna koordinata. Pretpostavili smo da važi aproksimacija prema kojoj je “poluprečnik orbite” ovog elektrona (Bohr-ov radijus prema modelu vodonikovog atoma) mnogo veći od međuatomskog rastojanja u kristalnoj rešetci osnovnog materijala i da se zbog toga može primeniti kontinualna aproksimacija osnovnog poluprovodnika preko dielektrične konstante $\epsilon_r\epsilon_0$. Energetski nivoi elektrona u atomu primese se prema Bohr-ovom modelu atoma mogu izraziti kao:

$$E_n = -\frac{13.6eV}{n^2} \frac{(m^*/m_0)}{\epsilon_r^2} \quad (1.269)$$

gde je m^* efektivna masa za elektrone u osnovnom poluprovodniku, a n je glavni kvantni broj. Referentni nivo za energiju je u ovom slučaju dno provodne zone osnovnog materijala, pa izraz (1.269) predstavlja energiju koja je potrebna da bi se primesni elektron “oslobodio”, odnosno prešao u provodnu zonu.

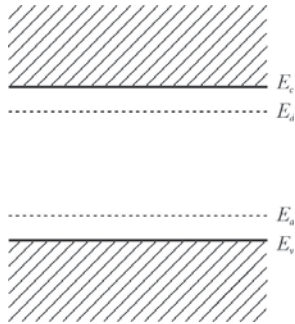
Bohr-ov radijus posmatranog elektrona izračunavamo po formuli

$$r_n = r_0 \frac{\epsilon_r}{(m^*/m_0)} \quad (1.270)$$

gde je $r_0 \approx 0.5\text{\AA}$ radijus osnovnog nivoa u atomu vodonika. Primera radi, relativna dielektrična konstanta GaAs iznosi $\epsilon_r \approx 13$, a efektivna masa $(m^*/m_0) \approx 0.067$ (videti Tabelu 1.1), pa je drugi činilac u izrazu (1.270) veličine ≈ 200 , odnosno Bohr-ov radijus $r_n \approx 100\text{\AA}$, što je mnogo veće od međuatomskog rastojanja $d \approx 6\text{\AA}$. Prema tome, potpuno je opravdano korišćenje aproksimacije prema kojoj se osnovni poluprovodnik tretira kao kontinuum. Što se tiče energije izračunate na osnovu (1.269), numerička vrednost faktora $(m^*/m_0)/\epsilon_r^2$ za većinu posmatranih poluprovodnika iznosi $\sim 10^{-3}$, pa je energija potrebna za jonizovanje atoma primese prilično mala (desetak meV, što je manje od termalne energije $k_B T$ na sobnoj temperaturi). Dakle, svi atomi primese su praktično jonizovani već na sobnoj temperaturi i na taj način smo kontrolisano povećali koncentraciju elektrona u provodnoj zoni.

S druge strane, osnovni materijal možemo dopirati i trovalentnim primesama (kao što su Ga, B,...), koje imaju jedan valentni elektron manje od atoma osnovnog materijala i ovakve primese nazivamo **akceptorskim**. Lako se može pokazati da je u tom slučaju potrebno dodati malu energiju elektronu iz valentne zone (manju od termalne energije), kako bi on napustio valentnu zonu i prešao na atom primese, ostavljajući za sobom prazno mesto, tj. slobodnu šupljinu, u valentnoj zoni. Pošto su na sobnoj temperaturi svi atomi akceptora jonizovani (primili su elektron), na ovaj način smo kontrolisano povećali koncentraciju šupljina u valentnoj zoni.

Prethodna razmatranja odnose se isključivo na tzv. **plitke primese** (engl., shallow impurities), gde se prisustvo primesnih atoma modeluje jednim nivoom koji se nalazi u blizini odgovarajuće zone, kao što je prikazano na Sl. 1.26. Slučaj dubokih primesa (engl., deep impurities), gde su odgovarajući primesni nivoi daleko od dna/vrha provodne/valentne zone nećemo razmatrati.



Sl. 1.26 Energetski dijagram dopiranog poluprovodnika

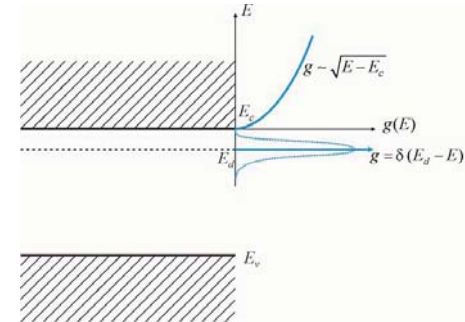
Donorski atomi predstavljaju se jednim diskretnim nivoom koji se naziva donorski nivo (E_d) i nalazi se nekoliko desetina meV ispod dna provodne zone. S druge strane, akceptorske atome modelujemo akceptorskim nivoom (E_a) koji se nalazi u energetskom procepu, nekoliko desetina meV iznad vrha valentne zone. Ovakva reprezentacija primesa diskretnim stanjima dozvoljena je u slučajevima kada je dopiranje umereno tj. kada je koncentracija primesa mnogo manja od koncentracije atoma osnovnog poluprovodnika. Ako bi dopiranje bilo preveliko i ove koncentracije uporedive, tada se atomi primese ne bi smeli tretirati diskretno već bi formirali sopstveni zonski spektar i analiza takve situacije bila bi veoma složena. U ovom tekstu razmatraćemo isključivo plitke primese "normalne" koncentracije. U tom slučaju, funkcija raspodele elektrona na donorskom i akceptorskom nivou je Fermi-Dirac-ovog tipa i glasi:

$$f_{FD}(E_i) = \frac{1}{\frac{E_i - E_i}{k_B T} + 1}, \quad i = d, a \quad (1.271)$$

gde je g_i faktor spinske degeneracije čije su vrednosti:

$$g_i = \begin{cases} 2, & i = d \\ 1/2, & i = a \end{cases} \quad (1.272)$$

Gustina stanja na donorskom i akceptorskom nivou opisuje se Dirac-ovom δ funkcijom, s obzirom da se radi o diskretnim stanjima, $g(E) = \delta(E_i - E)$, kao što je prikazano na Sl. 1.27. za primer donorskih primesa. Gustina stanja za elektrone u provodnoj zoni opisana je izrazom (1.137). Tačkasto isprekidana linija na Sl. 1.27 odgovara situaciji kada je koncentracija donora vrlo velika i tada gustina stanja za elektrone na donorskom nivou značajno odstupa od δ funkcije.



Sl. 1.27 Gustina stanja kod poluprovodnika dopiranog donorima. Tačkasta linija ilustruje slučaj vrlo jakog dopiranja

Kao što je već navedeno, donorske ili akceptorske primese biraju se tako da formiraju nivo neposredno ispod dna provodne, odnosno iznad vrha valentne zone, i tada su na sobnoj temperaturi sve primese jonizovane. Energija jonizacije primesa je značajno manja od energije jonizacije atoma osnovnog poluprovodnika (kao što se vidi sa Sl. 1.26). Koncentracija primesa se bira tako da značajno prevazilazi sopstvenu koncentraciju osnovnog poluprovodnika n_i na sobnoj temperaturi, inače se gubi efekat kontrolisanog povećanja koncentracije slobodnih nosilaca. S druge strane, mora biti dovoljno manja od koncentracije atoma osnovnog materijala da se ne bi poremetila osnovna kristalna rešetka što bi dovelo do formiranja komplikovanog zonskog spektra. Optimalan izbor koncentracije dopanata vrši se posle pažljive analize parametara osnovnog poluprovodnika i primesnih atoma.

1.7.1 KONCENTRACIJA NOSILACA U PRIMESNOM POLUPROVODNIKU

Posmatraćemo poluprovodnik dopiran donorima koncentracije N_D i akceptorima koncentracije P_A , smatrajući da je raspodela ovih primesa homogena. Atomi donora formiraju donorski nivo E_d u blizini dna provodne zone, a akceptorski atomi daju nivo E_a neposredno iznad vrha valentne zone. Odredićemo koncentraciju slobodnih nosilaca (elektrona i šupljina) u različitim temperaturnim opsezima u funkciji parametara osnovnog poluprovodnika i korišćenih dopanata. Uvodimo sledeće oznake: n_d predstavlja koncentraciju nejonizovanih donora, odnosno koncentraciju elektrona na donorskom nivou. Izračunava se kao proizvod ukupne koncentracije donorskih primesa (N_D) i verovatnoće da elektron bude (tj. ostane) na donorskom nivou (što daje funkcija raspodele ($f_{FD}(E_d)$)):

$$n_d = N_D f_{FD}(E_d) = \frac{N_D}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - E_F}{k_B T}} + 1} \quad (1.273)$$

Koncentracija jonizovanih donora (koji su pozitivno naelektrisani s obzirom da je jedan elektron otišao u provodnu zonu), prema tome, iznosi:

$$\bar{n}_d = N_D - n_d = \frac{N_D}{2 e^{\frac{E_d - E_F}{k_B T}} + 1} \quad (1.274)$$

Dalje, koncentraciju nejonizovanih akceptora označićemo sa p_a i oni su električno neutralni. Koncentracija jonizovanih akceptora (koji su negativno naelektrisani pošto su primili po jedan elektron iz valentne zone) određuje se kao proizvod ukupne koncentracije akceptorskih primesa (P_A) i verovatnoće da elektron bude na akceptorskom nivou (tj. dođe na taj nivo) ($f_{FD}(E_a)$):

$$\bar{p}_a = P_A f_{FD}(E_a) = \frac{P_A}{2 e^{\frac{E_a - E_F}{k_B T}} + 1} \quad (1.275)$$

pa je koncentracija nejonizovanih akceptora jednaka

$$p_a = P_A - \bar{p}_a = \frac{P_A}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_a - E_F}{k_B T}} + 1} \quad (1.276)$$

Koncentracije elektrona i šupljina izračunavaju se na poznati način:

$$n = B_c e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}} \quad (1.277a)$$

$$p = B_v e^{\frac{-(E_F - E_v) - E_a}{k_B T}} \quad (1.277b)$$

podrazumevajući slučaj potpune nedeGeneracije. S obzirom da je osnovni poluprovodnik bio električno neutralan, a da smo ga dopirali atomima donora i akceptora koji su takođe bili neutralni, ukupna neutralnost mora biti očuvana pa možemo napisati **jednačinu neutralnosti** u formi:

$$n + \bar{p}_a = p + \bar{n}_d \quad (1.278)$$

gde leva strana jednačine predstavlja ukupnu koncentraciju negativnog naelektrisanja, a desna strana ukupnu koncentraciju pozitivnog naelektrisanja. U razvijenom obliku jednačina neutralnosti glasi:

$$B_c e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}} + \frac{P_A}{2 e^{\frac{E_a - E_F}{k_B T}} + 1} = B_v e^{\frac{-(E_F - E_v) + E_a}{k_B T}} + \frac{N}{2 e^{\frac{E_F - E_d}{k_B T}} + 1} \quad (1.279)$$

Ulazni parametri koji zavise od izbora osnovnog poluprovodnika su B_c , B_v i E_g , dok primese određuju vrednosti N_D , P_A , E_d i E_a , a nepoznata veličina je položaj Fermijevog nivoa E_F . Pomoću smene $x = \exp((E_F - E_c) / k_B T)$, prethodni izraz se može prevesti u formu jednačine četvrtog stepena po x čije rešenje je moguće odrediti u analitičkom obliku ali je rezultujući izraz vrlo složen i nepregledan. Zbog toga ćemo izraz (1.279) analizirati u različitim opsezima temperature gde je opravdano uvođenje odgovarajućih aproksimacija i zanemarivanje određenih članova, tako da analitičko rešenje rezultujuće jednačine ima jednostavniju formu. Posmatraćemo sledeće oblasti:

1) oblast vrlo niskih temperatura

Pretpostavimo da u posmatranom poluprovodniku **dominiraju donorske primese** tj. $N_D > P_A$. Tada će se Fermijev nivo nalaziti negde u blizini dna provodne zone. Prema tome, veličina

$(E_c - E_f) < 0$ ima relativno veliku vrednost, pogotovo kada se podeli faktorom $k_B T$ koji je u ovom opsegu prilično mali, pa na osnovu izraza (1.275) možemo smatrati da su svi akseptori jonizovani ($p_c \approx 0$). Dalje, na vrlo niskim temperaturama koje su bliske temperaturi apsolutne nule, koncentracije slobodnih nosilaca određena prema formulama (1.277a) i (1.277b) biće veoma male i možemo ih zanemariti. Dakle, uvodimo sledeće aproksimacije:

$$\begin{aligned} n &\approx 0 \\ p &\approx 0 \\ \bar{p}_a &\approx P_A \end{aligned} \quad (1.280)$$

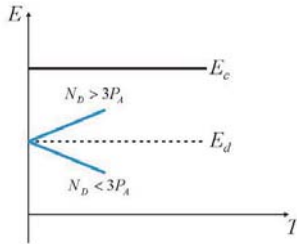
pa se jednačina neutralnosti svodi na formu $\bar{p}_a = P_A = \bar{n}_d$, tj.:

$$P_A = \frac{N_D}{2e^{\frac{E_f - E_d}{k_B T}} + 1} \quad (1.281)$$

odakle se može jednostavno izračunati položaj Fermijevog nivoa:

$$E_f = E_d + k_B T \ln \frac{N_D - P_A}{2P_A} \quad (1.282)$$

Odavde se vidi da se energija Fermijevog nivoa menja linearno sa temperaturom u zavisnosti od odnosa N_D i P_A , kao što je ilustrovano na Sl. 1.28.



Sl. 1.28 Zavisnost Fermijevog nivoa od temperature u oblasti vrlo niskih temperatura, u funkciji odnosa koncentracija donora i akseptora

Koncentracija elektrona se sada može odrediti zamenu (1.282) u (1.277a) i iznosi:

$$n = B_c \frac{N_D - P_A}{2P_A} e^{\frac{E_d - E_c}{k_B T}} = B_c \frac{N_D - P_A}{2P_A} e^{-\frac{W_d}{k_B T}} \quad (1.283)$$

gde je uvedena oznaka $W_d \equiv E_c - E_d > 0$. Iz gornjeg izraza se jasno vidi da koncentracija oštro opada sa smanjenjem temperature, tj. $n \rightarrow 0$ kada $T \rightarrow 0$. Koncentracija šupljina u ovom slučaju data je izrazom:

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{2P_A B_v}{N_D - P_A} e^{\frac{E_c - W_d}{k_B T}} \quad (1.284)$$

Kako je $E_g \gg W_d$, (E_g je reda eV, dok je W_d reda desetak meV), sledi da koncentracija šupljina izrazitiije opada sa smanjenjem temperature od koncentracije elektrona.

2) oblast niskih temperatura

U ovoj oblasti smatramo da je koncentracija elektrona dovoljno porasla tako da se više ne može zanemariti, dok su preostale dve aproksimacije iz izraza (1.270) i dalje na snazi. Pošto su svi akseptorski atomi jonizovani u prethodnoj temperaturskoj oblasti, a koncentracija elektrona se povećala, smatramo da je ispunjeno $n \gg P_A$, ali takođe uzimamo i da je n daleko manje od koncentracije donorskih primesa tj. da većina donora nije jonizovana. Ove pretpostavke uobičajeno se zapisuju na sledeći način:

$$\begin{aligned} p &\approx 0 \\ \bar{p}_a &\approx P_A \\ n &\gg P_A, \quad n \ll (N_D - P_A) \end{aligned} \quad (1.285)$$

U ovim uslovima, jednačina (1.279) dobija oblik:

$$B_c e^{\frac{E_f - E_c}{k_B T}} + P_A = \frac{N_D}{2e^{\frac{E_f - E_d}{k_B T}} + 1} \quad (1.286)$$

Uvođenjem oznaka $x = e^{\frac{E_f - E_c}{k_B T}}$ i $y = e^{\frac{W_d}{k_B T}}$ prethodni izraz svodimo formu:

$$B_c x + P_A = \frac{N_D}{2xy + 1} \quad (1.287)$$

ili u preuređenom obliku:

$$2xy \underbrace{(B_c x + P_A)}_{n \gg P_A} + \underbrace{B_c x + P_A - N_D}_{n \ll (N - P_A)} = 0 \quad (1.288)$$

S obzirom da je $n = B_c x$, uz primenu aproksimacija (1.284), gornja jednačina se može uprostiti, tako da postaje:

$$2x^2 y + P_A - N_D = 0 \quad (1.289)$$

odakle se može izračunati

$$x = \sqrt{\frac{N_D - P_A}{2yB_c}} \quad (1.290)$$

Dalje sledi

$$e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}} = \sqrt{\frac{N_D - P_A}{2B_c}} e^{-\frac{W_d}{2k_B T}} \quad (1.291)$$

odakle se konačno može izraziti vrednost energije Fermijevog nivoa:

$$E_F = E_c - \frac{W_d}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_D - P_A}{2B_c} \quad (1.292)$$

Pošto i parametar B_c zavisi od temperature kao $B_c \sim T^{3/2}$, funkcija $E_F(T)$ će u ovoj temperaturnoj oblasti za slučaj $N_D > 3P_A$ imati maksimum na temperaturi T_{opt} , kao što je prikazano na Sl. 1.30(a). Kada je poznat položaj Fermijevog nivoa može se izračunati i koncentracija elektrona u provodnoj zoni:

$$n = \sqrt{\frac{B_c(N_D - P_A)}{2}} e^{-\frac{W_d}{2k_B T}} \quad (1.293)$$

Koncentracija šupljina određena je izrazom

$$p = B_v \sqrt{\frac{2B_c}{N_D - P_A}} e^{-\frac{E_g - W_d/2}{k_B T}} \quad (1.294)$$

U slučaju $N_D < 3P_A$, što se retko sreće u praksi, $E_F(T)$ je monotono opadajuća funkcija.

3) oblast srednjih i visokih temperatura

U ovoj oblasti temperatura smatramo da su sve primese jonizovane, tj. da su koncentracije

nejonizovanih atoma primesa jednake nuli:

$$\begin{aligned} n_d \approx 0 &\Rightarrow \bar{n}_d \approx N_D \\ p_a \approx 0 &\Rightarrow \bar{p}_a \approx P_A \end{aligned} \quad (1.295)$$

Jednačina neutralnosti sada dobija oblik:

$$n + P_A = p + N_D \quad (1.296)$$

Iskoristićemo činjenicu da su koncentracije elektrona i šupljina povezane sledećom relacijom

$$np = n_i^2 \quad (1.297)$$

koja važi i za dopirani poluprovodnik, kao što se može videti na osnovu izraza (1.277a), (1.277b) i (1.240). Odavde se (1.296) može dalje napisati kao:

$$n + P_A = \frac{n_i^2}{n} + N_D \quad (1.298)$$

Rešavanjem ove kvadratne jednačine dobija se koncentracija elektrona

$$n = \frac{N_D - P_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D - P_A}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (1.299)$$

a prema (1.297) i koncentracija šupljina

$$p = -\frac{N_D - P_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D - P_A}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (1.300)$$

U daljoj analizi razlikovaćemo dva posebna slučaja

a) oblast srednjih temperatura, koje nisu preterano visoke tako da možemo smatrati da sopstvena koncentracija elektrona nije previše porasla i da važi:

$$n_i \ll \frac{N_D - P_A}{2} \quad (1.301)$$

Ako izraz (1.299) razvijemo u Taylor-ov red i primenimo gornju aproksimaciju, dobijamo koncentracije elektrona i šupljina u obliku:

$$n = (N_D - P_A) + \frac{n_i^2}{N_D - P_A} + \dots \approx N_D - P_A \quad (1.302a)$$

$$p = \frac{n_i^2}{n} \approx \frac{n_i^2}{N_D - P_A} \quad (1.302b)$$

Ova oblast temperatura u kojoj važi aproksimacija (1.301) se naziva **oblast iscrpljenja** i to je najvažnija oblast rada dopiranog poluprovodnika. Izjednačavanjem izraza (1.302a) i (1.277a) dolazimo do vrednosti Fermijeveg nivoa:

$$E_F = E_c + k_B T \ln \frac{N_D - P_A}{B_c} \quad (1.303)$$

b) **oblast visokih temperatura**, na kojima je sopstvena koncentracija toliko porasla da je ispunjeno

$$n_i \gg \frac{N_D - P_A}{2} \quad (1.304)$$

Tada se izrazi (1.284) i (1.285) mogu napisati u obliku

$$n = n_i + \frac{N_D - P_A}{2} + \dots \approx n_i \quad (1.305a)$$

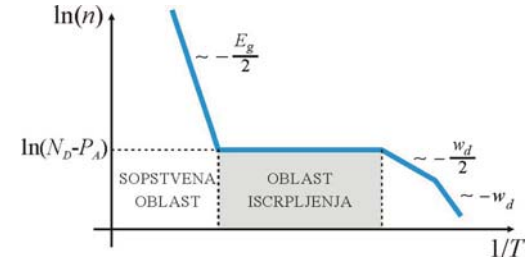
$$p = \frac{n_i^2}{n} \approx n_i \quad (1.305b)$$

Ova oblast temperatura naziva se **sopstvena oblast** i tu su koncentracije elektrona i šupljina praktično jednake sopstvenoj koncentraciji pa korišćenje dopiranog poluprovodnika u ovom opsegu nema mnogo smisla u praksi (s obzirom da se dopirani poluprovodnik ponaša vrlo slično nedopiranom). Fermijev nivo u ovom slučaju ima približno istu vrednost kao kod sopstvenog poluprovodnika

$$E_F \approx E_{F_i} \quad (1.306)$$

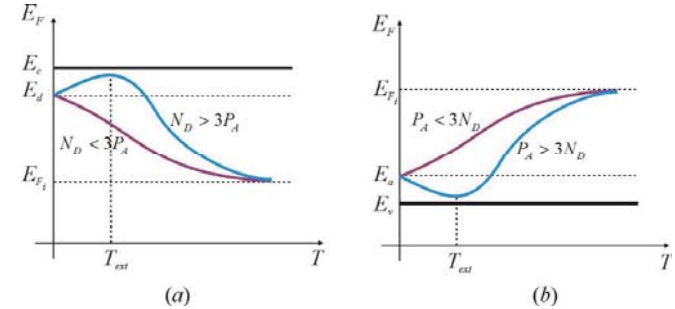
Prelaz iz oblasti iscrpljenja u sopstvenu oblast je jedan od kriterijuma za maksimalnu radnu temperaturu, a za dati osnovni poluprovodnik ova granica određena je veličinom energetskog procepa, pa se tako npr. prvo dostiže za Ge, pa za Si, i konačno za GaAs.

Dijagram zavisnosti koncentracije elektrona od temperature u analiziranim opsezima, skiciran na osnovu izraza (1.283), (1.293), (1.302a) i (1.305a), prikazan je na Sl. 1.29.



Sl. 1.29 Kvalitativni oblik zavisnosti koncentracije elektrona od temperature

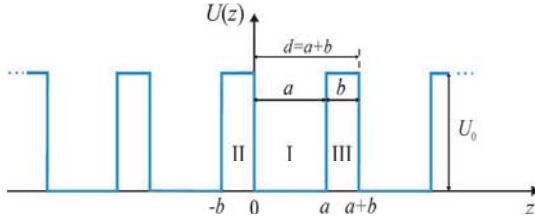
Zavisnost Fermijeveg nivoa od temperature za n-tip poluprovodnika koji smo analizirali (u kome dominiraju donorske primese tj. $N_D > P_A$), data je na Sl. 1.30a). Slična razmatranja za p-tip poluprovodnika ($P_A > N_D$) dovela bi do analognih rezultata koji su ilustrovani na Sl. 1.30b).



Sl. 1.30 Zavisnost Fermijeveg nivoa od temperature (a) za poluprovodnik n-tipa i (b) za poluprovodnik p-tipa

1.8 ODABRANI PROBLEMI

Problem 1.1. Za jednodimenzionalni Kronig-Penney-jev model potencijalne energije, prikazan na Sl. P.1.1, odrediti zavisnost energije elektrona od talasnog vektora (dispersiona relacija).



Sl. P.1.1 Kronig-Penney-jev pravougaoni model (periodične) potencijalne energije

Rešenje: Kronig-Penney-jev model podrazumeva aproksimaciju periodičnog potencijala kristalne rešetke nizom pravougaonih barijera (visine U_0 i širine b) i jama (širina a , čije dno čemu uzeti kao referentni nivo energije). Oblasti jama odgovaraju pozitivno naelektrisanim jonima kristalne rešetke dok barijere reprezentuju rastojanje između jona. Ovakav pojednostavljeni profil potencijala omogućava dobijanje rešenja u analitičkoj formi. Konstanta periodičnosti strukture iznosi $d = a + b$. Problem ćemo rešavati analizirajući Schrödinger-ovu jednačinu (1.2) u različitim oblastima i to prvo za opseg energija u podbarijernom deluju spektra ($E < U_0$). U oblastima I i II, Schrödinger-ova jednačina se svodi na:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad 0 \leq z < a \quad (P.1.1a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + U_0\Psi(z) = E\Psi(z), \quad -b \leq z < 0 \quad (P.1.1b)$$

Opšta rešenja jednačina (P.1.1a) i (P.1.1b) imaju oblik:

$$\Psi(z) = \begin{cases} Ae^{\beta z} + Be^{-\beta z}, & \beta = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}, \quad 0 \leq z < a \\ Ce^{\alpha z} + De^{-\alpha z}, & \alpha = \sqrt{\frac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad -b \leq z < 0 \end{cases} \quad (P.1.2)$$

gde su A, B, C i D integracione konstante. Napišaćemo granične uslove za talasnu funkciju u tački $z = 0$:

$$\Psi(0^+) = \Psi(0^-) \quad (P.1.3a)$$

$$\Psi'(0^+) = \Psi'(0^-) \quad (P.1.3b)$$

Time dolazimo do sledećih jednačina za integracione konstante:

$$C + D = A + B \quad (P.1.4a)$$

$$\alpha(C - D) = i\beta(A - B) \quad (P.1.4b)$$

Dodatne relacije između konstanti dobićemo primenićemo Bloch-ove teoreme (1.43), na osnovu koje rešenje Schrödinger-ove jednačine u periodičnom potencijalu možemo napisati u obliku:

$$\Psi_k(z) = u_k(z)e^{ikz} \quad (P.1.5)$$

gde je funkcija $u_k(z)$ periodična sa periodom d . Na osnovu toga je

$$\Psi_k(z+d) = u_k(z+d)e^{ik(z+d)} = u_k(z)e^{ikz}e^{ikd} = \Psi_k(z)e^{ikd} \quad (P.1.6)$$

Upotrebićemo izraz (P.1.6) da povežemo talasne funkcije u oblastima II ($-b \leq z < 0$) i III ($a \leq z < a+b$):

$$\Psi_{III}(z+d) = \Psi_{II}(z)e^{ikd} \quad (P.1.7a)$$

$$\Psi'_{III}(z+d) = \Psi'_{II}(z)e^{ikd} \quad (P.1.7b)$$

Na osnovu gornjih uslova napisanih u tački $z = -b$ imamo:

$$\Psi(a) = \Psi(-b)e^{ikd} \quad (P.1.7a)$$

$$\Psi'(a) = \Psi'(-b)e^{ikd} \quad (P.1.7b)$$

Granični uslovi za talasnu funkciju u tački $z = a$ glase:

$$\Psi_{III}(a^+) = \Psi_{I}(a^-) \Rightarrow \Psi_{II}(-b)e^{ikd} = \Psi_{I}(a) \quad (P.1.8a)$$

$$\Psi'_{III}(a^+) = \Psi'_{I}(a^-) \Rightarrow \Psi'_{II}(-b)e^{ikd} = \Psi'_{I}(a) \quad (P.1.8b)$$

što zamenom (P.1.2) daje:

$$(Ce^{-ab} + De^{ab})e^{ikd} = Ae^{i\beta a} + Be^{-i\beta a} \quad (P.1.9a)$$

$$(\alpha Ce^{-ab} - \alpha De^{ab})e^{ikd} = Ai\beta e^{i\beta a} - Bi\beta e^{-i\beta a} \quad (P.1.9b)$$

Jednačine (P.1.4a), (P.1.4b), (P.1.9a), (P.1.9b) čine sistem linearnih homogenih jednačina po konstantama A, B, C i D , a determinanta tog sistema ima oblik:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\beta & -i\beta & -\alpha & \alpha \\ e^{i\beta a} & e^{-i\beta a} & -e^{-ab}e^{ikd} & -e^{ab}e^{ikd} \\ i\beta e^{i\beta a} & -i\beta e^{-i\beta a} & -\alpha e^{-ab}e^{ikd} & \alpha e^{ab}e^{ikd} \end{vmatrix} \quad (P.1.10)$$

Da bi sistem jednačina imao netrivialno rešenje gornja determinanta mora biti jednaka nuli. Ovaj uslov, posle sređivanja, daje disperzionu relaciju koja povezuje energiju elektrona i talasni vektor k :

$$\frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sinh(\alpha b) \sin(\beta a) + \cosh(\alpha b) \cos(\beta a) = \cos(kd), \quad E < U_0 \quad (P.1.11)$$

Ovaj izraz predstavlja eksplicitnu formu jednačine (1.27) u podbarijernom delu spektra za pravougaoni (Kronig-Penney-jev) potencijal, čiji je opšti oblik glasio

$$f(E) = \cos(kd), \quad k \in \mathbb{R} \quad (P.1.12)$$

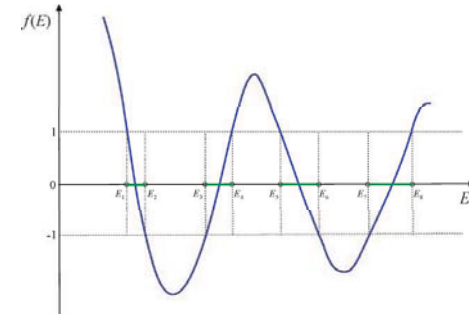
Posmatrajmo sada oblast energija iznad vrhova potencijalnih barijera ($E > U_0$). U tom slučaju veličina α definisana u (P.1.2) postaje imaginarna, pa ćemo je zapisati u sledećoj formi:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}} = i\sqrt{\frac{2m_0(E - U_0)}{\hbar^2}} \equiv i\tilde{\alpha} \quad (P.1.13)$$

gde je $\tilde{\alpha}$ realna i pozitivna veličina. Imajući u vidu da je $\sinh(i\tilde{\alpha}b) = i\sin(\tilde{\alpha}b)$ i $\cosh(i\tilde{\alpha}b) = \cos(\tilde{\alpha}b)$, disperzna relacija (P.1.11) dobija oblik:

$$-\frac{\tilde{\alpha}^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\tilde{\alpha}b) \sin(\beta a) + \cos(\tilde{\alpha}b) \cos(\beta a) = \cos(kd), \quad E > U_0 \quad (P.1.14)$$

Sada je moguće prikazati oblik funkcije $f(E)$ za sve vrednosti energije koji odgovara konkretnim vrednostima parametara a, b i U_0 , kao što je ilustrovano na Sl. P.1.2.



Sl. P.1.2 Opšti oblik funkcije $f(E)$ određen izrazima (P.1.11) i (P.1.14)

Problem 1.2. Elektroni se nalaze u jednodimenzionalnoj kristalnoj rešeci okarakterisanoj funkcijom potencijalne energije $U(z)$, koja je parna periodična funkcija sa periodom d . Poznato je da se talasna funkcija može predstaviti u obliku:

$$\Psi(z) = Ay_p(z) + By_n(z) \quad (P.1.15)$$

gde su $y_p(z)$ i $y_n(z)$ fundamentalno parno i neparno rešenje Schrödinger-ove jednačine koja zadovoljavaju granične uslove

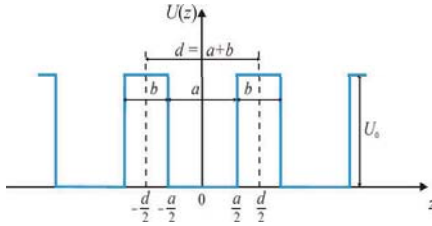
$$y_p(0) = 1, \quad y_p'(0) = 0 \quad (P.1.16a)$$

$$y_n(0) = 0, \quad y_n'(0) = 1 \quad (P.1.16b)$$

kao i da se disperzna relacija iz koje se određuju dozvoljene energije može dobiti u formi:

$$\cos(kd) = y_p\left(\frac{d}{2}\right)y_n\left(\frac{d}{2}\right) + y_p'\left(\frac{d}{2}\right)y_n'\left(\frac{d}{2}\right) = f(E) \quad (P.1.17)$$

gde $k \in \mathbb{R}$. Za specijalan slučaj kada je $U(z)$ pravougana funkcija širine jame a i širine barijere b , a visine barijere U_0 (Kronig-Penney-jev model kao na Sl.P.1.3), odrediti eksplicitno funkcije $y_p(z)$ i $y_n(z)$ u oblasti jedne periode, tretirajući posebno podbarijernu ($E < U_0$) i nadbarijernu oblast energije. Na osnovu toga, i izraza (P.1.17) izvesti disperzionu relaciju za Kronig-Penney-jev model.



Sl. P.1.3 Parna periodična potencijalna energija-pravougaoni model

Rešenje: Posmatraćemo prvo oblast energija u podbarijernom deluju spektra ($E < U_0$). U oviru centralne periode $[-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}]$, Schrödinger-ova jednačina dobija formu:

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + \frac{2m_0E}{\hbar^2}\Psi(z) = 0, \quad z \in (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \quad (P.1.18a)$$

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + \frac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}\Psi(z) = 0, \quad z \in [-\frac{d}{2}, -\frac{a}{2}] \cup [\frac{a}{2}, \frac{d}{2}] \quad (P.1.18b)$$

Rešenje jednačine (P.1.18a) je oblika:

$$\Psi(z) = A \cos(k_w z) + B \sin(k_w z), \quad k_w = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}}, \quad z \in (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \quad (P.1.19)$$

odnosno, parno i neparno rešenje se mogu napisati u formi:

$$y_p(z) = A_1 \cos(k_w z), \quad z \in (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \quad (P.1.20a)$$

$$y_n(z) = B_1 \cos(k_w z), \quad z \in (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \quad (P.1.20b)$$

Primenom fundamentalnih graničnih uslova (P.1.16a) i (P.1.16b) dolazimo do vrednosti konstanti, tj. $A_1 = 1$, $B_1 = 1/k_w$. Zbog parnosti potencijala ograničićemo se samo na analizu desne poluperiode $[0, \frac{d}{2}]$. Rešenja jednačine (P.1.18b) tražićemo u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} y_p(z) &= C_1 \cosh[k_b(z - \frac{a}{2})] + D_1 \sinh[k_b(z - \frac{a}{2})] \\ y_n(z) &= C_2 \cosh[k_b(z - \frac{a}{2})] + D_2 \sinh[k_b(z - \frac{a}{2})] \end{aligned}, \quad k_b = \sqrt{\frac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad z \in [\frac{a}{2}, \frac{d}{2}] \quad (P.1.21)$$

Na osnovu graničnih uslova (neprekidnosti y_p , y_n , y_p' i y_n') u tački $z = \frac{a}{2}$ dolazimo do vrednosti konstanti C_1 , D_1 , C_2 i D_2 , tako da konačni oblik parnog i neparnog rešenja Schrödinger-ove jednačine u desnoj polovini periode glasi:

$$y_p(z) = \begin{cases} \cos(k_w z), & 0 \leq z \leq \frac{a}{2} \\ \cos(k_w \frac{a}{2}) \cosh[k_b(z - \frac{a}{2})] - \frac{k_w}{k_b} \sin(k_w \frac{a}{2}) \sinh[k_b(z - \frac{a}{2})], & \frac{a}{2} \leq z \leq \frac{d}{2} \end{cases} \quad (P.1.22a)$$

$$y_n(z) = \begin{cases} \frac{1}{k_w} \sin(k_w z), & 0 \leq z \leq \frac{a}{2} \\ \frac{1}{k_w} \sin(k_w \frac{a}{2}) \cosh[k_b(z - \frac{a}{2})] + \frac{1}{k_b} \cos(k_w \frac{a}{2}) \sinh[k_b(z - \frac{a}{2})], & \frac{a}{2} \leq z \leq \frac{d}{2} \end{cases} \quad (P.1.22b)$$

Zamenom u izraz (P.1.17) dolazimo do tražene eksplicitne forme disperzione relacije za Kronig-Penney-jev model koja važi u podbarijernoj oblasti energija:

$$\cos(kd) = \cos(k_w a) \cosh(k_b b) + \frac{k_b^2 - k_w^2}{2k_b k_w} \sin(k_w a) \sinh(k_b b) = F(E), \quad E < U_0 \quad (P.1.23)$$

S obzirom na definisanu parnost funkcija y_p i y_n , za levu polovinu periode možemo direktno pisati:

$$y_p(z) = \begin{cases} \cos(k_w z), & -\frac{a}{2} \leq z \leq 0 \\ \cos(k_w \frac{a}{2}) \cosh[k_b(z + \frac{a}{2})] + \frac{k_w}{k_b} \sin(k_w \frac{a}{2}) \sinh[k_b(z + \frac{a}{2})], & -\frac{d}{2} \leq z \leq -\frac{a}{2} \end{cases} \quad (P.1.24a)$$

$$y_n(z) = \begin{cases} \frac{1}{k_w} \sin(k_w z), & -\frac{a}{2} \leq z \leq 0 \\ -\frac{1}{k_w} \sin(k_w \frac{a}{2}) \cosh[k_b(z + \frac{a}{2})] + \frac{1}{k_b} \cos(k_w \frac{a}{2}) \sinh[k_b(z + \frac{a}{2})], & -\frac{d}{2} \leq z \leq -\frac{a}{2} \end{cases} \quad (P.1.24b)$$

U nadbarijernoj oblasti ($E \geq U_0$), slično kao u izrazu (P.1.13) uvešćemo oznaku:

$$k_b^* = \sqrt{\frac{2m_0(E - U_0)}{\hbar^2}} = ik_b \quad (P.1.25)$$

što zamenom u (P.1.23) daje disperzionu relaciju

$$\cos(kd) = \cos(k_w a) \cos(k_b^* b) - \frac{k_b^{*2} + k_w^2}{2k_b^* k_w} \sin(k_w a) \sin(k_b^* b) = F(E), \quad E \geq U_0 \quad (P.1.26)$$

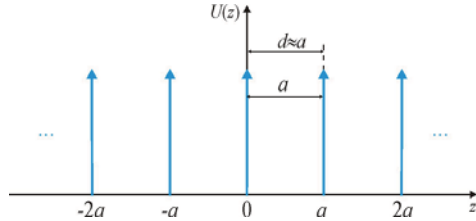
i odgovarajuća rešenja Schrödinger-ove jednačine:

$$y_p(z) = \begin{cases} \cos(k_w \frac{z}{2}) \cos[k_b^*(z + \frac{z}{2})] + \frac{k_w}{k_b^*} \sin(k_w \frac{z}{2}) \sin[k_b^*(z + \frac{z}{2})], & -\frac{d}{2} \leq z \leq -\frac{a}{2} \\ \cos(k_w z), & 0 \leq z \leq \frac{a}{2} \\ \cos(k_w \frac{z}{2}) \cos[k_b^*(z - \frac{z}{2})] - \frac{k_w}{k_b^*} \sin(k_w \frac{z}{2}) \sin[k_b^*(z - \frac{z}{2})], & \frac{a}{2} \leq z \leq \frac{d}{2} \end{cases} \quad (P.1.27a)$$

$$y_n(z) = \begin{cases} -\frac{1}{k_w} \sin(k_w \frac{z}{2}) \cos[k_b^*(z + \frac{z}{2})] + \frac{1}{k_b^*} \cos(k_w \frac{z}{2}) \sin[k_b^*(z + \frac{z}{2})], & -\frac{d}{2} \leq z \leq -\frac{a}{2} \\ \frac{1}{k_w} \sin(k_w z), & 0 \leq z \leq \frac{a}{2} \\ \frac{1}{k_b^*} \sin(k_w \frac{z}{2}) \cos[k_b^*(z - \frac{z}{2})] + \frac{1}{k_b^*} \cos(k_w \frac{z}{2}) \sin[k_b^*(z - \frac{z}{2})], & \frac{a}{2} \leq z \leq \frac{d}{2} \end{cases} \quad (P.1.27a)$$

Problem 1.3. Odrediti disperzionu relaciju za Kronig-Penney-jev δ -model potencijalne energije.

Rešenje: Kronig-Penney-jev δ -model dobijamo daljim uprošćavanjem strukture sa Sl. P.1.3, smanjujući širinu barijera b (u graničnom slučaju $b \rightarrow 0$) a istovremeno povećavajući visinu barijere ($U_0 \rightarrow \infty$) tako da njihov proizvod ostane konstantan ($bU_0 = Const$). Rezultujući potencijal može se prikazati nizom delta funkcija, kao na Sl. P.1.4.



Sl. P.1.4 Kronig-Penney-jev δ -model

Konstanta bU_0 obično se uzima u formi proizvoda širine jame a i unapred zadate veličine V_0 , tj. $bU_0 = aV_0$, a periodični potencijal sa Sl. P.1.4 se može predstaviti u obliku:

$$U(z) = \sum_{m=-\infty}^{m=\infty} aV \delta(z - ma) \quad (P.1.28)$$

Za određivanje disperzione relacije iskoristićemo rezultat (P.1.11) s obzirom da $U_0 \rightarrow \infty$ pa uvek važi $E < U_0$. Takođe imamo $\alpha = \sqrt{\frac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}} \rightarrow \infty$, $ab \rightarrow \sqrt{\frac{2m_0(U_0 b)}{\hbar^2}} \sqrt{b} = Const \cdot b \rightarrow 0$, pa prema tome $\sinh(ab) \rightarrow ab$, $\cosh(ab) \rightarrow 1$, što zamenjeno u izraz (P.1.11) daje:

$$\frac{\alpha^2 b}{2\beta} \sin(\beta a) + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (P.1.29)$$

odnosno

$$\frac{m_0 a V_0}{\beta \hbar^2} \sin(\beta a) + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (P.1.30)$$

Uvešćemo još veličinu $P = \frac{m_0 a^2 V_0}{\hbar^2}$ koja se naziva **faktor neprozračnosti**, čime dolazimo do finalnog oblika disperzione relacije za Kronig-Penney-jev δ -model

$$P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (P.1.31)$$

Problem 1.4. Odrediti granice energetskih zona u Kronig-Penney-jevom δ -modelu. Smatrajući da su prve dve dozvoljene zone vrlo uske, odrediti njihovu širinu.

Rešenje: Funkcija $f(\beta a)$ sa leve strane znaka jednakosti u izrazu (P.1.31) ima opšti oblik koji je prikazan na Sl. P.1.5.

Granice zona određene su izrazom

$$f(\beta a) = \pm 1 \quad (P.1.32)$$

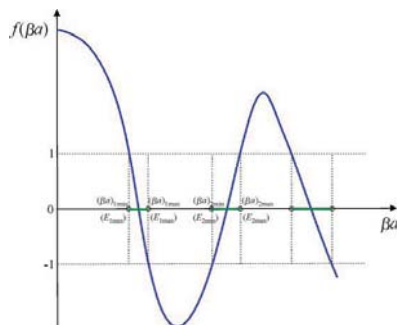
gde znak “+” odgovara donjim granicama neparnih zona i gornjim granicama parnih zona, dok znak “-” određuje gornje granične energije neparnih zona i minimalne energije parnih zona.

1) Razmotrićemo prvo slučaj kada je $f(\beta a) = 1$. Tada uslov (P.1.32) dobija oblik:

$$P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} - [1 - \cos(\beta a)] = 0 \quad (P.1.33)$$

odnosno,

$$\sin(\beta a / 2) \left[\frac{P}{\beta a} \cos(\beta a / 2) - \sin(\beta a / 2) \right] = 0 \quad (P.1.34)$$



Sl. P.1.5 Opšti oblik funkcije $f(\beta a)$ određene izrazom (P.1.31)

Rešenja prethodne jednačine određena su izrazima:

$$\sin(\beta a / 2) = 0 \Rightarrow \beta a = 2n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{P.1.35a})$$

$$\frac{P}{\beta a} = \tan(\beta a / 2) \quad (\text{P.1.35b})$$

Na osnovu izvoda funkcije $f(\beta a)$ po βa moguće je odrediti da li posmatrano rešenje odgovara donjoj ili gornjoj granici zone. Kako je

$$\frac{d[f(\beta a)]}{d(\beta a)} = P \frac{\cos(\beta a) \cdot (\beta a) - \sin(\beta a)}{(\beta a)^2} - \sin(\beta a) \quad (\text{P.1.36})$$

sledi

$$\left. \frac{d[f(\beta a)]}{d(\beta a)} \right|_{\beta a = 2n\pi} = \frac{P}{\beta a} > 0 \quad (\text{P.1.37})$$

Prema tome, rešenja oblika (P.1.35a) odgovaraju odgovaraju gornjim granicama parnih zona, a rešenja jednačine (P.1.35b) daju donje granice neparnih zona.

2) Kada je $f(\beta a) = -1$, tada se uslov (P.1.32) svodi na:

$$\cos(\beta a / 2) \left[\frac{P}{\beta a} \sin(\beta a / 2) + \cos(\beta a / 2) \right] = 0 \quad (\text{P.1.38})$$

čija rešenja su određena izrazima:

$$\cos(\beta a / 2) = 0 \Rightarrow \beta a = (2n-1)\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{P.1.39a})$$

$$\frac{P}{\beta a} = -\cot(\beta a / 2) \quad (\text{P.1.39b})$$

Pošto je

$$\left. \frac{d[f(\beta a)]}{d(\beta a)} \right|_{\beta a = (2n-1)\pi} = -\frac{P}{\beta a} < 0 \quad (\text{P.1.40})$$

možemo zaključiti da rešenja oblika (P.1.39a) određuju gonje granice neparnih zona, dok rešenja jednačine (P.1.39b) odgovaraju donjim granicama parnih zona. Na osnovu prethodnih rezultata zaključujemo da vrhove dozvoljenih zona dobijamo za vrednosti:

$$\beta a = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{P.1.41})$$

dok minimume zona određuju izrazi:

$$\frac{P}{\beta a} = \tan[(\beta a + (n-1)\pi) / 2] \quad (\text{P.1.42})$$

gde n sada ima ulogu indeksa dozvoljene zone. Širinu prve, odnosno druge zone, obeležićemo sa δE_1 i δE_2 , respektivno, gde je na osnovu Sl. P.1.5

$$\delta E_1 = E_{1\max} - E_{1\min} \quad (\text{P.1.43a})$$

$$\delta E_2 = E_{2\max} - E_{2\min} \quad (\text{P.1.43b})$$

S obzirom da je pretpostavljeno da su prve dve zone vrlo uske, možemo pisati:

$$\delta E_1 \ll E_{1\max} \quad (\text{P.1.44a})$$

$$\delta E_2 \ll E_{2\max} \quad (\text{P.1.44b})$$

Iz izraza (P.1.39a) ili (P.1.41) sledi da je

$$(\beta a)_{\max} = \pi \quad (\text{P.1.45})$$

a pošto je $\beta = \sqrt{2m_0 E / \hbar^2}$, dobijamo gornju granicu prve dozvoljene zone u obliku:

$$E_{1\max} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 a^2} \quad (\text{P.1.46})$$

Odgovarajuću donju granicu odredićemo na osnovu (P.1.35b), odakle je

$$\frac{P}{(\beta a)_{1\min}} = \tan[(\beta a)_{1\min} / 2] \quad (\text{P.1.47})$$

Pretpostavićemo da se $(\beta a)_{1\min}$ može napisati u obliku

$$(\beta a)_{1\min} = (\beta a)_{1\max} - \varphi_1 = \pi - \varphi_1 \quad (\text{P.1.48})$$

gde φ_1 označava neki mali ugao s obzirom da je zona uska (i na βa osi). Tada možemo pisati:

$$\frac{P}{\pi - \varphi_1} = \tan[(\pi - \varphi_1) / 2] = \cot(\varphi_1 / 2) \approx \frac{1}{\varphi_1 / 2} \quad (\text{P.1.49})$$

odakle je

$$\varphi_1 = \frac{2\pi}{P+2} \quad (\text{P.1.50})$$

a na osnovu (P.1.47)

$$E_{1\min} = \frac{\hbar^2 \pi^2 P^2}{2m_0 a^2 (P+2)^2} \quad (\text{P.1.51})$$

Širina prve dozvoljene zone iznosi:

$$\delta E_1 = E_{1\max} - E_{1\min} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 a^2} \left(1 - \frac{P^2}{(P+2)^2} \right) = \frac{2\hbar^2 \pi^2 (P+1)}{m_0 a^2 (P+2)^2} \approx \frac{2\hbar^2 \pi^2}{m_0 a^2 P} \quad (\text{P.1.52})$$

Na sličan način dolazimo do granica druge dozvoljene zone. Na osnovu izraza (P.1.35a) ili (P.1.41) sledi da je $(\beta a)_{2\max} = 2\pi$, odnosno

$$E_{2\max} = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{m_0 a^2} \quad (\text{P.1.53})$$

Pretpostavićemo da se $(\beta a)_{2\min}$ može napisati u obliku

$$(\beta a)_{2\min} = (\beta a)_{2\max} - \varphi_2 = 2\pi - \varphi_2 \quad (\text{P.1.54})$$

gde je sada φ_2 neki mali ugao. Na osnovu (P.1.39b) imamo

$$\frac{P}{2\pi - \varphi_2} = -\cot(\pi - \varphi_2 / 2) = \frac{1}{\tan(\varphi_2 / 2)} \approx \frac{1}{\varphi_2 / 2} \quad (\text{P.1.55})$$

odakle sledi

$$\varphi_2 = \frac{4\pi}{P+2} \quad (\text{P.1.56})$$

odnosno

$$E_{2\min} = \frac{2\hbar^2 \pi^2 P^2}{m_0 a^2 (P+2)^2} \quad (\text{P.1.57})$$

Konačno, možemo odrediti i širinu druge dozvoljene zone koja iznosi:

$$\delta E_2 = E_{2\max} - E_{2\min} = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{m_0 a^2} \left(1 - \frac{P^2}{(P+2)^2} \right) = \frac{8\hbar^2 \pi^2 (P+1)}{m_0 a^2 (P+2)^2} \approx \frac{8\hbar^2 \pi^2}{m_0 a^2 P} \quad (\text{P.1.58})$$

Problem 1.5. Za Kronig-Penney-jev δ -model izvesti disperzionu relaciju ne koristeći pravougaoni model.

Rešenje: Posmatrajmo Kronig-Penney-jev δ -model potencijalne energije koji je prikazan na Sl. P.1.4. Schrödinger-ova jednačina u oblastima jama ima sledeći oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} = E \Psi(z), \quad (\text{P.1.59})$$

Rešenje ove jednačine u odabranoj jami (npr. prvoj jami s leve strane koordinatnog početka) možemo napisati u formi:

$$\Psi(z) = A \sin(\beta z) + B \cos(\beta z), \quad -a < z < 0 \quad (\text{P.1.60})$$

gde je $\beta = \sqrt{2m_0 E / \hbar^2}$. Granični uslov za talasnu funkciju u tački $z = 0$ glasi:

$$\Psi(0^+) = \Psi(0^-) \quad (\text{P.1.61})$$

Iskoristićemo činjenicu da prema Bloch-ovoj teoremi rešenje jednačine (P.1.59) ima opšti oblik $\Psi_k(z) = u_k(z) e^{ikz}$, pošto je potencijalna energija periodična funkcija koordinate. Prema tome,

funkcija (P.1.60) ispunjava periodične granične uslove: $\Psi_k(z+a) = \Psi_k(z)e^{ika}$ i $\Psi'_k(z+a) = \Psi'_k(z)e^{ika}$. Ove uslove primenićemo u tački $z = -a^+$, što daje:

$$\Psi(0^+) = \Psi(-a^+)e^{ika} \quad (\text{P.1.62a})$$

$$\Psi'(0^+) = \Psi'(-a^+)e^{ika} \quad (\text{P.1.62b})$$

odnosno,

$$\Psi(0^+) = [-A \sin(\beta a) + B \cos(\beta a)]e^{ika} \quad (\text{P.1.63a})$$

$$\Psi'(0^+) = [A\beta \cos(\beta a) + B\beta \sin(\beta a)]e^{ika} \quad (\text{P.1.63b})$$

Na osnovu (P.1.63a) i (P.1.60), granični uslov (P.1.61) dobija oblik:

$$[-A \sin(\beta a) + B \cos(\beta a)]e^{ika} = B \quad (\text{P.1.64})$$

U tački $z = 0$, Schrödinger-ova jednačina ima oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + [E - aV_0\delta(z)]\Psi(z) = 0 \quad (\text{P.1.65})$$

Integralićemo ovu jednačinu u okolini $z = 0$:

$$\left. \frac{d\Psi(z)}{dz} \right|_{z=0^+} - \left. \frac{d\Psi(z)}{dz} \right|_{z=0^-} + \frac{2m_0E}{\hbar^2} \int_{z=0^-}^{z=0^+} \Psi(z) dz - \frac{2m_0aV_0}{\hbar^2} \Psi(0) = 0 \quad (\text{P.1.66})$$

Uz pomoć (P.1.63b) i (P.1.60) dalje dobijamo:

$$[A\beta \cos(\beta a) + B\beta \sin(\beta a)]e^{ika} - A\beta - \frac{2P}{a} B = 0 \quad (\text{P.1.67})$$

gde je $P = m_0a^2V_0/\hbar^2$ faktor neprozračnosti. Izrazi (P.1.64) i (P.1.67) čine sistem od dve linearne i homogenih jednačina po konstantama A i B , čija determinanta mora biti jednaka nuli da bi sistem imao netrivialna rešenja. Na osnovu toga dolazimo do uslova:

$$\begin{vmatrix} -\sin(\beta a)e^{ika} & -1 + \cos(\beta a)e^{ika} \\ -1 + \cos(\beta a)e^{ika} & \sin(\beta a)e^{ika} - \frac{2P}{\beta a} \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{P.1.68})$$

Koji posle sređivanja daje traženu disperzionu relaciju:

$$P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (\text{P.1.69})$$

Problem 1.6. Smatrajući disperzionu relaciju u kristalu ($f(E) = \cos(kd)$) poznatom, naći izraz za efektivnu masu u blizini ekstremuma zone. Posebno analizirati rezultate dobijene za vrhove dozvoljenih zona, za slučaj kada se disperziona relacija odgovara Kronig-Penney-jevom δ -modelu potencijalne energije. Takođe, odrediti opšti izraz za koeficijent neparaboličnosti u blizini ekstremuma zone.

Rešenje: Efektivna masa u okolini ekstremuma zone određena je izrazom

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left. \frac{d^2E}{dk^2} \right|_{k=k_0}} \quad (\text{P.1.70})$$

gde k_0 označava talasni vektor koji odgovara ekstremumu zone. Položaj ekstremuma zone određujemo izjednačavanjem izvoda dE/dk sa nulom. Diferenciranjem disperzione relacije po k dobijamo:

$$\frac{df}{dk} = \frac{df}{dE} \frac{dE}{dk} = -d \sin(kd) \quad (\text{P.1.71})$$

odakle sledi

$$\frac{dE}{dk} = -d \frac{\sin(kd)}{df/dE} \quad (\text{P.1.72})$$

Pošto je $\left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=k_0} = 0$, zaključujemo da je

$$\sin(k_0d) = 0 \Rightarrow k_0 = 0, \pm \frac{n\pi}{d}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{P.1.73})$$

Daljim diferenciranjem izraza (P.1.72) po talasnom vektoru dolazimo do izraza:

$$\frac{d^2E}{dk^2} = -d \frac{d \cos(kd) \frac{df}{dE} + \sin(kd) \frac{df^2}{dE^2}}{\left(\frac{df}{dE} \right)^2} \quad (\text{P.1.74})$$

S obzirom na (P.1.73), u tački ekstremuma imamo:

$$\left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=k_0} = \frac{-d^2 \cos(k_0 d)}{dE} = \frac{-d^2 \cdot f(E_0)}{dE} \Big|_{E=E_0} \quad (\text{P.1.75})$$

gde je $E(k_0) = E_0$. Zamenom (P.1.75) u izraz (P.1.70) dolazimo do formule za izračunavanje efektivne mase u ekstremumu zone, u obliku:

$$m^*(E_0) = \frac{-\hbar^2}{d^2 \cdot f(E_0)} \left. \frac{df}{dE} \right|_{E=E_0} \quad (\text{P.1.76})$$

Posmatrajmo Sl. P.1.2. Na dnu prve dozvoljene zone (energija E_1), $f(E_1) = 1$ a $df/dE < 0$ pa je efektivna masa elektrona u okolini ove energije pozitivna. S druge strane na vrhu prve zone imamo $f(E_2) = -1$ i $df/dE < 0$ pa je $m^*(E_2) < 0$.

U slučaju kada se posmatra Kronig-Penney-jev δ -model, disperziona relacija je oblika

$$f(E) = P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (\text{P.1.77})$$

pa je

$$\frac{df}{dE} = \frac{df}{d(\beta a)} \frac{d(\beta a)}{dE} = \left[P \frac{\cos(\beta a) \cdot (\beta a) - \sin(\beta a)}{(\beta a)^2} - \sin(\beta a) \right] \frac{\beta a}{2E} \quad (\text{P.1.78})$$

U primeru P.1.4 pokazano je da se vrhovi zona dobijaju kada je $\beta a = n\pi$, $n = 1, 2, \dots$, odakle sledi

$$\left. \frac{df}{dE} \right|_{E=E_{n\max}} = \frac{P \cos(n\pi)}{2E_{n\max}} \quad (\text{P.1.79})$$

Zamenom u (P.1.69), uz $d \approx a$, dobijamo:

$$m^*(E_{n\max}) = -\frac{\hbar^2}{2a^2 E_{n\max}} \frac{P \cos(n\pi)}{f(E_{n\max})} = -\frac{\hbar^2}{2a^2 E_{n\max}} \quad (\text{P.1.80})$$

Pošto su energije maksimuma zone određene izrazom $E_{n\max} = n^2 \pi^2 / (2m_0 a^2)$, dobijamo konačno:

$$m^*(E_{n\max}) = -\frac{m_0 P}{n^2 \pi^2} \quad (\text{P.1.81})$$

Prema tome, u vrhovima dozvoljenih zona efektivna masa elektrona je negativna, a njena vrednost opada sa kvadratom indeksa zone.

Da bismo odredili koeficijent neparaboličnosti u okolini ekstremuma zone, posmatraćemo razvoj u red funkcije $E(k)$ u okolini ekstremuma k_0 :

$$E(k) = E(k_0) + \left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3 E}{dk^3} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^3 + \frac{1}{4!} \left. \frac{d^4 E}{dk^4} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^4 + \dots \quad (\text{P.1.82})$$

Koeficijent neparaboličnosti je određen prvim članom posle kvadratnog u razvoju funkcije $E(k)$ koji je različit od nule. Potražićemo prvo $d^3 E / dk^3$:

$$\frac{d^3 E}{dk^3} = \frac{d}{dk} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right) = -d^2 \cdot \frac{d}{dk} \left(\frac{\cos(kd)}{df/dE} \right) + d \cdot \frac{d}{dk} \left(\frac{d \sin(kd) \cdot (d^2 f / dE^2)}{(df/dE)^2} \right) \quad (\text{P.1.83})$$

Posle sređivanja dobijenih izraza, dolazimo do rezultata:

$$\frac{d^3 E}{dk^3} = d^3 \frac{\sin(kd)}{df/dE} - \frac{3d^3 \sin(2kd) \frac{d^2 f}{dE^2}}{2 \left(\frac{df}{dE} \right)^3} + d^3 \frac{\sin^3(kd) \frac{d^3 f}{dE^3}}{\left(\frac{df}{dE} \right)^4} - 2d^3 \frac{\sin^3(kd) \left(\frac{d^2 f}{dE^2} \right)^2}{\left(\frac{df}{dE} \right)^5} \quad (\text{P.1.84})$$

Na osnovu (P.1.73) zaključujemo da je u tački ekstremuma:

$$\left. \frac{d^3 E}{dk^3} \right|_{k=k_0} = 0 \quad (\text{P.1.85})$$

što znači da se mora odrediti i sledeći član u razvoju u red. Još jednim diferencijiranjem (P.1.84) po k dobijamo:

$$\begin{aligned} \frac{d^4 E}{dk^4} = & d^4 \frac{\cos(kd)}{df/dE} - d^3 \frac{\sin(kd) \frac{d^2 f}{dE^2} \frac{dE}{dk}}{\left(\frac{df}{dE} \right)^2} - 3d^4 \frac{\cos(2kd) \frac{d^2 f}{dE^2}}{\left(\frac{df}{dE} \right)^3} - \frac{3d^3 \sin(2kd) \frac{d^3 f}{dE^3} \frac{dE}{dk}}{2 \left(\frac{df}{dE} \right)^3} \\ & + \frac{9d^3 \sin(2kd) \left(\frac{d^2 f}{dE^2} \right)^2 \frac{dE}{dk}}{2 \left(\frac{df}{dE} \right)^4} \end{aligned} \quad (\text{P.1.86})$$

U tačkama ekstremuma vrednost prethodnog izraza iznosi:

$$\left. \frac{d^4 E}{dk^4} \right|_{k=k_0} = d^4 \left. \frac{f(E_0)}{dE} \right|_{k=k_0} - 3d^4 \left. \frac{d^2 f}{dE^2} \right|_{k=k_0} \left(\left. \frac{df}{dE} \right|_{k=k_0} \right)^3 \quad (\text{P.1.87})$$

i uopštem slučaju je različita od nule. Zavisnost energije od talasnog vektora u okolini ekstremuma sada možemo prikazati u obliku:

$$E(k) \approx E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m} (k - k_0)^2 + c(k - k_0)^4 \quad (\text{P.1.88})$$

gde je m^* određeno izrazom (P.1.76), a c je koeficijent neparaboličnosti:

$$c = \frac{1}{4!} \left. \frac{d^4 E}{dk^4} \right|_{k=k_0} = d^4 \left[\frac{1}{24} \frac{f(E)}{df/dE} - \frac{1}{8} \frac{d^2 f/dE^2}{(df/dE)^3} \right]_{E=E_0} \quad (\text{P.1.89})$$

Problem 1.7. Izrazi za koncentraciju elektrona $n = B_c e^{(E_F - E_c)/k_B T}$ i koncentraciju šupljina $p = B_v e^{-(E_g - (E_F - E_c))/k_B T}$ izvedeni su korišćenjem 4 glavne pretpostavke. Navesti te pretpostavke, motivaciju za njihovo uvođenje i argumentovati njihovu opravdanost.

Rešenje: 1) Osnovna pretpostavka je da je kristal beskonačan, odnosno da broj atom u kristalnoj rešeci teži beskonačnosti, i da su zbog toga dozvoljeni energetski nivoi beskonačno zgusnuti (spektr je kontinualan) u okviru svake dozvoljene zone. Ovo omogućava da se prilikom određivanja broja elektrona koji popunjavaju dozvoljena stanja može preći sa sumiranja na integraciju. Pretpostavka je opravdana jer je koncentracija atoma u čvrstim telima veoma velika, npr. u 1 cm^3 Si ima $N_A \approx 4.99 \cdot 10^{23}$ atoma, pa je samim tim i broj dozvoljenih stanja ogroman.

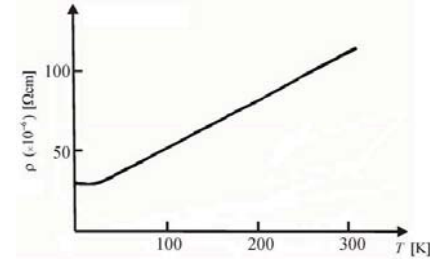
2) Uvedena je aproksimacija efektivne mase koja daje paraboličnu zavisnost energije od talasnog vektora (elipsoidne ekvivalentne površine). Na taj način dolazi se do analitičkog izraza za gustinu stanja. Validnost ove pretpostavke zavisi od materijala i tipa nosilaca, i po pravilu je znatno slabija za valentnu nego za provodnu zonu.

3) Pretpostavljeno je da je provodna zona dovoljno široka ($\gg k_B T$) kada je granica u integralu u izrazu za koncentraciju (1.145) pomenjena u ∞ , da bi integral dobio oblik poznate i tabelirane funkcije. Ovo je opravdano pošto je proizvod gustine stanja i Fermi-Dirac-ovog faktora $f_{FD}(E, E_F)$ maksimalan na energiji koja je bliska $k_B T/2$, a zatim brzo opada do zanemarljivih vrednosti na višim energijama. Dakle, potrebno je da je $(E_{\max} - E_c)/k_B T \gg 1$, gde je E_{\max}

gornja granica provodne zone. Na primer, za dovoljnu širinu provodne zone na $T = 300 \text{ K}$ mogla bi da se smatra vrednost od $4k_B T \approx 100 \text{ meV}$.

4) Konačno, pretpostavljeno je da važi uslov totalne nedegeneracije, odnosno da se Fermi-Diracova funkcija raspodele može aproksimirati Maxwell-Boltzmann-ovom funkcijom $e^{-(E - E_F)/k_B T}$, što pojednostavljuje Fermijev integral $F_{1/2}(\eta)$ u izrazu (1.148) i on postaje analitički rešiv. Ovo je opravdano za niže koncentracije elektrona (i šupljina), kada je $n \ll B_c$, gde B_c ima smisao gustine stanja svedene na dno provodne zone

Problem 1.8. Na Sl. P.1.6 je data zavisnost specifične električne otpornosti nekog čvrstog tela od temperature. a) na osnovu grafika zaključiti da li se radi o metalu ili izolatoru b) Ukratko opisati glavne fizičke procese koji dovode do ovakve zavisnosti $\rho(T)$.

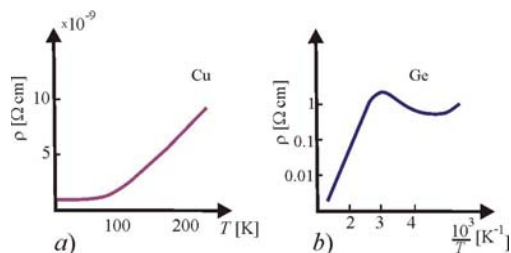


Sl. P.1.6 Specifična električna otpornost nekog materijala u funkciji temperature

Rešenje: a) Kao što se vidi sa slike, specifična električna otpornost posmatranog materijala generalno raste sa porastom temperature, i taj porast je približno linearan počevši od $T \approx 25 \text{ K}$, pri čemu je vrednost otpornosti na $T = 300 \text{ K}$ i dalje relativno mala ($\rho \sim 10^{-4} \Omega \text{cm}$). Na osnovu toga zaključujemo da se radi o metalu.

b) Kada bi kristalna rešetka metala bila idealna i ne bi bilo termalnih vibracija rešetke, elektroni bi se transportovali bez rasejanja, odnosno otpornost bi bila jednaka nuli. U realnim metalima elektroni doživljavaju rasejanje usled postojanja nepravilnosti, kao što su nečistoće i defekti kristalne rešetke, kao i usled termalnih vibracija atoma u rešeci (što rezultuje efektivnom promenom (distorzijom) periodičnog potencijala). Kao posledica ovih efekata javlja se odgovarajuća električna otpornost. Na niskim temperaturama ($T < 25 \text{ K}$), dominantan uticaj ima otpornost koja potiče od nečistoća i defekata i ona je nezavisna od temperature. Sa porastom temperature raste i doprinos otpornosti koja potiče od termalnih vibracija kristalne rešetke (fona).

Problem 1.9. Na Sl. P.1.7 dati su grafici temperaturne zavisnosti specifične električne otpornosti Cu i Ge dobijeni za realne uzorke visoke čistoće. Objasniti ukratko osnovne mehanizme provođenja u oba materijala i objasniti oblik dobijenih grafika. Voditi računa da su veličine na apscisama različite.



Sl. P.1.7 Specifična električna otpornost a) Cu i b) Ge u funkciji temperature

Rešenje: a) Cu je metal (videti Problem 1.8). Na vrlo niskim temperaturama specifična električna otpornost određena je verovatnoćom rasejanja na nečistoćama i ne zavisi od temperature. Zatim se uključuje i uticaj termalnih viracija kristalne rešetke (fonona) i u uskoj oblasti niskih temperatura $\rho \sim T^5$, dok na visokim temperaturama dominira uticaj fonona i u tom slučaju $\rho \sim T$

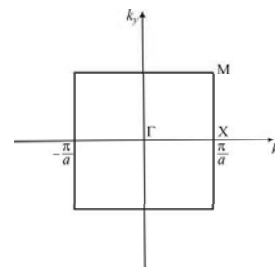
b) Ge je poluprovodnik. Sa grafika vidimo da na niskim temperaturama otpornost opada sa porastom temperature, na srednjim temperaturama ρ raste sa porastom temperature, a na visokim temperaturama ponovo brzo opada kako se T povećava. Ovakvo ponašanje se može objasniti na sledeći način: na niskim temperaturama dominira jonizacija atoma nečistoća koji su uvek prisutni u realnim uzorcima, makar u vrlo malom procentu. Koncentracija nosilaca dobijenih jonizovanjem atoma nečistoća raste sa porastom temperature pa zbog toga otpornost opada. U opsegu srednjih temperatura svi atomi nečistoća su jonizovani pa se koncentracija slobodnih nosilaca praktično ne menja sa temperaturom. Međutim, sa porastom T raste verovatnoća rasejanja elektrona na fononima, što smanjuje pokretljivost nosilaca i povećava otpornost. Na visokim temperaturama dolazi do naglog povećavanja sopstvene koncentracije (prelaska elektrona iz valentne u provodnu zonu) – videti izraz (1.241) – što rezultuje brzim opadanjem specifične električne otpornosti.

Problem 1.10. Posmatrati (dvodimenzionalnu) kvadratnu kristalnu rešetku, konstante periodičnosti a . Kinetička energija kvazi-slobodnog elektrona u uglu prve Brillouin-ove zone veća je od energije elektrona na sredini bočne ivice zone b puta. Odrediti faktor b .

Rešenje: Kinetičke energija kvazi-slobodnog elektrona data je izrazom:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{P.1.90})$$

Prva Brillouin-ova zona za kvadratnu kristalnu rešetku konstante a , predstavlja kvadrat stranice $\frac{2\pi}{a}$ u \vec{k} prostoru, kao što je prikazano na Sl. P.1.8.



Sl. P.1.8 Prva Brillouin-ova zona za kvadratnu kristalnu rešetku

Po uslovu zadatka je $\frac{E_M}{E_X} = b$. Kako je

$$\frac{E_M}{E_X} = \frac{k_M^2}{k_X^2} \quad (\text{P.1.91})$$

a sa Sl. P.1.8. se vidi da je $k_M^2 = 2k_X^2$, očigledno je da traženi faktor iznosi

$$b = 2 \quad (\text{P.1.92})$$

Problem 1.11. Elektron se nalazi u jednodimenzionalnoj kristalnoj rešeci konstante a kod koje je zavisnost energije i talasnog vektora oblika:

$$E(k) = -2V \cos(ka) \quad (\text{P.1.93})$$

gde je V poznata konstanta. Slabo uniformno električno polje $\vec{K} = K\vec{i}_x$ primenjeno je paralelno rešeci. Opisati kvalitativno kretanje elektrona u k -prostoru i u realnom prostoru. Kakav uticaj bi imalo uključivanje realnih procesa rasejanja elektrona? Šta se podrazumeva pod slabim poljem i do kakvih pojava može doći kod realnih (višezonskih) kristala kada polje \vec{K} nije slabo?

Rešenje: U odsustvu rasejanja, jednačina kretanja elektrona pod dejstvom električnog polja \vec{K} glasi:

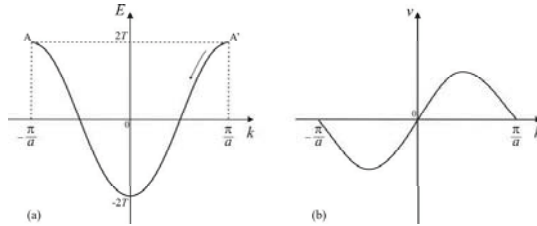
$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F} = -e\vec{K} \quad (\text{P.1.94})$$

Integracijom ove jednačine dobijamo rešenje u obliku:

$$\vec{k} = \vec{k}(0) - \frac{e\vec{K}t}{\hbar} \quad (\text{P.1.95})$$

odakle se vidi da se talasni vektor \vec{k} menja linearno sa t . U k -prostoru svi elektroni bi se kretali istom brzinom, u smeru suprotnom od polja \vec{K} , kao što je prikazano na Sl. P.1.9a). Kada elektron dostigne granicu prve Brillouin-ove zone (tačka A), on se reflektuje i prelazi u tačku A', simetričnu u odnosu na koordinatni početak (u redukovanom zonskom dijagramu). Stanja A i A' su u potpunosti ekvivalentna. Na osnovu ovoga zaključujemo da se elektron kreće periodično u k -prostoru u funkciji vremena t .

Pod dejstvom električnog polja stanje elektrona se kontinualno menja, kao i njegova brzina određena sa $v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ (P.1.9b)). Brzina elektrona osciluje između pozitivnih i negativnih vrednosti, pa je kretanje elektrona u realnom prostoru takođe periodično.



Sl. 1. P.1.9 Zavisnost a) energije i b) brzine elektrona od talasnog vektora u posmatranoj kristalnoj rešeci

U prisustvu rasejanja ne uočavaju se prethodno opisane oscilacije. U realnim kristalima prisutni su različiti mehanizmi rasejanja i jednačina kretanja (3) je u važnosti samo između uzastopnih rasejanja. Kako su vremena između rasejanja veoma kratka, talasni vektor elektrona se samo malo "pomeri" u k -prostoru pre nego što se elektron ponovo raseje, što onemogućava izvršenje prethodno opisanih oscilacija.

Pod slabim električnim poljem podrazumeva se da ono ne omogućava elektronu da dostigne dovoljno velike vrednosti energije za prelazak u višu energetska zonu. U realnim kristalima kod kojih postoji mnoštvo zona, takvi prelazi su moguć pri jakim poljima.

Problem 1.12. Uzorak metala izložen je dejstvu konstantnog magnetnog polja $\vec{B} = B_0 \vec{z}$. Smatrati da se elektroni u provodnoj zoni mogu tretirati kao slobodni, i da čine elektronski gas koncentracije n , karakterisan vremenom rasejanja τ . Izvesti izraz za tenzor specifične električne otpornosti ovog metala.

Rešenje: Pri rasejanju provodnog elektrona momenta $m\vec{v}$, koji u proseku doživi $1/\tau$ rasejanja u jedinici vremena, srednja "sila trenja" koja na njega deluje iznosi $-m\vec{v}/\tau$. Na osnovu toga, jednačina kretanja provodnog elektrona može se napisati u obliku:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{K} - e\vec{v} \times \vec{B} - \frac{m\vec{v}}{\tau} \quad (\text{P.1.96})$$

Kako je gustina stuje jednaka

$$\vec{J} = -en\vec{v} \quad (\text{P.1.97})$$

izraz (P.1.96) dobija formu:

$$-\frac{m}{ne} \frac{d\vec{J}}{dt} = -e\vec{K} + \frac{\vec{J} \times \vec{B}}{n} + \frac{m\vec{J}}{\tau ne} \quad (\text{P.1.98})$$

Potražimo rešenje u obliku

$$\vec{J} = \vec{J}_0 e^{-i\omega t} \quad (\text{P.1.99})$$

Zamenom u jednačinu (P.1.98) dobijamo:

$$\vec{K} = -\frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) \vec{J} + \frac{\vec{J} \times \vec{B}}{ne} \quad (\text{P.1.100})$$

Prethodni izraz možemo razložiti na tri skalare jednačine:

$$K_x = \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) J_x + \frac{B_0}{ne} J_y \quad (\text{P.1.101a})$$

$$K_y = \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) J_y - \frac{B_0}{ne} J_x \quad (\text{P.1.101b})$$

$$K_z = \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) J_z \quad (\text{P.1.101c})$$

S obzirom da je prema Ohm-ovom zakonu $\vec{J} = \sigma \vec{K}$, odnosno $\vec{K} = \rho \vec{J}$, specifična električna otpornost se dobija u matricnoj formi:

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) & \frac{B_0}{ne} & 0 \\ -\frac{B_0}{ne} & \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right) \end{bmatrix} \quad (\text{P.1.102})$$

Problem 1.13. Jednodimenzionalna kristalna rešetka sastoji se od pravilno raspoređenih atoma, na međusobnom rastojanju b , sa jednim elektronom po atomu. Zavisnost energije elektrona u provodnoj zoni može se prikazati izrazom:

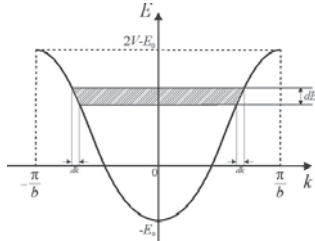
$$E(k) = -E_0 - 2V \cos(kb) \quad (\text{P.1.103})$$

gde su E_0 i V konstante. Naći izraz za energetska gustinu stanja.

Rešenje: Broj stanja u intervalu talasnog vektora ($k, k + dk$), po jedinici talasnog vektora, za jednodimenzionalnu rešetku dužine L iznosi (videti (1.74)):

$$g(k) = \frac{L}{2\pi} \quad (\text{P.1.104})$$

S druge strane, pošto je $E(k) = E(-k)$, promeni energije u intervalu ($E, E + dE$) odgovara promena talasnog vektora u oblasti ($k, k + dk$) ali i ($-k, -k + dk$), kao što je prikazano na Sl. P.1.9.



Sl. P.1.9 Zavisnost energije od talasnog vektora u posmatranoj kristalnoj rešeci i ekvivalentna promena talasnog vektora koja odgovara uocenom intervalu energije dE

Na osnovu toga možemo pisati:

$$g^*(E)dE = g(k) \cdot 2dk \quad (\text{P.1.105})$$

Odavde je energetska gustina stanje jednaka:

$$g^*(E) = 2 \frac{L}{2\pi} \frac{dk}{dE} \quad (\text{P.1.106})$$

Kako je, prema izrazu (P.1.103):

$$\frac{dE}{dk} = 2Vb \sin(kb) = 2Vb \sqrt{1 - \left(\frac{E + E_0}{2V} \right)^2} \quad (\text{P.1.107})$$

dobijamo

$$g^*(E) = \frac{L}{b\pi \sqrt{4V^2 - (E + E_0)^2}} \quad (\text{P.1.108})$$

odakle se za može izraziti i energetska gustina stanja po jedinici dužine

$$g(E) = \frac{1}{b\pi \sqrt{4V^2 - (E + E_0)^2}} \quad (\text{P.1.109})$$

Problem 1.14. Model slobodnog elektrona u metalu podrazumeva da se elektroni u provodnoj zoni mogu aproksimirati gasom slobodnih elektrona, gde su glavni parametri tog gasa koncentracija elektrona n , i vreme između sudara τ . Pokazati da se u okviru ovog modela specifična električna provodnost metala može izraziti kao

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (\text{P.1.110})$$

Rešenje: Kod slobodnog elektrona, impuls \vec{p} i talasni vektor \vec{k} povezani su izrazom:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (\text{P.1.111})$$

Jednačina kretanja ovog elektrona pod dejstvom spoljašnje sile \vec{F} , prema drugom Newton-ovom zakonu ima oblik:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} \quad (\text{P.1.112})$$

Taladni vektor elektrona u pravcu dejstva spoljašnje sile se povećava sa vremenom i

ravnotežna situacija će biti postignuta vraćanjem elektrona u početno stanje usled sudara sa jonima kristalne rešetke, nakon vremena τ koje je određeno izrazom:

$$\Delta\vec{k} = \frac{\hbar\vec{F}}{\tau} \quad (\text{P.1.113})$$

gde je \vec{k} promena talasnog vektora u odnosu na ravnotežnu vrednost. Odgovarajuća promena brzine iznosi:

$$\Delta\vec{v} = \frac{\Delta\vec{p}}{m} = \frac{\hbar\Delta\vec{k}}{m} = \frac{\tau\vec{F}}{m} \quad (\text{P.1.114})$$

Ako je primenjeno električno polje \vec{K} , tada je sila koja deluje na elektron $\vec{F} = -e\vec{K}$, pa se odgovarajuća gustina struje može zapisati u obliku:

$$\vec{J} = -en\Delta\vec{v} = \frac{e^2n\tau}{m}\vec{K} = \sigma\vec{K} \quad (\text{P.1.115})$$

Odakle sledi da specifična električna provodnost, pod pretpostavkom da se može primeniti Ohm-ov zakon, iznosi:

$$\sigma = \frac{e^2n\tau}{m} \quad (\text{P.1.116})$$

Problem 1.15. Zavisnost energije od talasnog vektora u jednoj zoni nekog materijala može se približno opisati sledećim izrazom:

$$E(\vec{k}) = -A_1\sqrt{1+4\cos\left(\frac{ak_y}{2}\right)\left[\cos\left(\frac{ak_x}{2}\right)+\cos\left(\frac{2ak_x\sqrt{3}}{2}\right)\right]}-2A_2\cos(ck_z) \quad (\text{P.1.117})$$

gde su A_1 i A_2 konstante, a a i c su parametri rešetke. Odrediti tenzor inverzne efektivne mase elektrona za talasni vektor $\vec{k} = (0, 0, 0)$.

Rešenje: Komponente tenzora inverzne efektivne mase određene su drugim parcijalnim izvodima energije po komponentama talasnog vektora (videti (1.122)):

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\vec{k}=0}, \quad i, j \in \{x, y, z\} \quad (\text{P.1.118})$$

Odredićemo prvo parcijalne izvode $\partial E/\partial k_i$, što daje:

$$\frac{\partial E}{\partial k_x} = \frac{a\sqrt{3}A_1 \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \sin\left(\frac{ak_x\sqrt{3}}{2}\right)}{\sqrt{1+4\cos\left(\frac{ak_y}{2}\right)\left[\cos\left(\frac{ak_x}{2}\right)+\cos\left(\frac{2ak_x\sqrt{3}}{2}\right)\right]}} \quad (\text{P.1.119a})$$

$$\frac{\partial E}{\partial k_y} = \frac{aA_1 \sin\left(\frac{ak_x}{2}\right)\left[2\cos\left(\frac{ak_x}{2}\right)+\cos\left(\frac{2ak_x\sqrt{3}}{2}\right)\right]}{\sqrt{1+4\cos\left(\frac{ak_y}{2}\right)\left[\cos\left(\frac{ak_x}{2}\right)+\cos\left(\frac{2ak_x\sqrt{3}}{2}\right)\right]}} \quad (\text{P.1.119b})$$

$$\frac{\partial E}{\partial k_z} = 2A_2 c \sin(ck_z) \quad (\text{P.1.119c})$$

Ponovnim diferenciranjem prethodnih izraza uz direktnu zamenu $k_x = k_y = k_z = 0$, što značajno pojednostavljuje dobijene izvode, dolazimo do odgovarajućih komponenti tenzora efektivne mase:

$$\frac{1}{m_{xx}} = \frac{1}{m_{yy}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{A_1 a^2}{2}, \quad \frac{1}{m_{zz}} = \frac{1}{\hbar^2} 2A_2 c^2, \quad \frac{1}{m_{xy}} = \frac{1}{m_{yz}} = \frac{1}{m_{zx}} = 0 \quad (\text{P.1.120})$$

Prema tome, tenzor inverzne efektivne mase je dijagonalan i glasi:

$$\left\| \frac{1}{m^*} \right\| = \left\| \begin{array}{ccc} \frac{A_1 a^2}{2\hbar^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A_1 a^2}{2\hbar^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2A_2 c^2}{\hbar^2} \end{array} \right\| \quad (\text{P.1.121})$$

Umesto direktnog izračunavanja izvoda $\partial^2 E/\partial k_i \partial k_j$ do rešenja smo mogli doći i razvijanjem funkcije (P.1.117) u okolini tačke $\vec{k} = (0, 0, 0)$ na sledeći način: pošto možemo smatrati da su u okolini posmatrane tačke veličine $k_{x,y}a$ i $k_z c$ male, primenom aproksimacije $\cos(x) \approx 1 - x^2/2$ funkciju pod korenom izraza (P.1.117) možemo napisati u obliku:

$$\left\{1+4\cos\left(\frac{ak_y}{2}\right)\left[\cos\left(\frac{ak_x}{2}\right)+\cos\left(\frac{2ak_x\sqrt{3}}{2}\right)\right]\right\} \approx 9\left(1-\frac{a^2}{6}(k_x^2+k_y^2)\right) \quad (\text{P.1.122})$$

kako je dalje $\sqrt{1-y} \approx 1 - y/2$, imamo

$$\sqrt{1-\frac{a^2}{6}(k_x^2+k_y^2)} \approx 1 - \frac{a^2(k_x^2+k_y^2)}{12} \quad (\text{P.1.123})$$

Konačno, zamenom u izraz (P.1.117) dobijamo:

$$E(\vec{k}) \approx -3A_1 - 2A_2 + \frac{a^2}{4}(k_x^2 + k_y^2) + A_2 c^2 k_z^2 \quad (\text{P.1.124})$$

Odakle direktno možemo pročitati vrednosti date izrazom (P.1.120).

Problem 1.16. Posmatrajmo metal kod koga postoje dve elektronske zone koje se međusobno preklapaju. Neka je energija elektrona u prvoj zoni određena izrazom:

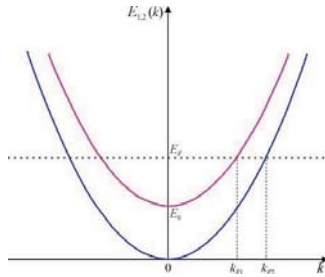
$$E_1(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{P.1.125})$$

dok je energija elektrona u drugoj zoni data u obliku:

$$E_2(\vec{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{P.1.126})$$

gde je $E_0 > 0$. a) Izračunati Fermi-jev talasni vektor (k_F) za obe zone, ako je poznata Fermi-jeva energija $E_F > E_0$. b) Izračunati koncentraciju elektrona c) Odrediti izraz za gustinu stanja $g(E)$

Rešenje: Energetske zone opisane izrazima (P.1.125) i (P.1.126) ilustrovane su na Sl. P.1.10.



Sl. P.1.10 Zavisnost energije od talasnog vektora u posmatranim zonama

a) Fermi-jev talasni vektor određujemo na osnovu izraza $E(k_F) = E_F$, što će u posmatranom slučaju dati

$$\frac{\hbar^2 k_{F1}^2}{2m} = E_F \Rightarrow k_{F1} = \sqrt{\frac{2mE_F}{\hbar^2}} \quad (\text{P.1.127a})$$

$$E_0 + \frac{\hbar^2 k_{F2}^2}{2m} = E_F \Rightarrow k_{F2} = \sqrt{\frac{2m(E_F - E_0)}{\hbar^2}} \quad (\text{P.1.127b})$$

b) Koncentracija elektrona izračunava se na osnovu izraza (1.145) uz primenu aproksimacije totalne degeneracije

$$n = \frac{\sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_{\min}}^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{2\sqrt{2m}^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} (E_F - E_{\min})^{3/2} \quad (\text{P.1.128})$$

gde je E_{\min} minimalna energija posmatrane zone ($E_{\min 1} = 0$, $E_{\min 2} = E_0$). Prema tome, koncentracija elektrona u prvoj i drugoj zoni respektivno, data je izrazima:

$$n_1 = \frac{(2mE_F)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (\text{P.1.129a})$$

$$n_2 = \frac{(2m(E_F - E_0))^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (\text{P.1.129b})$$

Ukupna koncentracija elektrona predstavlja zbir koncentracija u pojedinačnim zonama:

$$n = n_1 + n_2 = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} [E_F^{3/2} + (E_F - E_0)^{3/2}] \quad (\text{P.1.130})$$

c) Gustina stanja u svakoj zoni određena je izrazom oblika (1.143), a ukupna gustina stanja dobija se sabiranjem po preklapljenim zonama i glasi:

$$g(E) = \begin{cases} 0, & E < 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{m^{3/2} \sqrt{E}}{\hbar^3}, & 0 < E < E_0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} (\sqrt{E} + \sqrt{E - E_0}), & E_0 < E \end{cases} \quad (\text{P.1.131})$$

Problem 1.17. Dat je izraz za gustinu elektronskih stanja u nekom materijalu, u obliku

$$g(E) = C \cdot E \quad (\text{P.1.132})$$

gde je $C = 1.95 \cdot 10^{66} \text{ J}^{-2} \text{ m}^{-3}$. Odrediti vrednost Fermi-jeve energije E_F ako koncentracija elektrona u provodnoj zoni iznosi $n = 5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$.

Rešenje: Pošto je koncentracija elektrona u provodnoj zoni $n = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ veoma visoka jasno je da se Fermi-jev nivo mora nalaziti u provodnoj zoni, odnosno da je u važnosti aproksimacija totalne degeneracije. U tom slučaju, veza između koncentracije i gustine stanja je oblika:

$$n = 2 \int_0^{E_F} g(E) dE \quad (\text{P.1.133})$$

Zamenom izraza za gustinu stanja za posmatrani materijal dobijamo

$$n = 2C \int_0^{E_F} E dE = aE_F^2 \quad (\text{P.1.134})$$

gde je $a \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ eV}^{-2} \text{ cm}^{-3}$. Na osnovu prethodnog izraza Fermijeva energija iznosi

$$E_F = \sqrt{\frac{n}{a}} = 1 \text{ eV} \quad (\text{P.1.135})$$

Problem 1.18. Pretpostavimo da je energija elektrona koji se kreću u periodičnom potencijalu oblika

$$E(\vec{k}) = 6C - 2C \cos(ak_x) - 2C \cos(ak_y) - 2C \cos(ak_z) \quad (\text{P.1.136})$$

gde je $C = 4 \text{ eV}$ a konstanta rešetke $a = 2.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Odrediti efektivnu masu elektrona na dnu energetske zone (gde je $ak_i \ll 1$, $i = x, y, z$).

Rešenje: Na osnovu oblika izraza (P.1.136) vidimo da će vandijagonalne komponente tenzora efektivne mase biti jednake nuli, a dijagonalne međusobno jednake, tako da je efektivna masa u ovom primeru zapravo skalarna veličine. Uzimajući u obzir da je ak_i veoma malo i razvijajući funkciju (P.1.136) u okolini $\vec{k} = (0, 0, 0)$, dobijamo:

$$\frac{1}{m_{xx}} = \frac{1}{m_{yy}} = \frac{1}{m_{zz}} = \frac{1}{m^*} = \frac{2Ca^2}{\hbar^2} \quad (\text{P.1.137})$$

Na osnovu toga se zavisnost energije od talasnog vektora može prikazati u obliku:

$$E(\vec{k}) \approx E(0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{P.1.138})$$

Zamenom brojnih vrednosti dobijamo:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2Ca^2} \approx 1.4 \cdot 10^{-30} \text{ kg} \approx 0.15 m_0 \quad (\text{P.1.139})$$

gde je m_0 masa slobodnog elektrona.

Problem 1.19. Odrediti koliko puta se promeni koncentracija elektrona u provodnoj zoni sopstvenog poluprovodnika čiji energetski procep iznosi $E_g = 2 \text{ eV}$, ako se temperatura poveća sa 27°C na 77°C .

Rešenje: Koncentracija elektrona u provodnoj zoni sopstvenog poluprovodnika određena je izrazom (1.241) i glasi:

$$n_i = 2 \left(\frac{2\pi k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} (m_p m_i)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \quad (\text{P.1.140})$$

Na osnovu toga će odnos koncentracija na temperaturama T_2 i T_1 iznositi

$$\frac{n_i(T_2)}{n_i(T_1)} = \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2k_B} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)} \quad (\text{P.1.141})$$

gde je $T_1 = 27 + 273 = 300 \text{ K}$ a $T_2 = 77 + 273 = 350 \text{ K}$. Zamenom brojnih vrednosti dobijamo:

$$\frac{n_i(T_2)}{n_i(T_1)} = \left(\frac{350}{300} \right)^{3/2} e^{5.52} \approx 315 \quad (\text{P.1.142})$$

Problem 1.20. Pretpostavimo da je energija elektrona koji se kreće u jednodimenzionalnom kristalu, u posmatranoj dozvoljenoj zoni oblika:

$$E(k) = (2A + 2B) - 2A \cos(ak) - 2B \cos(2ak) \quad (\text{P.1.143})$$

gde je $A = 0.5 \text{ eV}$, $B = 0.25 \text{ eV}$, a konstanta rešetke iznosi $a = 2.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. a) Odrediti minimalnu i maksimalnu energiju date dozvoljene zone ($E_{\min}(k_{\min})$ i $E_{\max}(k_{\max})$), gde su k_{\min} i k_{\max} odgovarajući talasni vektori. b) Odrediti efektivnu masu elektrona na dnu energetske zone c) odrediti efektivnu masu elektrona na vrhu energetske zone d) Odrediti efektivnu masu elektrona na kraju I Brillouin-ove zone ($k = \pi/a$).

Rešenje: Oblik dozvoljene zone, definisan izrazom (P.1.143) prikazan je na Sl. P.1.11.

a) Minimalnu i maksimalnu vrednost energije odredićemo izjednačavanjem prvog izvoda energije po talasnom vektoru sa nulom. U tačkama ekstremuma važi:

$$\left. \frac{\partial E}{\partial k} \right|_{k=k_{\min, \max}} = 0 \quad (\text{P.1.144})$$

Na osnovu izraza (1) dobijamo:

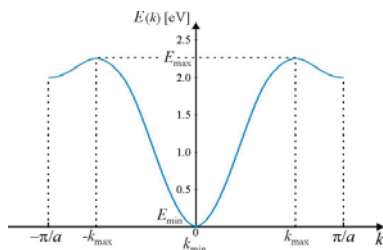
$$a \sin(ak) [A + 4B \cos(ak)] = 0 \quad (\text{P.1.145})$$

Ova jednačina ima dva rešenja, prvo je

$$k_{\min} = 0, \quad \Rightarrow \quad E_{\min} = 0 \quad (\text{P.1.146})$$

Drugo rešenja određuje maksimalnu vrednost energije i glasi

$$k_{\max} = \arccos(-A/4B) / a = 2\pi / 3a \quad \Rightarrow \quad E_{\max} = 2.25 \text{ eV} \quad (\text{P.1.147})$$



Sl. P.1.11 Zavisnost energije od talasnog vektora u posmatranoj zoni

b) Efektivna masa elektrona određuje se na osnovu izraza

$$\frac{1}{m^*(k)} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad \Rightarrow \quad m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2a^2 [A \cos(ak) + 4B \cos(2ak)]} \quad (\text{P.1.148})$$

U minimumu zone, efektivna masa iznosi

$$m^*(k=0) = \frac{\hbar^2}{2a^2 (A + 4B)} = 3.71 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx 0.41 m_0 \quad (\text{P.1.149})$$

c) U maksimumu energetske zone efektivna masa elektrona biće negativna:

$$m^*(k = 2\pi / 3a) = -\frac{\hbar^2}{a^2 (A + 4B)} = -7.42 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx -0.81 m_0 \quad (\text{P.1.150})$$

d) Na granici I Brillouin-ove zone efektivna masa elektrona iznosi:

$$m^*(k = \pi / a) = \frac{\hbar^2}{2a^2 (-A + 4B)} = 11.12 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx 1.22 m_0 \quad (\text{P.1.151})$$

Problem 1.21. Dat je izraz za gustinu elektronskih stanja u nekom materijalu, u obliku

$$g(E) = \begin{cases} 0, & E < 0 \\ CE^{-1/2}, & 0 < E < E_0 \\ CE^{-1/2} + C(E - E_0)^{-1/2}, & E > E_0 \end{cases} \quad (\text{P.1.152})$$

gde je $C = 1.6 \cdot 10^{38} \text{ J}^{-1/2} \text{ m}^{-3}$, a $E_0 = 0.2 \text{ eV}$. Izračunati Fermi-jevu energiju E_F ako koncentracija elektrona u provodnoj zoni iznosi $n = 6.4 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$.

Rešenje: S obzirom na veliku vrednost koncentracije elektrona, jasno je da se Fermi-jev nivo nalazi u dozvoljenoj zoni pa ćemo primeniti aproksimaciju totalne degeneracije tako da veza između koncentracije i gustine stanja glasi:

$$n = 2 \int_0^{E_F} g(E) dE \quad (\text{P.1.152})$$

gde je vrednost gornje granice integracije nepoznata. Pretpostavimo da je $0 < E_F < E_0$, tada prethodni izraz dobija oblik:

$$n = 2C \int_0^{E_F} E^{-1/2} dE = C \sqrt{E_F} \quad (\text{P.1.153})$$

Na osnovu toga dobija se vrednost Fermi-jeve energije

$$E_F = \frac{n^2}{C^2} = 1 \text{ eV} \quad (\text{P.1.154})$$

Kako je dobijena vrednost $E_F > E_0$ što je u suprotnosti sa pretpostavkom, to znači da se Fermi-jev nivo nalazi u opsegu $E_0 < E_F$, pa je

$$n = 2C \left\{ \int_0^{E_g} E^{-1/2} dE + \int_{E_0}^{E_F} [E^{-1/2} + (E - E_0)^{-1/2}] dE \right\} = C(\sqrt{E_F} + \sqrt{E_F - E_0}) \quad (\text{P.1.155})$$

Kvadriranjem gornjeg izraza i preuređivanjem dolazimo do vrednosti Fermi-jeve energije:

$$E_F = \frac{[(n/C)^2 + E_0^2]}{4(n/C)^2} = 0.36 \text{ eV} \quad (\text{P.1.156})$$

Problem 1.22. a) Izračunati odnos specifičnih električnih provodnosti kristala silicijuma bez primesa na temperaturama $T_1 = 300\text{K}$ i $T_2 = 350\text{K}$, ako je energetski procep silicijuma jednak $E_g = 1.114 \text{ eV}$. b) Izračunati koncentraciju elektrona u provodnoj zoni na temperaturi $T = 300\text{K}$, ako je efektivna masa elektrona $m_n = 0.26m_0$, a efektivna masa šupljina $m_p = 0.49m_0$, gde je m_0 masa slobodnog elektrona.

Rešenje: a) Ukupna specifična električna provodnost sopstvenog poluprovodnika ima oblik $\sigma(T) = en(T)(|\mu_n| + \mu_p)$ gde su μ_n i μ_p pokretljivost elektrona i šupljina respektivno. Prema tome odnos specifičnih otpornosti na posmatranim temperaturama svodi se na odnos odgovarajućih koncentracija i iznosi (videti Problem 1.19):

$$\frac{\sigma(T_2)}{\sigma(T_1)} = \frac{n_i(T_2)}{n_i(T_1)} = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2k_B} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)} \approx 27.3 \quad (\text{P.1.157})$$

b) Koncentracija elektrona u provodnoj zoni na $T = 300\text{K}$ iznosi

$$n_i(T = 300\text{K}) = 2 \left(\frac{2\pi k_B T}{h^2}\right)^{3/2} (m_p m_n)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \approx 2.4 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3} \quad (\text{P.1.158})$$

Problem 1.23. Neka je energija elektrona u dvodimenzionalnoj rešeci oblika:

$$E(k_x, k_y) = -4A \cos\left(\frac{(k_x + k_y)a}{2}\right) \cos\left(\frac{(k_x - k_y)a}{2}\right) - 4B \sin\left(\frac{(k_x + k_y)a}{2}\right) \sin\left(\frac{(k_x - k_y)a}{2}\right) \quad (\text{P.1.159})$$

gde je $A = 1 \text{ eV}$, $B = 0.2 \text{ eV}$ i $a = 1 \text{ \AA}$. Odrediti tenzor inverzne efektivne mase za $(k_x, k_y) = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ i za $(\frac{\pi}{a}, 0)$. Kako izgledaju ekvionergetske površine u okolini ovih tačaka u \vec{k} -prostoru?

Rešenje: Izraz (P.1.159) možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned} E(k_x, k_y) &= -2A[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] - 2B[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)] \\ &= 2(B - A)\cos(k_x a) - 2(A + B)\cos(k_y a) \end{aligned} \quad (\text{P.1.160})$$

odakle sledi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_{xx}} &= \frac{2a^2(A - B)}{\hbar^2} \cos(k_x a) \\ \frac{1}{m_{yy}} &= \frac{2a^2(A + B)}{\hbar^2} \cos(k_y a) \end{aligned} \quad (\text{P.1.161})$$

Tenzor inverzne efektivne mase je dijagonalan, njegov oblik u odabranim tačkama u \vec{k} -prostoru glasi:

$$\left[\frac{1}{m^*}\right]_{\vec{k}=(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})} = \frac{2a^2}{\hbar^2} \begin{bmatrix} (B - A) & 0 \\ 0 & -(B + A) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/4.77m_0 & 0 \\ 0 & -1/3.18m_0 \end{bmatrix} \quad (\text{P.1.162a})$$

$$\left[\frac{1}{m^*}\right]_{\vec{k}=(\frac{\pi}{a}, 0)} = \frac{2a^2}{\hbar^2} \begin{bmatrix} B - A & 0 \\ 0 & (B + A) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/4.77m_0 & 0 \\ 0 & 1/3.18m_0 \end{bmatrix} \quad (\text{P.1.162b})$$

Zavisnost energije od talasnog vektora u okolini postamtrane tačke $\vec{k} = \vec{k}_0$ je oblika:

$$E(k_x, k_y) \approx E(k_{x0}, k_{y0}) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}(k_{x0}, k_{y0})} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}(k_{x0}, k_{y0})} \quad (\text{P.1.163})$$

Kako su za $(k_x, k_y) = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ obe komponente efektivna mase istog znaka, ekvionergetska površina u okolini ove ima oblik elipse. S druge strane, za $(k_x, k_y) = (\frac{\pi}{a}, 0)$ imamo $m_{xx} < 0$ a $m_{yy} > 0$, pa ekvionergetske površine imaju oblik hiperbole.

Problem 1.24. Pretpostavimo da je u nekom anizotropnom metalu koncentracija slobodnih elektrona u provodnoj zoni jednaka $n = 5 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, a zavisnost energije od talasnog vektora oblika:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z} \quad (\text{P.1.164})$$

gde efektivne mase izražene u jedinicama mase slobodnog elektrona iznose $m_x = 1$, $m_y = 1.25$ i $m_z = 0.8$. a) naći izraz za energetsku gustinu stanja $g(E)$ b) izračunati Fermi-jevu energiju E_F .

Rešenje: a) U poglavlju 1.2.2 izveden je izraz za gustinu stanja (izraz (1.136)) u slučaju sfernih ekvivalentnih površina, u obliku

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \sqrt{\frac{m_x m_y m_z}{\hbar^3}} \sqrt{E} \quad (\text{P.1.165})$$

Zamenom brojnih vrednosti dobijamo:

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{m_0^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E} \quad (\text{P.1.166})$$

b) Koncentracija elektrona u provodnoj zoni metala određena je izrazom

$$n = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{m_0^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \frac{m_0^{3/2}}{\hbar^3} E_F^{3/2} \quad (\text{P.1.167})$$

odakle je

$$E_F = \frac{3^{2/3}}{2m_0} \pi^{4/3} \hbar^2 n^{2/3} \approx 1.07 \text{ eV} \quad (\text{P.1.168})$$

Problem 1.25. Posmatrajmo neko čvrsto telo koje se nalazi na vrlo niskoj temperaturi i pretpostavimo da je zavisnost energije od talasnog vektora oblika:

$$E(\vec{k}) = -2A [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \quad (\text{P.1.169})$$

gde je $|k_{x,y}| \leq \pi/a$. a) Odrediti enegiju vrha i dna provodne zone b) Koliko iznosi Fermi-jeva energija ako je provodna zona polupopunjena? c) Kako izgleda Fermi-jeva površina u dvodimenzionalnoj k_x - k_y ravni? d) Izračunati srednju vrednost energije elektrona u polupunjenoj zoni.

Rešenje: a) Minimalna vrednost izraza (P.1.169) dobija se kada je $\cos(k_x a) = \cos(k_y a) = 1$ tj. $k_x = k_y = 0$, i iznosi $E_{\min} = -4A$. Analogno, energija vrha provodne zone je $E_{\max} = 4A$ i dobija se kada je $\cos(k_x a) = \cos(k_y a) = -1$, odnosno $\vec{k} = (\pm\pi/a, \pm\pi/a)$.

b) Pošto je provodna zona polupopunjena i materijal se nalazi na vrlo niskoj temperaturi, onda je Fermi-jeva energija jednaka energiji sredine zone tj. $E_F = (E_{\min} + E_{\max})/2 = 0$.

c) Na osnovu prethodnog zaključujemo da se Fermi-jeva površina određuje rešavanjem jednačine

$$E_F = -2A [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] = 0 \quad (\text{P.1.170})$$

Gornji izraz možemo napisati u obliku:

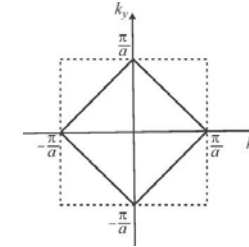
$$\cos\left(\frac{(k_x + k_y)a}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{(k_x - k_y)a}{2}\right) = 0 \quad (\text{P.1.171})$$

čije rešenje su $k_x \pm k_y = \pm \frac{\pi}{a}$. Odavde zaključujemo da je Fermi-jeva površina kvadrat čije su stranice određene sa

$$k_y = \begin{cases} -k_x + \pi/a \\ k_x - \pi/a \end{cases}, \text{ za } 0 \leq k_x \leq \pi/a \quad (\text{P.1.172a})$$

$$k_y = \begin{cases} k_x + \pi/a \\ -k_x - \pi/a \end{cases}, \text{ za } -\pi/a \leq k_x \leq 0 \quad (\text{P.1.172b})$$

kao što je prikazano na Sl. P.1.12.



Sl. P.1.12 Izgled Fermi-jeve površine (kvadrat oivičen punom linijom). Isprekidanom linijom prikazane su granice Brillouin-ove zone

d) Srednja vrednost energije elektrona u provodnoj zoni dobija se na sledeći način:

$$\bar{E} = \frac{\int_{(k_x, k_y)} E(k_x, k_y) dk_x dk_y}{\int_{(k_x, k_y)} dk_x dk_y} \quad (\text{P.1.173})$$

gde se integracija vrši po popunjenim stanjima u Brillouin-ovoj zoni, tj. po onim stanjima koja su ograničena Fermi-jevom površinom. S obzirom na simetriju, integracija se može izvršiti po prvom kvadrantu a rezultat pomnožiti sa 4. Prema tome, brojilac izraza (P.1.173) dobija oblik:

$$-4 \cdot 2A \int_{k_x=0}^{\pi/a} \int_{k_y=0}^{\pi/a-k_x} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] dk_x dk_y = -8A \frac{4}{a^2} \quad (\text{P.1.174})$$

dok je izraz u imeniocu jednak

$$4 \cdot \int_{k_x=0}^{\pi/a} \int_{k_y=0}^{\pi/a-k_x} dk_x dk_y = \frac{2\pi^2}{a^2} \quad (\text{P.1.175})$$

Konačno, srednja vrednost energije iznosi

$$\bar{E} = -\frac{16A}{\pi^2} \quad (\text{P.1.176})$$

Problem 1.26. U kvazi-jednodimenzionalnom metalu energija elektrona u posmatranoj zoni se može približno prikazati u obliku:

$$E(\vec{k}) = -2A \cos(k_x a) \quad (\text{P.1.177})$$

odnosno zavisi samo od jedne komponente talasnog vektora (k_x). a) Naći izraz za energetske gustine stanja ako su konstante rešetke u pravcu normalnom na kretanje elektrona označene sa b i c , a a je konstanta rešetke u pravcu kretanja elektrona. Skicirati dobijenu gustinu stanja. b) Ako je $a = 2 \text{ \AA}$ i $b = c = 8 \text{ \AA}$, kolika je koncentracija elektrona za polupopunjenu zonu.

Rešenje: Gustina stanja u \vec{k} -prostoru čvrstog tela data je izrazom (1.77) i iznosi:

$$g(\vec{k}) = \frac{V}{8\pi^3} \quad (\text{P.1.178})$$

gde je V zapremina celog čvrstog tela. Koncentracija elektrona dobija se na osnovu izraza (1.97), vodeći računa da se radi o metalu, što daje

$$n = \frac{1}{4\pi^3} \int_{k_x=-\pi/c}^{k_x=\pi/c} \int_{k_y=-\pi/b}^{k_y=\pi/b} \int_{k_z=-\pi/b}^{k_z=\pi/b} dk_x dk_y dk_z = \frac{1}{\pi b c} \int_{(k_x)} dk_x \quad (\text{P.1.179})$$

gde granice integracije po k_x zavise od popunjenih stanja. S druge strane, koncentracija elektrona može se izraziti preko energetske gustine stanja:

$$n = 2 \int_{(E)} g(E) dE \quad (\text{P.1.180})$$

Izraz (3) možemo dalje napisati u obliku

$$n = \frac{1}{\pi b c} \int_{(k_x)} dk_x = \frac{1}{\pi b c} \int_{(E)} \frac{2}{dE / dk_x} dE \quad (\text{P.1.181})$$

U prethodnom izrazu faktor 2 potiče od toga što pri integraciji po energiji treba uzeti u obzir da intervalu energije ($E, E + dE$) odgovara promena talasnog vektora u oblasti ($k_x, k_x + dk_x$) ali i ($-k_x, -k_x + dk_x$), (videti Problem 1.13). Na osnovu (P.1.177) imamo:

$$\frac{dE}{dk_x} = 2Aa \sin(k_x a) = 2Aa \sqrt{1 - \frac{E^2}{4A^2}} = a \sqrt{4A^2 - E^2} \quad (\text{P.1.182})$$

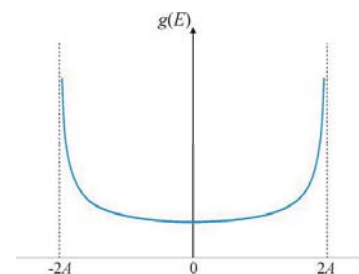
Na osnovu toga izraz (P.1.181) postaje

$$n = \frac{2}{\pi a b c} \int_{(E)} \frac{dE}{\sqrt{4A^2 - E^2}} \quad (\text{P.1.183})$$

Poređenjem izraza (P.1.183) i (P.1.180) zaključujemo da je broj stanja po jedinici energije i po jedinici zapremine jednak:

$$g(E) = \frac{1}{\pi a b c} \frac{1}{\sqrt{4A^2 - E^2}} \quad (\text{P.1.184})$$

što je ilustrovano na Sl. P.1.13.



Sl. P.1.13 Izgled energetske gustine stanja u posmatranoj zoni.

b) Koncentraciju elektrona možemo izračunati na osnovu izraza (P.1.179):

$$n = \frac{1}{\pi bc} \int_{-k_F}^{k_F} dk_x = \frac{2k_F}{\pi bc} \quad (\text{P.1.185})$$

gde je k_F Fermi-jev talasni vektor koji dobijamo rešavanjem jednačine

$$E(k_F) = E_F = -2A \cos(k_F a) \quad (\text{P.1.186})$$

Pošto je zona polupopunjena, a položaj Fermi-jevog nivoa se kod metala ne menja značajno sa temperaturom, zaključujemo da je $E_F = (E_{\max} + E_{\min})/2 = 0$ jer su maksimalna i minimalna energija u posmatranoj zoni jednake $E_{\max} = 2A$, $E_{\min} = -2A$. Zamenom E_F u izraz (P.1.186) dobijamo:

$$\cos(k_F a) = 0 \Rightarrow k_F = \pi / 2a \quad (\text{P.1.187})$$

pa je koncentracija elektrona jednaka

$$n = \frac{1}{abc} = 7.81 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{P.1.188})$$

Isti rezultat bismo naravno dobili korišćenjem izraza (P.1.183):

$$n = \frac{2}{\pi abc} \int_{-2A}^0 \frac{dE}{\sqrt{4A^2 - E^2}} = \frac{2}{\pi abc} \int_{-1}^0 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} = -\frac{2}{\pi abc} \arcsin(t) \Big|_{-1}^0 = \frac{1}{abc} \quad (\text{P.1.189})$$

Problem 1.27. Izračunati energiju donorskog stanja fosfora u energetskom procepu germanijuma ako se koncentracija elektrona pri povećanju temperature sa $T_1 = 150\text{K}$ na $T_2 = 240\text{K}$ poveća za 19%.

Rešenje: Kako se radi o oblasti relativno niskih temperatura, koncentracija elektrona može se odrediti na osnovu izraza (1.293):

$$n = \sqrt{\frac{B_c(N - P_A)}{2}} e^{\frac{(E_c - E_F)}{2k_B T}} \quad (\text{P.1.190})$$

Ako zanemarimo zavisnost faktora B_c od temperature ($B_c \sim T^{3/2}$), odnos koncentracija na različitim temperaturama može se prikazati u obliku

$$\frac{n(T_2)}{n(T_1)} \approx e^{\frac{(E_c - E_F)}{2k_B} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)} \quad (\text{P.1.191})$$

Energija donorskog nivoa prema tome glasi:

$$E_d = E_c - \frac{2k_B T_1 T_2}{T_2 - T_1} \ln \left[n(T_2) / n(T_1) \right] \quad (\text{P.1.192})$$

Zamenom brojnih vrednosti dobijamo:

$$E_d = E_c - k_B \cdot 800 \cdot \ln(1.19) = E_c - 0.012 \text{ eV} \quad (\text{P.1.193})$$

Donorski nivo se u posmatranom slučaju nalazi 12meV ispod dna provodne zone.

Problem 1.28. Posmatrajmo neki nepoznati jednodimenzionalni kristal čija elektronska struktura se sastoji od 2 relevantne zone od kojih je jedna sasvim popunjena, a druga sasvim prazna, a mogu se opisati izrazom:

$$E^\pm(k) = \pm 2\sqrt{(t \cos(ka))^2 + (\Delta \sin(ka))^2} \quad (\text{P.1.194})$$

gde je $t = 2.5 \text{ eV}$, $\Delta = 0.8 \text{ eV}$, a a je konstanta rešetke i iznosi 1.22 \AA . a) Odrediti granice posmatranih zona, kao i vrednost energetskog procepa između njih b) Izračunati efektivnu masu elektrona na dnu popunjene zona i efektivnu masu šupljina na vrhu popunjene zone.

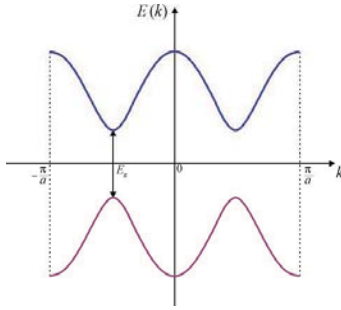
Rešenje: Na Sl. P.1.14 prikazan je profil posmatranih zona, a njihove granice se mogu odrediti izjednačavanjem izvoda izraza (P.1.194) po k sa nulom:

$$\frac{dE^\pm}{dk} \Big|_{k=k_0} = \pm \frac{-2a(\Delta - t) \sin(ka) \cos(ka)}{\sqrt{(t \cos(ka))^2 + (\Delta \sin(ka))^2}} \Big|_{k=k_0} = 0 \quad (\text{P.1.195})$$

odakle dobijamo

$$\sin(k_0 a) \cos(k_0 a) = 0 \Rightarrow k_0 = 0, \pm \frac{\pi}{a} \vee k_0 = \pm \frac{\pi}{2a} \quad (\text{P.1.196})$$

gde je k_0 talasni vektor ekstremuma u okviru prve Brillouin-ove zone.



Sl. P.1.14 Zavisnost energije od talasnog vektora u posmatranim zonama.

Zamenom vrednosti parametara dobijamo da je

$$\begin{aligned} E_{\max}^+ &= 2t = 5 \text{ eV}, & \text{za } k_0 &= 0, \pm\pi/a \\ E_{\min}^+ &= 2\Delta = 1.6 \text{ eV}, & \text{za } k_0 &= \pm\pi/2a \\ E_{\max}^- &= -2\Delta = -1.6 \text{ eV}, & \text{za } k_0 &= \pm\pi/2a \\ E_{\min}^- &= -2t = -5 \text{ eV}, & \text{za } k_0 &= 0, \pm\pi/a \end{aligned} \quad (\text{P.1.197})$$

a vrednost energetskog procepa je

$$E_g = E_{\min}^+ - E_{\max}^- = 3.2 \text{ eV} \quad (\text{P.1.198})$$

b) Tražene efektivne mase odredićemo dodatnim diferenciranjem izraza (P.1.195) po k , što daje:

$$\left. \frac{d^2 E^\pm}{dk^2} \right|_{k=k_0} = \pm \frac{2a^2 (\Delta^2 - t^2)}{\sqrt{(t \cos(k_0 a))^2 + (\Delta \sin(k_0 a))^2}} \quad (\text{P.1.199})$$

odnosno

$$m^* \Big|_{k=k_0} = \pm \frac{\hbar^2 \sqrt{(t \cos(k_0 a))^2 + (\Delta \sin(k_0 a))^2}}{2a^2 (\Delta^2 - t^2)} \quad (\text{P.1.200})$$

Efektivna masa elektrona na dnu popunjene zone iznosi:

$$m^* \Big|_{k=0} = -\frac{\hbar^2 t}{2a(\Delta^2 - t^2)} \approx -1.04 \cdot 10^{-30} \text{ kg} = 1.14 m_0 \quad (\text{P.1.201})$$

a efektivna masa šupljina na vrhu popunjene zone

$$m^* \Big|_{k=\pm\frac{\pi}{2a}} = -m^* \Big|_{k=\pm\frac{\pi}{2a}} = \frac{\hbar^2 \Delta}{2a(\Delta^2 - t^2)} \approx -3.32 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = -0.36 m_0 \quad (\text{P.1.202})$$

Problem 1.29. Pretpostavimo da se u dvodimenzionalnom kristalu zavisnost energije od talasnog vektora u provodnoj zoni može aproksimirati izrazom:

$$E(\vec{k}) = Ak^4 \quad (\text{P.1.203})$$

gde je A konstanta, a $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. Izvesti izraz za energetsku gustinu stanja u provodnoj zoni.

Rešenje: Koncentracija elektrona u dvodimenzionalnom kristalu data je izrazom:

$$\begin{aligned} N_s &= \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{(k)} f_{FD}(E, E_F) dV_k = \frac{1}{\pi} \int_{(k)} f_{FD}(E, E_F) k dk \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{(E)} f_{FD}(E, E_F) k \frac{dk}{dE} dE \end{aligned} \quad (\text{P.1.204})$$

S druge strane, veza površinske koncentracije i energetske gustine stanja glasi:

$$N_s = 2 \int_{(E)} f_{FD}(E, E_F) g(E) dE \quad (\text{P.1.205})$$

na osnovu čega sledi

$$g(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{k}{dE/dk} = \frac{1}{8\pi} \frac{1}{4\sqrt{AE}} \quad (\text{P.1.206})$$

Problem 1.30. Pretpostavljajući da je disperziona relacija u kristalu neparabolična, oblika

$$E(k)[1 + \alpha E(k)] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(0)} \quad (\text{P.1.207})$$

gde je $m^*(0) = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=0}$. Izračunati brzinu elektrona u funkciji talasnog vektora $v(k)$.

Rešenje: Brzina elektrona određena je izrazom:

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (\text{P.1.208})$$

Diferenciranjem disperzione relacije (P.1.207) po talasnom vektoru dobijamo:

$$\frac{dE}{dk}(1+2\alpha E) = \frac{\hbar^2 k}{m^*(0)} \quad (\text{P.1.209})$$

odakle je

$$v(k) = \frac{\hbar k}{m^*(0)[1+2\alpha E(k)]} = \frac{\hbar k}{m^*(E)} \quad (\text{P.1.210})$$

gde smo uveli energetski zavisnu efektivnu masu $m^*(E) = m^*(0)[1+2\alpha E(k)]$.

Problem 1.31. Posmatrati poluprovodnik koji se nalazi na temperaturi $T = 0\text{K}$ i za taj slučaj izračunati:

- površinsku koncentraciju elektrona, pretpostavljajući da je zavisnost energije od talasnog vektora parabolična, sa efektivnom masom m^*
- srednju vrednost x -komponente brzine elektrona (usrednjenu po svim stanjima)
- ponoviti izračunavanje površinske koncentracije za proizvoljnu vrednost temperature

Rešenje: a) Površinska koncentracija elektrona u poluprovodniku određena je izrazom:

$$N_s = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{(k)} f_{FD}(E, E_F) dV_k = \frac{1}{\pi} \int_{(k)} f_{FD}(E, E_F) k dk \quad (\text{P.1.211})$$

Na temperaturi $T = 0\text{K}$ i za slučaj parabolične disperzione relacije u obliku $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, prethodni izraz se svodi na

$$N_s = \frac{m^*}{\hbar^2 \pi} \int_0^{E_F} dE = \frac{m^* E_F}{\hbar^2 \pi} \quad (\text{P.1.212})$$

gde smo Fermi-Dirac-ovu funkciju raspodele na 0K zamenili sa Heaviside-ovom step funkcijom $h(E_F - E)$.

b) Brzina elektrona u x -pravcu glasi:

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x} = \frac{\hbar^2 k_x}{m^*} \quad (\text{P.1.213})$$

Prelaskom na polarne koordinate dobijamo $k_x = k \cos \theta = \sqrt{2m^* E / \hbar^2} \cos \theta$, pa prethodni izraz postaje

$$v_x(E, \theta) = \sqrt{\frac{2E}{m^*}} \cos \theta \quad (\text{P.1.214})$$

a srednja vrednost iznosi

$$\bar{v}_x = \frac{\int_{E=0}^{E_F} \int_{\theta=0}^{2\pi} \sqrt{E} \cos \theta dE d\theta}{\int_{E=0}^{E_F} \int_{\theta=0}^{2\pi} dE d\theta} = \frac{4}{3\pi} \sqrt{\frac{2E_F}{m^*}} = \frac{4}{3\pi} v_F \quad (\text{P.1.215})$$

gde je $v_F = \sqrt{2E_F / m^*}$.

c) Na proizvoljnoj temperaturi, površinska koncentracija elektrona izračunava se na osnovu izraza:

$$N_s = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{(E)} f_{FD}(E, E_F) dE = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{dE}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{E_F / (k_B T)} \right] \quad (\text{P.1.216})$$

Problem 1.32. Za poluprovodnik sa sporopromenljivom efektivnom masom $m^*(x)$ izvesti jednačinu kretanja elektrona u k -prostoru analognu onoj koja važi za slučaj kada je efektivna masa konstantna:

$$\frac{d(\hbar k)}{dt} = F_x = -\frac{dE_c(x)}{dx} \quad (\text{P.1.217})$$

gde F_x označava silu u pravcu x -ose, a $E_c(x)$ je dno provodne zone.

Rešenje: Ukupna energija elektrona jednaka je zbiru kinetičke i potencijalne energije:

$$E_{tot}(k, x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(x)} + E_c(x) \quad (\text{P.1.218})$$

pa je

$$\begin{aligned}\frac{dE(k,x)}{dt} &= \frac{\partial E}{\partial k} \frac{dk}{dt} + \frac{\partial E}{\partial x} \frac{dx}{dt} \\ &= \hbar v_x \frac{dk}{dt} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*} \right) \frac{dx}{dt} + \frac{dE_c}{dx} \frac{dx}{dt}\end{aligned}\quad (\text{P.1.219})$$

Pošto se ukupna energija održava sa vremenom, imamo

$$\frac{dE(k,x)}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d(\hbar k)}{dt} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*} \right) - \frac{dE_c}{dx} \quad (\text{P.1.220})$$

odakle dobijamo traženu jednačinu kretanja u obliku

$$\frac{d(\hbar k)}{dt} = \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) - \frac{dE_c}{dx} \quad (\text{P.1.221})$$

Ovaj primer je od značaja za poluprovodničke heterostrukture kod kojih efektivna masa sporo varira sa koordinatom.

Problem 1.33. Za trodimenzionalni elektronski gas izračunati srednju vrednost kinetičke energije po jednom elektronu u slučaju totalne nedegeneracije i parabolodne zavisnosti energije od talasnog vektora, sa izotropnom efektivnom masom. Ponoviti proračun za odgovarajući dvodimenzionalni elektronski gas.

Rešenje: Srednju vrednost kinetičke energije po jednom elektronu određujemo na sledeći način:

$$\begin{aligned}\bar{E}_{3D} &= \frac{2 \int_0^\infty g_{3D}(E) f_{FD}(E, E_F) E dE}{n} \\ &\approx \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{E_F}{k_B T}} \int_0^\infty e^{-\frac{E}{k_B T}} E^{3/2} dE = \frac{\sqrt{2} m^{*3/2} (k_B T)^{5/2}}{n \pi^2 \hbar^3} e^{\frac{E_F}{k_B T}} \Gamma(5/2)\end{aligned}\quad (\text{P.1.222})$$

Koncentracija elektrona u ovom slučaju prema (1.156) iznosi

$$n = 2 \left(\frac{m^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} \quad (\text{P.1.223})$$

pa je

$$\bar{E}_{3D} = \frac{3}{2} k_B T \quad (\text{P.1.224})$$

Za dvodimenzionalni elektronski gas pod istim uslovima imamo:

$$\bar{E}_{2D} = \frac{2 \int_0^\infty g_{2D}(E) f_{FD}(E, E_F) E dE}{n_s} \quad (\text{P.1.225})$$

gde je n_s površinska koncentracija elektrona, a $g_{2D}(E)$ je odgovarajuća gustina stanja. Pošto je

$$n_s = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{k_x=0}^\infty \int_{k_y=0}^\infty f_{FD}(E, E_F) dk_x dk_y = \frac{1}{\pi} \int_{k=0}^\infty f_{FD}(E, E_F) k dk \approx \frac{m^*}{\pi \hbar^2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} \quad (\text{P.1.226})$$

a odatle sledi i

$$g_{2D}(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{kdE}{dE} = \frac{m^*}{2\pi \hbar^2} \quad (\text{P.1.227})$$

izraz (P.1.225) dobija oblik:

$$\bar{E}_{2D} = \frac{\frac{m^*}{\pi \hbar^2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} \int_0^\infty e^{-\frac{E}{k_B T}} E dE}{n_s} = k_B T \quad (\text{P.1.228})$$

Problem 1.34. Koncentracija elektrona u sopstvenom poluprovodniku na temperaturi od 400 K iznosi $1.38 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Odrediti vrednost efektivne mase šupljina ako je efektivna masa elektrona $m_n = 0.4m_0$, gde je m_0 masa slobodnog elektrona. Poznato je da se širina energetskog procepa menja sa temperaturom po linearnom zakonu $E_g(T) = a - bT$, gde je $a = 0.785 \text{ eV}$, $b = 4 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$.

Rešenje: Koncentracija elektrona u sopstvenom poluprovodniku određena je izrazom (1.241):

$$n_i = 2 \left(\frac{2\pi k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} (m_p m_n)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \quad (\text{P.1.229})$$

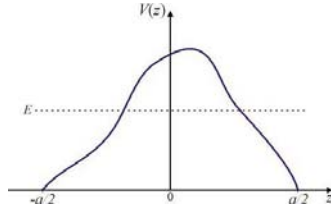
Odavde se može izraziti efektivna masa šupljina u obliku

$$m_p = \frac{1}{m_n} \left(\frac{n_i}{2} \right)^{4/3} \left(\frac{\hbar^2}{2\pi k_B T} \right)^2 e^{\frac{2(a-bT)}{3k_B T}} \quad (\text{P.1.230})$$

Zamenom brojnih vrednosti dobijamo

$$m_p \approx 0.52m_0 \quad (\text{P.1.231})$$

Problem 1.35. Razmotriti slučaj jednodimenzionalnog periodičnog potencijala $U(z)$ koji se sastoji od niza identičnih potencijalnih barijera $V(z)$, širine a , centriranih u tačkama $z = \pm na$ gde je n ceo broj. Pojedinačna barijera $V(z)$ ima opšti oblik kao što je prikazano na Sl. P.1.15, i može se okarakterisati amplitudom transmisije $t(k)$ i refleksije $r(k)$ za elektrone čija je energija $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, koji nailaze na nju.



Sl. P.1.15 Profil pojedinačne barijere izdvojene iz periodičnog potencijala

a) Za slučaj izolovane barijere napisati opšti oblik talasnih funkcija za elektrone energije $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ koji nailaze na nju.

b) Naći vezu energije i talasnog vektora elektrona u periodičnom potencijalu $U(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V(z+na)$. Pokazati da se za slobodan elektron ($V = 0$) dobija ispravan rezultat.

c) Koristeći osnovne osobine koeficijenata t i r , pokazati da Bloch-ovi talasi egzistiraju samo u odgovarajućim energetskeim zonama

Rešenje: a) Talasna funkcija elektrona energije E , koji nailazi s leve strane barijere prikazane na Sl. P.1.15, može se prikazati u obliku:

$$\psi_L(z) = \begin{cases} e^{ikz} + r_L e^{-ikz}, & z \leq -a/2 \\ t_L e^{ikz}, & z \geq a/2 \end{cases} \quad (\text{P.1.232})$$

gde je $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Talasna funkcija elektrona iste energije koji nailazi na barijeru s desne strane može se opisati izrazom:

$$\psi_D(z) = \begin{cases} e^{-ikz} + r_D e^{ikz}, & z \geq a/2 \\ t_D e^{-ikz}, & z \leq -a/2 \end{cases} \quad (\text{P.1.233})$$

Ukoliko barijera nije simetrična, amplitude transmisije t_L i t_D će u opštem slučaju biti različite, a isto važi i za r_L i r_D . Opšte rešenje za talasnu funkciju dato je linearnom kombinacijom ψ_L i ψ_D :

$$\psi(z) = A\psi_L(z) + B\psi_D(z) \quad (\text{P.1.234})$$

gde su A i B konstante. Unutar barijere $-a/2 < z < a/2$, talasna funkcija dobija se rešavanjem Schrödinger-ove jednačine:

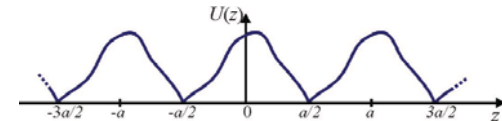
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad -\frac{a}{2} < z < \frac{a}{2} \quad (\text{P.1.235})$$

b) Ukoliko imamo periodični potencijal u obliku $U(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V(z+na)$ tj. niz barijera koje se međusobno dodiruju, kao na Sl. P.1.16, Hamiltonian u oblasti $-a/2 < z < a/2$ biće identičan kao kod pojedinačne barijere, a rešenje u ostatku strukture odredićemo uz pomoć Bloch-ove teoreme:

$$\psi(z+a) = e^{ik_a} \psi(z) \quad (\text{P.1.236a})$$

$$\Rightarrow \psi'(z+a) = e^{ik_a} \psi'(z) \quad (\text{P.1.236b})$$

gde je k_a konstanta koja igra ulogu talasnog vektora elektrona u periodičnom potencijalu, a funkcija $\psi(z)$ je data izrazom (P.1.234).



Sl. P.1.16 Periodični potencijal sastavljen od niza barijera centriranih u tačkama $z = \pm na$

Na osnovu toga, za $z = -a/2$ imamo:

$$A\psi_L(a/2) + B\psi_D(a/2) = e^{ik_a} [A\psi_L(-a/2) + B\psi_D(-a/2)] \quad (\text{P.1.237a})$$

$$A\psi_L'(a/2) + B\psi_D'(a/2) = e^{i\tilde{k}a} [A\psi_L'(-a/2) + B\psi_D'(a/2)] \quad (\text{P.1.237b})$$

odnosno,

$$A[t_L e^{i\tilde{k}a} - e^{i\tilde{k}a}(1+r_L e^{i\tilde{k}a})] + B[1+r_D e^{i\tilde{k}a} - t_D e^{i\tilde{k}a} e^{i\tilde{k}a}] = 0 \quad (\text{P.1.238a})$$

$$A[t_L e^{i\tilde{k}a} - e^{i\tilde{k}a}(1+r_L e^{i\tilde{k}a})] + B[1+r_D e^{i\tilde{k}a} - t_D e^{i\tilde{k}a} e^{i\tilde{k}a}] = 0 \quad (\text{P.1.238b})$$

Sabiranjem i oduzimanjem prethodna dva izraza dobijamo:

$$A(t_L e^{i\tilde{k}a} - e^{i\tilde{k}a}) + B r_D e^{i\tilde{k}a} = 0 \quad (\text{P.1.239a})$$

$$-A r_L e^{i\tilde{k}a} e^{i\tilde{k}a} + B(1 - t_D e^{i\tilde{k}a} e^{i\tilde{k}a}) = 0 \quad (\text{P.1.239b})$$

Da bi ovaj sistem jednačina imao netrivialna rešenja njegova determinanta mora biti jednaka nuli, što daje:

$$(t_L t_D - r_L r_D) e^{i\tilde{k}a} + e^{-i\tilde{k}a} = t_L e^{-i\tilde{k}a} + t_D e^{i\tilde{k}a} \quad (\text{P.1.240})$$

Prethodni izraz daje vezu između energije elektrona $E = \hbar^2 \tilde{k}^2 / 2m$ i talasnog vektora u kristalu \tilde{k} .

Ako pretpostavimo da je barijera simetrična, što je kod kristala obično ispunjeno, tada imamo $V(z) = V(-z)$, $r_L = r_D = r$, $t_L = t_D = t$. U tom slučaju izraz (P.1.240) dobija oblik:

$$(t^2 - r^2) e^{i\tilde{k}a} + e^{-i\tilde{k}a} = 2t \cos(\tilde{k}a) \quad (\text{P.1.241})$$

Ukoliko je elektron slobodan ($V = 0$), tada je $r = 0$, $t = 1$ pa (P.1.241) postaje

$$\cos(ka) = \cos(\tilde{k}a) \quad (\text{P.1.242})$$

odnosno

$$k = \tilde{k} \quad (\text{P.1.243})$$

što je ispravan rezultat jer za slobodan elektron veza energije i talasnog vektora treba da ima oblik $E(\tilde{k}) = \hbar^2 \tilde{k}^2 / 2m$.

c) Pretpostavimo da elektron nailazi s leve strane ne izolovanu barijeru (koju ćemo smatrati simetričnom) i da smo njegovu talasnu funkciju u oblastima van barijere prikazali izrazom

(P.1.232) prilagođenim za simetričan slučaj. Pošto u stacionarnom stanju gustina struje verovatnoće $\vec{J} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \psi' - \psi \psi'^*)$ mora biti prostorno konstanta, primena ovog uslova na oblasti $z \leq -a/2$ i $z \geq a/2$ daje:

$$\left(\psi_L^* \psi_L' - \psi_L \psi_L'^* \right) \Big|_{z \leq -\frac{a}{2}} = \left(\psi_L^* \psi_L' - \psi_L \psi_L'^* \right) \Big|_{z \geq \frac{a}{2}} \quad (\text{P.1.234a})$$

$$\Rightarrow 1 - |r|^2 = |t|^2 \quad (\text{P.1.234b})$$

što je i očekivano zbog održanja energije.

Posmatrajmo sada dva elektrona iste energije koji istovremeno nailaze na barijeru, jedan s leve a drugi sa desne strane. U tom slučaju ukupna gustina struje verovatnoće je jednaka nuli, što primenjeno na oblast $z \leq -a/2$ daje:

$$\left[(\psi_L + \psi_D)^* (\psi_L + \psi_D)' - (\psi_L + \psi_D) (\psi_L' + \psi_D')^* \right] \Big|_{z \leq -\frac{a}{2}} = 0 \quad (\text{P.1.235})$$

odakle sledi

$$1 - |r|^2 - |t|^2 - r^* t - t^* r = 0 \quad (\text{P.1.236})$$

Na osnovu (P.1.234b) zaključujemo da je

$$r^* t - t^* r = 2 \operatorname{Re}(r^* t) = 0 \quad (\text{P.1.237})$$

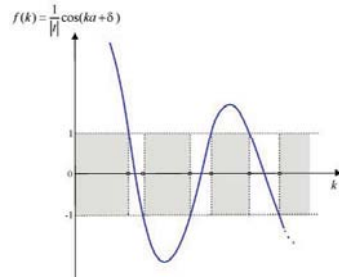
što znači da $r^* t$ mora biti čisto imaginaran broj. Napišaćemo koeficijente r i t u obliku:

$$t = |t| e^{i\delta}, \quad r = i|r| e^{i\delta} \quad (\text{P.1.238})$$

čime je zadovoljen uslov (P.1.237). Zamenom i izraz (P.1.241) koji važi za periodičan potencijal dobijamo:

$$\frac{\cos(ka + \delta)}{|t|} = \cos(\tilde{k}a) \quad (\text{P.1.239})$$

Pošto je $|t| \leq 1$, u određenim opsezima energija ćemo na levoj strani izraza (P.1.239) imati $f(k) = \cos(ka + \delta) / |t| > 1$, a s druge strane, vrednost $\cos(\tilde{k}a)$ je za realne vrednosti \tilde{k} ograničena na interval $[-1, 1]$ pa je očigledno da će te vrednosti energije pripadati zabranjenim zonama u kojima Bloch-ovi talasi ne mogu da se prostiru. Tipičan izgled funkcije $f(k)$ prikazan je na Sl. P.1.17, gde osenčene oblasti odgovaraju zabranjenim zonama.



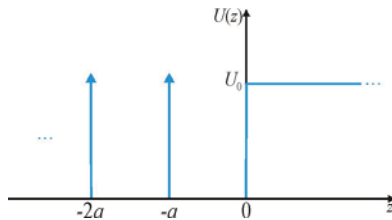
Sl. P.1.17 Opšti oblik funkcije $f(k)$ koju predstavlja leva strana izraza (P.1.239)

Problem 1.36. Za Kronig-Penney-jev δ -model polubeskonačne jednodimenzionalne kristalne rešetke ograničene konstantnim potencijalom U_0 , naći jednačinu iz koje se dobijaju energije površinskih (tamovskih) stanja.

Rešenje: Posmatrajmo profil potencijalne energije prikazan na Sl. P.1.17, koji odgovara opisanom modelu. Rešenje Schrödinger-ove jednačine u oblasti konstantnog potencijala, na energijama $0 \leq E \leq U_0$, ima oblik:

$$\Psi(z) = Ae^{-\kappa z}, \quad z \geq 0 \quad (P.1.240)$$

gde je $\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E) / \hbar^2}$.



Sl. P.1.17 Profil potencijalne energija kod polubeskonačnog Kronig-Penney-jevog δ -modela

U prvoj potencijalnoj jami levo od barijere, rešenje možemo predstaviti u formi:

$$\Psi(z) = Ae^{\beta z} + Be^{-\beta z}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad -a \leq z < 0 \quad (P.1.241)$$

U tački $z = 0$ talasna funkcija i njen prvi izvod moraju biti neprekidni, na osnovu čega dobijamo sledeće relacije između konstantni A, B , i C :

$$A + B = C \quad (P.1.242a)$$

$$i\beta(A - B) = -\kappa C \quad (P.1.242b)$$

U periodičnom delu potencijala (za $z < 0$), na osnovu Bloch-ove teoreme rešenje Schrödinger-ove jednačine ima opšti oblik $\Psi_{-k}(z) = u_{-k}(z)e^{-ikz}$, gde vodimo računa da rešenje tražimo na energijama iz zabranjenih zona (pošto se radi o površinskim stanjima), pa je talasni vektor k kompleksna veličina ($k = k_R + ik_I$, $k_I > 0$). Prema tome, funkcija (P.1.241) ispunjava periodične granične uslove: $\Psi_{-k}(z+a) = \Psi_k(z)e^{-ika}$. Ove uslove primenićemo u tački $z = -a^-$, što daje:

$$\Psi(0^-) = \Psi(-a^-)e^{-ika} = \Psi(-a^+)e^{-ika} \quad (P.1.243)$$

odnosno

$$C = e^{-ika} (Ae^{-\beta a} + Be^{\beta a}) \quad (P.1.244)$$

Determinantu sistema jednačina (P.1.242a), (P.1.242b) i (P.1.244) po nepoznatim konstantama izjednačićemo sa nulom, kako bi dobili netrivialna rešenja:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ i\beta & -i\beta & \kappa \\ e^{-\beta a} & e^{\beta a} & -e^{ika} \end{vmatrix} = 0 \quad (P.1.245)$$

što daje

$$e^{ika} = \frac{\kappa \sin \beta a}{\beta} + \cos \beta a \quad (P.1.246)$$

S druge strane, veza između energije i talasnog vektora za Kronig-Penney-jev δ -model data je izrazom (P.1.31):

$$P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (P.1.247)$$

Kombinovanjem jednačina (P.1.246) i (P.1.247) možemo eliminisati talasni vektor, čime dolazimo do tražene jednačine koja određuje energije površinskih stanja:

$$\frac{a^2}{2P}(\kappa^2 + \beta^2) - a\kappa = \beta a \cot(\beta a) \quad (\text{P.1.248})$$

Problem 1.37. Izvesti izraz za izračunavanje koncentracije elektrona u čvrstom telu za slučaj kada je zavisnost energije od talasnog vektora opisana Kane-ovom relacijom:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m(0)} = W \left(1 + \frac{W}{W_g} \right) \quad (\text{P.1.249})$$

gde je W energija elektrona izražena u odnosu na dno provodne zone, W_g je energetski procep, a $m(0) = m(k=0)$. Smatrati da su ispunjeni uslovi totalne degeneracije. Takođe odrediti prividnu masu gustine stanja u ovom slučaju.

Rešenje: Koncentraciju elektrona izračunavamo na osnovu izraza

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{(k)} f_{FD}(W(k), W_F) d^3k \quad (\text{P.1.250})$$

Pošto u posmatranom slučaju energija zavisi samo od modula talasnog vektora, integraciju je najjednostavnije obaviti u sfernom koordinatnom sistemu:

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{k=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} f_{FD}(W(k), W_F) k^2 \sin \theta d\theta d\varphi dk \quad (\text{P.1.251})$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} f_{FD}(W(k), W_F) k^2 \varphi dk$$

S druge strane, koncentracija elektrona može se izračunati i preko energetske gustine stanja

$$n = 2 \int_{W=0}^{\infty} g(W) f_{FD}(W(k), W_F) dW \quad (\text{P.1.252})$$

Poređenjem izraza (P.1.251) i (P.1.252) zaključujemo da se energetska gustina stanja može izraziti u formi:

$$g(W) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k^2 dk}{dW} \quad (\text{P.1.253})$$

Na osnovu Kane-ove relacije (P.1.249) dobijamo:

$$g(W) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2 \hbar^3} m(0)^{3/2} \sqrt{W \left(1 + \frac{W}{W_g} \right)} \left(1 + \frac{2W}{W_g} \right) \quad (\text{P.1.254})$$

U slučaju potpune degeneracije, izraz (P.1.252) dobija oblik:

$$\begin{aligned} n &= 2 \int_{W=0}^{W_F} g(W) f_{FD}(W(k), W_F) dW \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} m(0)^{3/2} \int_{W=0}^{W_F} \sqrt{W \left(1 + \frac{W}{W_g} \right)} \left(1 + \frac{2W}{W_g} \right) dW \end{aligned} \quad (\text{P.1.255})$$

Prethodni izraz napisaćemo u formi sume dva integrala od kojih ćemo prvi rešavati parcijalnom integracijom:

$$n = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} m(0)^{3/2} [I_1 + I_2] \quad (\text{P.1.256a})$$

$$I_1 = \int_{W=0}^{W_F} \sqrt{W} \left(1 + \frac{W}{W_g} \right)^{3/2} dW = \left[\frac{2}{3} W^{3/2} \left(1 + \frac{W}{W_g} \right) \right]_0^{W_F} - \frac{1}{W_g} \int_{W=0}^{W_F} \sqrt{\left(1 + \frac{W}{W_g} \right)} W^{3/2} dW \quad (\text{P.1.256b})$$

$$I_2 = \frac{1}{W_g} \int_{W=0}^{W_F} \sqrt{\left(1 + \frac{W}{W_g} \right)} W^{3/2} dW \quad (\text{P.1.256c})$$

Na osnovu toga, koncentracija elektrona u provodnoj zoni postaje jednaka:

$$n = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2 \hbar^3} m(0)^{3/2} \left(1 + \frac{W_F}{W_g} \right)^{3/2} W_F^{3/2} \quad (\text{P.1.257})$$

Prividnu masu gustine stanja odredićemo poređenjem sa izrazom za koncentracije elektrona (1.166), koji se dobija u slučaju kada je zavisnost energije od talasnog vektora parabolična ($W(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$)

$$n = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2 \hbar^3} m_{kn}^{3/2} W_F^{3/2} \quad (\text{P.1.258})$$

odakle zaključujemo da je

$$m_{g_s} = m(0) \left(1 + \frac{W_F}{W_g} \right) \quad (\text{P.1.259})$$

Kane-ov oblik disperzione relacije daje tačniju zavisnost energije od talasnog vektora (u odnosu na najjednostavniju paraboličnu aproksimaciju), za poluprovodnike na bazi III-V jedinjenja, s obzirom da uzima u obzir interakciju provodne i valentne zone. Očigledno je da su razlike između odgovarajućih izraza veće ukoliko je energetski procep manji (zamenom $W_g \rightarrow \infty$ u Kane-ovoj relaciji prelazimo na paraboličnu aproksimaciju).

Problem 1.38. Disperziona relacija za elektrone u provodnoj zoni se za male vrednosti energija može prikazati u obliku:

$$W(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m(0)} (1 - \gamma^2 k^2) \quad (\text{P.1.260})$$

gde je γ konstanta neparaboličnosti, a $m(0) = m(k=0)$. Izvesti izraz za γ polazeći od opšteg oblika Kane-ove relacije (P.1.249) i aproksimirajući ga za male vrednosti talasnog vektora. Naći vezu između koncentracije elektrona i Fermi-jevog nivoa u ovom slučaju.

Rešenje: Na osnovu Kane-ovom relacije (1 iz preth. primera) dobijamo sledeću kvadratnu jednačinu po energiji:

$$W^2 + WW_g - \frac{\hbar^2 k^2 W_g}{2m(0)} = 0 \quad (\text{P.1.261})$$

čije rešenje glasi:

$$W = \frac{W_g}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{W_g m(0)}} \right) \quad (\text{P.1.262})$$

Ovaj izraz razvićemo u red u okolini tačke $k=0$, u kome ćemo zadržati članove zaključno sa k^4 :

$$W \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m(0)} \left(1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2W_g m(0)} \right) \quad (\text{P.1.263})$$

Poređenjem sa izrazom (P.1.260) zaključujemo da konstanta neparaboličnosti iznosi:

$$\gamma = \frac{\hbar^2}{2W_g m(0)} \quad (\text{P.1.264})$$

Pošto smo disperzionu relaciju (P.1.260) izveli iz opšteg oblika Kane-ove relacije,

aproksimirajući ga za male vrednosti k , tj. W , onda i gustinu stanja po energiji možemo dobiti iz odgovarajućeg opštijeg izraza (P.1.254):

$$g(W) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2 \hbar^3} m(0)^{3/2} \sqrt{W \left(1 + \frac{W}{W_g} \right) \left(1 + \frac{2W}{W_g} \right)} \quad (\text{P.1.265})$$

koji za male vrednosti energije dobija oblik:

$$\begin{aligned} g(W) &= \frac{\sqrt{2} m(0)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{W} \left(1 + \frac{W}{2W_g} + \dots \right) \left(1 + \frac{2W}{W_g} \right) \\ &\approx \frac{\sqrt{2} m(0)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{W} \left(1 + \frac{5W}{2W_g} + \frac{W^2}{W_g^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{P.1.266})$$

Zamenom konstante neparaboličnosti (P.1.264) dobijamo:

$$g(W) = \frac{\sqrt{2} m(0)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{W} \left(1 + \frac{5\gamma m(0)}{\hbar^2} W \right) \quad (\text{P.1.267})$$

što možemo zapisati u formi:

$$g(W) = C_1 W^{1/2} + C_2 W^{3/2} \quad (\text{P.1.268})$$

gde su konstante

$$C_1 = \frac{\sqrt{2} m(0)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3}, \quad C_2 = \frac{5\sqrt{2} \gamma m(0)^{5/2}}{2\pi^2 \hbar^5} \quad (\text{P.1.269})$$

Koncentracija elektrona jednaka je:

$$\begin{aligned} n &= 2 \int_{W=0}^{\infty} g(W) f_{FD}(W, W_F) dW \\ &= 2C_1 \int_{W=0}^{\infty} W^{1/2} f_{FD}(W, W_F) dW + 2C_2 \int_{W=0}^{\infty} W^{3/2} f_{FD}(W, W_F) dW \end{aligned} \quad (\text{P.1.270})$$

Uvođenjem bezdimenzionalnih promenljivih $x \equiv W / k_B T$ i $\eta \equiv W_F / k_B T$ dobijamo:

$$n = 2C_1 (k_B T)^{3/2} \int_{x=0}^{\infty} x^{1/2} f_{FD}(x, \eta) dx + 2C_2 (k_B T)^{5/2} \int_{x=0}^{\infty} x^{3/2} f_{FD}(x, \eta) dx \quad (\text{P.1.271})$$

što se na osnovu (1.151) može zapisati preko Fermi-jevih integrala:

$$n = 2C_1(k_B T)^{3/2} F_{1/2}(\eta) + 2C_2(k_B T)^{5/2} F_{3/2}(\eta) \quad (\text{P.1.272})$$

Ukoliko uvedemo i efektivni broj stanja provodne zone $B_c = 2 \left(\frac{m(0)k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$, dobijamo

$$\begin{aligned} n &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_c \left[F_{1/2}(\eta) + \frac{5m(0)\gamma}{\hbar^2} (k_B T) F_{3/2}(\eta) \right] \\ &= n(\gamma=0) + n_1 \end{aligned} \quad (\text{P.1.273})$$

Vidimo da se koncentracija može izraziti u formi zbira vrednosti $n_0 = n(\gamma=0)$ koja se dobija u paraboloidnoj aproksimaciji i dodatka n_1 koji je direktno srazmeran konstanti neparaboloidnosti γ .

Problem 1.39. Odrediti relaciju između površinske koncentracije elektrona N_s i Fermi-jevog nivoa W_F u dvodimenzionalnom elektronskom gasu, ako je zavisnost energije od talasnog vektora $\vec{k} = (k_x, k_y)$ paraboloidna, sa izotropnom efektivnom masom ($W(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$).

Rešenje: Površinska koncentracija elektrona data je izrazom:

$$N_s = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{(\vec{k})} f_{FD}(W(\vec{k}), W_F) d^2k \quad (\text{P.1.274})$$

Pošto energija zavisi samo od modula talasnog vektora, najjednostavnije je da se integracija izvrši u polarnim koordinatama, pa je:

$$\begin{aligned} N_s &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} f_{FD}(W(k), W_F) k d\varphi dk \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty f_{FD}(W(k), W_F) k dk \end{aligned} \quad (\text{P.1.275})$$

Ako površinsku koncentraciju izračunavamo uz pomoć dvodimenzionalne gustine stanja po jedinici energije $g_{2D}(W)$ imamo:

$$N_s = 2 \int_{W=0}^\infty g_{2D}(W) f_{FD}(W, W_F) dW \quad (\text{P.1.276})$$

pa poređenjem sa izrazom (P.1.275) zaključujemo da je:

$$g_{2D}(W) = \frac{1}{2\pi} \frac{k dk}{dW} \quad (\text{P.1.277})$$

što se u slučaju paraboloidne zavisnosti energije od talasnog vektora svodi na:

$$g_{2D}(W) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \quad (\text{P.1.278})$$

Vidimo da je energetska gustina stanja u posmatranom primeru zapravo konstantna tj. ne zavisi od energije. Na osnovu izraza (P.1.276), površinska koncentracija je dalje jednaka:

$$N_s = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{e^{-(W-W_F)/k_B T} dW}{e^{(W-W_F)/k_B T} + 1} \quad (\text{P.1.279})$$

Uvođenjem smene $t = e^{-(W-W_F)/k_B T}$ dobijamo:

$$N_s = \frac{m^* k_B T}{\pi\hbar^2} \int_0^{e^{W_F/k_B T}} \frac{dt}{1+t} = \frac{m^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \ln \left(1 + e^{\frac{W_F}{k_B T}} \right) \quad (\text{P.1.280})$$

Problem 1.40. Odrediti energetsku gustinu stanja i relaciju između površinske koncentracije elektrona N_s i Fermi-jevog nivoa W_F u dvodimenzionalnom elektronskom gasu, ako je zavisnost energije od talasnog vektora $\vec{k} = (k_x, k_y)$ data Kane-ovom relacijom $\frac{\hbar^2 k^2}{2m(0)} = W(1+W/W_g)$. Smatrati da je degeneracija potpuna, tj. da se može uzeti $f_{FD}(W) = 1$, za $W \leq W_F$ i $f_{FD}(W) = 0$, za $W > W_F$. Upoređujući dobijeni izraz za površinsku koncentraciju sa rezultatom koji se dobija kada je zavisnost $W(k)$ čisto paraboloidna sa konstantnom efektivnom masom m^* ($W(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$), uz nepromenjene ostale uslove, izraziti m^* u funkciji $m(0)$, W_F i W_g .

Rešenje: Kao što je pokazano u prethodnom primeru, gustina stanja po jedinici energije kod dvodimenzionalnog elektronskog gasa ima oblik:

$$g_{2D}(W) = \frac{1}{2\pi} \frac{k dk}{dW} \quad (\text{P.1.281})$$

što u slučaju kada je veza W i k data Kane-ovom relacijom iznosi:

$$g_{2D}(W) = \frac{m(0)}{2\pi\hbar^2} \left[1 + \frac{2W}{W_g} \right] \quad (\text{P.1.282})$$

Površinska koncentracija, u aproksimaciji totalne degeneracije, jednaka je

$$N_s = \frac{m(0)}{\pi \hbar^2} \int_0^{W_g} (1 + 2W/W_g) dW = \frac{m(0)}{\pi \hbar^2} W_F \left(1 + \frac{W_F}{W_g} \right) \quad (\text{P.1.283})$$

Kada je zavisnost energije od talasnog vektora čisto parabolična, sa konstantnom efektivnom masom, energetska gustina stanja iznosi:

$$g_{2D}(W) = \frac{m^*}{2\pi \hbar^2} \quad (\text{P.1.284})$$

a površinska koncentracija

$$N_s = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_0^{W_g} dW = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} W_F \quad (\text{P.1.285})$$

Poređenjem izraza (P.1.285) i (P.1.283) zaključujemo da je

$$m^* = m(0) \left(1 + \frac{W_F}{W_g} \right) \quad (\text{P.1.286})$$

što je identično rezultatu (P.1.259) koji smo dobili u trodimenzionalnom slučaju.

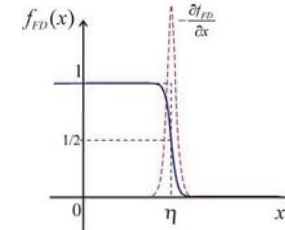
Problem 1.41. Odrediti približan izraz za koncentraciju elektrona u metalu, koristeći adekvatan razvoj Fermi Dirac-ovog integrala. Postupak sprovesti pretpostavljajući da je zavisnost energije od talasnog vektora parabolična. Takođe, naći približan izraz za promenu Fermi-jevog nivoa sa temperaturom smatrajući da je pri tome tokoncentracija elektrona u metalu konstantna.

Rešenje: Polazimo od opšteg oblika izraza za koncentraciju (1.148), za slučaj kada je disperziona relacija parabolična:

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_e F_{1/2}(\eta), \quad F_{1/2}(\eta) = \int_0^{\sqrt{x}} \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\eta} + 1} dx \quad (\text{P.1.287})$$

gde je $x = W/k_B T$, $\eta = W_F/k_B T$. Kod metala, Fermi-jev nivo W_F se nalazi u provodnoj zoni ($W_F > 0$), a funkcija raspodele $f_{FD}(W, W_F)$ se može aproksimirati odskočnom funkcijom u okolini W_F , dok je njen izvod $-\partial f_{FD} / \partial W$ oblika Dirac-ove delta-funkcije ($-\delta(W - W_F)$), kao što je prikazano na Sl. P.1.17. Zbog toga je zgodno da uvedemo promenljivih u obliku $y = x - \eta$, što daje

$$F_{1/2}(\eta) = \int_{-\eta}^{\infty} \frac{\sqrt{y+\eta}}{e^y + 1} dy \quad (\text{P.1.288})$$



Sl. P.1.18 Fermi-Dirac-ova funkcija i njen izvod po energiji kod metala

Parcijalnom integracijom gornjeg izraza dobijamo:

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{3} \frac{(y+\eta)^{3/2}}{e^y + 1} \Big|_{-\eta}^{\infty} + \frac{2}{3} \int_{-\eta}^{\infty} \frac{(y+\eta)^{3/2} e^y}{(e^y + 1)^2} dy \quad (\text{P.1.289})$$

Da bi pojednostavili rešavanje integrala (P.1.289), donju granicu $-\eta$ ćemo zameniti sa $-\infty$, što je opravdano uzevši u obzir da je vrednost podintegralne funkcije značajna samo u okolini $y = 0$.

$$F_{1/2}(\eta) \approx \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(y+\eta)^{3/2} e^y}{(e^y + 1)^2} dy \quad (\text{P.1.290})$$

Faktor $(y+\eta)^{3/2}$ podintegralne funkcije razvićemo u red u okolini $y = 0$, što daje

$$F_{1/2}(\eta) \approx \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^y}{(e^y + 1)^2} \left[\eta^{3/2} + \frac{3}{2} \eta^{1/2} y + \frac{3}{8} \eta^{-1/2} y^2 + \dots \right] dy \quad (\text{P.1.291})$$

Zadržaćemo prva tri člana u razvoju, čime dobijamo tri analitički rešiva integrala

$$F_{1/2}(\eta) \approx \frac{2}{3} \eta^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^y dy}{(e^y + 1)^2} + \eta^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^y y dy}{(e^y + 1)^2} + \frac{1}{4} \eta^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^y y^2 dy}{(e^y + 1)^2} \quad (\text{P.1.292})$$

$$= \frac{2}{3} \eta^{3/2} + \frac{\pi^2}{12} \eta^{-1/2}$$

Približan izraz za koncentraciju elektrona, prema tome, glasi:

$$n \approx \frac{4}{3\sqrt{\pi}} B_c \left(\frac{W_F}{k_B T} \right)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{W_F} \right)^2 \right] \quad (\text{P.1.293})$$

Na temperaturi $T = 0\text{K}$, izraz (P.1.293) dobija oblik:

$$n \approx \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2 \hbar^3} m_{s_0}^{3/2} W_{F_0}^{3/2} \quad (\text{P.1.294})$$

gde je $W_{F_0} = W_F(T=0)$, pa prema tome možemo pisati:

$$W_{F_0}^{3/2} \approx W_F^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{W_F} \right)^2 \right] \quad (\text{P.1.295})$$

Pošto kod metala Fermi-jev nivo ima veliku vrednost, možemo smatrati da je ispunjen uslov $W_F / k_B T \gg 1$, pa se prethodni izraz može aproksimirati na sledeći način:

$$W_{F_0} = W_F \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{W_F} \right)^2 \right]^{2/3} \approx W_F \left[1 + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{W_F} \right)^2 \right] \quad (\text{P.1.296})$$

Na osnovu toga dobijamo kvadratnu jednačinu po W_F u obliku

$$W_F^2 - W_{F_0} W_F + \frac{\pi^2}{12} (k_B T)^2 = 0 \quad (\text{P.1.297})$$

čija su rešenja:

$$W_F = \frac{W_{F_0}}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{\pi^2}{3} \frac{(k_B T)^2}{W_{F_0}^2}} \right) \approx \frac{W_{F_0}}{2} \left[1 \pm \left(1 - \frac{\pi^2}{6} \frac{(k_B T)^2}{W_{F_0}^2} \right) \right] \quad (\text{P.1.298})$$

U gornjem izrazu dolazi u obzir samo znak “+” (pošto bi u suprotnom dobili $W_F \approx 0$, što je nemoguće), pa konačno imamo:

$$W_F(T) \approx W_{F_0} \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \frac{(k_B T)^2}{W_{F_0}^2} \right) \quad (\text{P.1.299})$$

Problem 1.42. Primenjujući zakon o dejstvu generalisanih masa (pravilo o prelasku sa jednog energetskog nivoa na drugi) koji glasi:

$$\frac{(Za)_{mic} (Pr)_{fin}}{(Za)_{fin} (Pr)_{mic}} = e^{\frac{E_{fin} - E_{mic}}{k_B T}} \quad (\text{P.1.300})$$

gde je: $(Za)_{mic}$ - koncentracija zauzetih stanja na inicijalnom nivou (sa koga se vrši prelaz)

$(Za)_{fin}$ - koncentracija zauzetih stanja na finalnom nivou (na koji se vrši prelaz)

$(Pr)_{mic/fin}$ - koncentracija nezauzetih (praznih) stanja

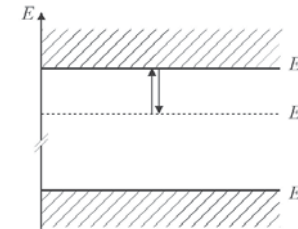
izračunati faktor spinske degeneracije za donorski nivo.

Rešenje: Posmatračemo samo prelaze između provodne zone i donorskog nivoa, kao što je prikazano na Sl. P.1.19, i primenićemo zakon o dejstvu generalisanih masa (P.1.300) u tom slučaju. U stanju termodinamičke ravnoteže, brzine prelaza između provodne zone (koju reprezentujemo energijom dna E_c) i donorskog nivoa E_d , moraju biti jednake u oba “smera”, pa izbor inicijalnog i finalnog stanja u formuli (P.1.300) ne utiče na rezultat.

Neka je $E_{mic} = E_d$, $E_{fin} = E_c$. U tom slučaju veličina $(Za)_{mic}$ predstavlja koncentraciju elektrona na donorskom nivou koja iznosi:

$$(Za)_{mic} = n_d = N_D \cdot f^d(E_d) \quad (\text{P.1.301})$$

gde je N_D koncentracija donorskih primesa, a f^d je funkcija koju treba odrediti i čija vrednost $f^d(E_d)$ daje verovatnoću da je donorski nivo E_d zauzet elektronom (tj. da atom donora nije jonizovan).



Sl. P.1.19 Ilustracija razmene elektrona između donorskog nivoa i provodne zone

S druge strane imamo:

$$(Za)_{fm} = n = B_c e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}} \quad (\text{P.1.302})$$

Broj praznih stanja u provodnoj zoni dobijamo kada od efektivnog broja stanja B_c (za $E_F = E_c$), oduzmemo broj zauzetih stanja, tj.

$$(Pr)_{fm} = B_c - n = B_c \left[1 - e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}} \right] \quad (\text{P.1.303})$$

Pošto je kod nedegenerisanih poluprovodnika $e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}} \ll 1$, sledi

$$(Pr)_{fm} \approx B_c \quad (\text{P.1.304})$$

Konačno, treba odrediti i koncentraciju nezauzetih stanja na donorskom nivou, a to je zapravo koncentracija jonizovanih donora, kojih ima $N_D - n_d$. Međutim, iako jedan jonizovani donor (kome nedostaje elektron) ima jedno prazno mesto i može da primi jedan elektron iz provodne zone – taj elektron može biti jedne ili druge orijentacije spina. Dakle, 2 elektrona iz provodne zone (sa različitim spinom) “vide” to stanje na donorskom nivou kao upražnjeno, iako naravno čim jedan od njih izvrši prelaz, ono više nije dostupno za drugi elektron. Prema tome, za $N_D - n_d$ jonizovanih donora, efektivan broj praznih stanja iznosi:

$$(Pr)_{mic} = 2(N_D - n_d) \quad (\text{P.1.305})$$

Zamenom izračunatih veličina $(Pr)_{mic/fm}$ i $(Za)_{mic/fm}$ u izraz (P.1.300) dobijamo:

$$\frac{n_d B_c}{n \cdot 2(N_D - n_d)} = e^{\frac{E_c - E_d}{k_B T}} \quad (\text{P.1.306})$$

Oдавде sledi:

$$\frac{n_d}{N_D} = f^d(E_d) = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_c - E_d}{k_B T}} + 1} \quad (\text{P.1.307})$$

Poređenjem sa izrazom (1.271), zaključujemo da faktor spinske degeneracije donorskog nivou iznosi:

$$g_d = 2 \quad (\text{P.1.308})$$

Problem 1.43. Za nedegenerisani poluprovodnik n-tipa ($P=0$), odrediti transcendentnu jednačinu za temperaturu jonizacije T_j u slučaju da je ona definisana na sledeći način:

a) T_j odgovara preseku zavisnosti $n(T)$ za oblast iscrpljenja i za primesnu oblast (oblast niskih temperatura).

b) T_j odgovara stanju potpune jonizacije donora, u slučaju kada se funkcija raspodele za elektrone na donorskom nivou aproksimira linearnom zavisnošću od $x = (E_d - E_F) / k_B T$

Rešenje: a) Koncentracija elektrona u primesnoj oblasti data je izrazom (1.293), koji za $P_d = 0$ dobija oblik

$$n = \sqrt{\frac{B_c N_D}{2}} e^{\frac{W_d}{2k_B T}} \quad (\text{P.1.309})$$

gde je $B_c = 2(2\pi m_{ec} k_B / h^2)^{3/2} T^{3/2} \equiv a_c T^{3/2}$, a $W_d = E_c - E_d$. U oblasti iscrpljenja važi

$$n \approx N_D \quad (\text{P.1.310})$$

Presek zavisnosti $n(T)$ datih izrazima (1) i (2) daje

$$N_D = \sqrt{\frac{B_c N_D}{2}} e^{\frac{W_d}{2k_B T}} \quad (\text{P.1.311})$$

a odgovarajuća transcendentna jednačina na osnovu koje se određuje T_j je, prema tome, oblika

$$N_D = \frac{a_c}{2} T_j^{3/2} e^{\frac{W_d}{k_B T_j}} \quad (\text{P.1.312})$$

b) Funkcija raspodele elektrona na donorskom nivou glasi:

$$f_{FD}^d(E_d) = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_c - E_d}{k_B T}} + 1} = \frac{1}{\frac{1}{2} e^x + 1} \quad (\text{P.1.313})$$

Razvijanjem prethodnog izraza u red i zanemarivanjem svih članova osim linearnog dobijamo:

$$f_{FD}^d(x) \approx \frac{2}{3} \left(1 - \frac{x}{3} \right) \quad (\text{P.1.314})$$

U slučaju kada su svi donori jonizovani, verovatnoća za nalaženje elektrona na donorskom nivou jednaka je nuli, odakle sledi:

$$f_{FD}^d(x) = 0 \Rightarrow x = 3 \Rightarrow E_F = E_d - 3k_B T \quad (\text{P.1.315})$$

Zamenom u izraz za koncentraciju elektrona dobijamo:

$$n = B_c e^{\frac{W_F}{k_B T}} = B_c e^{-\frac{W_F}{k_B T} - 3} \quad (\text{P.1.316})$$

a izjednačavanjem sa oblikom (P.1.309) koji važi u primesnoj oblasti dolazimo do tražene transcendentne jednačine:

$$N_D = \frac{2a_c}{e^6} T_i^{3/2} e^{-\frac{W_F}{k_B T_i}} \quad (\text{P.1.317})$$

2. TRANSPORTNI PROCESI

2.1 BOLTZMANN-OVA KINETIČKA JEDNAČINA

U dosadašnjim razmatranjima pretpostavljali smo da na posmatrano čvrsto telo ne deluju nikakva spoljašnja polja, kao i da se ono nalazi u uslovima termo-dinamičke ravnoteže. Međutim, ukoliko je materijal izložen dejstvu polja (električnog, magnetnog), ili je npr. dopiranje nehomogeno, ili postoji gradijent temperature duž uzorka, tada dolazi do dodatnog kretanja slobodnih elektrona i šupljina, odnosno vrši se transport nosilaca.

U ovom poglavlju analiziraćemo kretanje elektrona⁵ u čvrstom telu pod dejstvom navedenih spoljašnjih polja. Dejstvo električnog i magnetnog polja opisuje se preko Lorentz-ove sile koja je data izrazom:

$$\vec{F} = -e \times (\vec{K} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.1)$$

Kada se čvrsto telo nalazi u ravnoteži (ne deluju nikakva fizička polja) tada je funkcija raspodele elektrona u čvrstom telu Fermi-Dirac-ova i nju nazivamo **ravnotežna funkcija raspodele** i obeležavamo sa f_0 ($f_0 \equiv f_{FD}(E, E_F)$). Pod dejstvom spoljašnjih polja funkcija raspodele se menja i postaje zavisna od koordinate (a svakako i dalje zavisi od talasnog vektora, odnosno energije) i tu novu veličinu obeležićemo sa $f(\vec{k}, \vec{r})$. Ova funkcija dobija se rešavanjem **Boltzmann-ove kinetičke jednačine** u aproksimaciji vremena relaksacije, koja je data izrazom:

$$\dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_r f + \dot{\vec{k}} \cdot \vec{\nabla}_k f = -\frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})} \quad (2.2)$$

gde je τ **vreme relaksacije** i funkcija je talasnog vektora \vec{k} .

Funkciju raspodele $f(\vec{k}, \vec{r})$ prikazaćemo u formi zbira ravnotežnog (f_0) i neravnotežnog člana (f_1) koji izražava uticaj polja:

$$f = f_0 + f_1 \quad (2.3)$$

Boltzmann-ova kinetička jednačina se može izvesti na klasičan način. Ako su npr. električna i magnetna polja vrlo jaka, tada prestaje važenje ove jednačine i prelazi se na odgovarajući kvantno-mehanički tretman. Dakle, razmatraćemo **slaba spoljašnja polja**, a to dalje znači da je ispunjena sledeća nejednakost:

⁵ U okviru ovog poglavlja ograničićemo se samo na transport elektrona. Transport šupljina, zbog vrlo kompleksne strukture valentne zone, zahteva znatno složeniji tretman

$$|f_1| \ll f_0 \quad (2.4)$$

Imajući u vidu da je (videti poglavlje 1.3.1):

$$\dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \quad (2.5a)$$

$$\dot{\vec{k}} = \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{\vec{F}}{\hbar} \quad (2.5b)$$

na osnovu izraza (2.1) - (2.5b) Boltzmann-ovu jednačinu možemo napisati u obliku:

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f - \frac{e}{\hbar} (\vec{K} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}_k f = -\frac{f_1}{\tau} \quad (2.6)$$

Pretpostavićemo da u slučaju slabih spoljašnjih polja važi i sledeće:

$$|\vec{\nabla}_r (f_0 + f_1)| \approx |\vec{\nabla}_r f_0| \quad (2.7a)$$

$$|\vec{\nabla}_k (f_0 + f_1)| \approx |\vec{\nabla}_k f_0| \quad (2.7b)$$

što je dodatna aproksimacija koja ne sledi neposredno iz (2.4), npr. ne bi važila u slučaju da je f_1 brzopromenljiva funkcija po \vec{r} ili \vec{k} . Zamenimo sada funkciju raspodele u obliku (2.3) u izraz za Boltzmann-ovu jednačinu (2.6):

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r (f_0 + f_1) - \frac{e}{\hbar} \vec{K} \cdot \vec{\nabla}_k (f_0 + f_1) - \frac{e}{\hbar} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}_k (f_0 + f_1) = -\frac{f_1}{\tau} \quad (2.8)$$

i primenimo uslove (2.7a) i (2.7b) na prva dva sabirka. U trećem sabirku nećemo zanemariti član $\vec{\nabla}_k f_1$ jer bi na taj način izgubili informaciju o uticaju magnetnog polja. Naime, pokazaćemo da je $\vec{\nabla}_k f_0 \sim \vec{v}$, pa je $(\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}_k (f_0) - (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{v} = 0$ i član koji sadrži \vec{B} bi nestao. Zbog toga će u trećem sabirku (2.8) ostati član $\vec{\nabla}_k f_1$ pa ova jednačina dobija oblik:

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_0 - \frac{e}{\hbar} \vec{K} \cdot \vec{\nabla}_k f_0 - \frac{e}{\hbar} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}_k f_1 = -\frac{f_1}{\tau} \quad (2.9)$$

Ravnotežna, Fermi-Dirac-ova funkcija raspodele data je izrazom (1.79), tj.

$$f_0 = f_{FD}(E, E_F) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (2.10)$$

Ukupnu energiju elektrona E možemo napisati u obliku sume kinetičke i potencijalne enerije, pa je, prema tome

$$\begin{aligned} E - E_F &= E_{kin} + E_{pot} - E_F \\ &= W(\vec{k}) - e\phi(\vec{r}) - E_F(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

gde je $W = W(\vec{k})$ kinetička energija, $\phi = \phi(\vec{r})$ je elektrostatički potencijal, a $E_F(\vec{r})$ se naziva **elektrohemijski potencijal**. Ovaj izraz možemo napisati i u sledećem obliku gde smo razdvojili funkcije koje zavise od koordinate \vec{r} od onih koje zavise samo od talasnog vektora \vec{k} :

$$\begin{aligned} E - E_F &= W(\vec{k}) - [E_F(\vec{r}) + e\phi(\vec{r})] \\ &= W(\vec{k}) - W_F(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.12)$$

gde veličina $W_F(\vec{r}) = [E_F(\vec{r}) + e\phi(\vec{r})]$ predstavlja **hemijski potencijal**. Dakle, ravnotežna funkcija raspodele dobija formu:

$$f_0 = f_{FD}(W, W_F) = \frac{1}{e^{\frac{W - W_F(\vec{r})}{k_B T}} + 1} \quad (2.13)$$

gde je uzeto da se u opštem slučaju i temperatura može menjati sa koordinatom. Odredimo sada članove jednačine (2.9). U prvom sabirku imamo

$$\vec{\nabla}_r f_0 = \frac{e^{\frac{W - W_F}{k_B T}} \left(-\frac{\vec{\nabla}_r W_F}{k_B T} - \frac{W - W_F}{k_B T^2} \vec{\nabla}_r T \right)}{\left(1 + e^{\frac{W - W_F}{k_B T}} \right)^2} \quad (2.14)$$

Zatim treba izračunati $\vec{\nabla}_k f_0$, što možemo napisati u obliku

$$\vec{\nabla}_k f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial W} \cdot \vec{\nabla}_k W \quad (2.15)$$

a na osnovu (2.13) dobijamo

$$\frac{\partial f_0}{\partial W} = -\frac{e^{\frac{W - W_F}{k_B T}}}{\left(1 + e^{\frac{W - W_F}{k_B T}} \right)^2} \cdot \frac{1}{k_B T} \quad (2.16)$$

Poređenjem izraza (2.14) i (2.16) vidimo da važi relacija

$$\vec{\nabla}_r f_0 = -\frac{\partial f_0}{\partial W} \cdot \left(\vec{\nabla}_r W_F + \frac{W - W_E}{T} \vec{\nabla}_r T \right) \quad (2.17)$$

Na osnovu izraza (1.188) imamo $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} W(\vec{k})$, pa (2.15) možemo napisati u obliku

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} f_0 = \hbar \cdot \frac{\partial f_0}{\partial W} \cdot \vec{v} \quad (2.18)$$

odakle vidimo da je $\vec{\nabla}_{\vec{k}} f_0 \sim \vec{v}$, što je i razlog zbog koga nismo zanemarili član $\vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1$ u jednačini (2.8). Da bismo izračunali i treći sabirak na levoj strani jednačine (2.9) prepostavićemo funkciju f_1 u obliku:

$$f_1 \equiv \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \cdot [\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k}) \cdot \vec{v}] \quad (2.19)$$

gde je $\vec{\chi} = \vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k})$ nepoznata funkcija koju treba odrediti. Na osnovu (2.19) imamo

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1 = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \left[\left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \vec{\chi} \cdot \vec{v} \right] = \vec{\nabla}_{\vec{k}} [\vec{a}(\vec{r}, \vec{k}) \cdot \vec{v}] \quad (2.20)$$

gde smo uveli oznaku

$$\vec{a}(\vec{r}, \vec{k}) \equiv \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k}) \quad (2.21)$$

Dalje je

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1 &= \vec{\nabla}_{\vec{k}} [\vec{a} \cdot \vec{v}] = \vec{\nabla}_{\vec{k}} [a_x v_x + a_y v_y + a_z v_z] \\ &= \frac{\partial}{\partial k_x} [a_x v_x + a_y v_y + a_z v_z] \vec{i}_x \\ &+ \frac{\partial}{\partial k_y} [a_x v_x + a_y v_y + a_z v_z] \vec{i}_y \\ &+ \frac{\partial}{\partial k_z} [a_x v_x + a_y v_y + a_z v_z] \vec{i}_z \end{aligned} \quad (2.22)$$

U celom poglavlju o transportnim procesima pretvljaćemo model skalarnе efektivne mase tj. zavisnost kinetičke energije od talasnog vektora u obliku $W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, pri čemu je $m^* \neq m^*(\vec{k})$.

Ako su u pitanju složenije zavisnosti $W(\vec{k})$, teorija transportnih procesa se znatno usložnjava i izlazi iz okvira ovog teksta. U modelu skalarnе efektivne mase, brzina je data izrazom $\vec{v} = \hbar \vec{k} / m^*$, pa za x-komponentu izraza (2.22) možemo pisati

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k_x} [a_x v_x + a_y v_y + a_z v_z] &= \frac{\hbar}{m^*} \frac{\partial}{\partial v_x} [a_x v_x + a_y v_y + a_z v_z] \\ &= \frac{\hbar}{m^*} a_x + \frac{\hbar}{m^*} \left[\frac{\partial a_x}{\partial v_x} v_x + \frac{\partial a_y}{\partial v_x} v_y + \frac{\partial a_z}{\partial v_x} v_z \right] \\ &= \frac{\hbar}{m^*} a_x + \frac{\hbar}{m^*} \left[\frac{\partial a_x}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial v_x} v_x + \frac{\partial a_y}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial v_x} v_y + \frac{\partial a_z}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial v_x} v_z \right] \end{aligned} \quad (2.23)$$

Kako je $\frac{\partial W}{\partial v_x} = m^* v_x$ prethodni izraz se svodi na

$$\frac{\partial}{\partial k_x} [a_x v_x + a_y v_y + a_z v_z] = \frac{\hbar}{m^*} a_x + \hbar v_x \left[\frac{\partial a_x}{\partial W} v_x + \frac{\partial a_y}{\partial W} v_y + \frac{\partial a_z}{\partial W} v_z \right] \quad (2.24)$$

Na identičan način analiziraju se i y- i z-komponenta izraza (2.22), što konačno daje

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1 = \vec{\nabla}_{\vec{k}} [\vec{a} \cdot \vec{v}] = \frac{\hbar \vec{a}}{m^*} + \hbar \vec{v} \left[\frac{\partial a_x}{\partial W} v_x + \frac{\partial a_y}{\partial W} v_y + \frac{\partial a_z}{\partial W} v_z \right] \quad (2.25)$$

Analizirajući treći sabirak jednačine (2.9) zaključujemo da je

$$\begin{aligned} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1 &= (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \frac{\hbar}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \vec{\chi} + \hbar \underbrace{(\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{v}}_0 \left[\frac{\partial a_x}{\partial W} v_x + \frac{\partial a_y}{\partial W} v_y + \frac{\partial a_z}{\partial W} v_z \right] \\ &= -\frac{\partial f_0}{\partial W} \frac{\hbar}{m^*} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\chi} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Ovaj rezultat, zajedno sa (2.17) i (2.18), uvrstićemo u jednačinu (2.9):

$$-\frac{\partial f_0}{\partial W} \vec{v} \cdot \left(\vec{\nabla}_r W_F + \frac{W - W_E}{T} \vec{\nabla}_r T \right) - e \vec{k} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial W} \cdot \vec{v} + \frac{\partial f_0}{\partial W} \frac{e}{m^*} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\chi} = + \frac{\partial f_0}{\partial W} \frac{\vec{v} \cdot \vec{\chi}}{\tau} \quad (2.27)$$

Posle skraćivanja faktora $\frac{\partial f_0}{\partial W}$ i primene pravila za proizvod vektora na osnovu kojeg imamo $(\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\chi} = \vec{v} \cdot (\vec{B} \times \vec{\chi})$, jednačina (2.27) dobija sledeći oblik:

$$\vec{v} \cdot \left(-\vec{\nabla}_r W_F - \frac{W - W_F}{T} \vec{\nabla}_r T - e\vec{K} \right) + \frac{e}{m^*} \vec{v} \cdot (\vec{B} \times \vec{\chi}) = \frac{\vec{v} \cdot \vec{\chi}}{\tau} \quad (2.28)$$

S obzirom da gornja jednačina mora biti ispunjena za proizvoljno orijentisan vektor brzine, jasno je da sledi:

$$\vec{\nabla}_r W_F + (W - W_F) \frac{\vec{\nabla}_r T}{T} + e\vec{K} - \frac{e}{m^*} (\vec{B} \times \vec{\chi}) = -\frac{\vec{\chi}}{\tau} \quad (2.29)$$

Malim preuređivanjem gornjeg izraza dolazimo do jednačine:

$$\vec{\chi} = -\tau \left[\vec{\nabla}_r W_F + \frac{(W - W_F)}{T} \vec{\nabla}_r T + e\vec{K} \right] + \frac{e\tau}{m^*} (\vec{B} \times \vec{\chi}) \quad (2.30)$$

koja se može zapisati i kompaktnijoj formi kao:

$$\vec{\chi} = \vec{A} + \vec{\theta} \times \vec{\chi} \quad (2.31)$$

gde je

$$\vec{A} = -\tau \left[\vec{\nabla}_r W_F + \frac{(W - W_F)}{T} \vec{\nabla}_r T + e\vec{K} \right] \quad (2.32a)$$

$$\vec{\theta} = \frac{e\tau}{m^*} \vec{B} \quad (2.32b)$$

Pomnožićemo jednačinu (2.31) vektorom $\vec{\theta}$ prvo skalarno:

$$\vec{\chi} \cdot \vec{\theta} = \vec{A} \cdot \vec{\theta} + \underbrace{(\vec{\theta} \times \vec{\chi}) \cdot \vec{\theta}}_0 = \vec{A} \cdot \vec{\theta} \quad (2.33a)$$

a zatim i vektorski:

$$\begin{aligned} \vec{\chi} \times \vec{\theta} &= \vec{A} \times \vec{\theta} + (\vec{\theta} \times \vec{\chi}) \times \vec{\theta} \\ &= \vec{A} \times \vec{\theta} - \vec{\theta} (\vec{\theta} \cdot \vec{\chi}) + \vec{\chi} (\vec{\theta} \cdot \vec{\theta}) \\ &= \vec{A} \times \vec{\theta} - \vec{\theta} (\vec{\theta} \cdot \vec{A}) + \vec{\chi} \theta^2 \end{aligned} \quad (2.33b)$$

Kombinovanjem (2.31) dobijamo:

$$\vec{A} - \vec{\chi} = \vec{A} \times \vec{\theta} - \vec{\theta} (\vec{\theta} \cdot \vec{A}) + \vec{\chi} \theta^2 \quad (2.33c)$$

odakle je

$$\vec{\chi} = \frac{\vec{A} - \vec{A} \times \vec{\theta} + \vec{\theta} (\vec{\theta} \cdot \vec{A})}{1 + \theta^2} \quad (2.34)$$

Kada je poznata funkcija $\vec{\chi}$, onda na osnovu relacije (2.19) možemo odrediti neravnotežni član f_1 funkcije raspodele, kao i ukupnu funkciju raspodele datu izrazom (2.3). Naravno, za određivanje funkcije $\vec{\chi}$ neophodno je poznavanje zavisnosti vremena relaksacije od talasnog vektora $\tau = \tau(\vec{k})$, što je jedan od centralnih problema teorije rasejanja. U modelu skalarne efektivne mase koji ovde razmatramo, vreme relaksacije zavisi samo od $|\vec{k}|$, tj. od energije, pa ćemo u daljem izlaganju podrazumevati $\tau = \tau(W)$.

2.2 GUSTINA STRUJE NAELEKTRISANJA I GUSTINA STRUJE ENERGIJE

2.2.1 Gustina struje naelektrisanja

Nakon određivanja funkcije raspodele moguće je izračunati koncentraciju elektrona u elementarnoj zapremini \vec{k} -prostora, dV_k , koja je data izrazom:

$$dn = 2f \frac{dV_k}{8\pi^3} \quad (2.35)$$

kao što je pokazano u poglavlju 1.2. Elementarna gustina struje koja potiče od ovih elektrona iznosi:

$$d\vec{J} = -e\vec{v}(\vec{k})dn \quad (2.36)$$

Zamenom (2.35) u (2.36) dobijamo:

$$d\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} f\vec{v}dV_k \quad (2.37)$$

Ukupna gustina struje koja potiče od svih elektrona (sa svim mogućim vrednostima talasnog vektora) dobija se integracijom po \vec{k} -prostoru

$$\vec{J} = \int_{(k)} d\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} \vec{v} dV_k \quad (2.38)$$

Ukoliko funkciju raspodele napišemo u formi zbira ravnotežnog i neravnotežnog člana, dobijamo:

$$\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} (f_0 + f_1) \vec{v} dV_k = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} f_0 \vec{v} dV_k - \frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} f_1 \vec{v} dV_k \quad (2.39)$$

Kao što je već naglašeno, podrazumevamo zavisnost $W(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$, pa je f_0 parna funkcija talasnog vektora, a $\vec{v} = \hbar \vec{k} / m^*$ je neparna funkcija, pa je prvi integral u izrazu (2.39) jednak nuli. Dakle, ukupna gustina struje iznosi:

$$\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} f_1 \vec{v} dV_k \quad (2.40)$$

2.2.2 Gustina struje energije

Još jedna značajna makroskopska veličina koja karakteriše transportne procese je gustina struje energije. Elementarna gustina struje energije u zapremini dV_k u \vec{k} -prostoru iznosi

$$d\vec{\Gamma} = E_{tot}(\vec{r}, \vec{k}) \cdot \vec{v}(\vec{k}) dn \quad (2.41)$$

gde $E_{tot}(\vec{r}, \vec{k})$ predstavlja ukupnu energiju. Zamenom izraza (2.35) u (2.41) dolazimo do sledeće relacije:

$$d\vec{\Gamma} = E_{tot}(\vec{r}, \vec{k}) \cdot \vec{v}(\vec{k}) f \frac{dV_k}{4\pi^3} \quad (2.42)$$

Ukupnu gustinu struje energije dobijamo integracijom po svim stanjima:

$$\vec{\Gamma} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(k)} E_{tot}(\vec{r}, \vec{k}) \cdot \vec{v}(\vec{k}) f dV_k \quad (2.43)$$

Ukupnu energiju elektrona predstavimo kao zbir kinetičke i potencijalne energije: $E_{tot}(\vec{r}, \vec{k}) = W(\vec{k}) - e\varphi(\vec{r})$, što dalje daje

$$\vec{\Gamma} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(k)} W(\vec{k}) \cdot \vec{v}(\vec{k}) f dV_k - \frac{e\varphi(\vec{r})}{4\pi^3} \int_{(k)} \vec{v}(\vec{k}) f dV_k \quad (2.44)$$

Kao što je objašnjeno ispod jednačine (2.39), zbog neparnosti podintegralne funkcije ravnotežni deo energetskog fluksa biće jednak nuli, pa imamo:

$$\vec{\Gamma} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(k)} W(\vec{k}) \cdot \vec{v}(\vec{k}) f_1 dV_k - \frac{e\varphi(\vec{r})}{4\pi^3} \int_{(k)} \vec{v}(\vec{k}) f_1 dV_k \quad (2.45)$$

Poređenjem sa (2.40) zaključujemo da važi sledeća veza između gustine struje energije i gustine struje naelektrisanja:

$$\vec{\Gamma} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(k)} W(\vec{k}) \cdot \vec{v}(\vec{k}) f_1 dV_k + e\varphi(\vec{r}) \vec{J} \quad (2.46)$$

2.3 KINETIČKI KOEFICIJENTI

Posmatraćemo dejstvo četiri moguće eksitacije, a to su: električno polje \vec{K} , magnetno polje \vec{B} , gradijent temperature u materijalu $\vec{\nabla}_r T$ i gradijent hemijskog potencijala $\vec{\nabla}_r W_F$, i detaljnije analizirati situacije u kojima deluju samo pojedine od njih.

2.3.1 TERMOELEKTRIČNE POJAVE

Pretpostavimo da čvrsto telo nije izloženo uticaju magnetnog polja, već su za transport nosilaca odgovorne preostale tri veličine, odnosno

$$\vec{B} = 0, \vec{K} \neq 0, \vec{\nabla}_r T \neq 0, \vec{\nabla}_r W_F \neq 0 \quad (2.47)$$

Na osnovu (2.32b) imamo da je $\vec{\theta} = 0$, a iz (2.32a) i (2.34) sledi:

$$\vec{\chi} = \vec{A} = -\tau \left[\vec{\nabla}_r W_F + \frac{(W - W_F)}{T} \vec{\nabla}_r T + e\vec{K} \right] \quad (2.48)$$

Kako je $T\vec{\nabla}_r \left(\frac{W_F}{T} \right) = \vec{\nabla}_r W_F - \frac{W_F \vec{\nabla}_r T}{T}$, gornji izraz se može napisati u obliku:

$$\vec{\chi} = -e\tau \left[\vec{K} + \frac{T}{e} \vec{\nabla}_r \left(\frac{W_F}{T} \right) + \frac{W \vec{\nabla}_r T}{eT} \right] \quad (2.49)$$

Neravnotežni deo funkcije raspodele određujemo na osnovu (2.19) i on u ovom slučaju glasi

$$f_i = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \cdot (\vec{A} \cdot \vec{v}) \quad (2.50)$$

Zamenom (2.49) i (2.50) u izraz za gustinu struje (2.40) dobijamo:

$$\vec{J} = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau \left\{ \left[\vec{K} + \frac{T}{e} \vec{\nabla}_F \left(\frac{W_F}{T} \right) + \frac{W \vec{\nabla}_F T}{e T} \right] \cdot \vec{v} \right\} \vec{v} dV_k \quad (2.51)$$

Kao što je već rečeno, podrazumevamo da je vreme relaksacije τ izotropna veličina i da zavisi samo od energije, tj. $\tau = \tau(W)$. Posmatrajmo integral oblika:

$$\vec{I} = \int_{(k)} g(W) (\vec{P} \cdot \vec{v}) \cdot \vec{v} dV_k \quad (2.52)$$

gde su g i \vec{P} neke funkcije energije, mada naravno mogu zavisiti i od koordinate \vec{r} , što u posmatranom slučaju nije bitno jer se integracija vrši u k -prostoru, za određenu vrednost \vec{r} . Izraz (2.52) u razvijenom obliku predstavlja sumu 9 članova, pri čemu su koeficijenti oblika $\int_{(k)} g(W) P_j v_j v_k dV_k$, ($j \neq k$) jednaki nuli jer je podintegralna funkcija parna po k_j i k_k , a granice integracije su simetrične. Prema tome, imamo

$$\vec{I} = \int_{(k)} g(W) P_x v_x^2 dV_k \vec{i}_x + \int_{(k)} g(W) P_y v_y^2 dV_k \vec{i}_y + \int_{(k)} g(W) P_z v_z^2 dV_k \vec{i}_z \quad (2.53)$$

Ukoliko vektor \vec{P} ne zavisi od energije, tj. $P_i \neq P_i(W)$, tada se izraz (2.53) može napisati u obliku:

$$\begin{aligned} \vec{I} &= P_x \int_{(k)} g(W) v_x^2 dV_k \vec{i}_x + P_y \int_{(k)} g(W) v_y^2 dV_k \vec{i}_y + P_z \int_{(k)} g(W) v_z^2 dV_k \vec{i}_z \\ &= \vec{P} \int_{(k)} g(W) v_i^2 dV_k \end{aligned} \quad (2.54)$$

gde je $i=x,y$ ili z , s obzirom da su svi integrali oblika $\int_{(k)} g(W) v_i^2 dV_k$ međusobno jednaki zbog simetrije po k_i . Ovo očigledno važi pod uslovom da su komponente brzine različite od nule ($v_i \neq 0, i=x,y,z$), a tada možemo pisati i $\int_{(k)} g(W) v_i^2 dV_k = \frac{1}{3} \int_{(k)} g(W) v^2 dV_k$, pa imamo

$$\vec{I} = \frac{1}{3} \vec{P} \int_{(k)} g(W) v^2 dV_k \quad (2.55)$$

Ako primenimo ove rezultate na izraz (2.51), dobijamo sledeću formulu za gustinu struje

$$\vec{J} = \frac{e^2}{12\pi^3} \left[\vec{K} + \frac{T}{e} \vec{\nabla}_F \left(\frac{W_F}{T} \right) \right] \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 dV_k + \frac{e}{12\pi^3} \frac{\vec{\nabla}_F T}{T} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) \cdot W \cdot v^2 dV_k \quad (2.56)$$

koja se uobičajeno zapisuje u obliku

$$\vec{J} = C_1 \left[\vec{K} + \frac{T}{e} \vec{\nabla}_F \left(\frac{W_F}{T} \right) \right] + C_2 \frac{\vec{\nabla}_F T}{T} \quad (2.57)$$

gde C_1 i C_2 predstavljaju prvi i drugi **kinetički koeficijent**, respektivno, i definisani su na sledeći način

$$C_1 = \frac{e^2}{12\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 dV_k \quad (2.58a)$$

$$C_2 = \frac{e}{12\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) \cdot W \cdot v^2 dV_k \quad (2.58b)$$

Gustinu struje energije određujemo na osnovu izraza (2.46), zamenjujući (2.19) i (2.49), što daje:

$$\vec{\Gamma} = -\frac{e}{4\pi^3} \int W \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau \left\{ \left[\vec{K} + \frac{T}{e} \vec{\nabla}_F \left(\frac{W_F}{T} \right) + \frac{W \vec{\nabla}_F T}{e T} \right] \cdot \vec{v} \right\} \vec{v} dV_k + \varphi(\vec{r}) \vec{J} \quad (2.59)$$

odnosno, na osnovu (2.55) i (2.58b)

$$\begin{aligned} \vec{\Gamma} &= \varphi \vec{J} - \frac{e}{12\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau W \left\{ \left[\vec{K} + \frac{T}{e} \vec{\nabla}_F \left(\frac{W_F}{T} \right) + \frac{W \vec{\nabla}_F T}{e T} \right] \cdot \vec{v} \right\} v^2 dV_k \\ &= \varphi \vec{J} - C_3 \left[\vec{K} + \frac{T}{e} \vec{\nabla}_F \left(\frac{W_F}{T} \right) \right] - C_4 \frac{\vec{\nabla}_F T}{T} \end{aligned} \quad (2.60)$$

Ovde C_3 i C_4 predstavljaju nove kinetičke koeficijente, a očigledno je da važi:

$$C_3 = C_2 \quad (2.61a)$$

$$C_4 = \frac{1}{12\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) \cdot W^2 \cdot v^2 dV_k \quad (2.61b)$$

Uspostavićemo vezu između kinetičkih koeficijenata i makroskopskih veličina koje se mogu eksperimentalno odrediti. Kombinovanjem izraza (2.57) i (2.60) dobijamo:

$$\vec{\Gamma} = \left(\varphi - \frac{C_2}{C_1} \right) \vec{J} + \left(\frac{C_2^2}{C_1} - C_4 \right) \frac{\vec{\nabla}_r T}{T} \quad (2.62)$$

Na osnovu definicije hemijskog potencijala (2.12), imamo

$$W_F = E_F + e\varphi \quad (2.63)$$

Zamenom φ iz izraza (2.63) u (2.62) dobijamo:

$$\vec{\Gamma} = \left(\frac{W_F - E_F - C_2}{e} - \frac{C_2}{C_1} \right) \vec{J} + \left(\frac{C_2^2}{C_1} - C_4 \right) \frac{\vec{\nabla}_r T}{T} \quad (2.64)$$

a uobičajeno je da se prethodna formula napiše u obliku:

$$\vec{\Gamma} = \left(\frac{W_F - C_2}{e} - \frac{C_2}{C_1} \right) \vec{J} + \left(\frac{C_2^2}{C_1} - C_4 \right) \frac{\vec{\nabla}_r T}{T} - \frac{E_F}{e} \vec{J} \quad (2.65)$$

Ukoliko je $\vec{J} = 0$, tada je energetski fluks srazmeran gradijentu temperature, a koeficijent srazmere ima oblik

$$\lambda = \left(C_4 - \frac{C_2^2}{C_1} \right) \frac{1}{T} \quad (2.66)$$

naziva se **toplotna provodnost**, i kao što je poznato, može se eksperimentalno odrediti. S druge strane, ako je $\vec{J} \neq 0$ a $\vec{\nabla}_r T = 0$, možemo definisati koeficijent srazmere između energetskog fluksa i gustine struje u obliku:

$$\Pi^* = \frac{W_F - C_2}{e} - \frac{E_F}{e} \quad (2.67)$$

Gornji izraz predstavlja jednu od formulacija **Peltier-ovog koeficijenta**, koji opisuje efekat izdvajanja (ili apsorbovanja) energije pri proticanju električne struje kroz spoj različitih materijala. Uobičajeniji izraz za Peltier-ov koeficijent je

$$\Pi = \frac{W_F - C_2}{e} - \frac{C_2}{C_1} \quad (2.68)$$

i daje identične rezultate kao (2.67) jer izdvojena toplota na spoju dva materijala A i B zavisi od njihovog relativnog koeficijenta $\Pi_{AB} = \Pi_A - \Pi_B$, a elektrohemijski potencijal $E_F(\vec{r})$ je neprekidna funkcija koordinate \vec{r} . Kao što ćemo pokazati u nastavku $\vec{J} - \vec{\nabla}_r E_F(\vec{r})$, pa ako bi $E_F(\vec{r})$ bila prekidna funkcija sledilo bi $\vec{J} \rightarrow \infty$, što naravno nije fizički moguće.

Konačno, izraz za gustinu struje energije može se napisati u obliku:

$$\vec{\Gamma} = \Pi \vec{J} - \lambda \vec{\nabla}_r T - \frac{E_F}{e} \vec{J} \quad (2.69)$$

Ukoliko iz (2.57) izrazimo električno polje \vec{K} , dobijamo:

$$\vec{K} = \frac{1}{C_1} \vec{J} + \left(\frac{W_F - C_2}{e} - \frac{C_2}{C_1} \right) \vec{\nabla}_r T - \frac{1}{e} \vec{\nabla}_r W_F \quad (2.70)$$

Na osnovu gornje formule, posmatrajući slučaj kada je ispunjeno $\vec{\nabla}_r T = 0$ i $\vec{\nabla}_r W_F = 0$, lako je zaključiti da koeficijent uz \vec{J} predstavlja specifičnu električnu otpornost ρ . Drugim rečima, **specifična električna provodnost** iznosi:

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = C_1 \quad (2.71)$$

Analogno tome, ako je $\vec{J} = 0$, a $\vec{\nabla}_r T \neq 0$, tada možemo definisati **koeficijent termo-elektromotorne sile**, koji karakteriše Seebeck-ov efekat (generisanje razlike potencijala usled postojanja gradijenta temperature):

$$\alpha = \frac{\left(\frac{W_F - C_2}{e} - \frac{C_2}{C_1} \right)}{T} \quad (2.72)$$

Poređenjem izraza (2.72) i izraza za Peltier-ov koeficijent u obliku (2.68), dolazimo do veze

$$\Pi = \alpha \cdot T \quad (2.73)$$

koja predstavlja **Thomson-ovu relaciju**.

Na ovaj način smo, za slučaj kada je $\vec{B} = 0$, uspostavili zavisnost između funkcije raspodele i makroskopskih parametara ($\lambda, \sigma, \Pi, \alpha$), za čije izračunavanje je od ključnog značaja poznavanje funkcije $\tau(W)$, odnosno adekvatno modelovanje dominantnih mehanizama rasejanja.

Specifična električna provodnost

Ograničimo se na slučaj kada na elektrone u čvrstom telu deluje samo spoljašnje električno polje \vec{K} ($\vec{B}=0, \vec{\nabla}_r T=0, \vec{\nabla}_r W_F=0$). Pretpostavimo da je električno polju usmereno duž z-ose, tj.

$$\vec{K} = K\vec{i}_z \quad (2.74)$$

Tada na osnovu (2.51) imamo:

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) (\vec{K} \cdot \vec{v}) \cdot \vec{v} dV_k \\ &= \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) v_z \vec{v} dV_k \cdot \vec{K} \end{aligned} \quad (2.75)$$

Kao što je objašnjeno prilikom izvođenja kinetičkih koeficijenata (videti izraze (2.52)-(2.58a,b)), poslednji izraz se svodi na:

$$\vec{J} = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) v_z^2 dV_k \cdot \vec{K} = \sigma \vec{K} \quad (2.76)$$

S druge strane, gustina struje elektrona se može napisati i u obliku:

$$\vec{J} = (-e)n\langle \vec{v} \rangle \quad (2.77)$$

gde $\langle \vec{v} \rangle$ predstavlja srednju brzinu elektrona pod dejstvom električnog polja, odnosno driftovsku brzinu, a n je koncentracija elektrona. Na osnovu (2.76), driftovska brzina dobija oblik:

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{-\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) v_z^2 dV_k}{n} \cdot \vec{K} \quad (2.78)$$

Koncentraciju elektrona izračunavamo na uobičajeni način:

$$n = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(k)} f dV_k = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(k)} (f_0 + f_1) dV_k \quad (2.79)$$

Smatraćemo da je spoljašnje polje slabo, odnosno da je neravnotežni doprinos mali, pa ćemo koncentraciju aproksimirati njenom ravnotežnom vrednošću n_0 :

$$n \approx n_0 = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(k)} f_0 dV_k \quad (2.80)$$

Na osnovu toga izraz (2.78) dobija oblik:

$$\langle \vec{v} \rangle = -\frac{e \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) v_z^2 dV_k}{\int_{(k)} f_0 dV_k} \cdot \vec{K} \quad (2.81)$$

Analiziraćemo prvo integral u brojiocu:

$$I_1 = \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) v_z^2 dV_k \quad (2.82)$$

S obzirom da su ekvivalentne površine sfere ($W = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$), integral je najjednostavnije rešavati u sfernim koordinatama, pa u jednačini (2.82) možemo zameniti:

$$v_z = \frac{\hbar k_z}{m^*} = \frac{\hbar k \cos \theta}{m^*} \quad (2.83a)$$

$$dV_k = k^2 \sin \theta d\theta d\varphi dk \quad (2.83b)$$

Na osnovu toga dobijamo:

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{\hbar^2}{m^{*2}} \int_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) k^4 dk \int_{\theta=0}^{\pi} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi \\ &= \frac{4\pi}{3} \frac{\hbar^2}{m^{*2}} \int_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) k^4 dk \end{aligned} \quad (2.84)$$

Kako je dalje $k = \sqrt{2m^*W/\hbar^2}$, možemo preći na integraciju po kinetičkoj energiji:

$$I_1 = \frac{8\pi}{3} \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar^3} \int_{W=0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau(W) W^{3/2} dW \quad (2.85)$$

Na sličan način transformisaćemo i integral u imeniocu:

$$I_2 = \int_{(k)} f_0 dV_k = 2\pi \int_{k=0}^{\infty} f_0 k^2 dk = 4\pi \frac{(2m^*)^{3/2}}{h^3} \int_{W=0}^{\infty} f_0 W^{1/2} dW \quad (2.86)$$

Prema tome, driftovska brzina elektrona u slučaju slabog električnog polja dobija sledeći oblik:

$$\langle \bar{v} \rangle = \frac{(-e)}{m^*} \frac{2}{3} \frac{\int_{W=0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) W^{3/2} dW}{\int_{W=0}^{\infty} f_0 W^{1/2} dW} \cdot \bar{K} \quad (2.87)$$

Koeficijent srazmere između brzine drifta i električnog polja naziva se **pokretljivost** (μ), a gornji izraz se može zapisati u kompaktnijoj formi:

$$\langle \bar{v} \rangle = \frac{(-e)\langle \tau \rangle}{m^*} \bar{K} \equiv \mu \bar{K} \quad (2.88)$$

gde je $\langle \tau \rangle$ srednje vreme relaksacije, u obliku

$$\langle \tau \rangle = \frac{2}{3} \frac{\int_{W=0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) W^{3/2} dW}{\int_{W=0}^{\infty} f_0 W^{1/2} dW} \quad (2.89)$$

Na osnovu (2.88) vidimo da je pokretljivost elektrona negativna, tj.

$$\mu = \frac{(-e)\langle \tau \rangle}{m^*} < 0 \quad (2.90)$$

odnosno da je smer driftovske brzine elektrona suprotan od smera spoljašnjeg polja. Izraz za gustinu struje elektrona glasi:

$$\bar{J} = (-e)n\langle \bar{v} \rangle = -\frac{e^2 n \langle \tau \rangle}{m^*} \bar{K} \equiv \sigma \bar{K} \quad (2.91a)$$

$$\sigma = \frac{e^2 n \langle \tau \rangle}{m^*} \quad (2.91b)$$

gde je σ specifična električna provodnost. Za izračunavanje pokretljivosti i provodnosti ključno je poznavanje funkcije $\tau(W)$ čiji oblik je po pravilu veoma složen i određen različitim mehanizmima sudara koje elektron doživljava u poluprovodniku ili metalu. Tu spadaju

rasejanje elektrona na jonizovanim primesama, na defektima, na fononima (vibracijama kristalne rešetke) koji mogu biti optički i akustički, itd. Ukoliko su dominantni oblici interakcije rasejanja na jonizovanim primesama i na fononima, tada se zavisnost $\tau(W)$ može prikazati na sledeći način:

$$\tau(W) = \tau_0 \left(\frac{W}{k_B T} \right)^r \quad (2.92)$$

gde je τ_0 konstanta (tj. vreme relaksacije pri energiji $W = k_B T$), a r je parameter čija vrednost zavisi od mehanizma rasejanja:

$$r = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{za rasejanje na jonizovanim primesama} \\ -\frac{1}{2}, & \text{za rasejanje na akustičkim fononima} \\ 0, & \text{za rasejanje na optičkim fononima (na nižim temperaturama)} \\ \frac{1}{2}, & \text{za rasejanje na optičkim fononima (na višim temperaturama)} \end{cases} \quad (2.93)$$

Jasno je da konstanta τ_0 ima različitu vrednost za svaki od navedenih mehanizama rasejanja. Analizirajmo slučaj **potpune nedegeneracije**, gde kao što je poznato, ravnotežnu funkciju raspodele možemo aproksimirati na sledeći način:

$$f_0(W) = \frac{1}{e^{\frac{W-W_F}{k_B T}} + 1} \approx e^{-\frac{W-W_F}{k_B T}} \quad (2.94)$$

odnosno,

$$-\frac{\partial f_0}{\partial W} = \frac{1}{k_B T} e^{-\frac{W-W_F}{k_B T}} \quad (2.95)$$

Na osnovu toga izraz (2.89) postaje:

$$\langle \tau \rangle = \frac{2}{3k_B T} \frac{\int_{W=0}^{\infty} e^{-\frac{W-W_F}{k_B T}} \tau(W) W^{3/2} dW}{\int_{W=0}^{\infty} e^{-\frac{W-W_F}{k_B T}} W^{1/2} dW} \quad (2.96)$$

Posle skraćivanja faktora sa hemijskim potencijalom i zamene izraza (2.92) dobijamo:

$$\langle \tau \rangle = \frac{2\tau_0}{3k_B T} \frac{\int_{W=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} W^{3/2} \left(\frac{W}{k_B T}\right)^r dW}{\int_{W=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} W^{1/2} dW} \quad (2.97)$$

Uvešćemo bezdimenzionalnu promenljivu $x \equiv W / k_B T$, što će prethodni izraz dovesti u formu:

$$\langle \tau \rangle = \frac{2\tau_0}{3} \frac{\int_{x=0}^{\infty} e^{-x} x^{r+3/2} dx}{\int_{x=0}^{\infty} e^{-x} x^{1/2} dx} \quad (2.98)$$

S obzirom da vrednost integrala u imeniocu iznosi $\sqrt{\pi}/2$, konačni oblik izraza za srednje vreme relaksacije postaje:

$$\langle \tau \rangle = \frac{4\tau_0}{3\sqrt{\pi}} \int_{x=0}^{\infty} e^{-x} x^{r+3/2} dx = \frac{4\tau_0}{3\sqrt{\pi}} \Gamma(\frac{1}{2} + r) \quad (2.99)$$

gde $\Gamma(\frac{1}{2} + r)$ predstavlja gama-funkciju argumenta $\frac{1}{2} + r$. Gama-funkcija definisana je za kompleksne brojeve z sa pozitivnim realnim delom na sledeći način:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{z-1} dx \quad (2.100)$$

Ako je n prirodan broj, tada važe relacije:

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (2.101a)$$

$$\Gamma(n + \frac{1}{2}) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi} \quad (2.101b)$$

Izraz (2.99) važi isključivo pod pretpostavkom da su ispunjeni uslovi za primenu aproksimacija (2.94) i (2.92). Ukoliko τ ne zavisi od energije W , npr. kod rasejanja na optičkim fononima, na nižim temperaturama, gde je $r = 0$ u (2.92), tada izraz (2.99) uz primenu (2.101b) postaje:

$$\langle \tau \rangle = \frac{4\tau_0}{3\sqrt{\pi}} \Gamma(\frac{1}{2}) = \frac{4\tau_0}{3\sqrt{\pi}} \Gamma(2 + \frac{1}{2}) = \tau_0 \quad (2.102a)$$

Za bilo koju drugu vrednost $r \neq 0$ iz skupa (2.93), srednje vreme relaksacije $\langle \tau \rangle$ bi takođe bilo konstantno (ali $\neq \tau_0$) i određeno uz pomoć (2.101a):

$$\langle \tau \rangle = \begin{cases} \frac{8}{\sqrt{\pi}} \tau_0, & \text{za rasejanje na jonizovanim primesama} \\ \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \tau_0, & \text{za rasejanje na akustičkim fononima} \\ \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \tau_0, & \text{za rasejanje na optičkim fononima (na višim temperaturama)} \end{cases} \quad (2.102b)$$

Napomenimo da su prethodni rezultati za srednje vreme relaksacije izvedeni pretpostavljajući da je prisutan samo jedan tip rasejanja, što realno nikada nije slučaj. Istovremeno prisustvo više mehanizama rasejanja koji su međusobno nezavisni uračunava se na sledeći način:

$$\frac{1}{\langle \tau \rangle_{tot}} = \frac{1}{\langle \tau_1 \rangle} + \frac{1}{\langle \tau_2 \rangle} + \dots + \frac{1}{\langle \tau_N \rangle} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\langle \tau_i \rangle} \quad (2.103)$$

gde je $\langle \tau \rangle_{tot}$ totalno srednje vreme relaksacije. Do ovog izraza dolazi se sabiranjem otpornosti koje potiču od svakog tipa rasejanja ($\rho_{tot} = \sum_{i=1}^N \rho_i$, pri čemu je $\rho_i \sim 1/\tau_i$).

2.3.2 STRUJA U POLUPROVODNIKU. EINSTEIN-OVA RELACIJA

Posmatrajmo slučaj kada pored električnog polja postoji i uticaj prostorne zavisnosti hemijskog potencijala, tj.

$$\vec{K} \neq 0, \quad \vec{\nabla}_F W_F \neq 0, \quad \vec{B} = 0, \quad \vec{\nabla}_F T = 0 \quad (2.104)$$

Tada, na osnovu (2.48), funkcija $\tilde{\chi}$ dobija oblik

$$\tilde{\chi} = -\tau \left[\vec{\nabla}_F W_F + e\vec{K} \right] \quad (2.105)$$

a izraz za gustinu struje (2.51) se pojednostavljuje i postaje

$$\vec{J} = \frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau \left[\vec{\nabla}_F W_F + e\vec{K} \right] \cdot \vec{v} dV_k \quad (2.106)$$

Kao što je pokazano jednačinama (2.52)-(2.55), prethodni izraz se može napisati i u formi:

$$\vec{J} = \frac{e}{4\pi^3} \left[\vec{\nabla}_F W_F + e\vec{K} \right] \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v_{z^2} dV_k = C_1 \left[\frac{\vec{\nabla}_F W_F}{e} + \vec{K} \right] \quad (2.107)$$

Kako je $W_F(\vec{r}) = E_F(\vec{r}) + e\phi(\vec{r})$ i $\vec{K} = -\vec{\nabla}_F\phi(\vec{r})$, a $C_1 = \sigma$, izraz za gustinu struje dobija kompaktniji oblik:

$$\vec{J} = \sigma \frac{\vec{\nabla}_F E_F}{e} \quad (2.108)$$

Jasno je da će gustina struje u materijalu biti različita od nule samo u slučaju kada je elektrohemijski potencijal poziciono zavisna. Vraćajući se na oblik (2.107) možemo pisati:

$$\vec{J} = \sigma \vec{K} + \frac{\sigma}{e} \vec{\nabla}_F W_F = \vec{J}_{drift} + \vec{J}_{dif} \quad (2.109a)$$

gde je

$$\vec{J}_{drift} = \sigma \vec{K} \quad (2.110a)$$

$$\vec{J}_{dif} = \frac{\sigma}{e} \vec{\nabla}_F W_F \quad (2.110b)$$

Veličina \vec{J}_{drift} predstavlja **driftovsku komponentu struje**, a \vec{J}_{dif} je **difuziona komponenta struje** povezana sa prostornom promenom koncentracije. Driftovska komponenta struje može se na osnovu (2.91b) i (2.90) napisati i u obliku:

$$\vec{J}_{drift} = -en\mu_n \vec{K} \quad (2.111)$$

gde je μ_n pokretljivost elektrona. Koncentracija elektrona u opštem slučaju predstavlja funkciju hemijskog potencijala, odnosno veličine $\eta(\vec{r}) = W_F(\vec{r}) / k_B T$. Na osnovu toga je

$$\vec{\nabla}_F n(\vec{r}) = \frac{dn}{d\eta} \vec{\nabla}_F \eta = \frac{dn}{d\eta} \frac{\vec{\nabla}_F W_F}{k_B T} \quad (2.112)$$

Zamenom u (2.110b) dobijamo

$$\vec{J}_{dif} = -n\mu_n k_B T \frac{1}{dn} \vec{\nabla}_F n = e D_n \vec{\nabla}_F n \quad (2.113)$$

gde je $D_n > 0$ koeficijent difuzije za elektrone i određen je izrazom:

$$D_n = -\frac{k_B T}{e} \frac{n\mu_n}{dn/d\eta} \quad (2.114)$$

Odavde se može izraziti odnos koeficijenta difuzije i pokretljivosti u formi:

$$\frac{D_n}{\mu_n} = -\frac{k_B T}{e} \frac{dn}{d\eta} \quad (2.115)$$

i ovaj izraz naziva se **Einstein-ova relacija**.

Ukoliko pretpostavimo da je koncentracija elektrona bliska ravnotežnoj vrednosti, možemo je aproksimirati izrazom

$$n(\vec{r}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_c F_{1/2} \left(\frac{W_F(\vec{r})}{k_B T} \right) \quad (2.116)$$

odnosno,

$$n(\vec{r}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_c \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\eta(\vec{r})} + 1} dx \quad (2.117)$$

gde je $x = W / k_B T$. Diferenciranjem formule (2.117) po η dobijamo:

$$\frac{dn}{d\eta} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_c \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} \cdot \eta e^{x-\eta}}{(e^{x-\eta} + 1)^2} dx \quad (2.118)$$

Zamenom u Einstein-ovu relaciju (2.215), dolazimo do izraza:

$$\frac{D_n}{|\mu_n|} = \frac{k_B T}{e} \frac{\int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\eta} + 1} dx}{\int_0^\infty \frac{\sqrt{x} \cdot \eta e^{x-\eta}}{(e^{x-\eta} + 1)^2} dx} \quad (2.119)$$

Dalje ćemo razmotriti asimptotske slučajeve:

1) slučaj potpune nedegeneracije ($e^{-\eta} \gg 1$). Tada je

$$n(\eta) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_c e^\eta \int_0^\infty \sqrt{x} e^{-x} dx \quad (2.120a)$$

$$\frac{dn}{d\eta} \approx n \quad (2.120b)$$

pa izraz (2.119) dobija oblik

$$\frac{D_n}{|\mu_n|} = \frac{k_B T}{e} \quad (2.121)$$

što predstavlja klasičan oblik Einstein-ove relacije

2) slučaj potpune degeneracije ($e^{-\eta} \ll 1$). Tada je, prema (1.158)-(1.164)

$$n(\eta) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_c \int_0^\eta \sqrt{x} dx = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} B_c \eta^{3/2} \quad (2.122a)$$

$$\frac{dn}{d\eta} \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} B_c \eta^{1/2} \quad (2.122b)$$

odnosno,

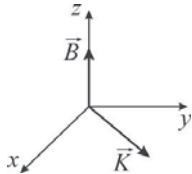
$$\frac{D_n}{|\mu_n|} = \frac{2 W_F}{3 e} \quad (2.123)$$

2.3.3 GALVANOMAGNETNE POJAVE

Posmatrajmo slučaj kada se čvrsto telo nalazi samo pod dejstvom spoljašnjeg električnog i magnetnog polja,

$$\vec{K} \neq 0, \vec{B} \neq 0, \vec{\nabla}_i W_F = 0, \vec{\nabla}_i T = 0 \quad (2.124)$$

Ograničimo se na situaciju kada su vektori električnog i magnetnog polja međusobno upravni ($\vec{B} \perp \vec{K}$) i orijentisani kao na Sl. 2.1.



Sl. 2.1 Pretpostavljena orijentacija vektora električnog polja i magnetne indukcije

U tom slučaju, na osnovu izraza (2.32a), (2.32b) i (2.34)

$$\vec{\chi} = \frac{-e\tau\vec{K} + \frac{\tau^2 e^2}{m^*} (\vec{K} \times \vec{B})}{1 + \frac{e^2 \tau^2}{m^{*2}} B^2} = -e \frac{\tau\vec{K} + \gamma\tau^2 (\vec{B} \times \vec{K})}{1 + (\gamma\tau B)^2} \quad (2.125)$$

gde je $\gamma = e/m^*$. Kako je na osnovu Sl. 2.1. pretpostavljeno da važi

$$\vec{B} = (0, 0, B) \quad (2.126a)$$

$$\vec{K} = (K_x, K_y, 0) \quad (2.126b)$$

gde su B , K_x , K_y konstante, sledi da je

$$\vec{B} \times \vec{K} = -BK_x \vec{i}_x + BK_y \vec{i}_y \quad (2.127)$$

Zamenom u (2.125) dobijamo

$$\vec{\chi} = \chi_x \vec{i}_x + \chi_y \vec{i}_y \quad (2.128a)$$

$$\chi_x = \frac{-e(\tau K_x - \gamma\tau^2 BK_y)}{1 + (\gamma\tau B)^2} \quad (2.128b)$$

$$\chi_y = \frac{-e(\tau K_y + \gamma\tau^2 BK_x)}{1 + (\gamma\tau B)^2} \quad (2.128c)$$

Određićemo gustinu struje polazeći od izraza (2.40) i (2.50).

$$\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} f_1 \vec{v} dV_k = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \vec{w}} \right) \cdot (\vec{A} \cdot \vec{v}) \vec{v} dV_k \quad (2.129)$$

Zamenom (1.128a) u (2.129) dobijamo

$$\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \vec{w}} \right) \cdot (\chi_x v_x + \chi_y v_y) (v_x \vec{i}_x + v_y \vec{i}_y + v_z \vec{i}_z) dV_k \quad (2.130)$$

Kada se prethodni izraz razvije u sumu 6 integrala, svi sabirci kod kojih podintegralne funkcije sadrže proizvod $v_i v_j$ ($i \neq j$) biće jednaki nuli zbog neparnosti tih podintegralnih funkcija, tako da se (2.130) svodi na:

$$\bar{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \cdot (\chi_x v_x^2 \vec{\tau} + \chi_y v_y^2 \vec{\tau}) dV_k = J_x \vec{i}_x + J_y \vec{i}_y \quad (2.131)$$

gde je

$$J_x = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \cdot \frac{\tau K_x - \gamma \tau^2 B K_x}{1 + (\gamma \tau B)^2} v_x^2 dV_k \quad (2.132a)$$

$$J_y = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \cdot \frac{\tau K_y + \gamma \tau^2 B K_x}{1 + (\gamma \tau B)^2} v_y^2 dV_k \quad (2.132b)$$

Izraz (2.132a) napisaćemo u obliku:

$$J_x = a_1 K_x - a_2 K_y \quad (2.133)$$

gde je

$$a_1 = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \cdot \frac{\tau v_x^2}{1 + (\gamma \tau B)^2} dV_k \quad (2.134a)$$

$$a_2 = \frac{e^2}{4\pi^3} \gamma B \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \cdot \frac{\tau^2 v_x^2}{1 + (\gamma \tau B)^2} dV_k \quad (2.134b)$$

Analogno možemo napisati:

$$J_y = \left[\frac{e^2}{4\pi^3} \gamma B \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \cdot \frac{\tau^2 v_y^2}{1 + (\gamma \tau B)^2} dV_k \right] K_x + \left[\frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \cdot \frac{\tau v_y^2}{1 + (\gamma \tau B)^2} dV_k \right] K_y \quad (2.135a)$$

$$J_y = a_2 K_x + a_1 K_y \quad (2.135b)$$

gde je uzeto u obzir da se u izrazima (2.134a) i (2.134b) može zameniti komponenta brzine ($v_x \rightarrow v_y$) bez promene rezultata integracije, zahvaljujući simetriji podintegralne funkcije u odnosu na v_x, v_y . Jednačine (2.133) i (2.135b) možemo zapisati u matičnom obliku:

$$\begin{bmatrix} J_x \\ J_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & -a_2 \\ a_2 & a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_x \\ K_y \end{bmatrix} \quad (2.136)$$

Dalju analizu koeficijenta a_1 nastavićemo proširivanjem izraza (2.134a) koncentracijom elektrona, pretpostavljajući da je ona bliska ravnotežnoj vrednosti, kao i efektivnom masom elektrona:

$$a_1 = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \cdot \frac{\tau v_x^2}{1 + (\gamma \tau B)^2} dV_k \frac{n}{\frac{e^2}{4\pi^3} \int_{(k)} \partial f_0 dV_k} \frac{m^*}{m} \quad (2.137)$$

Iz prethodnog izraza sledi:

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \frac{\int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau^2(W) v_x^2 dV_k}{\int_{(k)} \partial f_0 dV_k} \quad (2.138)$$

gde je $\tau^*(W) = \tau/[1 + (\gamma \tau B)^2]$. Na osnovu izraza (2.82), (2.85) i (2.86) dobijamo:

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \frac{2}{3} \frac{\int_{W=0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \tau^*(W) W^{3/2} dW}{\int_{W=0}^{\infty} f_0 W^{1/2} dW} \quad (2.139)$$

Konačno, posle zamene izraza (2.89), koeficijent a_1 možemo napisati u obliku

$$a_1 = \frac{ne^2 \langle \tau^* \rangle}{m^*} \quad (2.140)$$

Ukoliko su ispunjeni uslovi totalne nedegeneracije, tako da Fermi-Dirac-ovu funkciju f_0 možemo aproksimirati Maxwell-Boltzmann-ovom funkcijom raspodele, na osnovu (2.95) dobijamo:

$$\langle \tau^* \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{x=0}^{\infty} e^{-x} \tau^*(x) \cdot x^{3/2} dx \quad (2.141)$$

gde je $x = W/k_B T$. Na sličan način možemo sprovesti analizu koeficijenta a_2 i doći do rezultata analognog izrazu (2.138):

$$a_2 = \frac{ne^2}{m^*} \frac{m^* \gamma B \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W}\right) \frac{\tau v_x^2}{1 + (\gamma \tau B)^2} v_x^2 dV_k}{\int_{(k)} \partial f_0 dV_k} \quad (2.142)$$

Primena aproksimacije totalne nedegeneracije daje:

$$a_2 = \frac{ne^2}{m^*} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \gamma B \int_{x=0}^{\infty} e^{-x} \frac{\tau^2}{1+(\gamma\tau B)^2} \cdot x^{3/2} dx \quad (2.143)$$

ili konačno,

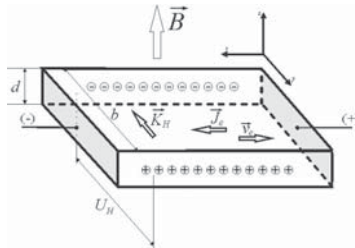
$$a_2 = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau^2}{1+(\gamma\tau B)^2} \right\rangle \gamma B = \frac{ne^2}{m^*} \langle \tilde{\tau}^* \rangle \quad (2.144)$$

kao i

$$\langle \tilde{\tau}^* \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \gamma B \int_{x=0}^{\infty} e^{-x} \frac{\tau^2}{1+(\gamma\tau B)^2} \cdot x^{3/2} dx \quad (2.145)$$

Hall-ov efekat

Posmatrajmo uzorak poluprovodničkog materijala, u formi pločice debljine d i širine b , koji se nalazi u konstantnom električnom i magnetnom polju i kroz koji protiče struja $\vec{J} = \vec{J}_e$, kao što je prikazano na Sl. 2.2. Na elektrone koji se usmereno kreću driftovskom brzinom \vec{v}_e , usled prisustva magnetno polja delovaće sila $\vec{F} = -e(\vec{v}_e \times \vec{B})$ u pravcu normalnom na \vec{v}_e i \vec{B} . Pod dejstvom ove sile doći će od skretanja elektrona i njihovog nagomilavanja na jednoj od bočnih stranica uzorka, dok će na suprotnoj stranici ostati višak pozitivnog naelektrisanja. Ovo će rezultovati pojavom razlike potencijala između posmatranih stranica koja se naziva **Hall-ov napon** (označen sa U_H na Sl. 2.2).



Sl. 2.1 Ilustracija pojave Hall-ovog napona u poluprovodniku kroz koji protiče struja, usled skretanja naelektrisanja pod dejstvom magnetnog polja

Za geometriju problema kao na Sl. 2.2. možemo pisati:

$$K_x, K_y \neq 0, B_x = B, J_x = J, J_y = 0 \quad (2.146)$$

s obzirom da je y -komponenta struje u ustaljenom režimu jednaka nuli. Na osnovu (2.136) imamo:

$$J_x = J = a_1 K_x - a_2 K_y \quad (2.147a)$$

$$J_y = 0 = a_2 K_x + a_1 K_y \quad (2.147b)$$

odakle sledi

$$K_y = -\frac{a_2}{a_1^2 + a_2^2} J \quad (2.148)$$

Prethodni izraz napisaćemo u formi:

$$K_y = R_H B J \quad (2.149)$$

uz napomenu da su K_y , B i J algebarske vrednosti u odnosu na koordinantni sistem sa Sl. 2.2, čime smo definisali **Hall-ovu konstantu** R_H :

$$R_H = -\frac{a_2}{a_1^2 + a_2^2} \frac{1}{B} \quad (2.150)$$

Na osnovu izraza (2.150) zaključujemo da Hall-ova konstanta za elektrone ima negativnu vrednost ($a_2 > 0$), jer je $K_y < 0$, a $J > 0$ i $B > 0$, kao što se vidi sa Sl. 2.2. Ova konstanta se može eksperimentalno odrediti merenjem Hall-ovog napona (razlike potencijala na stranicama upravni na y -osu). Kako je $K_y = |\vec{K}_H| = |U_H|/b$, zamenom u (2.149) dobijamo:

$$\frac{|U_H|}{b} = R_H B \frac{I}{bd} \quad (2.151)$$

odnosno,

$$R_H = \frac{|U_H| d}{I b B} \quad (2.152)$$

Definisaćemo još i **magnetootpornost** $\rho(B)$ na sledeći način:

$$\rho(B) = \frac{K_x}{J_x} \quad (2.153)$$

Relativna promena specifične električne otpornosti u odnosu na slučaj kada je $B = 0$ iznosi:

$$\Delta\rho(B) = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = \frac{1}{\rho(0)} \frac{K_x}{J_x} - 1 \quad (2.154)$$

Na osnovu (2.147b) i (2.148) sledi

$$K_x = -\frac{a_1}{a_2} K_y = \frac{a_1}{a_1^2 + a_2^2} J \quad (2.155)$$

tako da relativna promena otpornosti usled dejstva magnetnog polja iznosi

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho(0)} = \frac{1}{\rho(0)} \frac{a_1}{a_1^2 + a_2^2} - 1 \quad (2.156)$$

Detaljnija analiza izraza za R_H i $\rho(B)$ iziskuje poznavanje zavisnosti $\tau(W)$ pa ćemo dalje razmatrati specijalne slučajeve:

1) vreme relaksacije τ je konstantno tj. ne zavisi od energije ($\tau = \tau_0$, $\tau_0 \neq \tau_0(W)$).

Tada se izrazi (2.141) i (2.144b) pojednostavljuju pa dobijamo:

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \frac{\tau_0}{1 + (\gamma\tau_0 B)^2} \quad (2.157a)$$

$$a_2 = \frac{ne^2}{m^*} \gamma B \frac{\tau_0^2}{1 + (\gamma\tau_0 B)^2} = a_1 \gamma B \tau_0 \quad (2.157b)$$

što zamenom u (2.150) daje

$$R_H = -\frac{\gamma\tau_0}{a_1[1 + (\gamma\tau_0 B)^2]} \quad (2.158)$$

odnosno

$$R_H = R_{H_0} = -\frac{1}{ne} \quad (2.159)$$

Kao što je već objašnjeno, Hall-ova konstanta se može eksperimentalno odrediti, pa se iz (2.159) može jednostavno izračunati koncentracija elektrona. Hall-ov efekat je otkriven 1879. godine i u početku je istraživan na metalima, a kasnije i na poluprovodnicima. Iz izraza (2.152) i (2.159) vidi se da je Hall-ov napon U_H obrnuto srazmeran koncentraciji n . Kako je

koncentracija elektrona za nekoliko redova veličine veća u metalima nego u poluprovodnicima, to je i Hall-ov napon u istom odnosu manji u metalima. Konkretnije, U_H u poluprovodnicima jer reda desetak mV, a u metalima reda μ V i manje, što je naravno mnogo teže izmeriti. Ovo je jedan od razloga što je Hall-ov efekat dobio mnogo na značaju sa primenom poluprovodnika.

Izraz za relativnu promenu otpornosti (2.156) u ovom slučaju dobija oblik:

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho(0)} = \frac{1}{\rho(0)} \frac{1}{\left(\frac{ne^2\tau_0}{m^*}\right)} - 1 = 0 \quad (2.160)$$

s obzirom da je $\sigma(0) = 1/\rho(0) = ne^2\tau_0/m^*$ (videti (2.91b) i (2.102)). Kao što vidimo na osnovu izraza (2.160) u ovoj aproksimaciji efekat magnetootpornosti izostaje ($\Delta\rho(B)/\rho(0) = 0$).

2) vreme relaksacije τ je funkcija energije W , tj $\tau = \tau(W)$.

Tada je

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + (\gamma\tau B)^2} \right\rangle \quad (2.161a)$$

$$a_2 = \frac{ne^2}{m^*} \gamma B \left\langle \frac{\tau^2}{1 + (\gamma\tau B)^2} \right\rangle \quad (2.161b)$$

a) posmatrajmo slučaj **slabih magnetnih polja**, kada se može smatrati da je ispunjen uslov

$$(\gamma\tau(W)B)^2 \ll 1 \quad (2.162)$$

Ovak uslov se može zapisati približno i kao $(\mu B)^2 \ll 1$, gde je $\mu = |\mu_n|$, jer je $\mu \approx \gamma\tau$. Uzimajući standardne vrednosti za pokretljivost μ kod GaAs, Ge i Si koje iznose 0.85, 0.35 i 0.15 m^2/Vs , respektivno, i smatrajući da je potrebno ostvariti $(\mu B)^2 \ll 1$, odnosno u praksi $(\mu B)^2 < 0.1$, za maksimalne vrednosti indukcije pri kojima je prethodna nejednakost ispunjena, dobijamo 0.37, 0.81 i 2.1 T, respektivno. Ova analiza pokazuje da "slaba polja" u realnim uslovima ne moraju biti mala.

Linearna aproksimacija koeficijentata a_1 i a_2 u odnosu na B glasi

$$a_1 \approx \frac{ne^2}{m^*} \langle \tau \rangle \quad (2.163a)$$

$$a_2 \approx \frac{ne^2}{m^*} \gamma B \langle \tau^2 \rangle \quad (2.163b)$$

Tada izraz (2.150) dobija oblik:

$$R_H = -\frac{1}{\left(\frac{ne^2}{m^*}\right) \langle \tau \rangle^2 \left[1 + \gamma^2 B^2 \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}\right]} \langle \tau^2 \rangle \quad (2.164)$$

Drugi sabirak u imeniocu je srazmeran sa B^2 pa se u linearnoj aproksimaciji zanemaruje, što daje:

$$R_H = -\frac{1}{ne} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = R_{H_0} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \quad (2.165)$$

Posmatrajmo primer zavisnosti $\tau(W)$ dat izrazom (2.92). U tom slučaju se za vrednost Hall-ove konstante dobija:

$$R_H = \begin{cases} \frac{3\pi}{8} R_{H_0} \approx 1.178 R_{H_0}, & \text{za rasejanje na jonizovanim primesama} \\ \frac{315\pi}{512} R_{H_0} \approx 1.933 R_{H_0}, & \text{za rasejanje na akustičkim fononima} \\ \frac{45\pi}{128} R_{H_0} \approx 1.104 R_{H_0}, & \text{za rasejanje na optičkim fononima (niže temperature)} \\ R_{H_0}, & \text{za rasejanje na optičkim fononima (više temperature)} \end{cases} \quad (2.166)$$

što jasno ukazuje na to da se zanemarivanjem zavisnosti τ od W u nekim slučajevima pravi velika greška.

Relativna promena otpornosti u linearnoj aproksimaciji $a_1(B)$ i $a_2(B)$ iznosi:

$$\frac{\Delta \rho(B)}{\rho(0)} = \frac{1}{\rho(0)} \frac{\langle \tau \rangle^2}{\left(\frac{ne^2}{m^*}\right) \left[\langle \tau \rangle^2 + \gamma^2 B^2 \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \right]} - 1 \approx \frac{1}{\rho(0)} \left(\frac{ne^2}{m^*}\right) - 1 = 0 \quad (2.167)$$

Očigledno je da ni primena linearne aproksimacije ne omogućava detektovanje efekta magnetootpornosti.

U kvadratnoj aproksimaciji koeficijente a_1 i a_2 prikazujemo u obliku:

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \langle \tau \left[1 + (\gamma \tau B)^2\right] \rangle = \frac{ne^2}{m^*} \left[\langle \tau \rangle - \gamma^2 B^2 \langle \tau^3 \rangle \right] \quad (2.168a)$$

$$a_2 = \frac{ne^2}{m^*} \gamma B \langle \tau^2 \rangle \quad (2.168b)$$

Tada je

$$\begin{aligned} \rho(B) &= \frac{\langle \tau \rangle - \gamma^2 B^2 \langle \tau^3 \rangle}{\left(\frac{ne^2}{m^*}\right) \left[\left[\langle \tau \rangle - \gamma^2 B^2 \langle \tau^3 \rangle \right]^2 + \gamma^2 B^2 \langle \tau^2 \rangle^2 \right]} \\ &\approx \frac{1}{\left(\frac{ne^2}{m^*}\right)} \frac{\langle \tau \rangle - \gamma^2 B^2 \langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle^2 - 2\gamma^2 B^2 \langle \tau^3 \rangle \langle \tau \rangle + \gamma^2 B^2 \langle \tau^2 \rangle^2} \end{aligned} \quad (2.169)$$

Kako je $\sigma(0) = ne^2 \langle \tau \rangle / m^*$, možemo dalje pisati:

$$\begin{aligned} \rho(B) &= \frac{1 - \gamma^2 B^2 \frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle}}{\sigma(0) \left[1 - 2\gamma^2 B^2 \frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle} + \gamma^2 B^2 \frac{\langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right]} \\ &\approx \rho(0) \left(1 - \gamma^2 B^2 \frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle} \right) \left[1 + \gamma^2 B^2 \left(2 \frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle} - \frac{\langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.170)$$

Zanemarujući članove srazmerne sa B^4 i zamenjujući izraz za pokretljivost $\mu = \gamma \langle \tau \rangle$ dobijamo:

$$\rho(B) \approx \rho(0) \left[1 + \mu^2 B^2 \left(\frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle} - \frac{\langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right) \right] \quad (2.171)$$

odakle je konačno:

$$\frac{\Delta \rho(B)}{\rho(0)} \approx \mu^2 B^2 \left(\frac{\langle \tau^3 \rangle \langle \tau \rangle - \langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right) \quad (2.172)$$

Očigledno je da ako bi važiolo $\tau \neq \tau(W)$, tj. $\langle \tau \rangle = \tau$, tada bismo imali $\Delta\rho(B)/\rho(0)=0$, kao što smo već ranije konstatovali.

Za prethodno razmatrane mehanizme rasejanja dobijamo:

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho(0)} = \begin{cases} \frac{9\pi}{16} \left[1 - \frac{\pi}{4} \right] (\mu B)^2 \approx 4.16 (\mu B)^2, & \text{za rasejanje na jonizovanim primesama} \\ \frac{15\pi}{8} \left[1 - \frac{5615\pi}{32768} \right] (\mu B)^2 \approx 2.15 (\mu B)^2, & \text{za rasejanje na akustičkim fononima} \\ \frac{27\pi}{64} \left[1 - \frac{75\pi}{256} \right] (\mu B)^2 \approx 0.105 (\mu B)^2, & \text{za rasejanje na opt. fononima (niže temp.)} \\ 0, & \text{za rasejanje na opt. fononima (više temp.)} \end{cases} \quad (2.173)$$

Generalno, možemo zaključiti da u slučaju slabih polja primena kvadratne aproksimacije pokazuje da je relativna promena specifične otpornosti uvek pozitivna i srazmerna kvadratu magnetne indukcije.

b) slučaj **jakih magnetnih polja**, dat je uslovom $(\gamma\tau(W)B)^2 \gg 1$. Sprovedeći analizu kao kod slabih polja, a smatrajući da je ispunjeno $(\mu B)^2 > 10$, za minimalne vrednosti indukcije pri kojima je zadovoljena prethodna nejednakost dobijamo 3.72, 8.10 i 21.08 T, za GaAs, Ge i Si, respektivno. Ove minimalne vrednosti nalaze se u opsegu jakih ili vrlo jakih polja, što ukazuje na to da je neophodno sprovesti detaljniju analizu posmatranog problema. Naime, kada se čvrsto telo unese u magnetno polje, tada energetski spektar provodne zone (koji je u odsustvu magnetnog polja oblika $W = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$), dobija formu $W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} (j + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c$, $j = 0, 1, 2, \dots$

gde je $\omega_c = eB/m^*$ ciklotronska učestanost, j je Landau-ov indeks, a podrazumevano je da je vektor \vec{B} orijentisan duž x -ose. Ako su polja slaba, tada $\hbar \omega_c$ ima malu vrednost pa se energetski spektar može aproksimirati kontinualnim, a cela pojava zadovoljavajuće opisati Boltzmann-ovom kinetičkom jednačinom. Kada su polja jaka (reda nekoliko desetina T), tada je $\hbar \omega_c$ relativno veliko i može da bude veće od termalne energije $k_B T$. U ovom slučaju neophodan je strožiji kvantno-mehanički prilaz, koji isključuje Boltzmann-ovu kinetičku jednačinu. Prema tome, primena iste procedure kao za slaba polja, na slučaj kada je $(\mu B)^2 \gg 1$, ne bi imala nikakvog smisla, jer kao što je rečeno Boltzmann-ova kinetička jednačina gubi validnost tj. koeficijenti a_1 i a_2 nemaju fizičkog značaja.

Interesantno je napomenuti da u nekim od svetski priznatih knjiga iz fizike poluprovodnika, slučaj jakih magnetnih polja tretiran tako što je u koeficijentima a_1 i a_2 , koji su rezultat rešavanja Boltzmann-ove kinetičke jednačine, jednostavno uveden uslov $(\mu B)^2 \gg 1$. Ovakav prilaz, kao što smo pokazali, nema nikakvog fizičkog opravdanja.

2.4 ODBRANI PROBLEMI

Problem 2.1. Provodna zona jednodimenzionalnog provodnika može se opisati izotropnom disperzionom relacijom u obliku $E(k) = Ak^a$, gde su A i a konstante. Polazeći od izraza za provodnost

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^2} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 dk_x dk_y, \quad (P.2.1)$$

pokazati da na niskim temperaturama (na kojima se $(-\partial f_0/\partial W)$ može aproksimirati sa $\delta(W - W_F)$) nezavisno od vrednosti A i a možemo izraziti površinsku provodnost u obliku $\sigma = e^2 n_s \tau / m$, gde je n_s površinska koncentracija elektrona, $\tau = \tau(W_F)$, i $m = (\hbar k/V)_{|W=W_F}$.

Rešenje: Izraz za površinsku koncentraciju (P.2.1) predstavlja kinetički koeficijent C_1 (videti (2.58a)), izračunat za dvodimenzionalni slučaj:

$$\begin{aligned} \sigma_{2D} = C_1 &= \frac{2e^2}{(2\pi)^2} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v_i^2 dV_k, \quad i = x \vee y \\ &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{2\pi^2} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 dk_x dk_y, \end{aligned} \quad (P.2.2)$$

Prelaskom u polarne koordinate dobijamo

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^2} \int_{(k)} \int_{\theta=0}^{2\pi} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 k dk d\theta = \frac{e^2}{2\pi} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 k dk \quad (P.2.3)$$

Dalje ćemo iskoristiti aproksimaciju za niske temperature $(-\partial f_0/\partial W) \approx \delta(W - W_F)$, vodeći računa da se integracija vrši po k , pa ćemo zameniti

$$\left(-\partial f_0/\partial W \right) \approx \delta(W - W_F) = \frac{1}{\left(\frac{dW}{dk} \right)_{k=k_F}} \delta(k - k_F) \quad (P.2.4)$$

u izraz (P.2.3), gde je $W(k_F) = W_F$. Na taj način dobijamo

$$\sigma = \frac{e^2}{2\pi} \int_{(k)} \frac{1}{\left(\frac{dW}{dk} \right)_{k=k_F}} \delta(k - k_F) \tau(W) v^2 k dk \quad (P.2.5)$$

Znajući da je brzina elektrona $\vec{v} = \vec{\nabla}_{\vec{k}} W(\vec{k}) / \hbar$, odnosno da je $v = (dW/dk) / \hbar$, izraz (P.2.5) možemo napisati u obliku:

$$\sigma = \frac{e^2}{2\pi} \int_{(k)} \frac{1}{v_F \hbar} \delta(k - k_F) \tau(W) v^2 k dk = \frac{e^2}{2\pi \hbar} \tau(W_F) v_F k_F \quad (\text{P.2.6})$$

Površinska koncentracija elektrona u metalu iznosi:

$$n_s = \frac{1}{\pi} \int_{k=0}^{k_F} k dk = \frac{k_F^2}{2\pi} \quad (\text{P.2.7})$$

što daje traženi rezultat:

$$\sigma = \frac{e^2}{\hbar k_F} v_F \tau(W_F) n_s = \frac{e^2 n_s \tau}{m} \quad (\text{P.2.8})$$

Problem 2.2. Izračunati Seebeck-ov koeficijent za trodimenzionalni poluprovodnik u slučaju potpune nedegeneracije, ako je zavisnost energije od talasnog vektora parabolična sa izotropnom efektivnom masom. a) pretpostaviti da je vreme rasejanja konstantno b) pretpostaviti da je srednja dužina slobodnog puta konstantna

Rešenje: Seebeck-ov koeficijent izražen preko kinetičkih koeficijenata dat je izrazom (2. 72)

$$\alpha = \frac{\left(\frac{W_F}{e} - \frac{C_2}{C_1} \right)}{T} \quad (\text{P.2.9})$$

gde je

$$C_1 = \frac{e^2}{12\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial \epsilon_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 dV_k \quad (\text{P.2.10a})$$

$$C_2 = \frac{e}{12\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial \epsilon_0}{\partial W} \right) \tau(W) \cdot W \cdot v^2 dV_k \quad (\text{P.2.10b})$$

Kako je u slučaju totalne nedegeneracije $-\frac{\partial f_0}{\partial W} = \frac{1}{k_B T} e^{-\frac{W_F - W}{k_B T}}$, kinetičke koeficijente možemo dalje napisati u obliku:

$$C_1 = \frac{e^2}{12\pi^3 k_B T} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} e^{-\frac{W}{k_B T}} \tau(W) v^2 k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi \quad (\text{P.2.11a})$$

$$= \frac{e^2}{3\pi^2 k_B T} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} \tau(W) v^2 k^2 dk$$

$$C_2 = \frac{e}{3\pi^2 k_B T} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} \tau(W) W v^2 k^2 dk \quad (\text{P.2.11b})$$

a) ukoliko je vreme relaksacije konstantno i iznosi $\tau(W) = \tau_0$, dobijamo

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{e^2 \tau_0 \hbar^2}{3\pi^2 k_B T m^{3/2}} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} k^4 dk = \frac{2e^2 \tau_0 \sqrt{2m^*}}{3\pi^2 k_B T \hbar} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{W=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} W^{3/2} dW \\ &= \frac{2e^2 \tau_0 \sqrt{2m^*} (k_B T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{x=0}^{\infty} e^{-x} x^{3/2} dx = \frac{2e^2 \tau_0 \sqrt{2m^*} (k_B T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \Gamma(5/2) \end{aligned} \quad (\text{P.2.12})$$

Na sličan način, drugi kinetički koeficijent možemo napisati u obliku:

$$\begin{aligned} C_2 &= \frac{2e\tau_0 \sqrt{2m^*}}{3\pi^2 k_B T \hbar} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{W=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} W^{5/2} dW \\ &= \frac{2e\tau_0 \sqrt{2m^*} (k_B T)^{5/2}}{3\pi^2 \hbar} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{x=0}^{\infty} e^{-x} x^{5/2} dx = \frac{2e\tau_0 \sqrt{2m^*} (k_B T)^{5/2}}{3\pi^2 \hbar} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \Gamma(7/2) \end{aligned} \quad (\text{P.2.13})$$

Zamenom u izraz (P.2.9) za Seebeck-ov koeficijent dobijamo:

$$\alpha = \frac{1}{T} \left(\frac{W_F}{e} - \frac{k_B T}{e} \frac{\Gamma(7/2)}{\Gamma(5/2)} \right) = \frac{k_B}{e} \left(\frac{W_F}{k_B T} - \frac{5}{2} \right) \quad (\text{P.2.14})$$

b) ukoliko je srednja dužina slobodnog puta konstantna tada možemo smatrati da je $v\tau = \text{Const} = \lambda_0$, što na osnovu (P.2.11a) i (P.2.11b) daje:

$$C_1 = \frac{e^2 \lambda_0}{3\pi^2 k_B T} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} v k^2 dk = \frac{e^2 \lambda_0 \hbar}{3\pi^2 m k_B T} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} k^3 dk \quad (\text{P.2.15a})$$

$$= \frac{2e^2 \lambda_0 m^*}{3\pi^2 k_B T \hbar^3} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{W=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} W dW = \frac{2e^2 \lambda_0 m^* k_B T}{3\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{x=0}^{\infty} e^{-x} x dx$$

$$C_2 = \frac{e \lambda_0}{3\pi^2 k_B T} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} W v k^2 dk = \frac{2e \lambda_0 m^*}{3\pi^2 k_B T \hbar^3} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{W=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} W^2 dW$$

$$= \frac{2e \lambda_0 m^* (k_B T)^2}{3\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{x=0}^{\infty} e^{-x} x^2 dx \quad (\text{P.2.15b})$$

pa Seebeck-ov koeficijent iznosi:

$$\alpha = \frac{1}{T} \left(\frac{W_F}{e} - \frac{k_B T}{e} \frac{\Gamma(3)}{\Gamma(2)} \right) = \frac{k_B}{e} \left(\frac{W_F}{k_B T} - 2 \right) \quad (\text{P.2.16})$$

Problem 2.3 Izraz za gustinu struje elektrona kada u poluprovodniku postoji gradijent hemijskog potencijala i gradijent temperature može se napisati u obliku:

$$\vec{J} = K_1 \vec{\nabla}_r W_F + K_2 \vec{\nabla}_r T \quad (\text{P.2.17})$$

Određiti koeficijente K_1 i K_2 za trodimenzionalni poluprovodnik kod koga se može primeniti aproksimacija totalne degeneracije u slučaju kada se srednja dužina slobodnog puta može smatrati konstantnom.

Rešenje: U prisustvu gradijenta hemijskog potencijala i temperature, gustinu struje možemo izraziti preko kinetičkih koeficijenata C_1 i C_2 u formi (2.57):

$$\vec{J} = C_1 \frac{T}{e} \vec{\nabla}_r \left(\frac{W_F}{T} \right) + C_2 \frac{\vec{\nabla}_r T}{T} = \frac{C_1}{e} \vec{\nabla}_r W_F + \frac{1}{T} \left(C_2 - \frac{C_1 W_F}{e} \right) \vec{\nabla}_r T \quad (\text{P.2.18})$$

Na osnovu prethodnog izraza zaključujemo da je

$$K_1 = \frac{C_1}{e} = \frac{\sigma}{e} \quad (\text{P.2.19a})$$

$$K_2 = -\frac{C_1}{T} \left(\frac{W_F}{e} - \frac{C_2}{C_1} \right) = -\frac{1}{T} \sigma \Pi = -\sigma \alpha \quad (\text{P.2.19b})$$

gde je σ specifična električna provodnost, Π je Peltier-ov koeficijent a α je Seebeck-ov koeficijent. Koristeći izraz (2.58a) možemo pisati

$$K_1 = \frac{e}{12\pi^3} \int_{(k)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 dV_k = \frac{e}{3\pi^2} \int_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) \tau(W) v^2 k^2 dk \quad (\text{P.2.20})$$

S obzirom da se radi o slučaju totalne nedegeneracije imamo $-\frac{\partial f_0}{\partial W} = \frac{1}{k_B T} e^{-\frac{W_F - W}{k_B T}}$, a pošto se srednja dužina slobodnog puta može smatrati konstantnom ($v(W)\tau(W) = \lambda_0$), prethodni izraz dobija oblik:

$$K_1 = \frac{e \lambda_0}{3\pi^2 k_B T} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} v k^2 dk = \frac{e \lambda_0 \hbar}{3\pi^2 k_B T m^*} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} k^3 dk \quad (\text{P.2.21})$$

Prelaskom na integraciju po kinetičkoj energiji W , dolazimo do rezultata:

$$K_1 = \frac{2e \lambda_0 m^*}{3\pi^2 k_B T \hbar^3} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \int_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{W}{k_B T}} W dW = \frac{2e \lambda_0 m^* k_B T}{3\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \quad (\text{P.2.22})$$

Ravnotežna koncentracija elektrona u posmatranom slučaju iznosi:

$$n_0 = 2 \left(\frac{m^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{W_F}{k_B T}} \quad (\text{P.2.23})$$

pa se izraz (6) može napisati u obliku

$$K_1 = \frac{2\sqrt{2} e \lambda_0 n_0}{3\sqrt{\pi} m^* k_B T} \quad (\text{P.2.24})$$

Za izračunavanje koeficijenta K_2 iskoristićemo rezultat dobijen u primeru P.2.2 za Seebeck-ov koeficijent:

$$\alpha = \frac{k_B}{e} \left(\frac{W_F}{k_B T} - 2 \right) \quad (\text{P.2.25})$$

pa je

$$K_2 = -\sigma \alpha = -\frac{2\sqrt{2} k_B e \lambda_0 n_0}{3\sqrt{\pi} m^* T} \left(\frac{W_F}{k_B T} - 2 \right) \quad (\text{P.2.26})$$

Problem 2.4 Polazeći od pretpostavljenog rešenja za neravnotežni član funkcije raspodele u obliku (2.19), pokazati da se u slučaju kada deluje samo slabo električno polje \vec{K} , ukupna (neravnotežna) funkcija raspodele može aproksimirati izrazom :

$$f = f_0(W - e\tau\vec{v}\vec{K}) \quad (\text{P.2.27})$$

gde je f_0 ravnotežna (Fermi-Dirac-ova funkcija raspodele). Posebno analizirati slučaj kada se Fermi-Dirac-ova funkcija raspodele može aproksimirati Maxwell-Boltzmann-ovom funkcijom, a zavisnost kinetičke energije od talasnog vektora je parabolna (sa skalarnom efektivnom masom).

Rešenje: Neravnotežnu funkciju raspodele predstavljamo u obliku:

$$f = f_0 + \left(-\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) [\vec{\chi} \cdot \vec{v}] \quad (\text{P.2.28})$$

gde je $\vec{\chi}$, za slučaj kada postoji samo slabo električno polje, na osnovu izraza (2.30) jednako

$$\vec{\chi} = -\tau e \vec{K} \quad (\text{P.2.29})$$

Prema tome, funkciju raspodele možemo napisati u formi:

$$f = f_0 + \left(\frac{\partial f_0}{\partial W} \right) e\tau\vec{v} \cdot \vec{K} \quad (\text{P.2.30})$$

gde je

$$\frac{\partial f_0}{\partial W} = -\frac{e^{-\frac{W-W_F}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{W-W_F}{k_B T}} + 1 \right)^2} \frac{1}{k_B T} \quad (\text{P.2.31})$$

S druge strane, posmatrajmo funkciju

$$\tilde{f} = f_0(W+x) = \frac{1}{e^{\frac{W+x-W_F}{k_B T}} + 1} \quad (\text{P.2.32})$$

gde je $x = e\tau\vec{v} \cdot \vec{K}$. Za male vrednosti x , funkciju \tilde{f} možemo aproksimirati izrazom

$$\tilde{f} \approx \tilde{f}(x=0) + \left. \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x} \right|_{x=0} \cdot x \quad (\text{P.2.33})$$

Kako je $\tilde{f}(x=0) = f_0$, a $\left. \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{\partial f_0}{\partial W}$, možemo pisati

$$\tilde{f} = f_0(W + e\tau\vec{v} \cdot \vec{K}) \approx f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial W} (e\tau\vec{v} \cdot \vec{K}) \quad (\text{P.2.34})$$

Poređenjem sa izrazom (4) zaključujemo da je

$$f \approx f_0(W + e\tau\vec{v} \cdot \vec{K}) \quad (\text{P.2.35})$$

Ovo znači da u prisustvu slabog električnog polja funkcija raspodele zadržava istu formu kao u slučaju termodinamičke ravnoteže, samo je energija elektrona promenjena i iznosi $\tilde{W} = W + e\tau\vec{v} \cdot \vec{K}$, odnosno "pomerena" je za vrednost $e\tau\vec{v} \cdot \vec{K}$ koja predstavlja energiju koju elektron dobije pod dejstvom polja \vec{K} za vreme τ .

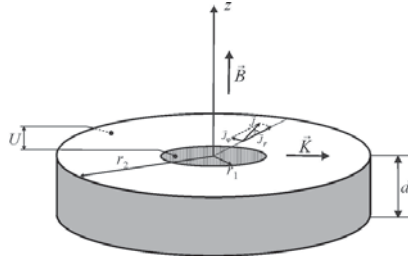
U slučaju totalne nedegeneracije, Fermi-Dirac-ovu funkciju raspodele možemo aproksimirati Maxwell-Boltzmann-ovom funkcijom $f_0 = e^{-\frac{W-W_F}{k_B T}}$, gde je po uslovu zadatka $W = \hbar^2 k^2 / 2m^*$. Tada neravnotežna funkcija raspodele dobija oblik:

$$f = e^{-\frac{W_F - W - e\tau\vec{v} \cdot \vec{K}}{k_B T}} = e^{-\frac{W_F}{k_B T}} e^{-\frac{m^*}{2k_B T} (v^2 - 2\vec{v} \cdot \vec{v}_d)} \quad (\text{P.2.36})$$

gde je $\vec{v}_d = -e\tau\vec{v} \cdot \vec{K} / m^*$ driftovska brzina elektrona. Prethodni izraz možemo preurediti i u formu

$$f = e^{-\frac{W_F + m^* v_d^2 / 2}{k_B T}} e^{-\frac{m^* (\vec{v} - \vec{v}_d)^2}{2k_B T}} \quad (\text{P.2.37})$$

Problem 2.5. Disk od poluprovodničkog materijala izrazito p-tipa ima dva omska kontakta (Sl. P.2.1). Kroz disk protiče struja, a prisutno je i slabo spoljašnje magnetno polje \vec{B} paralelno osi diska. Odrediti a) ugao φ koji zaklapa vektor gustine struje sa poluprečnikom diska, b) relativnu promenu otpornosti u funkciji magnetnog polja i c) ukupnu tangencijalnu struju. Debljinu diska iznosi d , napon između elektroda je U . Smatrati da su pokretljivost μ i koncentracija šupljina poznate.


Sl. P.2.1 Corbino disk

Rešenje: a) Konfiguracija prikazana na Sl. P.2.1 naziva se Corbino disk i pogodna je za merenje magnetootpornosti. Naziv je dobila po O. M. Corbino-u koji je 1911. godine objavio rezultate merenja magnetootpornosti nekoliko metala koristeći ovakvu geometriju.

Ovaj problem rešavaćemo koristeći Lorentz-ov modela transporta koji se može dobiti pojednostavljanjem Boltzmann-ovog modela. Prema Lorentz-ovom pristupu, pretpostavlja se da je kretanje nosilaca naelektrisanja pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja \vec{K} i magnetnog polja \vec{B} , režirano sledećom jednačinom kretanja:

$$m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{K} + q(\vec{v} \times \vec{B}) - \frac{m^* \vec{v}}{\tau} \quad (\text{P.2.38})$$

U ovom izrazu \vec{v} srednju brzinu nosilaca, m^* je efektivna masa za koju je pretpostavljeno da je skalarna veličina, τ je izotropno vreme relaksacije. Poslednji sabirak u jednačini (P.2.38) ima ulogu da uračuna efekte različitih procesa rasejanja u poluprovodniku na kretanje nosilaca. Ovi efekti se približno opisuju "silom trenja" koja je srazmerna brzini. Gornju jednačinu najjednostavnije je rešavati u cilindričnom koordinatnom sistemu, pa ćemo napisati:

$$\vec{v} = v_r \vec{i}_r + v_\phi \vec{i}_\phi + v_z \vec{i}_z \quad (\text{P.2.39a})$$

$$\vec{K} = K \vec{i}_r \quad (\text{P.2.39b})$$

$$\vec{B} = B \vec{i}_z \quad (\text{P.2.39c})$$

Analiziraćemo stacionarno stanje (kada je $d\vec{v}/dt = 0$), pa će jednačina (P.2.38) dobiti oblik:

$$e\vec{i}_r K + eB(v_\phi \vec{i}_r - v_r \vec{i}_\phi) - \frac{m^*}{\tau}(v_r \vec{i}_r + v_\phi \vec{i}_\phi + v_z \vec{i}_z) = 0 \quad (\text{P.2.40})$$

gde je zamenjeno $q = e$ pošto se radi o šupljinama (poluprovodnik je izrazito p-tipa). Dobijenu vektorsku jednačinu dalje možemo razložiti na tri skalarne:

$$eK + eBv_\phi - \frac{m^*}{\tau}v_r = 0 \quad (\text{P.2.41a})$$

$$-eBv_r - \frac{m^*}{\tau}v_\phi = 0 \quad (\text{P.2.41b})$$

$$-\frac{m^*}{\tau}v_z = 0 \quad (\text{P.2.41c})$$

Kao što je i očekivano, pod dejstvom spoljašnjih polja nosioci će se kretati u ravni diska ($v_z = 0$). Iz izraza (P.2.341a) i (P.2.341b) možemo odrediti radialnu i tangencijalnu komponentu brzine:

$$v_r = \frac{eK}{\frac{m^*}{\tau} + \frac{e^2 B^2 \tau}{m^*}} \quad (\text{P.2.42a})$$

$$v_\phi = -\frac{e^2 BK \frac{\tau}{m^*}}{\frac{m^*}{\tau} + \frac{e^2 B^2 \tau}{m^*}} \quad (\text{P.2.42b})$$

Zamenom izraza za pokretljivost u obliku $\mu = e\tau / m^*$ dobijamo:

$$v_r = \frac{\mu K}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{P.2.43a})$$

$$v_\phi = -\frac{\mu^2 BK}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{P.2.43b})$$

Pretpostavljajući da je struja manjinskih nosilaca zanemarljiva, ukupnu gustinu struje možemo napisati na sledeći način:

$$\vec{J} \approx \vec{J}_p = ep\vec{v} = J_r \vec{i}_r + J_\phi \vec{i}_\phi \quad (\text{P.2.44a})$$

$$J_r = epv_r, \quad J_\phi = epv_\phi \quad (\text{P.2.44b})$$

Zamenom izraza (P.2.343a) i (P.2.343b), dobijamo radijalnu i tangencijalnu komponentu gustine struje u obliku:

$$J_r = ep - \frac{\mu K}{1 + \mu^2 B^2} = \frac{\sigma K}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{P.2.45a})$$

$$J_\varphi = -ep \frac{\mu^2 BK}{1 + \mu^2 B^2} = -\frac{\sigma \mu BK}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{P.2.45b})$$

gde je $\sigma = ep\mu$ specifična električna provodnost. Ugao koji zaklapa vektor gustine struje sa poluprečnikom diska (θ na Sl. Sl. P.2.1), možemo odrediti na sledeći način:

$$\tan \theta = \frac{J_\varphi}{J_r} = -\mu B \quad (\text{P.2.46})$$

b) Otpornost diska predstavlja odnos između priključenog napona i ukupne struje koja teče u radijalnom pravcu:

$$R = \frac{U}{I_r} \quad (\text{P.2.47})$$

Struju I_r izračunavamo uz pomoć radijalne komponente gustine struje:

$$I_r = J_r S_r = J_r \cdot 2r\pi d \quad (\text{P.2.48})$$

dok je veza napon između elektroda i električnog polja oblika:

$$U = |U_r| = \int_{r_1}^{r_2} K(r) dr \quad (\text{P.2.49})$$

gde su r_1 i r_2 unutrašnji i spoljašnji poluprečnik diska, respektivno. Zamenićemo J_r iz relacije (P.2.348) u izraz (P.2.345a), a zatim integraliti po radijalnoj koordinati:

$$\frac{I_r}{2\pi d} \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r} = \frac{\sigma}{1 + \mu^2 B^2} \int_{r_1}^{r_2} K(r) dr \quad (\text{P.2.50})$$

čime dobijamo

$$\frac{I_r}{2\pi d} \ln \frac{r_2}{r_1} = \frac{\sigma}{1 + \mu^2 B^2} U \quad (\text{P.2.51})$$

Prema tome, otpornost diska za datu vrednost magnetnog polja iznosi:

$$R(B) = \frac{\ln(r_2/r_1)}{2\pi d \sigma} (1 + \mu^2 B^2) \quad (\text{P.2.52})$$

a relativna promena otpornosti u funkciji magnetnog polja:

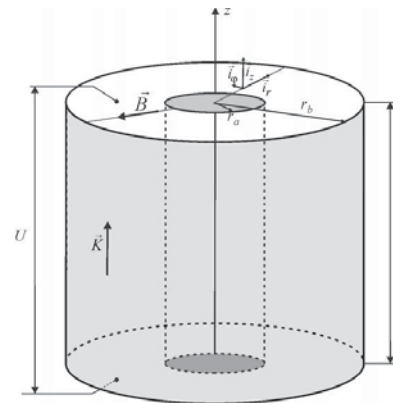
$$\frac{\Delta R(B)}{R(B)} = \frac{R(B) - R(0)}{R(B)} = \mu^2 B^2 \quad (\text{P.2.53})$$

c) Ukupnu tangencijalnu struju odredićemo na sledeći način:

$$I_\varphi = \int J_\varphi dS_\varphi = \int_{r_1}^{r_2} J_\varphi d \cdot dr = -\frac{\sigma \mu B d}{1 + \mu^2 B^2} \ln \frac{r_2}{r_1} \cdot U \quad (\text{P.2.54})$$

Znak “-“ označava da se nosioci kreću u suprotnom smeru od onog koji je pretpostavljen na Sl. Sl. P.2.1.

Problem 2.6. Cilindar visine l , unutrašnjeg poluprečnika r_a i spoljašnjeg r_b , napravljen od poluprovodničkog materijala izrazito p-tipa, izložen je dejstvu radijalnog magnetnog polja koje se u oblasti $r_a \leq r \leq r_b$ može prikazati u obliku $\vec{B}(\vec{r}) = B_0 \frac{r_a}{r} \vec{e}_r$. Na osnove cilindra nanete su elektrode i na njih je priključen spoljašnji napon U (videti Sl. P.2.2). Odrediti (ukupnu) tangencijalnu struju I_φ i relativnu relativnu promenu provodnosti između elektroda u zavisnosti od magnetnog polja. Smatrati da su pokretljivost μ i koncentracija šupljina poznate.



Sl. P.2.2 Poluprovodnički cilindar pod dejstvom radijalnog magnetnog polja, na čije osnove je priključen spoljašnji napon U

Rešenje: a) Lorentz-ova jednačina kretanja nosilaca u stacionarnom stanju, u posmatranom slučaju glasi:

$$e\vec{K} + e(\vec{v} \times \vec{B}) - \frac{m^* \vec{v}}{\tau} = 0 \quad (\text{P.2.55})$$

gde je

$$\vec{B} = B(r)\vec{i}_r \quad (\text{P.2.56a})$$

$$\vec{K} = K\vec{i}_z \quad (\text{P.2.56b})$$

Zamenom (P.2.356a) i (P.2.356b) u jednačinu kretanja (P.2.355) dobijamo:

$$eK\vec{i}_z + eB(r)(v_z\vec{i}_\phi - v_\phi\vec{i}_z) - \frac{m^*}{\tau}(v_r\vec{i}_r + v_\phi\vec{i}_\phi + v_z\vec{i}_z) = 0 \quad (\text{P.2.57})$$

odakle sledi:

$$v_r = 0 \quad (\text{P.2.58a})$$

$$v_\phi = \frac{eK}{eB + \frac{m^*}{\tau^2}eB} = \frac{\mu^2 KB}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{P.2.58b})$$

$$v_z = \frac{\mu K}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{P.2.58c})$$

Ukupna gustina struje iznosi

$$\vec{J} = \vec{J}_\phi = ep\vec{v} = epv_\phi\vec{i}_\phi + epv_z\vec{i}_z \quad (\text{P.2.59a})$$

$$J_\phi = \frac{\sigma\mu B(r)K}{1 + \mu^2 B^2}, \quad J_z = \frac{\sigma K}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{P.2.59b})$$

Prema tome, tangencijalna komponenta struje određena je izrazom:

$$I_\phi = \int J_\phi dS_\phi = \int_{r_a}^{r_b} J_\phi l \cdot dr = \sigma\mu Kl \int_{r_a}^{r_b} \frac{B_0(r_a/r)}{1 + \mu^2 B_0^2(r_a/r)^2} dr \quad (\text{P.2.60})$$

Integral rešavamo uvođenjem smene $t = r^2 + \mu^2 B_0^2 r_a^2$ i dobijamo:

$$I_\phi = \frac{\sigma\mu UB_0 r_a}{2} \ln \frac{(r_b/r_a)^2 + \mu^2 B_0^2}{1 + \mu^2 B_0^2} \quad (\text{P.2.61})$$

Provodnost između elektroda iznosi:

$$G = \frac{1}{R} = \frac{I_z}{U} \quad (\text{P.2.62})$$

gde je

$$I_z = \int J_z dS_z = \int_{r_a}^{r_b} J_z 2r\pi dr = 2\pi\sigma K \int_{r_a}^{r_b} \frac{rdr}{1 + \mu^2 B_0^2(r_a/r)^2} \quad (\text{P.2.63})$$

odnosno:

$$I_z = \pi\sigma \frac{U}{l} \left\{ (r_b^2 - r_a^2) - \mu^2 B_0^2 r_a^2 \ln \left[\frac{(r_b/r_a)^2 + \mu^2 B_0^2}{1 + \mu^2 B_0^2} \right] \right\} \quad (\text{P.2.64})$$

Na osnovu toga provodnost između elektroda jednaka je

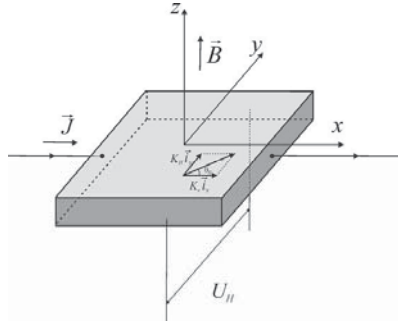
$$G = \frac{\pi\sigma}{l} \left\{ (r_b^2 - r_a^2) - \mu^2 B_0^2 r_a^2 \ln \left[\frac{(r_b/r_a)^2 + \mu^2 B_0^2}{1 + \mu^2 B_0^2} \right] \right\} \quad (\text{P.2.65})$$

dok relativna promena provodnosti iznosi:

$$\frac{\Delta G(B)}{G(B)} = \frac{G(B) - G(0)}{G(B)} = -\mu^2 B_0^2 r_a^2 \frac{\ln \left[\frac{(r_b/r_b)^2 + \mu^2 B_0^2}{1 + \mu^2 B_0^2} \right]}{(r_b^2 - r_a^2)} \quad (\text{P.2.66})$$

Vidimo da sa porastom B_0 opada provodnost cilindra, pošto se smanjuje komponenta brzine u z-pravcu.

Problem 2.7. Naći Hall-ovu konstantu R_H i Hall-ov ugao θ_H za poluprovodnički materijal u kome su prisutne obe vrste nosilaca. Smatrati da su ekvivalentne površine elipsoidne, a odgovarajuće dijagonalne komponente tenzora inverzne efektivne mase za elektrone iznose $1/m_{x_e}$, $1/m_{y_e}$ i $1/m_{z_e}$ i analogno za šupljine ($1/m_{x_h}$, $i = x, y, z$). Posmatrati uzorak u obliku kvadra, čije ose su orijentisane u pravcu glavnih osa ekvivalentnih elipsoida, pri čemu struja teče u pravcu x , a magnetno polje deluje u pravcu z (Sl. P.2.3). Smatrati da su vremena relaksacije konstantna i ne zavise od pravca kretanja nosilaca ali se razlikuju za elektrone i šupljine ($\tau_e \neq \tau_h$). Takođe smatrati da je magnetno polje slabo.



Sl. P.2.3 Poluprovodnički uzorak u obliku kvadra, kod koga su značajne obe vrste nosilaca, kroz koji protiče struja u pravcu x , a slabo magnetno polje je usmereno u pravcu z .

Rešenje: Jednačine kretanja nosilaca u poluprovodničkom uzorku sa Sl. P.2.3 imaju oblik:

$$\frac{d\vec{p}_e}{dt} = q_e \vec{K} + q_e (\vec{v}_e \times \vec{B}) - \frac{\vec{P}_e}{\tau_e} \quad (\text{P.2.67a})$$

$$\frac{d\vec{p}_h}{dt} = q_h \vec{K} + q_h (\vec{v}_h \times \vec{B}) - \frac{\vec{P}_h}{\tau_h} \quad (\text{P.2.67b})$$

gde je $q_e = -e$, $q_h = e$, a pošto se radi o materijalu kod koga su ekvivalentne površine elipsoidi, veza između impulsa i brzine za elektrone i šupljine je oblika:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{m_{xx,h}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_{yy,h}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_{zz,h}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{x,h} \\ P_{y,h} \\ P_{z,h} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_{x,h} \\ V_{y,h} \\ V_{z,h} \end{bmatrix} \quad (\text{P.2.68})$$

odakle je

$$P_{x,h} = m_{xx,h} V_{x,h}, \quad P_{y,h} = m_{yy,h} V_{y,h}, \quad P_{z,h} = m_{zz,h} V_{z,h} \quad (\text{P.2.69})$$

Pod dejstvom spoljašnjeg magnetnog polja $\vec{B} = B \vec{i}_z$, doći će do skretanja nosilaca u pravcu y i stvaranja razlike potencijala U_H , pa je električno polje oblika $\vec{K} = K_x \vec{i}_x + K_y \vec{i}_y$, gde je

$K_y = K_H$. Jednačine (P.2.367a) i (P.2.367b) rešavamo u stacionarnom stanju ($d\vec{p}_{e,h}/dt = 0$), što daje:

$$-e(K_x \vec{i}_x + K_y \vec{i}_y) - eB(v_{y,h} \vec{i}_x - v_{x,h} \vec{i}_y) - \frac{1}{\tau_e} (m_{xx} v_{x,e} \vec{i}_x + m_{yy} v_{y,e} \vec{i}_y + m_{zz} v_{z,e} \vec{i}_z) = 0 \quad (\text{P.2.70a})$$

$$e(K_x \vec{i}_x + K_y \vec{i}_y) + eB(v_{y,h} \vec{i}_x - v_{x,h} \vec{i}_y) - \frac{1}{\tau_h} (m_{xx} v_{x,h} \vec{i}_x + m_{yy} v_{y,h} \vec{i}_y + m_{zz} v_{z,h} \vec{i}_z) = 0 \quad (\text{P.2.70b})$$

Jednačinu (4a) razdvojimo na tri skalare jednačine:

$$-eK_x - eBv_{y,e} - \frac{m_{xx} v_{x,e}}{\tau_e} = 0 \quad (\text{P.2.71a})$$

$$-eK_x + eBv_{x,e} - \frac{m_{yy} v_{y,e}}{\tau_e} = 0 \quad (\text{P.2.71b})$$

$$-\frac{m_{zz} v_{z,e}}{\tau_e} = 0 \quad (\text{P.2.71c})$$

Odavde dobijamo komponente brzine elektrona:

$$v_{x,e} = \frac{e\tau_e}{m_{xx}} \left[\frac{eB\tau_e K_y}{m_{yy}} - K_x \right] \frac{1}{1 + \frac{e^2 \tau_e^2 B^2}{m_{xx} m_{yy}}} \quad (\text{P.2.72a})$$

$$v_{y,e} = \frac{e\tau_e}{m_{yy}} \left[\frac{eB\tau_e K_x}{m_{xx}} + K_y \right] \frac{1}{1 + \frac{e^2 \tau_e^2 B^2}{m_{xx} m_{yy}}} \quad (\text{P.2.72b})$$

$$v_{z,e} = 0 \quad (\text{P.2.72c})$$

Uvešćemo pokretljivosti elektrona u pravcima x i y na sledeći način:

$$\mu_x = -\frac{e\tau_e}{m_{xx}}, \quad \mu_y = -\frac{e\tau_e}{m_{yy}} \quad (\text{P.2.73})$$

na osnovu čega izrazi (8a) i (8b) dobijaju oblik:

$$v_x = \frac{\mu_x [\mu_y BK_y + K_x]}{1 + \mu_x \mu_y B^2} \quad (\text{P.2.74a})$$

$$v_y = \frac{\mu_y [-\mu_x BK_x + K_y]}{1 + \mu_x \mu_y B^2} \quad (\text{P.2.74b})$$

Na sličan način, rešavanjem jednačine (4b) dolazimo do odgovarajućih izraza za komponente brzine šupljina:

$$v_{s_x} = \frac{\frac{e\tau_h}{m_{sx}} \left[\frac{eB\tau_h K_y}{m_{sy}} + K_x \right]}{1 + \frac{e^2 \tau_h^2 B^2}{m_{sx} m_{sy}}} \quad (\text{P.2.75a})$$

$$v_{s_y} = \frac{\frac{e\tau_h}{m_{sy}} \left[-\frac{eB\tau_h K_x}{m_{sx}} + K_y \right]}{1 + \frac{e^2 \tau_h^2 B^2}{m_{sx} m_{sy}}} \quad (\text{P.2.75b})$$

$$v_{s_z} = 0 \quad (\text{P.2.75c})$$

Pokretljivosti šupljina u pravcima x i y imaju oblik:

$$\mu_{s_x} = \frac{e\tau_h}{m_{sx}}, \quad \mu_{s_y} = \frac{e\tau_h}{m_{sy}} \quad (\text{P.2.76})$$

pa je

$$v_{s_x} = \frac{\mu_{s_x} [\mu_{s_y} BK_y + K_x]}{1 + \mu_{s_x} \mu_{s_y} B^2} \quad (\text{P.2.77a})$$

$$v_{s_y} = \frac{\mu_{s_y} [-\mu_{s_x} BK_x + K_y]}{1 + \mu_{s_x} \mu_{s_y} B^2} \quad (\text{P.2.77b})$$

Pošto je magnetno polje slabo, komponente brzine elektrona možemo aproksimirati izrazima:

$$v_x \approx \mu_x (\mu_y BK_y + K_x) \quad (\text{P.2.78a})$$

$$v_y \approx \mu_y (-\mu_x BK_x + K_y) \quad (\text{P.2.78b})$$

a odgovarajuće komponente gustine struje u tom slučaju dobijaju oblik:

$$J_x = -en v_x \approx -en \mu_x (\mu_y BK_y + K_x) = \sigma_x (\mu_y BK_y + K_x) \quad (\text{P.2.79a})$$

$$J_y = -en v_y \approx -en \mu_y (-\mu_x BK_x + K_y) = \sigma_y (-\mu_x BK_x + K_y) \quad (\text{P.2.79b})$$

gde $\sigma_x = -en \mu_x$ i $\sigma_y = -en \mu_y$ predstavljaju specifične električne provodnosti elektrona u pravcu x i y , respektivno. Kada su u pitanju šupljine, zanemarivanjem članova srazmernih sa B^2 u (11a) i (11b) dobijamo:

$$J_{s_x} = ep v_{s_x} \approx ep \mu_{s_x} (\mu_{s_y} BK_y + K_x) = \sigma_{s_x} (\mu_{s_y} BK_y + K_x) \quad (\text{P.2.80a})$$

$$J_{s_y} = ep v_{s_y} \approx ep \mu_{s_y} (-\mu_{s_x} BK_x + K_y) = \sigma_{s_y} (-\mu_{s_x} BK_x + K_y) \quad (\text{P.2.80b})$$

gde je $\sigma_{s_x} = ep \mu_{s_x}$ i $\sigma_{s_y} = ep \mu_{s_y}$. Ukupna gustina struje u pravcu y jednaka je nuli pa imamo:

$$J_y = J_x + J_{s_y} = 0 \quad (\text{P.2.81})$$

odnosno

$$\sigma_x (-\mu_x BK_x + K_y) + \sigma_{s_y} (-\mu_{s_x} BK_x + K_y) = 0 \quad (\text{P.2.82})$$

odakle je

$$K_y = K_H = \frac{\mu_{s_x} \sigma_{s_y} + \mu_x \sigma_{s_x}}{\sigma_x + \sigma_{s_x}} BK_x \quad (\text{P.2.83})$$

Hall-ova konstanta određena je izrazom (2.149):

$$R_H = \frac{K_y}{BJ_x} \quad (\text{P.2.84})$$

gde je u posmatranom poluprovodniku

$$J_x = J_x + J_{s_x} = (\sigma_x + \sigma_{s_x}) K_x + (\sigma_x \mu_x + \sigma_{s_x} \mu_{s_x}) BK_y \quad (\text{P.2.85})$$

Pošto je $K_y \sim B$ na osnovu izraza (P.2.83), zaključujemo da je drugi deo izraza za J_x srazmeran sa B^2 pa ga možemo zanemariti u odnosu na prvi član kada je B malo.

$$J_x \approx (\sigma_{y_x} + \sigma_{y_h}) K_x \quad (\text{P.2.86})$$

Prema tome, Hall-ova konstanta iznosi:

$$R_H = \frac{\mu_{y_h} \sigma_{y_h} + \mu_{y_x} \sigma_{y_x}}{(\sigma_{y_x} + \sigma_{y_h})(\sigma_{y_x} + \sigma_{y_h})} \quad (\text{P.2.87})$$

Hall-ov ugao definisan je na sledeći način:

$$\tan(\theta_H) = \frac{K_H}{K_x} \quad (\text{P.2.88})$$

i u posmatranom slučaju iznosi:

$$\tan(\theta_H) = \frac{\mu_{y_h} \sigma_{y_h} + \mu_{y_x} \sigma_{y_x}}{\sigma_{y_x} + \sigma_{y_h}} B \quad (\text{P.2.89})$$

Kada bi efektivna masa u poluprovodniku bila izotropna, imali bismo $\mu_{y_x} = \mu_{y_h} = \mu_e$, $\mu_{y_h} = \mu_{y_x} = \mu_h$, $\sigma_{y_x} = \sigma_{y_h} = \sigma_e$, $\sigma_{y_h} = \sigma_{y_x} = \sigma_h$, pa bi izrazi za Hall-ovu konstantu i Hall-ov ugao dobili oblik:

$$R_H = \frac{\mu_e \sigma_e + \mu_h \sigma_h}{\sigma^2} \quad (\text{P.2.90a})$$

$$\tan(\theta_H) = \frac{\mu_h \sigma_h + \mu_e \sigma_e}{\sigma} B \quad (\text{P.2.90b})$$

gde je $\sigma = \sigma_h + \sigma_e$.

Problem 2.8. Na čestice naelektrisanja q i skalarnu efektivnu masu m^* deluje stalno magnetno polje indukcije \vec{B} i električno polje jačine \vec{K} visoke učestanosti ω . Vektori \vec{K} i \vec{B} su međusobno upravni, pri čemu se pravac \vec{K} poklapa sa x -osom, a pravac \vec{B} sa z -osom. Odrediti izraz za visokofrekventnu provodnost definisanu kao $\sigma = J_x / K_x$ i frekvenciju za koju je apsorpcija elektromagnetnih talasa maksimalna. Uticaj defekata rešetke, rasejanja na fononima i primesama, kao i u prethodnim primerima opisati "silom trenja" koja je srazmerna impulsu čestice.

Rešenje: Jednačina kretanja čestica u ovom slučaju je oblika:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = q(\vec{K} + \vec{v} \times \vec{B}) - \frac{m^* \vec{v}}{\tau} \quad (\text{P.2.91})$$

gde je $\vec{K} = \vec{K}_0 e^{j\omega t} = K_0 \vec{i}_x e^{j\omega t}$, $\vec{B} = B \vec{i}_z$, dok je τ izotropno vreme relaksacije. Brzinu elektrona pretpostavićemo u obliku:

$$\vec{v} = \vec{v}_0 e^{j\omega t} = (v_{0x} \vec{i}_x + v_{0y} \vec{i}_y + v_{0z} \vec{i}_z) e^{j\omega t} \quad (\text{P.2.92})$$

Zamenom u jednačinu (P.2.391) dobijamo:

$$m^* j\omega (v_{0x} \vec{i}_x + v_{0y} \vec{i}_y + v_{0z} \vec{i}_z) = qK_0 \vec{i}_x + qB[v_{0y} \vec{i}_x - v_{0x} \vec{i}_y] - \frac{m^*}{\tau} (v_{0x} \vec{i}_x + v_{0y} \vec{i}_y + v_{0z} \vec{i}_z) \quad (\text{P.2.93})$$

odakle je

$$v_{0x} m^* \left(j\omega + \frac{1}{\tau} \right) - qK_0 - qBv_{0y} = 0 \quad (\text{P.2.94a})$$

$$v_{0y} m^* \left(j\omega + \frac{1}{\tau} \right) + qBv_{0x} = 0 \quad (\text{P.2.94b})$$

$$v_{0z} = 0 \quad (\text{P.2.94c})$$

Na osnovu izraza (P.2.394a) i (P.2.394b) možemo odrediti komponentu brzine koja je potrebna za izračunavanje visokofrekventne provodnosti:

$$v_{0x} = \frac{qK_0 m^* \left(j\omega + \frac{1}{\tau} \right)}{q^2 B^2 + m^{*2} \left(j\omega + \frac{1}{\tau} \right)} \quad (\text{P.2.95})$$

Odgovarajuća komponenta gustine struje iznosi:

$$J_x = qnv_{0x} \quad (\text{P.2.96})$$

pa je provodnost jednaka

$$\sigma = \frac{J_x}{K_x} = \frac{q^2 n m^* \tau (j\omega \tau + 1)}{q^2 B^2 \tau^2 + m^{*2} (j\omega \tau + 1)^2} = \sigma_{0x} \frac{1 + j\omega \tau}{(\omega \tau)^2 + (j\omega \tau + 1)^2} \quad (\text{P.2.97})$$

gde je $\sigma_{0x} = q^2 n \tau / m^*$, a $\omega_c = qB / m^*$ je ciklotronska učestanost.

Apsorpcija elektromagnetnog zračenja određena je realnim delom provodnosti, pa ćemo frekvenciju na kojoj je apsorpcija maksimalna odrediti na osnovu uslova:

$$\left. \frac{d \operatorname{Re}\{\sigma\}}{d\omega} \right|_{\omega=\omega_{opt}} = 0 \quad (\text{P.2.98})$$

gde je

$$\operatorname{Re}\{\sigma\} = \sigma_{0x} \frac{1 + \tau^2(\omega^2 + \omega_c^2)}{\tau^2(\omega_c^2 - \omega^2 + 1)^2 + 4(\omega^2 \tau^2)} \quad (\text{P.2.99})$$

Uvedimo sledeće oznake: $x_c = 1 + \omega_c^2 \tau^2$ i $x = \omega^2 \tau^2$. Tada se izraz (P.2.399) može prikazati u obliku:

$$\operatorname{Re}\{\sigma\} = \sigma_{0x} \frac{x_c + x}{(x_c - x)^2 + 4x} \quad (\text{P.2.100})$$

Uslov (8) se sada svodi na:

$$\frac{d \operatorname{Re}\{\sigma\}}{d\omega} = \frac{d \operatorname{Re}\{\sigma\}}{dx} \frac{dx}{d\omega} = 2\omega\tau^2 \frac{d \operatorname{Re}\{\sigma\}}{dx} = 0 \quad (\text{P.2.101})$$

odakle sledi:

$$x_{opt}^2 + 2x_{opt}x_c - 3x_c^2 + 4x_c = 0 \quad (\text{P.2.102})$$

Pošto mora biti ispunjeno $x > 0$ dobijamo rešenje

$$x_{opt} = -x_c + 2\sqrt{x_c^2 - x_c} \quad (\text{P.2.103})$$

Pošto se radi o visokim učestanostima, pretpostavićemo da je ispunjeno $x \gg 1$ i $x_c \gg 1$, pa prethodni izraz možemo aproksimirati na sledeći način:

$$x_{opt} = -x_c + 2x_c \sqrt{1 - 1/x_c} \approx x_c \quad (\text{P.2.104})$$

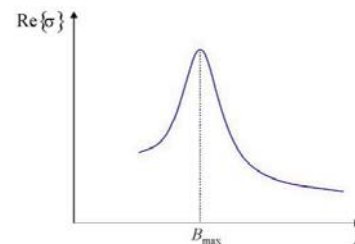
na osnovu čega zaključujemo da je

$$\omega_{opt}^2 \tau^2 \approx 1 + \omega_c^2 \tau^2 \quad (\text{P.2.105})$$

odnosno, pošto je po pretpostavci $\omega_c^2 \tau^2 \gg 1$ dobijamo

$$\omega_{opt} \approx \omega_c \quad (\text{P.2.106})$$

Dakle, apsorpcija elektromagnetnog zračenja je maksimalna kada je učestanost ω približno jednaka ciklotronskoj učestanosti. Ova činjenica može se iskoristiti za određivanje efektivne mase nosilaca, na taj način što se snimi zavisnost $\operatorname{Re}\{\sigma\}$ od veličine magnetne indukcije B , pri konstantnoj učestanosti ω spoljašnjeg električnog polja koja je poznata. Ovim postupkom dobija se grafik nalik onom sa Sl. P.2.4, na osnovu koga se određuje vrednost magnetne indukcije B_{max} pri kome je provodnost najveća. Iz prethodnih rezultata jasno je da je ciklotronska učestanost ω_c pri toj vrednosti indukcije približno jednaka fiksiranoj učestanosti ω .



Sl. P.2.4 Zavisnost realnog dela specifične električne provodnosti od magnetne indukcije
Koristeći uslov $\omega_c \approx \omega$, odnosno:

$$\frac{|q|B_{max}}{m} \approx \omega \quad (\text{P.2.107})$$

lako dolazimo do tražene efektivne mase nosilaca.

Problem 2.9. Naći ciklotronsku učestanost u uslovima kada na uzorak deluje magnetno polje indukcije \vec{B} i električno polje jačine \vec{K} visoke učestanosti ($\vec{B} \perp \vec{K}$), a disperziona relacija je data izrazom:

$$E(\vec{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{zz}} \quad (\text{P.2.108})$$

Koristeći dobijeni rezultat, naći komponente efektivne mase na osnovu sledećih merenja:

1) Na učestanosti od 20 GHz, jedna rezonancija je postignuta za $B_1 = 0.304\text{T}$ i pri tome se nije menjala ukoliko je kristal rotiran oko ose normalne na vektor magnetne indukcije.

2) Drugo merenje je sprovedeno tako što je vektor \vec{B} imao pravac ose rotacije iz prvog merenja. Tada je rezonancija postignuta za $B_2 = 0.136\text{T}$.

Ceo eksperiment je izvršen na temperaturi tečnog helijuma, tako da se “sila trenja”, kao i odgovarajuća sila koja potiče od visokofrekventnog električnog polja, mogu zanemariti u jednačini kretanja.

Rešenje: Jednačina kretanja elektrona, uzimajući u obzir zadate uslove, ima oblik:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \left\| \frac{1}{m} \right\| \vec{F} \approx -e \left\| \frac{1}{m} \right\| (\vec{v} \times \vec{B}) \quad (\text{P.2.109})$$

odnosno

$$\begin{bmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{bmatrix} = -e \begin{bmatrix} \frac{1}{m_{xx}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_{yy}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_{zz}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} \times \vec{B} \quad (\text{P.2.110})$$

gde je $\dot{v}_i = dv_i/dt$, $i = x, y, z$. Rešenje za brzinu elektrona tražićemo u obliku $\vec{v} = \vec{v}_0 e^{j\omega t}$, pri čemu je ω učestanost spoljašnjeg električnog polja. Izraz (P.2.110) možemo razdvojiti na tri skalarne jednačine:

$$j\omega v_{0x} = -\frac{e}{m_{xx}} (v_{0y} B_z - v_{0z} B_y) \quad (\text{P.2.111a})$$

$$j\omega v_{0y} = -\frac{e}{m_{yy}} (v_{0z} B_x - v_{0x} B_z) \quad (\text{P.2.111b})$$

$$j\omega v_{0z} = -\frac{e}{m_{zz}} (v_{0x} B_y - v_{0y} B_x) \quad (\text{P.2.111c})$$

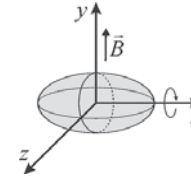
Da bi posmatrani sistem jednačina imao netrivialno rešenje, njegova determinanta mora biti jednaka nuli, što daje:

$$\omega \left(-\omega^2 + \frac{e^2 B_x^2}{m_{yy} m_{zz}} + \frac{e^2 B_y^2}{m_{xx} m_{zz}} + \frac{e^2 B_z^2}{m_{xx} m_{yy}} \right) \quad (\text{P.2.112})$$

Rešenje $\omega = 0$ odgovaralo bi kretanju nosilaca u pravcu magnetnog polja ($\vec{v} \times \vec{B} = 0$), dok drugo rešenje odgovara postizanju ciklotronske rezonancije (što se može pokazati na sličan način kao u prethodnom primeru P.2.8):

$$\omega = \omega_c = e \sqrt{\frac{B_x^2}{m_{yy} m_{zz}} + \frac{B_y^2}{m_{xx} m_{zz}} + \frac{B_z^2}{m_{xx} m_{yy}}} \quad (\text{P.2.113})$$

Koordinatni sistem postavimo tako da se pravci x , y i z -ose poklapaju sa pravcima glavnih osa ekvivalentnih elipsoida k_x , k_y i k_z , respektivno. Pretpostavimo da je prilikom prvog merenja magnetno polje imalo pravac jedne od osa, npr. y -ose (Sl. P.2.5), s obzirom da prilikom rotacije kristala oko normalne ose ne treba da dolazi do promena.



Sl. P.2.5 Orijentacija magnetnog polja u odnosu na ose ekvivalentnog elipsoida prilikom prvog merenja

Za izabranu orijentaciju magnetnog polja $\vec{B} = (0, B_1, 0)$, zaključujemo da je

$$\omega_c = e \sqrt{\frac{B_1^2}{m_{xx} m_{zz}}} \quad (\text{P.2.114})$$

Pretpostavimo da kristal rotira oko x -ose. Sa Sl. P.2.5 se vidi da do promene vrednosti ciklotronske učestanosti neće doći samo ukoliko su komponente tenzora inverzne efektivne mase u pravcima y i z jednake. Konkretnije, ako rotiramo kristal za $\pi/2$ u smeru kazaljke na satu, tada će pravac magnetnog polja poklopiti sa pravcem z -ose, tj. $\vec{B} = (0, 0, B_1)$, pa je

$$\omega_c = e \sqrt{\frac{B_1^2}{m_{xx} m_{yy}}} \quad (\text{P.2.115})$$

Na osnovu izraza (P.2.114) i (P.2.115) jasno je da mora biti $m_{yy} = m_{zz}$. Prilikom drugog merenja, ciklotronska rezonancija se postiže pri magnetnom polju $\vec{B} = (B_2, 0, 0)$, što zamenom u (P.2.113) daje

$$\omega_c = e \sqrt{\frac{B_z^2}{m_{yy} m_{zz}}} = \frac{e B_z}{m_{yy}} \quad (\text{P.2.116})$$

Koristeći brojne vrednosti dobijene merenjima, možemo izračunati:

$$m_{yy} = m_{zz} = \frac{e B_z}{2\pi f_c} \approx 0.19 m_0 \quad (\text{P.2.117a})$$

$$m_{xx} = e \frac{B_1^2}{2\pi f_c B_z} \approx 0.95 m_0 \quad (\text{P.2.117b})$$

gde je m_0 masa slobodnog elektrona.

3. GENERACIONO-REKOMBINACIONI I DIFUZIONI PROCESI

3.1 GENERACIJA I REKOMBINACIJA

U okviru poglavlja posvećenih zonskoj teoriji razmatrali smo čvrsto telo u stanju termodinamičke ravnoteže i analizirali zavisnost (ravnotežne) koncentracije nosilaca od temperature, vrste i količine primesa itd. Zatim smo proučavali transportne procese, pretpostavljajući da je termodinamička ravnoteža narušena dejstvom slabih polja, što nam je dozvoljavalo da smatramo da su koncentracije nosilaca i dalje vrlo bliske ravnotežnim. Međutim, u slučaju značajnih pobuda (npr. pod dejstvom jačih spoljašnjih polja), koncentracije nosilaca će se bitno razlikovati od ravnotežnih vrednosti i možemo ih u najopštijem slučaju prikazati u obliku:

$$n(\vec{r}, t) = n_0(\vec{r}, t) + \delta n(\vec{r}, t) \quad (3.1a)$$

$$p(\vec{r}, t) = p_0(\vec{r}, t) + \delta p(\vec{r}, t) \quad (3.1b)$$

gde su n i p **neravnotežne koncentracije**, δn i δp su nadkoncentracije elektrona i šupljina, respektivno, a n_0 i p_0 predstavljaju ravnotežne koncentracije koje ispunjavaju uslov:

$$n_0 p_0 = n_i^2 \quad (3.2)$$

Veličina n_i , kao što je poznato, označava sopstvenu koncentraciju nosilaca. Pod pojmom **generacije** podrazumeva se nastajanje parova dodatnih slobodnih nosilaca nadkoncentracija δn i δp , pod dejstvom neke pobude. Do sada smo se susretali sa termalnom generacijom koja je podrazumevala da na datoj temperaturi ($T > 0\text{K}$) određeni broj elektrona, koji poseduje dovoljnu energiju, pređe iz valentne u provodnu zonu, ostavljajući za sobom podjednak broj upražnjenih mesta (šupljina). **Rekombinacija** predstavlja suprotan proces, odnosno iščezavanje parova elektrona i šupljina. Na primer, elektron koji izgubi energiju u nekom procesu prelazi u valentnu zonu i zauzima upražnjeno mesto, tj. rekombinuje se sa šupljinom. U uslovima ravnoteže brzine ova dva procesa su jednake. Proces sličan termalnoj generaciji odvija se i pri dejstvu spoljašnjih pobuda (polja). Spoljašnje polje može dovesti do značajne generacije dodatnih slobodnih nosilaca tj. do stvaranja velike nadkoncentracije, a po prestanku dejstva polja ta nadkoncentracija će početi da opada. Višak elektrona (u odnosu na n_0) će se vraćati u valentnu zonu i na taj način ukloniti ekvivalentnu količinu dodatno generisanih šupljina, pa će se tako koncentracije nosilaca vratiti na ravnotežne vrednosti.

Razlikujemo dva osnovna tipa rekombinacije:

1) **direktna rekombinacija** ili rekombinacija zona-zona. Kod ovog tipa rekombinacije, elektroni iz provodne zone se direktno vraćaju u valentnu zonu

2) **indirektna rekombinacija** koja se vrši preko rekombinacionih centara. Usled prisustva primesa kod dopiranih poluprovodnika, ali i usled nesavršenosti realnih kristala (nečistoće, defekti,...), u okviru energetskog procepa javljaju se dodatni diskretni nivoi koji mogu da učestvuju u procesima rekombinacije tako što privremeno zahvataju nosioce, pre nego što dođe do njihovog novog prebacivanja u odgovarajuću zonu.

3.1.1 Direktna rekombinacija

Ovaj tip rekombinacije ima osnovnu ulogu kod poluprovodnika sa manjim energetskim procepom (do 0.2-0.3 eV) i tada se elektroni iz provodne zone direktno rekombinuju sa šupljinama u valentnoj zoni. Posmatračemo uzorak idealnog poluprovodnika, koji se nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže, a koncentracije elektrona i šupljina u njemu iznose n_0 i p_0 , respektivno, i poznate su. Poluprovodnik ćemo zatim izložiti dejstvu neke spoljašnje pobude (npr. obasjati ga svetlošću čija je energije fotona veća od veličine energetskog procepa) i na taj način ćemo generisati dodatne slobodne nosioce. Nove koncentracije elektrona i šupljina označićemo sa n i p . Pretpostavimo da smo u trenutku $t=0$ ukinuli dejstvo pobude. Tada će vrednosti koncentracija u momentu isključivanja pobude iznositi

$$n(0) = n_0 + \delta n(0) \quad (3.3a)$$

$$p(0) = p_0(0) + \delta p(0) \quad (3.3b)$$

gde je $\delta n(0) = \delta p(0)$, s obzirom da je broj elektrona koji su prebačeni u provodnu zonu jednak broju šupljina nastalih u valentnoj zoni. Po ukidanju pobude doći će do rekombinacije i opadanja veličina $\delta n(t)$ i $\delta p(t)$ sa vremenom, pri čemu će u svakom trenutku važiti $\delta n(t) = \delta p(t)$. Posle dovoljno dugo vremena ($t \rightarrow \infty$), koncentracije elektrona i šupljina poprimiće svoje ravnotežne vrednosti n_0 i p_0 (u opštem slučaju $n_0 \neq p_0$ pošto poluprovodnik može biti dopiran). Odredićemo brzinu procesa rekombinacije, odnosno brzinu kojom se smanjuju koncentracije dodatnih slobodnih nosilaca nastalih pod dejstvom spoljašnje pobude.

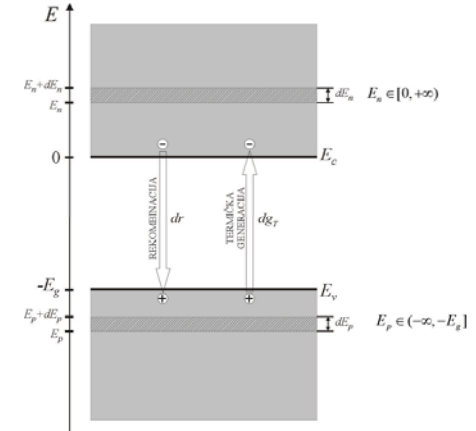
Uočimo opseg energija elektrona u provodnoj zoni ($E_n, E_n + dE_n$) i opseg energija šupljina u valentnoj zoni ($E_p, E_p + dE_p$), gde su energije u obe zone izražene u odnosu na isti referentni nivo (dno provodne zone), kao što je prikazano na Sl. 3.1. Koncentracija elektrona dn i šupljina dp sa posmatranim energijama iznosi:

$$dn(E_n) = 2g_n(E_n)f_n(E_n)dE_n \quad (3.4a)$$

$$dp(E_p) = 2g_p(E_p)f_p(E_p)dE_p \quad (3.4a)$$

gde su g_n i g_p energetske gustine stanja elektrona i šupljina po jedinici zapremine, respektivno, a f_n i f_p odgovarajuće funkcije raspodele. S obzirom da razmatramo

neravnotežne procese, svakako da f_n i f_p predstavljaju neravnotežne funkcije raspodele. Pretpostavićemo da se one mogu prikazati u obliku Fermi-Dirac-ovih funkcija, ali sa različitim parametrom koji u njima figuriše u odnosu na ravnotežno stanje.



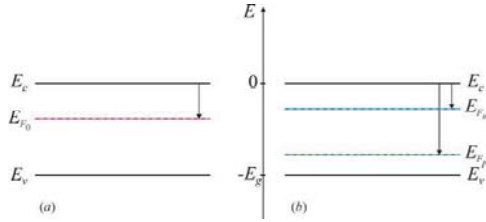
Sl. 3.1 Šematski prikaz procesa termičke generacije i direktne rekombinacije između provodne i valentne zone posmatranog poluprovodnika

Fermi-jeva energija u ovom slučaju zamenjuje se veličinama koji se nazivaju **kvazi Fermi-jevi nivoi**, i oni se razlikuju za elektrone i šupljine (a naravno da se razlikuju i od vrednosti Fermi-jevog nivoa u stanju ravnoteže E_{F_0}). Naime, povećanje koncentracije elektrona (usled procesa generacije) odgovara zahtevu da Fermi-jev nivo bude bliži dnu provodne zone. Međutim, istovremeno povećanje koncentracije šupljina nalaže da Fermi-jev nivo treba da bude bliži valentnoj zoni. Pošto su ovi zahtevi protivrečni, za svaku vrstu nosilaca uvodi se poseban nivo (kvazi Fermi-jev nivo). Dakle, funkcije raspodele uzimamo u obliku:

$$f_n(E_n) = \frac{1}{e^{\frac{E_n - E_{F_n}}{k_B T}} + 1} \quad (3.5a)$$

$$f_p(E_p) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{E_p - E_{F_p}}{k_B T}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{E_{F_p} - E_p}{k_B T}} + 1} \quad (3.5b)$$

gde su E_{F_n} i E_{F_p} kvazi Fermi-jev nivo za elektrone i šupljine, respektivno, i izraženi su u odnosu na dno provodne zone ($E_c = 0$), kao što se može videti na Sl. 3.2. Zapravo, prema izabranom referentnom smeru, E_{F_p} je zapravo kvazi Fermi-jev nivo za elektrone u valentnoj zoni (dok bismo za šupljine očekivali da se kvazi Fermi-jev nivo izražava u odnosu na vrh valentne zone kao $-E_g - E_{F_p}$) ali je uobičajeno da se ova veličina naziva kvazi Fermi-jev nivo za šupljine pa ćemo zadržati takav naziv.



Sl. 3.2 (a) Jedinstveni Fermi-jev nivo u stanju termodinamičke ravnoteže (b) kvazi Fermi-jevi nivoi za elektrone i šupljine kod neravnotežne raspodele nosilaca

U slučaju potpune nedegeneracije možemo pisati:

$$f_n(E_n) \approx e^{\frac{E_n - E_{F_n}}{k_B T}} \quad (3.6a)$$

$$f_p(E_p) \approx e^{\frac{E_p - E_{F_p}}{k_B T}} \quad (3.6b)$$

Ukupne neravnotežne koncentracije elektrona i šupljina u provodnoj, odnosno valentnoj zoni, prema tome iznose:

$$n = B_n e^{\frac{E_n}{k_B T}} \quad (3.7a)$$

$$p = B_p e^{\frac{-E_p - E_{F_p}}{k_B T}} \quad (3.7b)$$

Proizvod neravnotežnih koncentracija jednak je

$$np = B_n B_p e^{\frac{-E_g - E_{F_p}}{k_B T}} e^{\frac{E_{F_n} - E_{F_p}}{k_B T}} \quad (3.8a)$$

odnosno

$$np = n_0 p_0 e^{\frac{E_{F_n} - E_{F_p}}{k_B T}} \quad (3.8b)$$

gde su ravnotežne koncentracije date izrazima (1.156) i (1.231). Očigledno je da razlika kvazi Fermi-jevih nivoa predstavlja meru (ne)ravnoteže. Proizvod funkcija raspodele (3.6a) i (3.6b) daje verovatnoću da je stanje sa energijom E_n popunjeno elektronom a da je istovremeno stanje sa energijom E_p upražnjeno:

$$f_n(E_n) f_p(E_p) = e^{\frac{E_n - E_n}{k_B T}} e^{\frac{E_{F_n} - E_{F_p}}{k_B T}} \quad (3.9)$$

Na osnovu (3.9) i (3.8b) imamo:

$$f_n(E_n) f_p(E_p) = \frac{np}{n_0 p_0} e^{\frac{E_n - E_p}{k_B T}} \quad (3.10)$$

Brzina rekombinacije elektrona (koncentracija rekombinovanih elektrona u jedinici vremena) čije su energije u intervalu $(E_n, E_n + dE_n)$ sa šupljinama energija u intervalu $(E_p, E_p + dE_p)$ proporcionalna je koncentracijama nosilaca uključenih u prelaz i može se izraziti na sledeći način:

$$dr = w(E_n, E_p) dn(E_n) dp(E_p) \quad (3.11)$$

odnosno

$$dr = 4w(E_n, E_p) g_n(E_n) f_n(E_n) g_p(E_p) f_p(E_p) dE_n dE_p \quad (3.12)$$

gde je $w(E_n, E_p)$ verovatnoća prelaza elektrona iz stanja sa energijom E_n u stanje sa energijom E_p , u jedinici vremena, pomnožena sa ukupnom zapreminom V i izražava se u jedinicama cm^3/s . Pored procesa rekombinacije, uvek je prisutan i proces termalne generacije nosilaca (i kad je spoljašnja pobuda ukinuta) i brzinu tog procesa za date intervale energija u provodnoj i valentnoj zoni označićemo sa dg_T . Ukupna promena koncentracije elektrona pri rekombinaciji, po jedinici vremena, dobija se integracijom po svim energijama u provodnoj i valentnoj zoni:

$$r = \int_{E_n=0}^{\infty} \int_{E_p=-\infty}^{-E_g} 4w(E_n, E_p) g_n(E_n) f_n(E_n) g_p(E_p) f_p(E_p) dE_n dE_p \quad (3.13)$$

Zamenom (3.10) u (3.13) dobijamo:

$$r = \frac{np}{n_0 p_0} \int_{E_n=0}^{\infty} \int_{E_p=-\infty}^{-E_n} 4w(E_n, E_p) g_n(E_n) g_p(E_p) e^{\frac{E_p - E_n}{k_B T}} dE_n dE_p \quad (3.14)$$

Uvešćemo veličinu γ koja zavisi samo od osobina materijala i vrste prelaza, a ne od koncentracija n i p , u obliku:

$$\gamma = \frac{1}{n_0 p_0} \int_{E_n=0}^{\infty} \int_{E_p=-\infty}^{-E_n} 4w(E_n, E_p) g_n(E_n) g_p(E_p) e^{\frac{E_p - E_n}{k_B T}} dE_n dE_p \quad (3.15)$$

i smatramo je ona konstantna za posmatrani poluprovodnik. Na osnovu toga možemo pisati:

$$r = \gamma np \quad (3.16)$$

Posmatrajmo ukupnu (efektivnu) brzinu rekombinacije R , koju dobijamo kada od koncentracije rekombinovanih nosilaca odbijemo koncentraciju nosilaca koji su termalno generisani:

$$R = r - g_T = \gamma np - g_T \quad (3.17)$$

U stanju termodinamičke ravnoteže brzine procesa generacije i rekombinacije su jednake, tj. $R = 0$, a $n = n_0$ i $p = p_0$, odakle sledi:

$$\gamma n_0 p_0 - g_T = 0 \Rightarrow g_T = \gamma n_0 p_0 \quad (3.18)$$

Zamenom u izraz (3.17) dobijamo

$$R = \gamma(np - n_0 p_0) \quad (3.19)$$

Efektivna rekombinacija određuje promenu neravnotežne koncentracije elektrona sa vremenom po ukidanju spoljašnje pobude:

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = -R(t) \quad (3.20)$$

a kako je

$$n(t) = n_0 + \delta n(t) \quad (3.21a)$$

$$p(t) = p_0 + \delta p(t) \quad (3.21b)$$

možemo posmatrati promenu nadkoncentracije u jedinici vremena:

$$\frac{\partial(\delta n(t))}{\partial t} = -R(t) \quad (3.22)$$

Kod direktne rekombinacije u svakom trenutku ispunjeno je $\delta n(t) = \delta p(t)$, odakle sledi

$$\frac{\partial(\delta p(t))}{\partial t} = -R(t) \quad (3.23a)$$

$$\frac{\partial(p(t))}{\partial t} = \frac{\partial(n(t))}{\partial t} \quad (3.23b)$$

Uz pomoć izraza (3.21a) i (3.21b), ukupnu brzinu rekombinacije možemo predstaviti u obliku

$$R = \gamma[(n_0 + p_0)\delta n(t) + (\delta n(t))^2] \quad (3.24)$$

pa je promena nadkoncentracije elektrona sa vremenom određena jednačinom

$$\frac{\partial(\delta n(t))}{\partial t} = -\gamma[(n_0 + p_0) + \delta n(t)](\delta n(t)) \quad (3.25)$$

Prethodni izraz preuredićemo u oblik:

$$\frac{d(\delta n(t))}{[(n_0 + p_0) + \delta n(t)]\delta n(t)} = -\gamma dt \quad (3.26)$$

odakle integracijom dolazimo do jednačine

$$\frac{1}{n_0 + p_0} \ln \left[\frac{(n_0 + p_0) + \delta n(t)}{\delta n(t)} \right] = \gamma t + C \quad (3.27)$$

Integraciona konstanta određuje se na osnovu odgovarajućeg početnog uslova $\delta n(t=0) = \delta n(0)$:

$$C = \frac{1}{n_0 + p_0} \ln \left[\frac{(n_0 + p_0) + \delta n(0)}{\delta n(0)} \right] \quad (3.28)$$

pa je konačno,

$$\delta n(t) = \frac{n_0 + p_0}{\frac{(n_0 + p_0) + \delta n(0)}{\delta n(0)} e^{\gamma t(n_0 + p_0)} - 1} \quad (3.29)$$

Važno je napomenuti da u opštem slučaju poremećaj koncentracije u odnosu na ravnotežno stanje može imati i negativne vrednosti ($\delta n(t) < 0$) u zavisnosti od prirode spoljašnjeg dejstva u intervalu $t < 0$, odnosno znaka početnog uslova $\delta n(0)$. U ovom izvođenju pretpostavljeno je da je u $t < 0$ izvršena generacija nosilaca pa $\delta n(t) > 0$ i koristi se termin nadkoncentracija nosilaca. U tom slučaju nadkoncentracija ima sledeće opšte osobine:

- 1) $\delta n(t)$ je monotono opadajuća funkcija u celokupnom vremenskom domenu
- 2) $\delta n(t \rightarrow \infty) = 0$

Definišaćemo vremenski parametar τ_f koji opisuje proces relaksacije neravnotežne koncentracije nosilaca, odnosno smanjenje nadkoncentracije nosilaca sa vremenom i vraćanje u ravnotežno stanje, na sledeći način:

$$\tau_f \equiv \frac{\delta n(t)}{R(t)} \quad (3.30)$$

Veličina τ_f naziva se **vreme života neravnotežnih nosilaca** i $1/\tau_f$ ima smisao verovatnoće rekombinacije jednog slobodnog nosioca naelektrisanja u jedinici vremena i jedinici zapremine. Kod direktne rekombinacije očigledno je da će vremena života elektrona i šupljina biti jednaka:

$$\tau_{p_n} = \frac{\delta n(t)}{R(t)} = \frac{\delta p(t)}{R(t)} = \tau_{p_p} \quad (3.31a)$$

$$\tau_{p_n} = \tau_{p_p} = \tau_f \quad (3.31b)$$

Na osnovu izraza (3.22) možemo pisati:

$$\frac{\partial(\delta n(t))}{\partial t} = -\frac{\delta n(t)}{\tau_f} \quad (3.32)$$

Ukoliko bi vreme života bilo konstantno, integracijom prethodnog izraza dobili bismo

$$\int_{\delta n(0)}^{\delta n(t)} \frac{d(\delta n(t))}{\delta n(t)} = -\frac{1}{\tau_f} \int_0^t dt \Rightarrow \ln \frac{\delta n(t)}{\delta n(0)} = -\frac{t}{\tau_f} \quad (3.33)$$

odnosno

$$\delta n(t) = \delta n(0) e^{-\frac{t}{\tau_f}} \quad (3.34)$$

Prema tome, sistem bi se iz neravnotežnog stanja relaksirao sa vremenskom konstantom τ_f koja je jednaka srednjem vremenu “preživljavanja” neravnotežnih nosilaca pre nego što se rekombinuju. Polazeći od definicionog izraza (3.30) i zamenjujući ukupnu rekombinaciju u obliku (3.24), vidimo da u opštem slučaju vreme života nije konstantno:

$$\tau(t) = \frac{1}{\gamma[(n_0 + p_0) + \delta n(t)]} \quad (3.35)$$

i ovu veličinu možemo nazvati **trenutno vreme života neravnotežnih nosilaca** ($\tau_{p_n}(t) = \tau_{p_p}(t) = \tau(t)$).

Dalju analizu izraza (3.29) sprovedćemo pretpostavljajući da se radi o poluprovodniku izrazito n-tipa:

$$n_0 \gg p_0 \quad (3.36)$$

Na osnovu toga, (3.29) postaje

$$\delta n(t) \approx \frac{n_0}{\frac{n_0 + \delta n(0)}{\delta n(0)} e^{\gamma t n_0} - 1} \quad (3.37)$$

a trenutno vreme života iznosi

$$\tau(t) \approx \frac{1}{\gamma[n_0 + \delta n(t)]} \quad (3.38)$$

Razmatraćemo dva asimptotska slučaja:

1) linearna rekombinacija

Ako je efektivna brzina rekombinacije nosilaca direktno proporcionalna nadkoncentraciji, tada se rekombinacija naziva linearnom. Za poluprovodnik n-tipa izraz (3.24) dobija oblik $R = \gamma[n_0 + \delta n(t)]\delta n(t)$, pa zaključujemo da će rekombinacija biti linearna ako je ispunjen uslov:

$$\delta n(t) \ll n_0 \quad (3.39)$$

Tada dobijamo

$$R \approx \gamma n_0 \delta n(t) \quad (3.40)$$

Ako je pored toga ispunjen i uslov

$$\delta n(0) \ll n_0 \quad (3.41)$$

tada će rekombinacija biti linearna u celom vremenskom domenu $t \in [0, \infty)$. Ovaj poslednji slučaj ćemo detaljno ispitati.

Na osnovu (3.41), izraz (3.37) dobija oblik

$$\delta n(t) \approx \frac{n_0}{\frac{n_0}{\delta n(0)} e^{\gamma t n_0} - 1} \approx \delta n(0) e^{-\gamma t n_0} \quad (3.42)$$

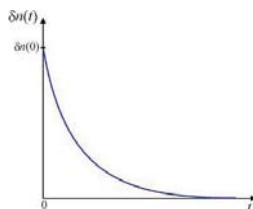
jer je $\frac{n_0}{\delta n(0)} e^{\gamma t n_0} \gg 1$ za $t \in [0, \infty)$. Vreme života (3.38) postaje praktično konstantno

$$\tau \approx \frac{1}{\gamma n_0} = \tau_f \quad (3.43)$$

U tom slučaju možemo pisati

$$\delta n(t) = \delta n(0) e^{-\frac{t}{\tau_f}} \quad (3.44)$$

Kod ovog tipa rekombinacije poremećaj koncentracije nestaje po eksponencijalnom zakonu, kao što je prikazano na Sl. 3.3.



Sl. 3.3 Promena nadkoncentracije sa vremenom u slučaju linearne rekombinacije

2) kvadratna rekombinacija

Ovaj tip rekombinacije podrazumeva da je efektivna brzina rekombinacije srazmerna kvadratu poremećaja, što će na osnovu (3.24) biti ispunjeno u onom vremenskom intervalu u kome važi $\delta n(t) \gg n_0$ pa možemo pisati

$$R \approx \gamma [\delta n(t)]^2 \quad (3.45)$$

Pošto je $\delta n(t)$ monotono opadajuća funkcija, rekombinacija može biti kvadratna samo u nekom vremenskom intervalu $t \in (0, t_1)$. Dužinu ovog intervala možemo oceniti na osnovu izraza (3.37), primenjujući uslov $\delta n(0) \gg n_0$:

$$\frac{\delta n(t)}{n_0} = \frac{1}{\frac{n_0 + \delta n(0)}{\delta n(0)} e^{\gamma t n_0} - 1} \gg 1 \quad (3.46)$$

odakle dobijamo

$$\frac{n_0 + \delta n(0)}{\delta n(0)} e^{\gamma t n_0} - 1 \ll 1 \quad (3.47)$$

Kako je $\delta n(0) \gg n_0$, ovaj uslov dobija oblik $e^{\gamma t n_0} - 1 \ll 1$, odnosno, u svakom trenutku $t \in (0, t_1)$ mora biti ispunjeno

$$\gamma t n_0 \ll 1 \quad (3.48)$$

U tom slučaju možemo koristiti aproksimaciju $e^{\gamma t n_0} \approx 1 + \gamma t n_0$, što zamenom u (3.37) daje:

$$\delta n(t) \approx \frac{1}{\frac{1}{\delta n(0)} + \gamma t \left(1 + \frac{n_0}{\delta n(0)}\right)} e^{\gamma t n_0} \approx \frac{\delta n(0)}{1 + \gamma \delta n(0) t}, \quad t \in (0, t_1) \quad (3.49)$$

Trenutno vreme života dobijamo zamenom (3.49) u (3.38), i ono iznosi

$$\tau(t) = \frac{1 + \gamma \delta n(0) t}{\gamma [n_0 + \gamma n_0 \delta n(0) t + \delta n(0)]} \approx \frac{1 + \gamma \delta n(0) t}{\gamma \delta n(0) [n_0 + \gamma n_0 t]} \quad (3.50)$$

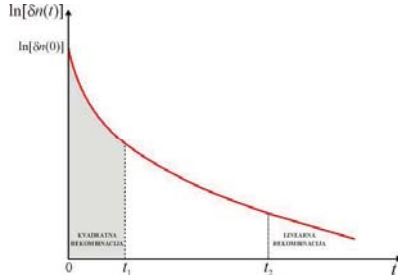
Do izraza (3.49) mogli smo doći i direktno iz (3.25), uzimajući u obzir da se radi o poluprovodniku izrazito n-tipa ($n_0 \gg p_0$) i velikom poremećaju ($\delta n(t) \gg n_0$, za $0 < t < t_1$)

$$\frac{\partial(\delta n(t))}{\partial t} = -\gamma [\delta n(t)]^2 \Rightarrow \frac{d(\delta n(t))}{[\delta n(t)]^2} = -\gamma dt \quad (3.51)$$

Integracijom (3.51) direktno dobijamo

$$\frac{1}{\delta n(t)} - \frac{1}{\delta n(0)} = \gamma t \Rightarrow \delta n(t) = \frac{\delta n(0)}{1 + \gamma \delta n(0) t} \quad (3.52)$$

Na osnovu jednačine (3.49) zaključujemo da kod kvadratne rekombinacije nadkoncentracija opada po hiperboličkom zakonu u vremenskom intervalu $(0, t_1)$. Posle određenog vremena t_2 , nadkoncentracija će se smanjiti toliko da će biti ispunjeno $\delta n(t) \ll n_0$, što odgovara linearnoj rekombinaciji i promena $\delta n(t)$ za $t > t_2$ biće eksponencijalna. U intervalu $[t_1, t_2]$ neophodno je koristiti izraz (3.37) za određivanje $\delta n(t)$, što je ilustrovano na Sl. 3.4.

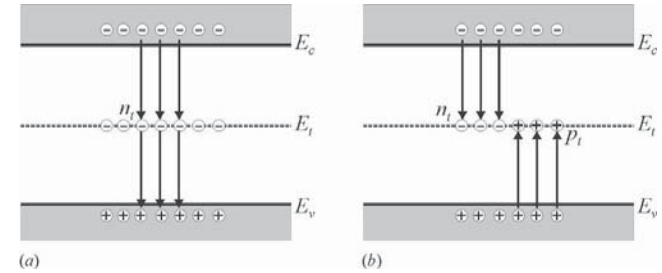


Sl. 3.4 Promena nadkoncentracije sa vremenom u slučaju kvadratne rekombinacije

3.1.2 Indirektna rekombinacija (Shockley-Read-ov model)

Kod poluprovodnika čiji je energetski procep veći od 0.5 eV, proces rekombinacije se dominantno odvija preko lokalizovanih stanja koja su smeštena u okviru procepa a nazivaju se rekombinacioni centri ili “zamke” (engl. trap). Ova lokalizovana stanja su zapravo primesni nivoi koji potiču od nesavršenosti poluprovodnika i pozicionirana su najčešće duboko u energetskom procepu (daleko od vrha valentne zone i dna provodne zone). Prilikom rekombinacije, slobodni nosioci bivaju zahvaćeni od strane jednog od tih primesnih nivoa i na njemu provode određeno vreme pre novog prelaska u odgovarajuću zonu. Da bi primesni nivo mogao da dovede do rekombinacije para elektron-šupljina on mora da “stupa u interakciju” sa obe zone. Generalno, razlikuju se dve vrste primesnih nivoa. Prva vrsta predstavlja **privremene centre zahvata** (u literaturi na engleskom jeziku koristi se termin temporary storage traps tj. privremene zamke), koji mogu primiti samo jednu vrstu nosilaca. Ovi centri su ilustrovani na Sl. 3.5a, na primeru gde mogu primiti samo elektrone, i njih nećemo detaljnije proučavati u okviru ovog teksta. Više prostora biće posvećeno složenijem tipu rekombinacionih centara, koji mogu prihvatiti i elektrone i šupljine. Ovaj drugi tip rekombinacionih centara nadalje ćemo označavati kao **R-centri**, a procesi koji se mogu odvijati između provodne i valentne zone i jednog R-centra čija je energija E_i prikazani su na Sl. 3.5b. Veličine n_i i p_i na Sl. 3.5 označavaju neravnotežne koncentracije elektrona i šupljina respektivno, na centru rekombinacije.

Detaljnije razmatranje indirektna rekombinacije započecemo analizom procesa koji se odvijaju između provodne i valentne zone i R-centara. Pretpostavićemo da je energetski procep poluprovodnika dovoljno veliki, tako da se direktna rekombinacija može zanemariti, kao i da je energetski nivo R-centara E_i pozicioniran duboko u okviru procepa. Važno je naglasiti da se R-centri u procesu rekombinacije ne menjaju već igraju ulogu katalizatora. Njihovu koncentraciju označićemo sa N_i , a funkciju raspodele elektrona na nivou E_i , koja ima oblik Fermi-Dirac-ove funkcije, označićemo sa f_i .



Sl. 3.5 a) privremeni centri zahvata koji mogu primiti npr. samo elektrone, b) R-centri koji mogu primiti i elektrone i šupljine

1) Posmatrajmo prvo slučaj termodinamičke ravnoteže (kada je Fermi-jev nivo za elektrone i šupljine jedinstven i iznosi E_F). U intervalu energija $(E_n, E_n + dE_n)$ u provodnoj zoni (Sl. 3.6), imamo koncentraciju elektrona koja je jednaka $2g_n(E_n)f(E_n)dE_nN_i f_{ip}$, a brzina rekombinacije ovih elektrona prelaskom na R-centre glasi:

$$dr_n = 2c_n(E_n)g_n(E_n)f(E_n)dE_nN_i f_{ip} \quad (3.53)$$

gde je $c_n(E_n)$ kvantno-mehanički parametar koji karakteriše prelaz, a analogan je veličini $w(E_n, E_p)$ iz izraza (3.12), f_{ip} je funkcija raspodele za šupljine na R-centru ($f_{ip} = 1 - f_i$), a proizvod $N_i f_{ip}$ predstavlja koncentraciju šupljina (praznih stanja) na nivou E_i .

$$f_i(E_i) = \frac{1}{\frac{1}{g} e^{\frac{E_i - E_F}{k_B T}} + 1} \quad (3.54a)$$

$$f_p = 1 - f_i(E_i) = \frac{1}{g} f_i(E_i) e^{\frac{E_i - E_f}{k_B T}} \quad (3.54b)$$

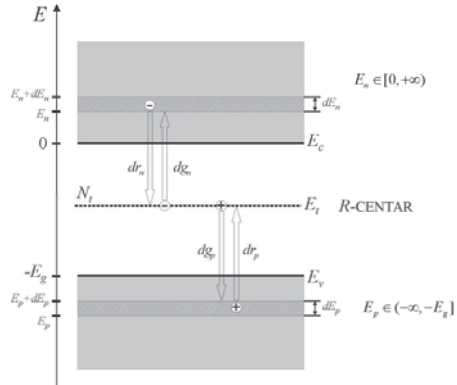
gde je g faktor spinske degeneracije.

Istovremeno sa prelaskom elektrona iz provodne zone na R-centar, odvija se i proces termalne generacije tj. prelazak elektrona sa R-centra u provodnu zonu. Brzina termalne generacije uz prelazak elektrona u oblast energije oko E_n iznosi:

$$dg_{tn} = 2I_n(E_n)g_n(E_n)f_p(E_n)dE_nN_i f_i \quad (3.55)$$

gde je $I_n(E_n)$ novi kvantno-mehanički faktor. Proizvod $2g_n(E_n)f_p(E_n)dE_n$ daje koncentraciju praznih stanja u intervalu $(E_n, E_n + dE_n)$, a $N_i f_i$ je broj elektrona na R-centrima, dok je:

$$f_p(E_n) = 1 - f(E_n) = f(E_n) e^{\frac{E_n - E_f}{k_B T}} \quad (3.56)$$



SI. 3.6 Šematski prikaz procesa indirektno rekombinacije koji se odvijaju između provodne i valentne zone i nivoa E_i koji potiče od R-centara

U stanju termodinamičke ravnoteže, brzine toplote generacije i rekombinacije date izrazima (3.53) i (3.55) su međusobno jednake:

$$dr_n = dg_{tn} \quad (3.57)$$

što dalje daje

$$c_n(E_n)f(E_n)f_p = I_n(E_n)f_p(E_n)f_i \quad (3.58)$$

odnosno

$$\frac{I_n(E_n)}{c_n(E_n)} = \frac{f(E_n)f_p(E_i)}{f_p(E_n)f_i(E_i)} \quad (3.59)$$

Zamenom izraza (3.54a), (3.54b), (3.56) u (3.59) dobijamo:

$$\frac{I_n(E_n)}{c_n(E_n)} = \frac{1}{g} \frac{e^{\frac{E_n - E_f}{k_B T}}}{e^{\frac{E_n - E_f}{k_B T}}} = \frac{1}{g} e^{\frac{E_n - E_f}{k_B T}} \quad (3.60)$$

Na osnovu prethodnog zaključujemo da u stanju termodinamičke ravnoteže odnos posmatranih koeficijenata ne zavisi od koncentracija već samo od energetskog razmaka i temperature.

2) U neravnotežnom slučaju Fermi-jev nivo nije jedinstven pa ćemo uvesti sledeće oznake: Fermi-jev nivo za elektrone u provodnoj zoni obeležavaćemo sa E_{Fn} , za elektrone na R-centru sa E_{Fi} , a za šupljine u valentnoj zoni sa E_{Fp} . Brzine termalne generacije i rekombinacije pri prelascima elektrona između provodne zone i R-centra su sada svakako različite:

$$dr_n \neq dg_{tn} \quad (3.61)$$

pa ćemo posmatrati efektivnu rekombinaciju koju definišemo kao razliku ovih brzina:

$$dR_n = dr_n - dg_{tn} \quad (3.62)$$

Smatrajući da se koeficijenti c_n i I_n ne menjaju pri prelasku na neravnotežno uslove, možemo pisati:

$$dr_n = 2c_n(E_n)g_n(E_n)f(E_n, E_{Fn})dE_nN_i f_p(E_i, E_{Fi}) \quad (3.63a)$$

$$dg_{tn} = 2I_n(E_n)g_n(E_n)f_p(E_n, E_{Fn})dE_nN_i f_i(E_i, E_{Fi}) \quad (3.63b)$$

pa je efektivna rekombinacija elektrona sa energijama u intervalu $(E_n, E_n + dE_n)$ jednaka:

$$dR_n = 2c_n(E_n)g_n(E_n)f_{i_p}N_i dE_n \left[1 - \frac{I_n(E_n)f_{i_p}f_{i_t}}{c_n(E_n)f_{i_p}} \right] \quad (3.64)$$

Imajući u vidu da se Fermi-jevi nivoi razlikuju, u neravnotežnom slučaju izrazi (3.54b) i (3.56) dobijaju novi oblik:

$$f_{i_p}(E_i, E_{F_i}) = 1 - f_i(E_i, E_{F_i}) = \frac{1}{g} f_i(E_i, E_{F_i}) e^{\frac{E_i - E_{F_i}}{k_B T}} \quad (3.65a)$$

$$f_{i_p}(E_n, E_{F_n}) = 1 - f(E_n, E_{F_n}) = f(E_n, E_{F_n}) e^{\frac{E_n - E_{F_n}}{k_B T}} \quad (3.65b)$$

Zamenom ovih izraza, zajedno sa (3.60) u (3.64) daje

$$dR_n = 2c_n(E_n)g_n(E_n)f_{i_p}N_i dE_n \left[1 - e^{\frac{E_n - E_{F_n}}{k_B T}} \right] \quad (3.66)$$

Ukupna efektivna rekombinacija elektrona u provodnoj zoni dobija se integracijom:

$$R_n = \int_0^\infty dR_n(E_n) = N_i f_{i_p} n \left[1 - e^{(E_n - E_{F_n})/k_B T} \right] \int_0^\infty 2c_n(E_n)f(E_n)g_n(E_n)dE_n \quad (3.67)$$

Izraz (3.67) ćemo proširiti koncentracijom elektrona, koja ima oblik:

$$n = \int_0^\infty 2g_n(E_n)f(E_n)dE_n \quad (3.68)$$

što daje

$$R_n = N_i f_{i_p} n \left[1 - e^{(E_n - E_{F_n})/k_B T} \right] \frac{\int_0^\infty c_n(E_n)f(E_n)g_n(E_n)dE_n}{\int_0^\infty g_n(E_n)f(E_n)dE_n} \quad (3.69)$$

Uvedimo srednju vrednost koeficijenta c_n na sledeći način:

$$\langle c_n \rangle = \frac{\int_0^\infty c_n(E_n)f(E_n)g_n(E_n)dE_n}{\int_0^\infty c_n(E_n)f(E_n)dE_n} \quad (3.70)$$

i definišimo novi koeficijent

$$C_n = \langle c_n \rangle N_i \quad (3.71)$$

gde je N_i koncentracija R-centara. Na osnovu toga, izraz (3.69) za ukupnu efektivnu rekombinaciju možemo napisati u formi:

$$R_n = C_n f_{i_p} n \left[1 - e^{(E_n - E_{F_n})/k_B T} \right] \quad (3.72)$$

$$= C_n f_{i_p} n - C_n f_{i_p} n e^{(E_n - E_{F_n})/k_B T}$$

Pretpostavićemo da su ispunjeni uslovi za primenu aproksimacije totalne nedegeneracije, tj. da funkciju raspodele elektrona u provodnoj zoni možemo prikazati Maxwell-Boltzmann-ovom funkcijom, pa koncentracija elektrona ima oblik

$$n = B_e e^{\frac{E_n}{k_B T}} \quad (3.73)$$

Zamenom (3.73) i (3.65a) u drugi sabirak (3.72) dobijamo

$$R_n = C_n f_{i_p} n - C_n f_{i_p} B_e e^{\frac{E_n}{k_B T}} \quad (3.74)$$

Uvešćemo veličinu

$$n_i \equiv B_e e^{\frac{E_n}{k_B T}} \quad (3.75)$$

koja ima smisao efektivne koncentracije elektrona u slučaju kada se Fermi-jev nivo za elektrone poklapa sa nivoom R-centra E_i . Konačno, izraz za ukupnu rekombinaciju možemo napisati u obliku:

$$R_n = C_n f_{i_p} n - C_n n_i f_{i_t} \quad (3.76)$$

Na sličan način možemo sprovesti analizu razmene nosilaca između R-centra i valentne zone, što bi rezultovalo sledećim izrazom za ukupnu (efektivnu) rekombinaciju šupljina:

$$R_p = C_p f_i p - C_r p_i f_r \quad (3.77a)$$

gde je

$$p_i \equiv B_v e^{-\frac{E_v - E_i}{k_B T}} \quad (3.77b)$$

Da bismo uspostavili vezu između ukupnih brzina relaksacije elektrona i šupljina (R_n i R_p), poćićemo od jednačine električne neutralnosti. Pošto posmatramo R-centre koji mogu primiti i elektrone i šupljine, jednačina neutralnosti će u slučaju termodinamičke ravnoteže imati oblik:

$$n_0 + P_A^- + \tilde{n}_i = p_0 + N_D^+ + \tilde{p}_i \quad (3.78)$$

gde P_A^- i N_D^+ označavaju koncentracije jonizovanih akceptorskih i donorskih primesa, respektivno, a \tilde{n}_i i \tilde{p}_i su koncentracije negativnog, odnosno pozitivnog naelektrisanja na R-centru. U neravnotežnom slučaju, jednačina neutralnosti glasi:

$$n_0 + P_A^- + \tilde{n}_i = p + N_D^+ + \tilde{p}_i \quad (3.79)$$

pri čemu smo pretpostavili da se P_A^- i N_D^+ ne menjaju pri prelasku na neravnotežni slučaj. Oduzimanjem izraza (3.78) od izraza (3.79) dolazimo do rezultata:

$$\delta n + \delta \tilde{n}_i = \delta p + \delta \tilde{p}_i \quad (3.80)$$

gde je $\delta n = n - n_0$, $\delta p = p - p_0$, $\delta \tilde{n}_i = \tilde{n}_i - \tilde{n}_{i0}$, $\delta \tilde{p}_i = \tilde{p}_i - \tilde{p}_{i0}$. Prethodni izraz možemo preurediti u oblik:

$$\delta n - \delta p = \delta \tilde{p}_i - \delta \tilde{n}_i \quad (3.81)$$

Veličina na desnoj strani (3.81) proporcionalna je koncentraciji R-centara. Ako je N_i malo tada je $\delta n \approx \delta p$ i na osnovu definicionog izraza za rekombinaciju (3.22) sledi:

$$R_n = R_p \quad (3.82)$$

a dalje ćemo analizirati samo ovakav slučaj. Zamenimo sada izraze (3.76), (3.77a) i (3.77b) u (3.82):

$$C_N f_i p - C_N n_i f_i = C_p f_i p - C_p p_i f_i \quad (3.83)$$

Uzimajući u obzir da je $f_p = 1 - f_i$, iz prethodne jednačine dobijamo

$$f_i = \frac{C_N n_i + C_p p_i}{C_N(n + n_i) + C_p(p + p_i)} \quad (3.84)$$

odnosno

$$f_i p = \frac{C_N n_i + C_p p}{C_N(n + n_i) + C_p(p + p_i)} \quad (3.85)$$

Zamenom ovih izraza u (3.76) dobijamo efektivnu rekombinaciju u obliku

$$R_n = \frac{C_N C_p (np - n_i p_i)}{C_N(n + n_i) + C_p(p + p_i)} \quad (3.86)$$

Proizvod $n_i p_i$ ima jednostavnu formu:

$$n_i p_i \equiv B_c B_v e^{-\frac{E_g}{k_B T}} = n_0 p_0 = n_i^2 \quad (3.87)$$

pa je

$$R_n = \frac{C_N C_p (np - n_i^2)}{C_N(n + n_i) + C_p(p + p_i)} = R_p \quad (3.88)$$

Određićemo vreme života elektrona pri rekombinaciji na R-centrima na osnovu definicionog izraza ($\tau_n = \delta n / R_n$), što prema (3.86) daje

$$\tau_n = \frac{C_N(n + n_i) + C_p(p + p_i)}{C_N C_p (np - n_i^2)} \delta n \quad (3.89)$$

Član u imeniocu određen vrednostima koncentracija može se napisati u obliku:

$$np - n_i^2 = (n_0 + \delta n)(p_0 + \delta p) - n_0 p_0 = n_0 \delta p + p_0 \delta n + \delta n \delta p \quad (3.90)$$

pa je

$$\tau_n = \frac{C_N(n + n_i) + C_p(p + p_i)}{C_N C_p} \frac{1}{n_0 + p_0 + \delta n} \quad (3.91)$$

Konstante C_N i C_p imaju dimenziju s^{-1} pa možemo uvesti sledeće oznake:

$$C_N \equiv \frac{1}{\tau_n}, \quad C_p \equiv \frac{1}{\tau_p} \quad (3.92)$$

Na osnovu toga izraz za vreme života elektrona dobija oblik:

$$\tau_n = \left[\tau_{p_0} (n + n_1) + \tau_{n_0} (p + p_1) \right] \frac{1}{n_0 + p_0 + \delta n} \quad (3.93)$$

Pošto je $\delta n = \delta p$ i $R_n = R_p$, izraz (3.93) ujedno predstavlja i vreme života šupljina τ_p :

$$\tau_n = \tau_p = \tau \quad (3.94)$$

Konačni izraz za τ u proširenoj formi je oblika

$$\tau = \tau_{p_0} \frac{n_0 + \delta n + n_1}{n_0 + p_0 + \delta n} + \tau_{n_0} \frac{n_0 + \delta p + p_1}{n_0 + p_0 + \delta p}, \quad \delta n = \delta p \quad (3.95)$$

Ovo je poznata **Shockley-Read-ova formula** (objavljena u radu "Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons", W. Shockley, W. T. Read, Jr., Physical Review 87, pp. 835-842, 1952.) Na osnovu izraza (3.95) zaključujemo da vreme života nosilaca τ zavisi od tipa R-centara (preko veličina τ_{n_0} , τ_{p_0}), od položaja nivoa E_i (što određuje n_1 i p_1), od koncentracije primesa (kroz veličine n_0 i p_0) i od temperature (koja figuriše u n_0 , p_0 , n_1 , p_1 i vrlo malo utiče na τ_{n_0} , τ_{p_0}).

Napomenimo da bismo do potpuno istog krajnjeg izraza (3.93) odnosno (3.95) došli i da smo uzeli $g = 1$ u (3.54a), što je i uobičajeno u literaturi. Mišljenja smo da je postupak izložen ovde, uz računanje $g \neq 1$, ipak egzaktiji.

Relacija (3.95) izvedena je pod pretpostavkom da je koncentracija R-centara dovoljno mala, odakle sledi da su nadkoncentracije elektrona i šupljina vrlo približno jednake, pa su i odgovarajuća vremena života elektrona i šupljina jednaka ($\tau_n = \tau_p = \tau$). Ako je koncentracija N_i značajna, tada se nadkoncentracije δn i δp razlikuju, što naravno ima za posledicu i različita vremena života elektrona i šupljina.

3.2 JEDNAČINA KONTINUITETA

U prethodnim razmatranjima promene koncentracije neravnotežnih nosilaca u poluprovodniku sa vremenom, pretpostavili smo da nisu prisutna spoljašnja polja kao ni druge pobude kao što je npr. gradijent koncentracije duž materijala, odnosno da kroz poluprovodnik ne teče struja. U opštem slučaju (kao što smo videli u poglavlju o transportnim procesima), pod dejstvom spoljašnjih ili unutrašnjih pobuda doći će do transporta nosilaca i postojaće odgovarajuće driftovske i difuzione komponente struje. Ukupna struja u poluprovodniku predstavlja zbir struja nastalih transportom elektrona i šupljina:

$$\vec{J} = \vec{J}_n + \vec{J}_p \quad (3.96)$$

Struje elektrona i šupljina sastoje se od driftovske i difuzione komponente:

$$\vec{J}_n = \vec{J}_{n,drift} + \vec{J}_{n,dif} \quad (3.97a)$$

$$\vec{J}_p = \vec{J}_{p,drift} + \vec{J}_{p,dif} \quad (3.97b)$$

koje su za slučaj elektrona date izrazima (2.111) i (2.113), analogni oblik važi i za šupljine:

$$\vec{J}_n = -en\mu_n\vec{K} + eD_n\vec{\nabla}_r n \quad (3.98a)$$

$$\vec{J}_p = ep\mu_p\vec{K} - eD_p\vec{\nabla}_r p \quad (3.98b)$$

gde je $\mu_n < 0$, a $\mu_p > 0$. Pri proticanju struje dolazi do promene koncentracija nosilaca $n(\vec{r}, t)$ i $p(\vec{r}, t)$, a ta promena se odvija u skladu sa jednačinom kontinuiteta, čiji je generalni oblik:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}_r \vec{J} \quad (3.99)$$

gde je ρ gustina prostornog naelektrisanja (ukupna koncentracija pozitivnog naelektrisanja iznosi $\rho^+ = ep + eN_D^+$, a negativno $\rho^- = -en - eP^-$). Jednačina (3.99) važi u slučaju kada nema spoljašnje generacije, kao ni rekombinacije nosilaca. U opštijem slučaju, promena koncentracije nosilaca sa vremenom (usled proticanja struje, generacije i rekombinacije), određena je sledećim jednačinama:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n(\vec{r}, t) - R_n(\vec{r}, t) + \vec{\nabla}_r \left(\frac{\vec{J}_n}{e} \right) \quad (3.100a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p(\vec{r}, t) - R_p(\vec{r}, t) - \vec{\nabla}_r \left(\frac{\vec{J}_p}{e} \right) \quad (3.100b)$$

Jednačine (3.100a), (3.100b), (3.98a) i (3.98b) rešavaju se u kombinaciji sa Poisson-ovom jednačinom koja povezuje električno polje $\vec{K}(\vec{r}, t)$ i ukupno prostorno naelektrisanje:

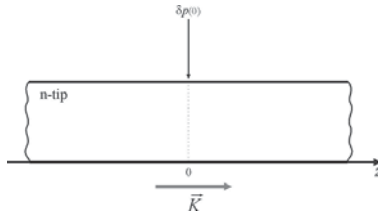
$$\vec{\nabla}_r \vec{K} = \frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (3.101)$$

gde je ϵ_0 dielektrična permitivnost vakuuma, ϵ_r relativna dielektrična permitivnost posmatranog materijala, a ukupna gustina prostornog naelektrisanja iznosi

$$\rho = e[p + N_D^+ - n - P^-] \quad (3.102)$$

Zamenom (3.108) u (3.101), kao i (3.98a) i (3.98b) u (3.100a) i (3.100b), respektivno, dobijamo sistem od 3 jednačine, čijim rešavanjem dolazimo do nepoznatih veličina $n(\bar{r}, t)$, $p(\bar{r}, t)$ i $\bar{K}(\bar{r}, t)$. Pošto se radi o sistemu parcijalnih diferencijalnih jednačina, pri čemu su nepoznate funkcije zavisne od četiri promenljive, problem se naravno u opštem slučaju ne može analitički rešiti. Primer koji sledi ilustruje kako se u vrlo specijalnom slučaju rešenje može dobiti u analitičkoj formi.

Posmatrajmo jednodimenzionalni homogeni poluprovodnik kod koga se vrši injekcija manjinskih nosilaca u tački $z=0$, kao što je prikazano na Sl. 3.7. Pretpostavimo da na poluprovodnik deluje spoljašnje električno polje koje je usmereno duž z-ose.



Sl. 3.7 Jednodimenzionalni homogeni poluprovodnik n-tipa, pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja, u koji se injektuju šupljine u tački $z=0$

Navešćemo eksplicitno sve pretpostavke koje uvodimo prilikom razmatranja prikazanog modela:

1) $\rho(z, t) \approx 0$ -ostvarena je kvazineutralnost. Poluprovodnik je homogen i u svakoj tački gustina prostornog naelektrisanja je jednaka nuli. Na osnovu ove pretpostavke, iz Poisson-ove jednačine (3.102) sledi:

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{K} \approx 0 \quad (3.103)$$

2) Injekcija manjinskih nosilaca vrši se samo u tački $z=0$. Ako pretpostavimo da je uzorak poluprovodnika n-tipa, tada možemo pisati:

$$\begin{aligned} G_p &\neq 0, \quad z=0 \\ G_p &= 0, \quad z \neq 0 \end{aligned} \quad (3.104)$$

3) Smatramo da je rekombinacija linearna i data u obliku:

$$R_p = \frac{\delta p}{\tau_p} \quad (3.105)$$

4) Posmatramo isključivo stacionarno stanje tako da važi:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (3.106)$$

Na osnovu gornjih pretpostavki, jednačina (3.100b) za $z \neq 0$ dobija oblik:

$$-R_p - \frac{1}{e} \bar{\nabla} \cdot \bar{J}_p = 0 \quad (3.107)$$

odnosno, posle zamene (3.105) i (3.98b):

$$-\frac{\delta p}{\tau_p} - \bar{\nabla} \cdot \left[p \mu_p \bar{K} - D_p \frac{\partial p}{\partial z} \bar{i}_z \right] = 0 \quad (3.108)$$

Kako je na osnovu izraza (3.103) $\bar{\nabla} \cdot \bar{K} \approx 0$, a $p(z) = p_0 + \delta p(z)$, pri čemu p_0 ne zavisi od koordinate, dalje možemo pisati:

$$\frac{\delta p}{\tau_p} + p \mu_p \bar{\nabla} \cdot \bar{K}^0 + \mu_p \bar{K} \frac{d(\delta p)}{dz} \bar{i}_z - D_p \frac{d^2(\delta p)}{dz^2} = 0 \quad (3.109)$$

Pošto smo pretpostavili da je električno polje oblika $\bar{K} = K \bar{i}_z$, konačno imamo:

$$\frac{d^2(\delta p)}{dz^2} - \frac{\mu_p K}{D_p} \frac{d(\delta p)}{dz} - \frac{\delta p}{D_p \tau_p} = 0 \quad (3.110)$$

Definisaćemo **difuzionu dužinu** za šupljine na sledeći način:

$$L_p = \sqrt{D_p \tau_p} \quad (3.111)$$

a uvešćemo i oznaku

$$l_{sp} = \mu_p K \tau_p \quad (3.112)$$

na osnovu čega će jednačina (3.110) dobiti oblik:

$$\frac{d^2(\delta p)}{dz^2} - \frac{l_{kp}}{L_p^2} \frac{d(\delta p)}{dz} - \frac{\delta p}{L_p^2} = 0, \quad z \neq 0 \quad (3.113)$$

Ovo je homogena linearna diferencijalna jednačina sa konstantnim koeficijentima, koju ćemo rešavati uz pomoć njene karakteristične jednačine:

$$a^2 - \frac{l_{kp}}{L_p} a - \frac{1}{L_p^2} = 0 \quad (3.114)$$

čija su rešenja

$$a_{1,2} = \frac{1}{L_p} \left(\frac{l_{kp}}{2L_p} \pm \sqrt{\frac{l_{kp}^2}{4L_p^2} + 1} \right) \quad (3.115)$$

Na osnovu toga, rešenje diferencijalne jednačine (3.113) ima oblik:

$$\delta p(z) = A_1 e^{a_1 z} + A_2 e^{a_2 z} \quad (3.116)$$

gde su A_1 i A_2 konstante koje se određuju uz pomoć graničnih uslova. Pretpostavićemo da je $a_1 > 0$ (znak “+” u izrazu (3.115)) a $a_2 < 0$. U tom slučaju $e^{a_1 z} (z \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$ i $e^{a_2 z} (z \rightarrow -\infty) \rightarrow \infty$, a pošto nadkoncentracije moraju biti konačne, rešenje u odgovarajućim oblastima uzimamo u formi:

$$\delta p(z) = \begin{cases} A_1 e^{a_1 z}, & z \geq 0 \\ A_2 e^{a_2 z}, & z < 0 \end{cases} \quad (3.117)$$

Na osnovu graničnog uslova $\delta p(z=0) = \delta p(0)$ zaključujemo da je $A_1 = A_2 = \delta p(0)$, pa izraz (3.117) postaje

$$\delta p(z) = \begin{cases} \delta p(0) e^{a_1 z}, & z \geq 0 \\ \delta p(0) e^{a_2 z}, & z < 0 \end{cases} \quad (3.118)$$

Iz izraza (3.115) jasno se vidi da je $a_1 \neq a_2$, tj. da je u prisustvu električnog polja raspodela nosilaca asimetrična u odnosu na tačku $z=0$ u kojoj se vrši injekcija. Ukoliko ne bi bilo spoljašnjeg električnog polja ($l_{kp}=0$), tada bismo imali $a_1 = 1/L_p$, $a_2 = -1/L_p$ i raspodela dodatnih manjinskih nosilaca bi bila simetrična:

$$\delta p(z) = \begin{cases} \delta p(0) e^{\frac{z}{L_p}}, & z \geq 0 \\ \delta p(0) e^{\frac{z}{L_p}}, & z < 0 \end{cases}, \quad K=0 \quad (3.119)$$

Analiziramo dalje asimptotske slučajeve:

1) **slabo električno polje** -u tom slučaju smatramo da je ispunjen uslov:

$$\frac{l_{kp}}{L_p} \ll 1 \quad (3.120)$$

Tada možemo pisati:

$$a_{1,2} \approx \frac{1}{L_p} \left[\frac{l_{kp}}{2L_p} \pm \left(1 + \frac{l_{kp}^2}{8L_p^2} \right) \right] = \pm \frac{1}{L_p} + \frac{l_{kp}}{2L_p^2} \pm \frac{l_{kp}^2}{8L_p^3} \quad (3.121)$$

Ako zanemarimo član srazmeran sa $(l_{kp}/L_p)^2$ dobijamo:

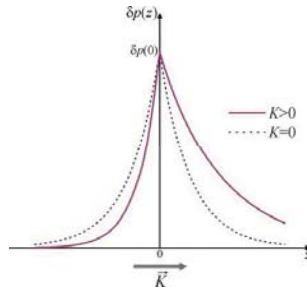
$$a_1 \approx \frac{1}{L_p} + \frac{l_{kp}}{2L_p^2} \quad (3.122a)$$

$$a_2 \approx -\frac{1}{L_p} + \frac{l_{kp}}{2L_p^2} \quad (3.122b)$$

odnosno

$$\delta p(z) = \begin{cases} \delta p(0) e^{\frac{z}{L_p} \left(1 + \frac{l_{kp}}{2L_p} \right)}, & z \geq 0 \\ \delta p(0) e^{\frac{z}{L_p} \left(-1 + \frac{l_{kp}}{2L_p} \right)}, & z < 0 \end{cases} \quad (3.123)$$

Pretpostavili smo da se smer električnog polja poklapa sa smerom z -ose ($K > 0$) i da se radi o efektivnoj injekciji nosilaca ($\delta p(0) > 0$) pa će raspodela dodatnih manjinskih nosilaca duž poluprovodnika izgledati kao na Sl. 3.8. Vidimo da električno polje “pomera” dodatne šupljine u pravcu z -ose.



Sl. 3.8 Promena nadkoncentracije manjinskih nosilaca duž homogenog poluprovodnika sa Sl. 3.7, u prisustvu slabog električnog polja (puna linija). Isprekidanom linijom ilustrovana je raspodela ovih nosilaca kada nema električnog polja ($K = 0$)

2) **jako električno polje** -tada smatramo da je ispunjen uslov:

$$\frac{l_{kp}}{L_p} \gg 1 \quad (3.124)$$

pa ćemo koeficijente a_1 i a_2 prikazati u obliku

$$a_{1,2} = \frac{1}{L_p} \left[\frac{l_{kp}}{2L_p} \pm \frac{l_{kp}}{2L_p} \sqrt{1 + \frac{4L_p^2}{l_{kp}^2}} \right] \approx \frac{1}{L_p} \left[\frac{l_{kp}}{2L_p} \pm \frac{l_{kp}}{2L_p} \left(1 + \frac{2L_p^2}{l_{kp}^2} \right) \right] \quad (3.125)$$

Na osnovu prethodnog izraza dalje dobijamo

$$a_1 = \frac{l_{kp}}{2L_p^2} + \frac{1}{l_{kp}} \approx \frac{l_{kp}}{2L_p^2} \quad (3.126a)$$

$$a_2 = -\frac{1}{l_{kp}} \quad (3.126b)$$

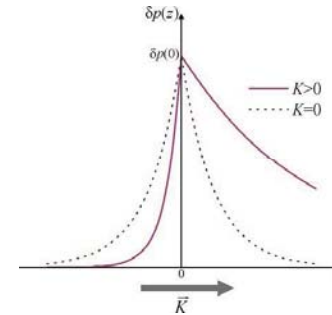
Promena nadkoncentracije šupljina sa koordinatom, prema tome, ima oblik:

$$\delta p(z) = \begin{cases} \delta p(0)e^{-\frac{z}{l_{kp}}}, & z \geq 0 \\ \delta p(0)e^{\frac{l_{kp}}{L_p^2}z}, & z < 0 \end{cases} \quad (3.127)$$

a količnik koeficijenta a_2 i a_1 pokazuje da će se nadkoncentracija šupljina mnogo sporije menjati u oblasti $z > 0$:

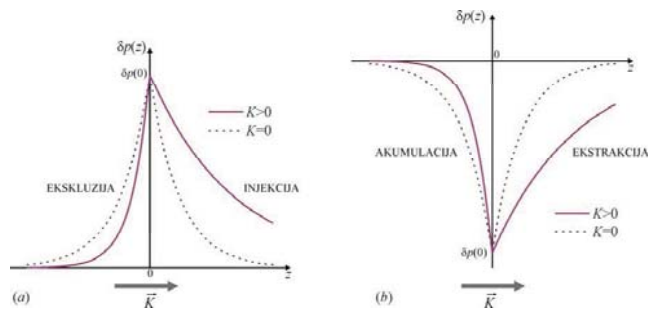
$$\left| \frac{a_2}{a_1} \right| = \frac{2L_p^2}{l_{kp}^2} \ll 1 \quad (3.128)$$

kao što je prikazano na Sl. 3.9. Pošto se radi o jakom električnom polju, "pomak" šupljina u pravcu z-ose je veoma izražen.



Sl. 3.9 Promena nadkoncentracije manjinskih nosilaca duž homogenog poluprovodnika u prisustvu jakog električnog polja (puna linija). Isprekidanom linijom ilustrovana je raspodela u slučaju kada je $K = 0$

Generalno, za $K > 0$ i $\delta p(0) > 0$, možemo zaključiti da u oblasti $z > 0$ električno polje vrši injekciju neravnotežnih manjinskih nosilaca, dok za $z < 0$ polje vrši ekskluziju (smanjuje koncentraciju nosilaca u poređenju sa slučajem kada je $K = 0$). Ukoliko bismo razmatrali i situaciju kada je $\delta p(0) < 0$, što bi značilo da se u tački $z = 0$ ekstrahuju manjinski nosioci, tada bi električno polje u oblasti $z > 0$ vršilo ekstrakciju (oduzimanje) manjinskih nosilaca, dok bismo s druge strane (za $z < 0$) imali akumulaciju, jer bi polje "dodavalo" manjinske nosioce. Opisani slučajevi ilustrovani su na Sl. 3.10.



Sl. 3.10 Ilustracija uticaja električnog polja na raspodelu neravnotežnih manjinskih nosilaca u homogenom poluprovodniku sa Sl. 3.7, u slučaju kada je a) $\delta p(0) > 0$ i b) $\delta p(0) < 0$

3.3 ODABRANI PROBLEMI

Problem 3.1. Za uzorak germanijuma n-tipa, čija otpornost na sobnoj temperaturi ($T = 300\text{ K}$), pri slaboj spoljašnjoj pobudi (osvetljenosti) iznosi $\rho_0 = 1.65\ \Omega\text{cm}$, dobija se vreme života nosilaca $\tau_0 = 2\ \mu\text{s}$. Pri jakoj spoljašnjoj osvetljenosti otpornost se smanjuje na vrednost $\rho_1 = 1.27\ \Omega\text{cm}$, a vreme života iznosi $\tau_1 = 3.3\ \mu\text{s}$. Ako se zna da se rekombinacija u ovom uzorku vrši preko R-centara određenih sa $W_g - |W_t| = 0.32\ \text{eV}$, odrediti vremena života τ_{n_0} i τ_{p_0} . Poznato je $B_v = 0.565 \cdot 10^{19}\ \text{cm}^{-3}$, $|\mu_n| = 3800\ \text{cm}^2/\text{Vs}$, $|\mu_p| = 1800\ \text{cm}^2/\text{Vs}$.

Rešenje: Vreme života nosilaca u posmatranom slučaju dato je Shockley-Read-ovom formulom (3.95) u obliku:

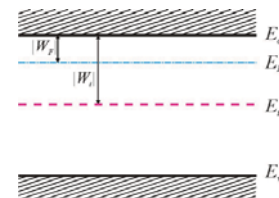
$$\tau = \tau_{p_0} \frac{n_0 + \delta n + n_1}{n_0 + p_0 + \delta n} + \tau_{n_0} \frac{n_0 + \delta p + p_1}{n_0 + p_0 + \delta p}, \quad \delta n = \delta p \quad (\text{P.3.1})$$

Pošto se radi o uzorku n-tipa sledi $n_0 \gg p_0$, a na osnovu izraza (3.75) i (3.77b) zaključujemo da je

$$\frac{n_0}{n_1} = e^{\frac{W_g - W_t}{k_B T}} \Rightarrow n_0 \gg n_1 \quad (\text{P.3.2a})$$

$$\frac{p_0}{p_1} = e^{\frac{-W_t + W_g}{k_B T}} \Rightarrow p_0 \ll p_1 \quad (\text{P.3.2b})$$

gde je $W_t = E_t - E_c < 0$ (videti Sl. P.3.1). Ove relacije slede iz činjenice da energetski procep Ge iznosi $W_g = 0.66\ \text{eV}$, što znači da se R-centar nalazi u blizini sredine procepa, dok je Fermi-jev nivo blizu dna provodne zone pošto se radi o uzorku n-tipa.



Sl. P.3.1 Međusobni položaj Fermi-jevog nivoa i R-centra u posmatranom poluprovodniku

Prema tome, u posmatranom slučaju izraz (P.3.1), za slabe spoljašenje pobude ($\delta n \ll n_0$) dobija oblik:

$$\tau_0 \approx \tau_{p_0} + \tau_{n_0} \frac{p_1}{n_0} \quad (\text{P.3.3})$$

Ukoliko je pobuda δn velika, tada se zanemarivanjem odgovarajućih članova u izrazu (P.3.1) dobija

$$\tau_1 \approx \tau_{p_0} + \tau_{n_0} \frac{p_1 + \delta n}{n_0 + \delta n} \quad (\text{P.3.4})$$

Specifična otpornost uzorka određena je izrazom

$$\rho = \frac{1}{e(n_0 + \delta n) |\mu_n| + e(p_0 + \delta n) \mu_p} \quad (\text{P.3.5})$$

Pošto je $n_0 \gg p_0$, u slučaju slabe pobude dobijamo

$$\rho_0 \approx \frac{1}{en_0 |\mu_n|} \quad (\text{P.3.6})$$

dok u slučaju jake pobude imamo

$$\rho_1 \approx \frac{1}{en_0 |\mu_n| + e(\mu_p + |\mu_n|) \delta n} \quad (\text{P.3.7})$$

Na osnovu izraza (P.3.3) i (P.3.4) sledi

$$\tau_{n_0} = \frac{(\tau_1 - \tau_0)(n_0 + \delta n)n_0}{(n_0 - p_1)\delta n} \quad (\text{P.3.8})$$

Iz jednačine (P.3.6) možemo odrediti $n_0 \approx 1/(e\rho_0 |\mu_n|) \approx 9.97 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, a kombinovanjem sa (P.3.7) dolazimo do izraza

$$\delta n = \frac{\rho_0 - \rho_1}{\rho_0 \rho_1 (\mu_p + |\mu_n|) e} \approx 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{P.3.9})$$

Na osnovu izraza (3.77b) možemo odrediti veličinu:

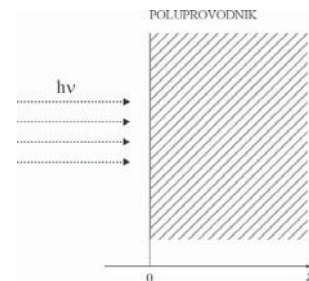
$$p_1 = B_v e^{-\frac{W_g - W_f}{k_B T}} = B_v e^{-\frac{|W_v| - W_g}{k_B T}} \approx 2.55 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{P.3.10})$$

pa konačno dobijamo

$$\tau_{n_0} \approx 8 \mu\text{s}, \quad \tau_{p_0} = \tau_0 - \tau_{n_0} \frac{p_1}{n_0} \approx 1.8 \mu\text{s} \quad (\text{P.3.11})$$

Problem 3.2. Naći koncentraciju nosilaca na površini debelog uzorka n-tipa germanijuma kada je generacija parova elektron-šupljina ravnomerna po zapremini i iznosi $g_0 = 2.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} = \text{const}$, vreme života šupljina iznosi $\tau_p = 4 \mu\text{s}$, brzina površinske rekombinacije $s = 500 \text{ cm/s}$, a koeficijent difuzije $D_p = 49 \text{ cm}^2/\text{s}$.

Rešenje: Posmatrani uzorak poluprovodnika, za koji je potrebno odrediti raspodelu manjinskih nosilaca, prikazan je na Sl. P.3.2. Pretpostavimo da je izložen dejstvu neke spoljašnje pobude, npr. fotona odgovarajuće energije koji dovode do ravnomerne generacije nosilaca po zapremini. Dodatni nosioci će se zatim rekombinovati, ali pored zapreminske rekombinacije u realnim poluprovodnicima prisutan je i proces **površinske rekombinacije** tj. određeni broj nosilaca će se rekombinovati na površini materijala.



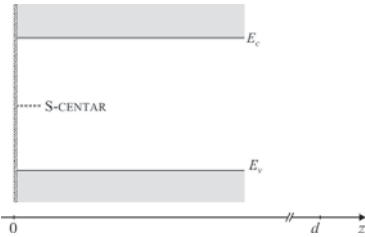
Sl. P.3.2 Uzorak poluprovodnika velike debljine izložen dejstvu spoljašnje pobude (svetlosti)

Do ove pojave dolazi zbog toga što na površini realnih materijala mogu postojati različiti defekti i nesavršenosti. Površina je često izložena mehaničkim oštećenjima do kojih može doći u procesu narastanja i obrade uzorka, hemijskim nečistoćama (u smislu apsorpcije stranih atoma ili molekula) i sl., i te nepravilnosti su jedan od uzroka smanjenja koncentracije neravnotežnih nosilaca. Međutim, površinska rekombinacija postoji i kada nisu prisutni strani atomi, niti druge nepravilnosti (vakancije, intersticije), s obzirom da i sama površina poluprovodnika predstavlja inherentu nesavršenost jer narušava idealnu periodičnost kristalne rešetke (kao što smo videli u poglavlju 1.6). Ovakvo narušavanje periodičnosti dovodi do pojave lokalizovanih stanja na energijama u okviru zabranjenih zona (površinska stanja) i ti diskretni nivoi u energetskom procepu mogu zahvatiti nosioce, analogno R-centrima kod

zapreminske rekombinacije. Svi navedeni efekti rezultuju promenom koncentracije nosilaca na površini tj. igraju ulogu centara rekombinacije koje označavamo kao **S-centri** (Sl. P.3.3). Kao i kod zapreminskih efekata, proces rekombinacije opisujemo odgovarajućom brzinom rekombinacije R_s koja predstavlja broj rekombinovanih nosilaca po jedinici površine u jedinici vremena. Rekombinacija R_s je srazmerna promeni koncentracije manjinskih nosilaca na površini, i ako posmatramo poluprovodnik n-tipa gde su manjinski nosioci šupljine imaćemo:

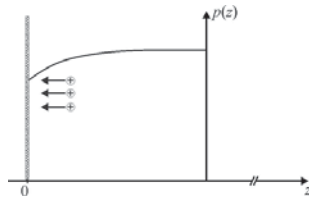
$$R_s = s\delta p_s \quad (\text{P.3.12})$$

gde je s koeficijent proporcionalnosti koji ima dimenzije brzine (m/s) i naziva se brzina površinske rekombinacije, a δp_s predstavlja razliku neravnotežne koncentracije šupljina na površini ($z = 0$) i ravnotežne koncentracije šupljina p_0 (koja je ista kao u balku).



Sl. P.3.3 Ilustracija površinskih centara rekombinacije (S-centri)

Pošto na površini dolazi do rekombinacije šupljina, javlja se gradijent koncentracije (Sl. P.3.4) što prouzrokuje (difuzionu) struju šupljina ka površini. Ukupan broj rekombinovanih šupljina po jedinici površine u jedinici vremena mora biti jednak ukupnom broju šupljina po jedinici površine koje difuzijom pristižu na površinu $eR_s = \pm J_p(z_0)$.



Sl. P.3.4 Promena neravnotežne koncentracije šupljina u okolini površine poluprovodnika

Za proizvoljnu površinu uzorka $z = z_0$, imamo granične uslove u formi:

$$eR_s = \pm J_p(z_0) \quad (\text{P.3.13a})$$

$$s(\delta p)|_{z=z_0} = \pm \frac{1}{e} J_p(z_0) = \mp D_p \left. \frac{d(\delta p)}{dz} \right|_{z=z_0} \quad (\text{P.3.13b})$$

gde se znak bira vodeći računa o smeru difuzione struje šupljina u konkretnom slučaju.

Jednačina kontinuiteta za uslove date u tekstu zadatka se može napisati u obliku

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\delta p)}{\partial t} &= g_0 - \frac{\delta p}{\tau_p} - \frac{1}{e} \nabla_x \bar{J}_p \\ &= g_0 - \frac{\delta p}{\tau_p} - \frac{1}{e} \frac{\partial \bar{J}_p}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{P.3.14})$$

gde je $\delta p = p - p_0$. Ukupna struja šupljina iznosi:

$$\bar{J}_p = ep\mu_p \bar{K} - eD_p \frac{\partial(\delta p)}{\partial z} = -eD_p \frac{\partial(\delta p)}{\partial z} \quad (\text{P.3.15})$$

gde smo driftovku komponentu struje zanemarili s obzirom da nema spoljašnjeg polja. Zamenjivanjem (P.3.15) u (P.3.14) dolazimo do odgovarajuće diferencijalne jednačine za nadkoncentraciju šupljina δp :

$$\frac{\partial(\delta p)}{\partial t} = g_0 - \frac{\delta p}{\tau_p} + D_p \frac{\partial^2(\delta p)}{\partial z^2} \quad (\text{P.3.16})$$

U stacionarnom stanju, kada je $\frac{\partial(\delta p)}{\partial t} = 0$, dobijamo

$$\frac{d^2(\delta p)}{dz^2} - \frac{\delta p}{L_p^2} = -\frac{g_0}{D_p} \quad (\text{P.3.17})$$

gde je $L_p = \sqrt{\tau_p D_p}$. Rešenje jednačine (P.3.17) je oblika

$$\delta p(z) = g_0 \tau_p + Ae^{-z/L_p} + Be^{z/L_p} \quad (\text{P.3.18})$$

Pošto se radi o debelom uzorku (tretiramo ga kao polubeskonačan), da bi $\delta p(z)$ bilo konačno kada $z \rightarrow \infty$, mora se uzeti $B = 0$, pa imamo

$$\delta p(z) = g_0 \tau_p + A e^{-\frac{z}{L_p}} \quad (\text{P.3.19})$$

Pošto nema površinske generacije nosilaca, to znači da se na površini moraju rekombinovati sve šupljine koje dolaze difuzijom, što daje granični uslov u formi:

$$s(\delta p)|_{z=0} = -\frac{1}{e} J_p(0) = D_p \left. \frac{d(\delta p)}{dz} \right|_{z=0} \quad (\text{P.3.20})$$

Primenom na izraz (P.3.19) dobijamo

$$A = -\frac{s g_0 \tau_p^2}{L_p + s \tau_p} \quad (\text{P.3.21})$$

Na osnovu toga možemo odrediti nadkoncentraciju šupljina na površini uzorka

$$\delta p(0) = g_0 \tau_p - \frac{s g_0 \tau_p^2}{L_p + s \tau_p} = \frac{\tau_p g_0 L_p}{L_p + s \tau_p} = 0,875 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{P.3.22})$$

dok na velikoj udaljenosti od površine imamo $\delta p(z \rightarrow \infty) = 10^{12} \text{ cm}^{-3} > \delta p(0)$.

Problem 3.3. Naći koncentraciju neravnotežnih šupljina na osvetljenoj površini debelog uzorka n-tipa germanijuma, ako je brzina površinske rekombinacije $s = 500 \text{ cm/s}$, intenzitet svetlosti (podeljen sa energijom fotona) $I_0 = 6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, koeficijent apsorpcije svetlosti $\alpha = 10^3 \text{ cm}^{-1}$, vreme života šupljina $\tau_p = 100 \mu\text{s}$, koeficijent difuzije šupljina $D_p = 49 \text{ cm}^2$, pod pretpostavkom da svaki kvant svetlosti daje par elektron-šupljina.

Rešenje: S obzirom da postoji apsorpcija svetlosti u uzorku, generacija nosilaca neće biti uniformna, već će biti funkcija rastojanja od površine koja se osvetljava. Ukupan broj generisanih nosilaca u jedinici vremena, u elementarnoj zapremini $dV = S dz$, gde je S površina poprečnog preseka uzorka, iznosi:

$$dN = g(z) dV = g(z) S dz \quad (\text{P.3.23})$$

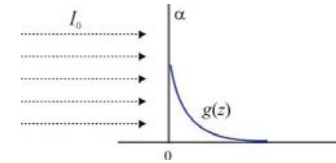
S druge strane, broj apsorbovanih kvanata svetlosti u posmatranoj zapremini je jednak $[I(z) - I(z + dz)]S$, a kako svaki kvant svetlosti daje jedan par elektron šupljina, možemo pisati:

$$g(z) = -dl/dz \quad (\text{P.3.24})$$

gde je $I(z) = I_0 e^{-\alpha z}$. Prema tome, generacija nosilaca menja se duž uzorka po zakonu:

$$g(z) = \alpha I_0 e^{-\alpha z} = g_0 e^{-\alpha z} \quad (\text{P.3.25})$$

gde je $g_0 = \alpha I_0$, kao što je ilustrovano na Sl. P.3.5.



Sl. P.3.5 Promena generacije nosilaca sa udaljenjem od površine, koja je posledica apsorpcije

Diferencijalna jednačina, analogna sa (P.3.17) za stacionarno stanje, sada ima oblik:

$$\frac{d^2(\delta p)}{dz^2} - \frac{\delta p}{L_p^2} = -\frac{\alpha I_0}{D_p} e^{-\alpha z} \quad (\text{P.3.26})$$

Rešenje ove jednačine je u formi

$$\delta p(z) = A_1 e^{r_1 z} + A_2 e^{r_2 z} + y_p \quad (\text{P.3.27})$$

gde su r_1 i r_2 rešenja karakteristične jednačine homogenog dela u (P.3.26)

$$r^2 - \frac{1}{L_p^2} = 0 \Rightarrow r_{1,2} = \mp \frac{1}{L_p} \quad (\text{P.3.28})$$

a y_p je partikularno rešenje koje tražimo u obliku $y_p = A e^{-\alpha z}$. Zamenom u (P.3.26) dobijamo

$$A = -\frac{g_0 \tau_p L_p^2}{L_p^2 \alpha^2 - 1} \quad (\text{P.3.29})$$

Konačno, rešenje (P.3.27) se može napisati u formi

$$\delta p(z) = A_1 e^{\frac{z}{L_p}} - \frac{g_0 \tau_p L_p^2}{L_p^2 \alpha^2 - 1} e^{-\alpha z} \quad (\text{P.3.30})$$

gde je zamenjeno $A_2 = 0$ zbog zahteva za konačnim δp kada $z \rightarrow \infty$. Konstantu A_1 određujemo iz graničnog uslova na površini poluprovodnika

$$s(\delta p)|_{z=0} = D_p \left. \frac{d(\delta p)}{dz} \right|_{z=0} \quad (\text{P.3.31})$$

što kombinovanjem sa (P.3.30) daje:

$$A_1 = \frac{g_0 \tau_p}{L_p^2 \alpha^2 - 1} \cdot \frac{s \tau_p + \alpha L_p^2}{L_p + s \tau_p} \quad (\text{P.3.32})$$

Konačno, zamenjujući (P.3.32) u (P.3.30) dobijamo:

$$\delta p(z) = \frac{g_0 \tau_p}{L_p^2 \alpha^2 - 1} \left[\frac{s \tau_p + \alpha L_p^2}{L_p + s \tau_p} e^{\frac{z}{L_p}} - e^{-\alpha z} \right] \quad (\text{P.3.33})$$

odakle je

$$\delta p(0) = \frac{g_0 \tau_p L_p}{(\alpha L_p + 1)(L_p + s \tau_p)} \quad (\text{P.3.34})$$

Kako je u posmatranom primeru $\alpha L_p = 70 \gg 1$, a $g_0 = \alpha I_0$, sledi:

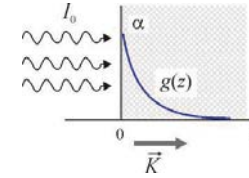
$$\delta p(0) \approx \frac{I_0 \tau_p}{L_p + s \tau_p} = 5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{P.3.35})$$

Primitimo da je $\delta p(z \rightarrow \infty) = 0$, što nije slučaj kod uniformne generacije ($\alpha = 0$) gde je $\delta p(z \rightarrow \infty) = g_0 \tau_p$.

Problem 3.4. Na polubeskonačni poluprovodnik izrazito n-tipa ($p_0 \approx 0$) pada svetlost intenziteta I_0 (W/cm^2) energije fotona $h\nu > E_g$, normalno na površinu pri čemu svaki apsorbovani kvant daje jedan par elektron-šupljina. Ako je na poluprovodnik primenjeno električno polje K normalno na površinu (sa smerom od površine u dubinu) odrediti raspodelu šupljina $\delta p(z)$ smatrajući poznatim koeficijent apsorpcije svetlosti α , koeficijent difuzije D_p ,

vreme života τ_p , brzinu površinske rekombinacije s i pokretljivost μ_p . Odrediti koordinatu z_0 gde je koncentracija šupljina maksimalna.

Rešenje: Kao što je objašnjeno u primeru P.3.3, zbog postojanja apsorpcije svetlosti u poluprovodniku, generacija će opadati duž uzorka po zakonu $g(z) = g_0 e^{-\alpha z}$, gde je sada $g_0 = \alpha I_0 / h\nu$ (upadni intenzitet je potrebno podeliti energijom fotona da bi se odredio broj fotona tj. broj parova elektron-šupljina), Sl. P.3.6.



Sl. P.3.6 Polubeskonačni poluprovodnik kod koga generacija nosilaca opada sa koordinatom usled apsorpcije, pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja

Jednačina kontinuiteta u stacionarnom stanju glasi:

$$g - \frac{\delta p}{\tau_p} - \frac{1}{e} \frac{dJ_p}{dz} = 0 \quad (\text{P.3.36})$$

gde je

$$J_p = ep\mu_p K - eD_p \frac{\partial p}{\partial z} \approx e(\delta p)\mu_p K - eD_p \frac{\partial(\delta p)}{\partial z} \quad (\text{P.3.37})$$

pošto se p_0 može zanemariti. Na osnovu izraza (P.3.37) i (P.3.36) dolazimo do diferencijalne jednačine

$$\frac{d^2(\delta p)}{dz^2} - \frac{\mu_p K}{D_p} \frac{d(\delta p)}{dz} - \frac{\delta p}{L_p^2} = -\frac{\alpha I_0}{h\nu D_p} e^{-\alpha z} \quad (\text{P.3.38})$$

gde je zamenjeno $L_p^2 = D_p \tau_p$. Karakteristična jednačina homogenog dela ove diferencijalne jednačine je oblika:

$$r^2 - \frac{\mu_p K}{D_p} r - \frac{1}{L_p^2} = 0 \quad (\text{P.3.39})$$

odakle sledi

$$r_1 = \frac{\mu_p K}{2D_p} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4}{L_p^2} \left(\frac{D_p}{\mu_p K} \right)^2} \right) \quad (\text{P.3.40a})$$

$$r_2 = \frac{\mu_p K}{2D_p} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4}{L_p^2} \left(\frac{D_p}{\mu_p K} \right)^2} \right) \quad (\text{P.3.40b})$$

Partikularno rešenje tražićemo u obliku

$$\delta p_p(z) = C e^{-\alpha z} \quad (\text{P.3.41})$$

što zamenom u (P.3.38) daje

$$C = - \frac{\alpha I_p \tau_p / h\nu}{1 - \alpha^2 L_p^2 - \frac{eK\alpha L_p^2}{k_B T}} \quad (\text{P.3.42})$$

Ukupno rešenje ima oblik:

$$\delta p(z) = A e^{\alpha z} + B e^{\alpha z} + C e^{-\alpha z} \quad (\text{P.3.43})$$

gde se mora uzeti $B = 0$ (pošto je $r_2 > 0$) da bi δp ostalo konačno kada $z \rightarrow \infty$. Granični uslov na površini poluprovodnika glasi

$$s \delta p(0) = - \frac{1}{e} J_p(0) \quad (\text{P.3.44})$$

gde $J_p(0)$ podrazumeva ukupnu struju šupljina (i driftovsku i difuzionu komponentu) koje pristižu na površinu. Na osnovu toga dobijamo

$$s(A+C) = D_p A r_1 - \alpha D_p C - \mu_p K (A+C) \quad (\text{P.3.45})$$

odnosno

$$A = \frac{\alpha D_p + s + \mu_p K}{D_p r_1 - s - \mu_p K} C \quad (\text{P.3.46})$$

Vrednost koordinate u kojoj je koncentracija šupljina maksimalna odredićemo diferenciranjem izraza (P.3.43) i izjednačavanjem sa nulom:

$$r_1 A e^{\alpha z_0} - \alpha C e^{-\alpha z_0} = 0 \quad (\text{P.3.43})$$

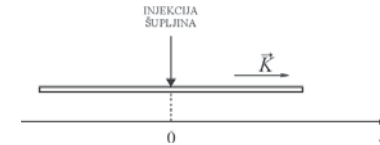
odakle je

$$z_0 = \frac{1}{r_1 + \alpha} \ln \frac{\alpha C}{r_1 A} = \frac{1}{r_1 + \alpha} \ln \frac{\alpha (D_p r_1 - s - \mu_p K)}{r_1 (D_p + s + \mu_p K)} \quad (\text{P.3.44})$$

Problem 3.5. Odrediti raspodelu neravnotežnih šupljina u uzorku germanijuma n-tipa, koji ima oblik dugačkog vlakna, pri stacionarnoj injekciji šupljina u jednoj tački ($z = 0$) i konstantnom električnom polju $K = 5 \text{ V/cm}$ duž uzorka. Temperatura je sobna ($T = 300 \text{ K}$), a $L_p = 0.09 \text{ cm}$.

Rešenje: Jednačina kontinuiteta za svaku vrednost koordinate z uzorka sa Sl. P.3.7, osim za tačku $z = 0$ gde postoji injekcija tj. spoljašnja generacija, ima oblik:

$$\frac{\partial(\delta p)}{\partial t} = - \frac{\delta p}{\tau_p} - \frac{1}{e} \frac{dJ_p}{dz}, \quad z \neq 0 \quad (\text{P.3.45})$$



Sl. P.3.7 Uzorak oblika dugačkog vlakna, izložen dejstvu spoljašnjeg električnog polja \vec{K} , kod koga je prisutna stacionarna injekcija šupljina u tački $z = 0$

Struja šupljina određena je izrazom:

$$J_p = ep\mu_p K - eD_p \frac{\partial(\delta p)}{\partial z} \quad (\text{P.3.46})$$

odakle sledi

$$\begin{aligned} \frac{dJ_p}{dz} &= e \frac{\partial p}{\partial z} \mu_p K + ep\mu_p \frac{\partial K}{\partial z} - eD_p \frac{\partial^2(\delta p)}{\partial z^2} \\ &= e\mu_p K \frac{\partial(\delta p)}{\partial z} - eD_p \frac{\partial^2(\delta p)}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (\text{P.3.47})$$

pošto je $\frac{\partial K}{\partial z} = 0$ a $\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial(\delta p)}{\partial z}$. Na osnovu izraza (P.3.45) i (P.3.46), u stacionarnom stanju ($\partial(\delta p)/\partial t = 0$) dobija se:

$$\frac{d^2(\delta p)}{dz^2} - \frac{\mu_p K}{D_p} \frac{d(\delta p)}{dz} - \frac{\delta p}{D_p \tau_p} = 0, \quad z \neq 0 \quad (\text{P.3.48})$$

Kada se zameni $L_p^2 = D_p \tau_p$ i $D_p/\mu_p = k_B T/e$ iz Einstein-ove relacije (2.121) napisane za šupljine, prethodna jednačina dobija oblik

$$\frac{d^2(\delta p)}{dz^2} - \frac{eK}{k_B T} \frac{d(\delta p)}{dz} - \frac{\delta p}{L_p^2} = 0, \quad z \neq 0 \quad (\text{P.3.49})$$

Karakteristična jednačina homogenog dela diferencijalne jednačine (P.3.49) glasi:

$$r^2 - \frac{eK}{k_B T} r - \frac{1}{L_p^2} = 0 \quad (\text{P.3.50})$$

odakle je

$$r_1 = \frac{eK}{2k_B T} \left(1 + \sqrt{1 + \left(\frac{2k_B T}{L_p e K} \right)^2} \right) > 0 \quad (\text{P.3.51a})$$

$$r_2 = \frac{eK}{2k_B T} \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{2k_B T}{L_p e K} \right)^2} \right) < 0 \quad (\text{P.3.51b})$$

Rešenje jednačine (P.3.49) se prema tome može napisati u obliku:

$$\delta p(z) = Ae^{r_1 z} + Be^{r_2 z} \quad (\text{P.3.52})$$

Pošto δp mora biti konačno kada $z \rightarrow \infty$, a kako je $r_1 > 0$ sledi da za $z > 0$ mora biti $A = 0$. Na sličan način zaključujemo da je za $z < 0$ neophodno da bude $B = 0$ zbog $r_2 < 0$. Na osnovu toga imamo:

$$\delta p(z) = \begin{cases} \delta p(0)e^{r_1 z}, & z < 0 \\ \delta p(0)e^{r_2 z}, & z > 0 \end{cases} \quad (\text{P.3.53})$$

Posmatrajmo veličinu $L_k = k_B T/eK = 5.2 \cdot 10^{-3} \text{ cm} \ll L_p$. Uzimajući u obzir ovu vrednost, izraze (P.3.51a) i (P.3.51b) možemo napisati u obliku

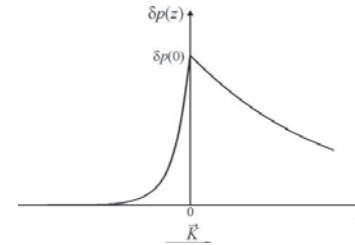
$$r_1 = \frac{1}{2L_k} \left(1 + \sqrt{1 + 4 \left(\frac{L_k}{L_p} \right)^2} \right) \approx \frac{1}{L_k} \left(1 + \frac{L_k^2}{L_p^2} \right) \approx \frac{1}{L_k} \quad (\text{P.3.54a})$$

$$r_2 = \frac{1}{2L_k} \left(1 - \sqrt{1 + 4 \left(\frac{L_k}{L_p} \right)^2} \right) \approx -\frac{L_k}{L_p^2} \quad (\text{P.3.55b})$$

odakle zaključujemo da je $|r_2| \ll r_1$, što označava da se koncentracija elektrona znatno sporije menja u oblasti $z > 0$. Konačni oblik rešenja (P.3.53) glasi

$$\delta p(z) = \begin{cases} \delta p(0)e^{\frac{z}{L_k}}, & z < 0 \\ \delta p(0)e^{-\frac{z}{L_p^2}}, & z > 0 \end{cases} \quad (\text{P.3.56})$$

što je ilustrovano na Sl. P.3.8.

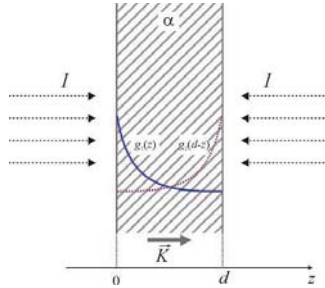


Sl. P.3.8 Raspodela neravnotežnih šupljina u uzorku sa Sl. P.3.7.

Dakle, od tačke $z = 0$ gde je stvorena nadkoncentracija $\delta p(0)$, šupljine se difuzijom kreću na levu i desnu stranu. Kada ne bi postojalo električno polje, raspodela šupljina bi bila simetrična ($|r_2| = r_1$), a očigledno je da polje utiče tako što “potpomaže” difuziju u pravcu z , a “otežava” difuziju u pravcu suprotnom od svoga delovanja.

Problem 3.6. Na poluprovodnički uzorak izrazito n-tipa ($p_0 \approx 0$), na levu i desnu stranu normalno na površinu, pada svetlost intenziteta $I = 6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ pri čemu svaki apsorbovani kvant daje jedan par elektron-šupljina, Sl. P.3.9. Debljina poluprovodničkog uzorka je

$d = 5 \text{ mm}$. Ako je na poluprovodnik primenjeno električno polje $K = 1 \text{ V/cm}$ normalno na površine (sa smerom od leve površine na desno), odrediti raspodelu šupljina $\delta_p(z)$, znajući da je koeficijent apsorpcije svetlosti $\alpha = 10^3 \text{ cm}^{-1}$, koeficijent difuzije $D_p = 49 \text{ cm}^2/\text{s}$, vreme života $\tau_p = 100 \mu\text{s}$, pokretljivost $\mu_p = 1800 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ i brzina površinske rekombinacije na levoj i desnoj strani $s = 500 \text{ cm/s}$. Posebno razmotriti slučaj kada $s \rightarrow \infty$. Skicirati dobijene rezultate.



Sl. P.3.9 Poluprovodnički uzorak n-tipa osvetljen sa obe strane i izložen dejstvu spoljašnjeg električnog polja

Rešenje: Jednačina kontinuiteta u stacionarnom stanju, za posmatrani uzorak ima oblik:

$$g - \frac{\delta p}{\tau_p} - \frac{1}{e} \frac{dJ_p}{dz} = 0 \quad (\text{P.3.57})$$

gde je

$$J_p \approx e(\delta p)\mu_p K - eD_p \frac{\partial(\delta p)}{\partial z} \quad (\text{P.3.58})$$

a generacija $g(z)$ se dobija sabiranjem efekata osvetljavanja sa leve i desne strane:

$$\begin{aligned} g(z) &= g_1(z) + g_2(d-z) \\ &= \alpha I e^{-\alpha z} + \alpha I e^{-\alpha(d-z)} \end{aligned} \quad (\text{P.3.59})$$

Zamenjivanjem (P.3.59) i (P.3.58) u (P.3.57) dolazimo do diferencijalne jednačine u obliku:

$$\frac{d^2(\delta p)}{dz^2} - \frac{\mu_p K}{D_p} \frac{d(\delta p)}{dz} - \frac{\delta p}{L_p^2} = -\frac{\alpha I}{D_p} [e^{-\alpha z} + e^{\alpha(z-d)}] \quad (\text{P.3.60})$$

Rešenja karakteristične jednačine homogenog dela ove diferencijalne su oblika:

$$r_{1,2} = \frac{\mu_p K}{2D_p} \left[1 \pm \sqrt{1 + 4 \left(\frac{D_p}{L_p^2} \right) \left(\frac{\mu_p K}{\mu_p K} \right)^2} \right] \quad (\text{P.3.61})$$

Partikularno rešenje tražićemo u formi

$$\delta p_p(z) = C_1 e^{-\alpha z} + C_2 e^{\alpha(z-d)} \quad (\text{P.3.62})$$

što zamenom u (P.3.60) daje

$$C_1 = \frac{\alpha I \tau_p}{1 - \alpha^2 L_p^2 - \mu_p K \alpha \tau_p} = -1.18 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{P.3.63})$$

$$C_2 = \frac{\alpha I \tau_p}{1 - \alpha^2 L_p^2 + \mu_p K \alpha \tau_p} = -1.27 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$$

Ukupno rešenje ima oblik:

$$\delta p(z) = A_1 e^{\alpha z} + A_2 e^{\alpha z} + C_1 e^{-\alpha z} + C_2 e^{\alpha(z-d)} \quad (\text{P.3.64})$$

Konstante A_1 i A_2 određuju se na osnovu graničnih uslova na površinama koje se osvetljavaju:

$$s \delta p(0) = -\frac{1}{e} J_p(0) \quad (\text{P.3.65a})$$

$$s \delta p(d) = \frac{1}{e} J_p(d) \quad (\text{P.3.65b})$$

ili, u razvijenom obliku:

$$\begin{aligned} &s(A_1 + A_2 + C_1 + C_2 e^{-\alpha d}) \\ &= D_p (r_1 A_1 + r_2 A_2 - \alpha C_1 + \alpha C_2 e^{-\alpha d}) - \mu_p K (A_1 + A_2 + C_1 + C_2 e^{-\alpha d}) \end{aligned} \quad (\text{P.3.66a})$$

$$\begin{aligned} &s(A_1 e^{\alpha d} + A_2 e^{\alpha d} + C_1 e^{-\alpha d} + C_2) \\ &= -D_p (r_1 A_1 e^{\alpha d} + r_2 A_2 e^{\alpha d} - \alpha C_1 e^{-\alpha d} + \alpha C_2) + \mu_p K (A_1 e^{\alpha d} + A_2 e^{\alpha d} + C_1 e^{-\alpha d} + C_2) \end{aligned} \quad (\text{P.3.66b})$$

Preuređivanjem gornjih jednačina dolazimo do forme:

$$A_1 M + A_2 N = K_1 \quad (\text{P.3.67a})$$

$$A_1 P + A_2 Q = K_2 \quad (\text{P.3.67b})$$

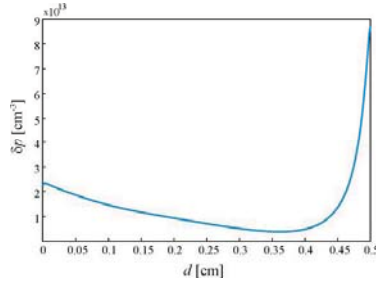
gde je

$$\begin{aligned} M &= s - D_p r_1 - \mu_p K \\ N &= s - D_p r_2 + \mu_p K \\ P &= (s + D_p r_1 - \mu_p K) e^{r_1 d} \\ Q &= (s + D_p r_2 - \mu_p K) e^{r_2 d} \\ K_1 &= -C_1 (s + \alpha D_p + \mu_p K) + C_2 e^{-\alpha d} (-s + \alpha D_p - \mu_p K) \\ K_2 &= -C_1 e^{-\alpha d} (-s + \alpha D_p + \mu_p K) + C_2 (-s - \alpha D_p + \mu_p K) \end{aligned} \quad (\text{P.3.68})$$

Zamenom brojnih vrednosti dolazimo do rezultata:

$$\begin{aligned} A_1 &\approx 2.4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \\ A_2 &= 7.84 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3} \end{aligned} \quad (\text{P.3.69})$$

a raspodela šupljina, određena izrazom (P.3.64) prikazana je na Sl. P.3.10.



Sl. P.3.10 Raspodela neravnotežnih šupljina u uzorku osvetljenom sa obe strane, i izloženom dejstvu spoljašnjeg električnog polja u pravcu z-ose, kada je brzina površinske rekombinacije konačna i iznosi $s = 500 \text{ cm} / \text{s}$

Ukoliko brzina površinske rekombinacije ima veoma veliku vrednost ($s \rightarrow \infty$), granični uslovi na površinama se menjaju i svode na:

$$\delta p(0) = 0 \quad (\text{P.3.70a})$$

$$\delta p(d) = 0 \quad (\text{P.3.70b})$$

pošto je desna strana izraza (P.3.65a) i (P.3.65b) konačna. Na osnovu toga imamo:

$$A_1 + A_2 + C_1 + C_2 e^{-\alpha d} = 0 \quad (\text{P.3.71a})$$

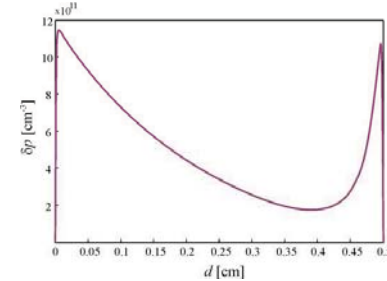
$$A_1 e^{r_1 d} + A_2 e^{r_2 d} + C_1 e^{-\alpha d} + C_2 = 0 \quad (\text{P.3.71b})$$

odnosno,

$$A_1 = \frac{C_1 (e^{-\alpha d} - e^{r_1 d}) + C_2 (1 - e^{(r_2 - \alpha)d})}{e^{r_2 d} - e^{r_1 d}} = 1.18 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{P.3.72a})$$

$$A_2 = \frac{C_1 (e^{r_1 d} - e^{-\alpha d}) - C_2 (1 - e^{(r_1 - \alpha)d})}{e^{r_2 d} - e^{r_1 d}} = 1.06 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3} \quad (\text{P.3.72b})$$

Do istih rezultata došli bismo naravno i zamenjujući $s \rightarrow \infty$ u (P.3.68) a zatim rešavajući sistem jednačina (P.3.67a) i (P.3.67b). Raspodela šupljina $\delta_p(z)$ u ovom slučaju prikazana je na Sl. P.3.11.



Sl. P.3.11 Raspodela neravnotežnih šupljina u uzorku kada je brzina površinske rekombinacije $s \rightarrow \infty$

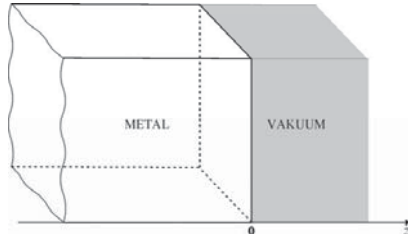
4. POVRŠINSKE I KONTAKTNE POJAVE. HETEROSPOJEVI

Prilikom dovođenja u kontakt dva različita čvrsta tela, u graničnom sloju dolazi do razmene nosilaca između njih i javljaju se odgovarajuće potencijalne barijere, što dovodi do promena osobina materijala ne samo u okolini spoja, već i u celoj zapremini. Pod **heterospojem** podrazumeva se spoj materijala čije se fizičke i hemijske osobine, kao i atomski sastav, značajno razlikuju (npr. spoj metala i poluprovodnika, ili spoj dva poluprovodnika koji imaju bitno različit hemijski sastav). S druge strane, pojam **homospoj** označava da se sa različitih strana granične površine nalaze fizički, hemijski i atomski identični materijali, ili oni koji se razlikuju u zanemaljivoj meri (npr. p-n spoj kod koga se sa obe strane radi o istom poluprovodniku, samo dopiranom primesama različitog tipa čija koncentracija je zanemarljiva u odnosu na koncentraciju atoma osnovnog materijala).

U opštem slučaju, granična površina dva materijala predstavlja složen kvazidvodimenzionalni sistem sa specifičnom atomskom geometrijom, uz mogućnost pojave interdifuzije i formiranja dodatnih hemijskih jedinjenja na površini. U okviru ovog teksta, razmatračemo samo idealizovani slučaj gde se pretpostavlja da su spojevi potpuno atomski oštri i ne dolazi do mešanja komponenti dve materijala. U dosadašnjoj analizi elektronske strukture čvrstih tela, energije nosilaca smo najčešće izražavali u odnosu na dno provodne zone ili, za šupljine, u odnosu na vrh valentne zone posmatranog materijala, i od značaja su bile relativne pozicije elektronskih nivoa a ne i njihove apsolutne vrednosti. Međutim, kada se radi o kontaktu različitih materijala, postaju značajne i apsolutne pozicije nivoa energije, pa je radi određivanja međusobnog položaja zona u datim materijama neophodno da se njihove energije izraze u odnosu na neki opšti referentni nivo. U tom cilju uvodi se **vakuumski nivo** energije koji odgovara vrednosti energije koju bi elektron imao van materijala, u vakuumu. Ovaj nivo energije je naravno jedinstven, tj. ne zavisi od posmatranog materijala koji se analizira izolovano pre formiranja heterospoja. Položaj dna provodne zone posmatranog materijala u odnosu na vakuumski nivo predstavlja **elektronski afinitet**. Ukoliko je elektronski afinitet pozitivan, onda je to energije koju treba uložiti da bi se elektron sa dna provodne zone u materijalu prebacio na vakuumski nivo, tj. izveo iz materijala, odnosno to je energija koju bi elektron dobio pri ulasku u čvrsto telo. Elektronski afinitet nam omogućava da odredimo međusobne pozicije provodne i valentne zone u različitim materijalima. Još jedna karakteristična veličina je i **izlazni rad** koji se definiše kao energetska razlika Fermi-jevog nivoa u kristalu i vakuumskog nivoa. Kod metala, izlazni rad predstavlja minimalnu energiju koja je potrebna da bi se elektron sa Fermi-jevog nivoa u kristalu prebacio na vakuumski nivo (na $T = 0\text{ K}$). Analizu heterospojeva započecemo razmatranjem njihove najjednostavnije varijante koju predstavlja kontakt čvrstog tela (metala ili poluprovodnika) i vakuumu.

4.1 HETEROSPOJ METAL-VAKUUM. TERMOELEKTRONSKA EMISIJA

Posmatrajmo uzorak metala koji je ograničen u z -pravcu, tako da se u ravni $z = 0$ nalazi granična površina kojom se metal nalazi u kontaktu sa spoljašnjom sredinom koju čini vakuum (Sl. 4.1).



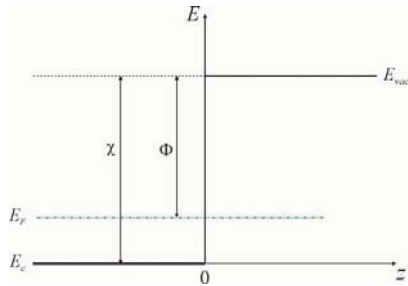
Sl. 4.1 Ilustracija heterospoja metal-vakuum

Referentni nivo za energiju ćemo postaviti u dno provodne zone metala, a vakuumski nivo ćemo označiti sa E_{vac} . Pošto se posmatrani sistem nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže Fermi-jev nivo će biti jedinstven (E_F na Sl. 4.2). Izlazni rad definisan je na sledeći način:

$$\Phi = E_{vac} - E_F \quad (4.1)$$

i može zavistiti od temperature, a ukoliko bi se radilo o kontaktu dopiranog poluprovodnika i vakuuma, izlazni rad bi zavisio i od vrste i koncentracije primesa. Elektronski afinitet χ predstavlja karakteristiku samo datog materijala i određen je izrazom

$$\chi = E_{vac} - E_c \quad (4.2)$$



Sl. 4.2 Ilustracija izlaznog rada i elektronskog afiniteta metala

Izračunaćemo gustinu struje nosilaca koja protiče kroz spoj (gde se u ovom primeru zapravo radi o struji elektrona koji izlaze iz metala), polazeći od opšteg izraza za gustinu struje u slučaju termo-dinamičke ravnoteže (2.38):

$$\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} f_{FD}(\vec{k}) \vec{v} dV_k \quad (4.3)$$

pri čemu je $f_{FD}(\vec{k})$ ravnotežna funkcija raspodele. Za razliku od beskonačnog kristala kod koga je ova struja jednaka nuli, kod polubeskonačnog kristala (kao što će biti pokazano) ova struja ima konačnu vrednost. Pošto je uzorak metala neograničen u ravni x - y , kretanje elektrona u x - i y -pravcu je slobodno, pa će komponente gustine struje J_x i J_y biti jednake nuli (podintegralne funkcije u odgovarajućim komponentama izraza (4.3) su neparne po k_x tj. k_y). Prema tome, možemo pisati:

$$\vec{J} = J_z \vec{i}_z \quad (4.4a)$$

$$J_z = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(k)} f_{FD}(\vec{k}) v_z dV_k \quad (4.4b)$$

Pretpostavićemo da je zavisnost energije od talasnog vektora parabolična, sa izotropnom efektivnom masom:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (4.5)$$

U tom slučaju je $\vec{v} = \hbar \vec{k} / m^*$, pa izraz (4.4b) dobija oblik:

$$J_z = -\frac{e}{4\pi^3} \left(\frac{m^*}{\hbar} \right)^3 \int_{(v)} f_{FD}(E = \frac{m^{*2} v^2}{2}, E_F) v_z dv_x dv_y dv_z \quad (4.6)$$

Nadalje ćemo razmatrati samo apsolutnu vrednost struje pošto nam je smer proticanja poznat:

$$\begin{aligned} J &= |J_z| = \frac{e}{4\pi^3} \left(\frac{m^*}{\hbar} \right)^3 \int_{(v)} \frac{v_z dv_x dv_y dv_z}{e^{\left(\frac{m^{*2} v^2}{2} - E_F\right)/k_B T} + 1} \\ &= 2e \left(\frac{m^*}{\hbar} \right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{v_{z0}}^{\infty} \frac{v_z dv_z}{e^{\left(\frac{m^{*2} v^2}{2} - E_F\right)/k_B T} + 1} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Komponente brzine v_x i v_y mogu imati sve vrednosti od $-\infty$ do ∞ , dok je komponenta brzine v_z ograničena s donje strane, zbog činjenice da struju mogu činiti samo elektroni čija je kinetička energija veća od potencijalne barijere koja postoji na spoju

$$\frac{m^* v^2}{2} \geq \chi \quad (4.8)$$

Dakle, u struji učestvuju samo elektroni čija energija je veća od vakuumskeg nivoa, a svakako se podrazumeva da je $v_z > 0$, s obzirom da u vakuumu nema elektrona. Izraz (4.8) se može napisati i u obliku

$$\frac{m^* (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2} \geq \chi \quad (4.9a)$$

odakle jasno sledi

$$v_{z_{\min}} = v_{z_0} = \sqrt{\frac{2\chi}{m^*}} \quad (4.9b)$$

Posmatrajmo razliku energija ($m^* v^2 / 2 - E_F$) u argumentu Fermi-Dirac-ove funkcije u izrazu (4.7) i potražimo njenu minimalnu vrednost:

$$\frac{m^* v^2}{2} - E_F \geq \frac{m^* v_x^2}{2} - E_F \geq \frac{m^* v_{z_0}^2}{2} - E_F = \chi - E_F = \Phi \quad (4.10)$$

Dakle, najmanja vrednost ovog faktora jednaka je izlaznom radu Φ , koji je kod metala reda veličine eV, što značajno prevazilazi vrednost termalne energije $k_B T$. Prema tome, imamo:

$$e^{\frac{(m^* v^2 - E_F)/k_B T}{k_B T}} \geq e^{\Phi/k_B T} \gg 1 \quad (4.11)$$

pa možemo pisati

$$\begin{aligned} J &= 2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{v_{z_0}}^{\infty} e^{\frac{(E_F - m^* v^2)/k_B T}{k_B T}} v_z dv_z \\ &= 2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 e^{\frac{E_F}{k_B T}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m^* v_x^2}{2k_B T}} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m^* v_y^2}{2k_B T}} dv_y \int_{v_{z_0}}^{\infty} e^{-\frac{m^* v_z^2}{2k_B T}} v_z dv_z \end{aligned} \quad (4.12)$$

Integrali po komponentama v_x i v_y imaju formu Poisson-ovog integrala $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2 x^2} dx = \sqrt{\pi} / a$, dok integral po v_z daje $\frac{k_B T}{m^*} e^{-m^* v_{z_0}^2 / 2k_B T} = \frac{k_B T}{m^*} e^{-\chi / k_B T}$, pa izraz (4.12) postaje:

$$J = \frac{4em^* \pi (k_B T)^2}{h^3} e^{\frac{(\chi - E_F)}{k_B T}} \quad (4.13)$$

Ova struja elektrona koji izlaze iz metala i idu u vakuum naziva se **struja termoelektronske emisije** i na osnovu Sl. 4.2 vidimo da je određena veličinom izlaznog rada ($\chi - E_F = \Phi$):

$$J = \frac{4em^* \pi (k_B T)^2}{h^3} e^{-\frac{\Phi}{k_B T}} \quad (4.14)$$

Izraz (4.14) naziva se **Richardson-Dushman-ova formula** i uobičajeno je da se zapisuje u obliku:

$$J = AT^2 e^{-\frac{\Phi}{k_B T}}, \quad A = \frac{4em^* \pi k_B^2}{h^3} \quad (4.15)$$

i važi kako za metale, tako i za poluprovodnike. Pošto u struji učestvuju elektroni čija energija je daleko veća od periodične potencijalne energije kristalne rešetke, možemo smatrati da je $m^* \approx m_0$, što daje

$$A \approx 120.2 \frac{A}{\text{cm}^2 \text{K}^2} \quad (4.16)$$

Ako je npr. veličina izlaznog rada $\Phi = 2.5 \text{ eV}$, tada dobijamo $J(T = 300 \text{ K}) \approx 10^{-36} \text{ A/cm}^2$ i $J(T = 1500 \text{ K}) \approx 0.8 \text{ A/cm}^2$, što znači da je struja termoelektronske emisije zanemarljiva na sobnoj temperaturi, dok na višim temperaturama postaje značajna. Ova činjenica predstavlja jedan od osnova za konstruisanje elektronskih cevi.

4.2 HETEROSPOJ METAL-POLUPROVODNIK. SCHOTTKY-JEVA APROKSIMACIJA

Prilikom analize heterospoja metal-poluprovodnik, pretpostavićemo da se radi o poluprovodniku n -tipa, kao i da je izlazni rad metala (M) veći od izlaznog rada poluprovodnika (S):

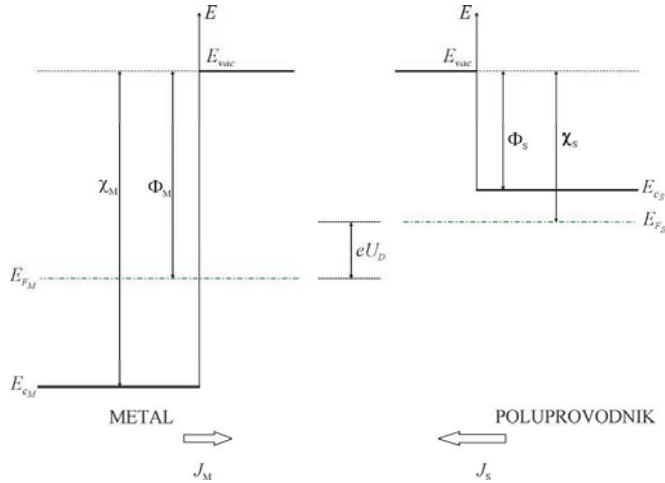
$$\Phi_M > \Phi_S \quad (4.17)$$

Posmatrajmo prvo energetske nivoe u metalu i poluprovodniku pre njihovog spajanja, izražene u odnosu na vakuumski nivo, kao što je prikazano na Sl. 4.3. Struja elektrona koji bi izlazili iz metala i išli u vakuum (J_M), kao i struja elektrona koji bi išli iz poluprovodnika u vakuum (J_S), mogu se odrediti uz pomoć Richardson-Dushman-ove jednačine (4.15):

$$J_M = AT^2 e^{-\frac{\Phi_M}{k_B T}} \quad (4.18a)$$

$$J_S = AT^2 e^{-\frac{\Phi_S}{k_B T}} \quad (4.18b)$$

I kod poluprovodnika je veličina izlaznog rada reda veličine nekoliko eV, pa je opravdana aproksimacija Fermi-Dirac-ove raspodele Maxwell-Boltzmann-ovom. Pošto je u posmatranom primeru izabrano $\Phi_M > \Phi_S$, svakako da sledi $J_S > J_M$, što znači da će prilikom spajanja metala i poluprovodnika, u prelaznom procesu doći do efektivnog prelaska elektrona iz poluprovodnika u metal. Međutim, kako je koncentracije elektrona u metalu veoma velika, neće se osetiti ovaj priliv elektrona i možemo smatrati da njegova koncentracija ostaje praktično nepromenjena, a samim tim i položaj Fermi-jevog nivoa praktično fiksiran. S druge strane, poluprovodnik će biti osiromašen elektronima u blizini spoja i ovo smanjene koncentracije u poluprovodniku procentualno nije zanemarljivo.



Sl. 4.3 Energetski dijagram metala i poluprovodnika n-tipa pre formiranja njihovog spoja, za slučaj kada je izlazni rad metala veći od izlaznog rada poluprovodnika

Po završetku prelaznih procesa i uspostavljanju termodinamičke ravnoteže, struja kroz heterospoj će biti jednaka nuli a Fermi-jev nivo mora biti jedinstven za celu strukturu. Pošto je obogaćenje elektronima u metalu zanemarljivo u odnosu na njegovu koncentraciju, i kao što je

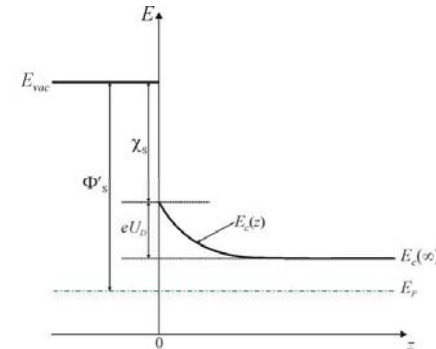
već naglašeno, Fermi-jev nivo ne menja svoju poziciju, to znači da će jedinstveni Fermi-jev nivo u stanju ravnoteže zapravo biti Fermi-jev nivo metala ($E_F = E_{F_M}$). Izlazni rad poluprovodnika na površini se prema tome povećava i izjednačava sa izlaznim radom metala, čime se i postiže da je ukupna struja kroz spoj jednaka nuli ($J_M = J_S$). Vrednost izlaznog rada poluprovodnika na površini (Φ'_S) se može napisati u obliku:

$$\Phi'_S = \Phi_S + eU_D = \Phi_M \quad (4.19)$$

a veličina U_D naziva se kontaktna razlika potencijala. Odgovarajuća potencijalna energija eU_D jednaka je razlici Fermi-jevog nivoa u poluprovodniku pre spajanja i zajedničkog Fermi-jevog nivoa na spoju (koji se poklapa sa E_{F_M}), što se može videti sa Sl. 4.3.

$$eU_D = \Phi_M - \Phi_S = (E_{vac} - E_{F_M}) - (E_{vac} - E_{F_S}) = E_{F_S} - E_{F_M} > 0 \quad (4.20)$$

Pošto u poluprovodniku dolazi do značajnog smanjenja koncentracije elektrona u okolini spoja, mora doći i do pomeranja dna provodne zone – u ovom slučaju krivljenja naviše, što odgovara “udaljenju” od Fermi-jevog nivoa (Sl. 4.4). Podizanje dna provodne zone u tački spoja je toliko da veličina energetskog afiniteta u poluprovodniku ostane očuvana, s obzirom da je to karakteristika posmatranog materijala, kao i energetski procep, i mora biti konstantna duž poluprovodnika. Ovo znači da će i zavisnost vrha valentne zone od koordinate duž poluprovodnika biti istog oblika kao i zavisnost dna provodne zone i ovakva promena $E_{cS}(z)$ i $E_{vS}(z)$ naziva se **krivljenje zona**.

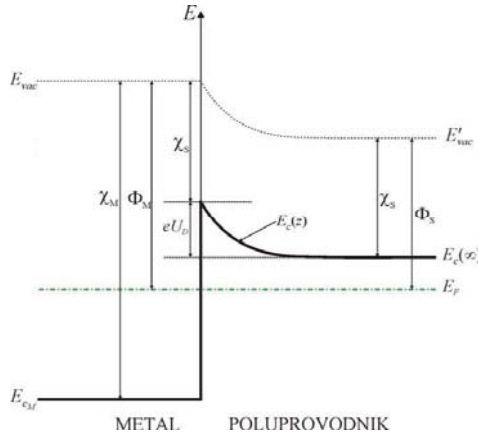


Sl. 4.4 Krivljenje dna provodne zone u poluprovodniku u okolini spoja

Nakon formiranja heterospoja, Fermi-jev nivo u poluprovodniku se izjednačio sa Fermi-jevim nivoom metala, što u primeru sa Sl. 4.3 znači da se spustio za vrednost eU_D u odnosu na poziciju koju je imao pre spajanja. Dovoljno daleko od spoja poluprovodnik je neizmenjen, pa veličine kao što su koncentracija elektrona (odnosno udaljenost Fermi-jevog nivoa od dna provodne zone), elektronski afinitet, izlazni rad i sl. moraju biti neizmenjene tj. zadržati vrednosti kao pre spajanja:

$$\chi_S - \Phi_S = E_{cs} - E_{Fs} = E_c(\infty) - E_F \quad (4.21)$$

Da bi ovo bilo ispunjeno, znači da je moralo doći do spuštanja dna provodne zone u poluprovodniku daleko od spoja za isti iznos za koji se spustio i Fermi-jev nivo. S druge strane, da bi elektronski afinitet, kao karakteristika isključivo datog poluprovodničkog materijala ostao konstantan, neophodno je da dođe i do spuštanja vakuumnog nivoa tj. nivoa energije koji elektron treba da dostigne da bi postao slobodan (Sl. 4.5).



Sl. 4.5 Energetski dijagram heterospoja metal-poluprovodnik, za slučaj prikazan na Sl. 4.3

Pošto u metalu ne dolazi do značajnijih promena, analiziraćemo samo raspodelu naelektrisanja u poluprovodniku u okolini spoja. U uslovima totalne nedegeneracije, koncentracija elektrona u poluprovodniku data je izrazom:

$$n(z) = B_c e^{\frac{E_F - E_c(z)}{k_B T}} \quad (4.22)$$

Definišimo veličinu

$$\delta E_c = E_c(z) - E_c(\infty) \quad (4.23)$$

koja predstavlja promenu položaja dna provodne zone u odnosu na vrednost dovoljno daleko od spoja ($z \rightarrow \infty$). Tada izraz za koncentraciju (4.22) možemo napisati u obliku:

$$n(z) = B_c e^{\frac{[E_F - E_c(\infty)] - \delta E_c(z)}{k_B T}} = B_c e^{\frac{E_F - E_c(\infty)}{k_B T}} e^{-\frac{\delta E_c(z)}{k_B T}} \quad (4.24)$$

Pretpostavimo da je poluprovodnik uniformno dopiran donorima koncentracije N_D i da su na posmatranoj temperaturi sve primese jonizovane. U tom slučaju dovoljno daleko od spoja važi:

$$n(\infty) = B_c e^{\frac{E_F - E_c(\infty)}{k_B T}} \approx N_D \quad (4.25)$$

pa izraz (4.24) postaje

$$n(z) \approx N_D e^{-\frac{\delta E_c(z)}{k_B T}} \quad (4.26)$$

Promena položaja dna provodne zone sa koordinatom, rezultuje promenom potencijala elektrostatičke barijere $Y(z)$:

$$\delta E_c = -eY(z) \quad (4.27)$$

gde je $Y(z \rightarrow \infty) = 0$, Sl. 4.6. Prema tome, koncentraciju elektrona (4.25) možemo napisati u obliku:

$$n(z) = N_D e^{\frac{eY(z)}{k_B T}} \quad (4.28)$$

Gustina naelektrisanja u poluprovodniku iznosi:

$$\rho(z) = e[N_D - n(z)] \quad (4.29)$$

gde je pretpostavljeno da je koncentracija manjinskih nosilaca (šupljina) zanemarljiva, kao i da su sve primese jonizovane pa ukupno pozitivno naelektrisanje predstavljaju joni donora koncentracije N_D . Uz pomoć izraza (4.28) dobijamo:

$$\rho(z) = eN_D \left[1 - e^{-\frac{eY(z)}{k_B T}} \right] \quad (4.30)$$

Veza između zapremne gustoće naelektrisanja i elektrostatičkog potencijala $Y(z)$ određena je Poisson-ovom jednačinom:

$$\frac{d^2 Y(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (4.31)$$

Zamenom izraza (4.30) dolazimo do nelinearne diferencijalne jednačine po nepoznatom potencijalu $Y(z)$:

$$\epsilon_r \epsilon_0 \frac{d^2 Y(z)}{dz^2} = -eN_D \left[1 - e^{-\frac{eY(z)}{k_B T}} \right] \quad (4.32)$$

koja se rešava uz granične uslove:

$$Y(z \rightarrow \infty) = 0 \quad (4.33a)$$

$$-eY(0) = eU_D \quad (4.33b)$$

Jednačina (4.32) nema analitičko rešenje u opštem slučaju i može se dalje analizirati samo uz primenu odgovarajućih aproksimacija. Koristićemo poznatu **aproksimaciju totalnog osiromašenja** koju je predložio W. S. Schottky. Smatraćemo da postoji neka tačka udaljena od spoja za veličinu w , tako da se za $z > w$ ne osećaju promene u raspodeli naelektrisanja pod uticajem spoja i važi potpuna električna neutralnost (Sl. 4.6). S druge strane, pretpostavljamo da je u oblasti $z \leq w$ proces prelaska elektrona iz poluprovodnika u metal bio toliko intenzivan da je u oblasti $z \leq w$ proces prelaska elektrona iz poluprovodnika u metal bio toliko intenzivan da je koncentracija preostalih slobodnih elektrona približno jednaka nuli. Oblast $z \leq w$ naziva se **oblast prostornog naelektrisanja**, i nadalje ćemo smatrati da jedino prisutno naelektrisanje u njoj predstavljaju nepokretni pozitivno naelektrisani joni donora. Konkretno, aproksimacija totalnog osiromašenja podrazumeva da jednačinu (4.32) dalje rešavamo uzimajući:

$$n(z) \approx N_D, \quad Y(z) = 0 \Rightarrow e^{-\frac{eY(z)}{k_B T}} = 1, \quad z > w \quad (4.34a)$$

$$n(z) \approx 0, \quad e^{-\frac{eY(z)}{k_B T}} \ll 1, \quad z \leq w \quad (4.34b)$$

Prema tome, u oblasti totalne osiromašenosti elektronima, Poisson-ova jednačina se svodi na oblik:

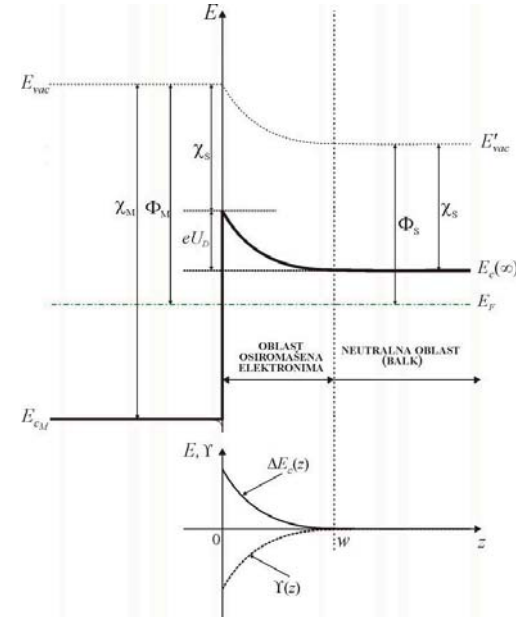
$$\frac{d^2 Y(z)}{dz^2} = -\frac{eN_D}{\epsilon_r \epsilon_0}, \quad z \leq w \quad (4.35)$$

a odgovarajući granični uslovi glase

$$Y(w) = 0 \quad (4.36a)$$

$$\left. \frac{dY}{dz} \right|_{z=w} = 0 \quad (4.36b)$$

Drugi granični uslov potiče od činjenice da unutrašnje električno polje, koje nastaje razdvajanjem naelektrisanja na spoju, mora da iščezava dovoljno daleko od granične površine spoja – tamo gde su svi uslovi isti kao u balku, otuda $(dY/dz)|_{z \rightarrow \infty} = 0$. U suprotnom bismo imali neku struju različitu od nule.



Sl. 4.6 Ilustracija aproksimacije totalnog osiromašenja za heterospoj metal-poluprovodnik

Rešenje jednačine (4.35) je oblika

$$Y(z) = -\frac{eN_D z^2}{2\epsilon_r \epsilon_0} + Az + B, \quad z \leq w \quad (4.37)$$

gde su A i B konstante koje se određuju na osnovu (4.36a) i (4.36b).

$$\left. \frac{dY}{dz} \right|_{z=w} = -\frac{eN_D w}{\epsilon_r \epsilon_0} + A = 0 \quad (4.38a)$$

$$Y(w) = \frac{eN_D w^2}{2\epsilon_r \epsilon_0} + B = 0 \quad (4.38b)$$

Konačno, traženi elektrostatički potencijal možemo napisati u obliku:

$$Y(z) = \begin{cases} -\frac{eN_D}{2\epsilon_r \epsilon_0} (z-w)^2, & z \leq w \\ 0, & z > w \end{cases} \quad (4.39)$$

Potrebno je još odrediti i širinu oblasti prostornog naelektrisanja. U tački spoja ($z=0$) imamo:

$$\begin{aligned} \Delta E_c(0) &= \Phi_M - \Phi_S = eU_D = -eY(0) \\ \Rightarrow Y(0) &= -\frac{\Phi_M - \Phi_S}{e} < 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

Upoređujući ovaj izraz sa vrednošću $Y(0)$ dobijenom na osnovu (4.39), zaključujemo da je

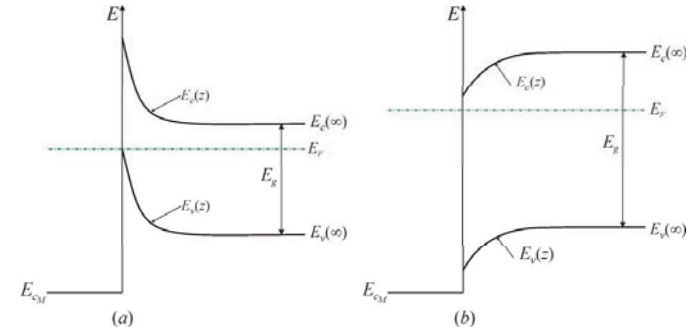
$$w = \sqrt{\frac{2\epsilon_r \epsilon_0 (\Phi_M - \Phi_S)}{e^2 N_D}} \quad (4.41)$$

Složeniji modeli pokazuju da je prethodni izraz potrebno korigovati tako što se razlika $\Phi_M - \Phi_S$ zamenjuje sa $\Phi_M - \Phi_S - k_B T$. Pošto je $k_B T \sim 26 \text{ meV}$ na sobnoj temperaturi, što se može zanemariti u odnosu na $\Phi_M - \Phi_S$, vidimo da je korišćenje aproksimacije totalnog osiromašenja sasvim opravdano.

U oblasti osiromašenja elektronima u poluprovodniku (oblast prostornog naelektrisanja), koncentracija šupljina može se zanemariti sve dok je dno valentne zone značajno ispod Fermi-jevog nivoa. Međutim, ukoliko je razlika $\Phi_M - \Phi_S$ veoma velika i krivljenje zona izrazito, može se desiti da se vrh valentne zone približi Fermi-jevom nivou toliko da koncentracija šupljina postane veća od koncentracije elektrona pa šupljine formiraju inverzioni sloj u

poluprovodniku u okolini spoja. S druge strane, ukoliko bi izlazni rad u poluprovodniku bio veći od izlaznog rada metala ($\Phi_S > \Phi_M$), tada bi elektroni prelazili iz metala u poluprovodnik sve do uspostavljanja ravnoteže i izjednačavanja Fermi-jevog nivoa na vrednosti koja odgovara metalu. U tom slučaju došlo bi do krivljenja zona naniže, a oblast poluprovodnika u okolini spoja bi se obogaćivala elektronima, odnosno došlo bi do njihove akumulacije. Pojava inverzije i akumulacije ilustrovane su na Sl. 4.7.

U slučaju akumulacije (poluprovodnik n-tipa, $\Phi_S > \Phi_M$) i Poisson-ova jednačina ostaje nepromenjena, u formi (4.32). Kako se koncentracija elektrona povećava idući ka površini, u odnosu na balkovsku vrednost, u ovom slučaju se ne pojavljuje oblast osiromašenja, pa se ne može primeniti aproksimacija totalno osiromašenja, već se Poisson-ova jednačina može rešavati isključivo numeričkim metodama. Slučaj inverzije obuhvata 1) inverziju šupljina u n-tipu poluprovodnika ($\Phi_M > \Phi_S$) ili 2) inverziju elektrona u p-tipu poluprovodnika ($\Phi_M < \Phi_S$). U oba slučaja manjinski nosioci se koncentrišu uz površinu i taj sloj je vrlo tanak (nekoliko nanometara). Kako je električno polje u ovim slojevima vrlo veliko, manjinski nosioci se nalaze u vrlo uskim potencijalnim jamama, pa je neophodan kvantno-mehanički tretman, što znači da pored Poisson-ove jednačine treba rešavati i Schrödinger-ovu jednačinu.



Sl. 4.7 a) Pojava inverzije tipa većinskih nosilaca u okolini spoja metal-poluprovodnik kada je izlazni rad u metalu značajno veći od izlaznog rada u poluprovodniku b) Obogaćivanje poluprovodnika elektronima u okolini spoja, u slučaju kada je izlazni rad poluprovodnika veći od izlaznog rada metala

4.3 HETEROSPOJ POLUPROVODNIK-POLUPROVODNIK

Razmatraćemo spoj dva poluprovodnička materijala sa različitim vrednostima energetskeg procepa, elektronskog afiniteta i izlaznog rada, čiji su relevantni energetski nivoi pre spajanja prikazani na Sl. 4.8. Ograničićemo se na situaciju kada su poluprovodnici različitog tipa provodnosti, pretpostavljajući da je prvi uniformno dopiran akceptorskim primesama koncentracije P_A , a drugi uniformno dopiran donorima koncentracije N_D . Razlika energetskih procepa ova dva poluprovodnika je $\Delta E_g = |E_{g1} - E_{g2}|$ i ona se raspodeljuje na diskontinuitet provodne zone $\Delta E_c = |E_{c1} - E_{c2}|$ i diskontinuitet valentne zone $\Delta E_v = |E_{v1} - E_{v2}|$. Pretpostavićemo da važi sledeće:

1) Elektronski afinitet u poluprovodniku p -tipa je manji od elektronskog afiniteta poluprovodnika n -tipa

$$\chi_1 < \chi_2 \quad (4.42a)$$

$$\Rightarrow E_{c1} > E_{c2} \quad (4.42b)$$

2) vrednosti energetskeg procepa u materijalima su takve da je ispunjeno

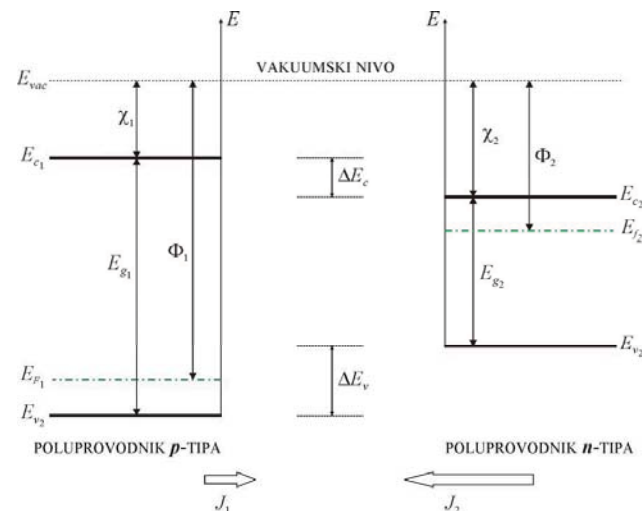
$$\chi_1 + E_{g1} < \chi_2 + E_{g2} \quad (4.43a)$$

$$\Rightarrow E_{v2} > E_{v1} \quad (4.43b)$$

3) odnos izlaznih radova je

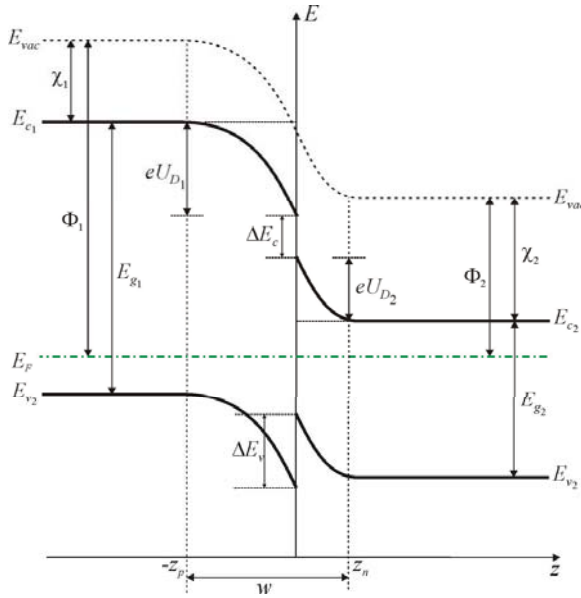
$$\Phi_1 > \Phi_2 \quad (4.44)$$

Pošto je izlazni rad u poluprovodniku n -tipa manji, na osnovu izraza (4.15) zaključujemo da je $J_2 > J_1$, pa će nakon formiranja spoja elektroni efektivno prelaziti iz materijala 2 u materijal 1. Ovo znači da će se doći do obogaćivanja elektronima poluprovodnika p -tipa (tj. smanjiće se koncentracija šupljina) u okolini spoja, dok će se s druge strane poluprovodnik n -tipa oslobađati elektrona u uskom sloju u okolini granične površine. Na taj način, u blizini površine poluprovodnik 1 će biti osiromašen šupljinama, dok će poluprovodnik 2 u blizini površine biti osiromašen elektronima.



Sl. 4.8 Energetski dijagram poluprovodnika p - i n -tipa pre formiranja spoja

Po uspostavljanju termodinamičke ravnoteže Fermi-jev nivo mora biti jedinstven i njegov položaj će biti negde između Fermi-jevih nivoa izolovanih poluprovodnika sa Sl. 4.8. Zbog toga će doći do krivljenja zona u oba materijala. Pretpostavimo da se Fermi-jev nivo u poluprovodniku 2 spustio za vrednost eU_{D2} , a da se u poluprovodniku 1 podigao za vrednost eU_{D1} . Očigledno je da će se položaji dna provodne zone daleko od spoja, u odnosu na vrednosti sa Sl. 4.8, promeniti za iste tolike iznose (Sl. 4.9). Krivljenje vrha valentne zone u potpunosti prati promenu dna provodne zone u oba materijala, pošto energetska procep kao karakteristika materijala mora imati istu vrednost u svakoj tački. Slično tome, da bi se održale vrednosti χ i Φ , dolazi do krivljenja vakuumskeg nivoa. Koristićemo aproksimaciju totalnog osiromašenja, pretpostavljajući da u oblasti prostornog naelektrisanja $[-z_p, z_n]$ nema slobodnih nosilaca naelektrisanja. U poluprovodniku p -tipa u okolini spoja, za $-z_p \leq z < 0$, nalaze se samo negativno naelektrisani joni akceptora koncentracije P_A (smatramo da su sve primese jonizovane). Analogno, za $0 < z \leq z_n$ imamo samo pozitivno naelektrisane jone donora koncentracije N_D . Izvan oblasti prostornog naelektrisanja, podrazumevamo potpunu neutralnost ($\rho(z) = 0$).



Sl. 4.9 Energetski dijagram heterospoja poluprovodnika p-tipa i poluprovodnika n-tipa

Prema Sl. 4.9, ukupna razlika potencijalne energije na spoju iznosi:

$$eU_D = eU_{D1} + eU_{D2} = \Phi_1 - \Phi_2 \quad (4.45)$$

Kako je

$$\Phi_1 = \chi_1 + E_{c1}(-\infty) - E_F \quad (4.46a)$$

$$\Phi_2 = \chi_2 + E_{c2}(\infty) - E_F \quad (4.46b)$$

sledi:

$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + [E_{c1}(-\infty) - E_F] - [E_{c2}(\infty) - E_F] \quad (4.47)$$

U aproksimaciji totalnog osiromašenja, koncentracije većinskih nosilaca u poluprovodnicima 1 i 2 na granicama oblasti prostornog naelektrisanja možemo napisati u obliku:

$$p(-z_p) = B_{v1} e^{\frac{[E_{c1}(-\infty) - E_F] - E_{v1}}{k_B T}} \approx P \quad (4.48a)$$

$$n(z_n) = B_{c2} e^{\frac{E_F - E_{c2}(\infty)}{k_B T}} \approx N_D \quad (4.48b)$$

odakle je

$$E_{c1}(-\infty) - E_F = k_B T \ln \frac{P}{B_{v1}} + E_{g1} \quad (4.49a)$$

$$E_F - E_{c2}(\infty) = k_B T \ln \frac{N_D}{B_{c2}} \quad (4.49b)$$

Kombinovanjem sa izrazom (4.47) dobijamo:

$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + k_B T \ln \left(\frac{PN_D}{B_{v1} B_{c2}} \right) + E_{g1} \quad (4.50)$$

Prethodni izraz može se napisati i u obliku:

$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + k_B T \ln \left(\frac{PN_D}{B_{v1} B_{c2}} e^{\frac{E_{g1}}{k_B T}} \right) \quad (4.51)$$

Pošto je sopstvena koncentracija u poluprovodniku p-tipa određena izrazom $n_i^2 = B_{v1} B_{c1} e^{\frac{E_{g1}}{k_B T}}$, dalje imamo:

$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + k_B T \ln \left(\frac{N_D P B_{c1}}{n_i^2 B_{c2}} \right) \quad (4.52)$$

Na osnovu definicije konstante B_{c1} , u obliku (1.149), zaključujemo da je

$$\frac{B_{c1}}{B_{c2}} = \left(\frac{m_{n1}}{m_{n2}} \right)^{3/2} \quad (4.53)$$

što konačno daje

$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + k_B T \ln \left(\frac{N_D P}{n_i^2} \right) + \frac{3}{2} \ln \frac{m_n}{m_p} \quad (4.54)$$

gde je U_D ukupna razlika potencijala između balkovskih oblasti materijala n - i p -tipa, tj.

$$U_D = Y(z_n) - Y(-z_p) \equiv U_{sp} \quad (4.55)$$

U aproksimaciji totalnog osiromašenja, Poisson-ova jednačina dobija oblik:

$$\frac{d^2 Y(z)}{dz^2} = \begin{cases} \frac{eP}{\epsilon_n \epsilon_0}, & -z_p \leq z < 0 \\ -\frac{eN_D}{\epsilon_p \epsilon_0}, & 0 < z \leq z_n \end{cases} \quad (4.56)$$

a odgovarajući granični uslovi su

$$\left. \frac{dY}{dz} \right|_{z=-z_p} = 0, \quad \left. \frac{dY}{dz} \right|_{z=z_n} = 0 \quad (4.57)$$

Integracijom jednačine (4.56) dobijamo

$$\frac{dY(z)}{dz} = \begin{cases} \frac{ePz}{\epsilon_n \epsilon_0} + C_1, & -z_p \leq z < 0 \\ -\frac{eN_D z}{\epsilon_p \epsilon_0} + C_2, & 0 < z \leq z_n \end{cases} \quad (4.58)$$

Integracione konstante C_1 i C_2 određujemo uz pomoć uslova (4.57):

$$C_1 = \frac{ePz_p}{\epsilon_n \epsilon_0}, \quad C_2 = \frac{eN_D z_n}{\epsilon_p \epsilon_0} \quad (4.59)$$

pa je

$$\frac{dY(z)}{dz} = \begin{cases} \frac{eP}{\epsilon_n \epsilon_0} (z + z_p), & -z_p \leq z < 0 \\ \frac{eN_D}{\epsilon_p \epsilon_0} (-z + z_n), & 0 < z \leq z_n \end{cases} \quad (4.60)$$

Nova integracija daje

$$\frac{dY(z)}{dz} = \begin{cases} \frac{eP}{\epsilon_n \epsilon_0} (z^2 / 2 + z_p z) + C_3, & -z_p \leq z < 0 \\ \frac{eN_D}{\epsilon_p \epsilon_0} (-z^2 / 2 + z_n z) + C_4, & 0 < z \leq z_n \end{cases} \quad (4.61)$$

a konstante C_3 i C_4 ćemo odrediti uzimajući referentni nivo za potencijal u balkovskoj oblasti poluprovodnika p -tipa:

$$Y(-z_p) = 0, \quad Y(z_n) = U_D \quad (4.62)$$

na osnovu čega je konačno

$$Y(z) = \begin{cases} \frac{eP}{2\epsilon_n \epsilon_0} (z + z_p)^2, & -z_p \leq z < 0 \\ -\frac{eN_D}{2\epsilon_p \epsilon_0} (z - z_n)^2 + U_D, & 0 < z \leq z_n \end{cases} \quad (4.63)$$

Potrebno je odrediti i granice oblasti prostornog naelektrisanja $-z_p$ i z_n , što ćemo postići korišćenjem uslova neprekidnosti potencijala i dielektričnog pomeraja, primenjenih u tački spoja $z = 0$.

$$Y(0^-) = Y(0^+) \quad (4.64a)$$

$$D(0^-) = D(0^+) \quad (4.64b)$$

gde je $D(z) = \epsilon_r \epsilon_0 K(z) = -\epsilon_r \epsilon_0 dY/dz$, a $K(z)$ je električno polje. Ukoliko uslovi (4.64a) i (4.64b) ne bi bili ispunjeni, imali bismo beskonačni skok površinske gustine naelektrisanja u Poisson-ovoj jednačini (4.31). Prema tome, imamo

$$\frac{eP}{2\epsilon_n \epsilon_0} z_p^2 = -\frac{eN_D}{2\epsilon_p \epsilon_0} z_n^2 + U_D \quad (4.65a)$$

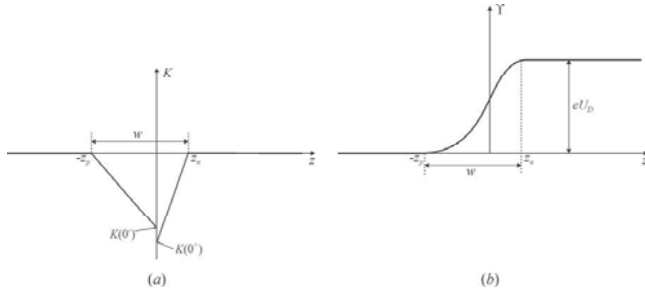
$$Pz_p = N_D z_n \quad (4.65b)$$

Izraz (4.65b) smo mogli dobiti i iz jednačine globalne neutralnosti, izjednačavajući ukupno pozitivno i negativno naelektrisanje u oblasti prostornog naelektrisanja ($e z_p S P = e z_n S N_D$), gde je S površina poprečnog preseka. Iz (4.65a) i (4.65b) može se izračunati

$$z_p = \sqrt{\frac{2U_D}{eP} \frac{1}{\frac{1}{\epsilon_1 \epsilon_0} + \frac{P}{N_D \epsilon_2 \epsilon_0}}} \quad (4.66a)$$

$$z_n = \sqrt{\frac{2U_D}{eN_D} \frac{1}{\frac{N_D}{\epsilon_1 \epsilon_0 P} + \frac{1}{\epsilon_2 \epsilon_0}}} \quad (4.66a)$$

Električno polje i potencijal $\Upsilon(z)$ u analiziranoj strukturi prikazani su na Sl. 4.10. Vidimo da u ravni spoja postoji diskontinuitet električnog polja koji je posledica razlike relativnih dielektričnih konstanti u poluprovodnicima (ϵ_1 i ϵ_2).

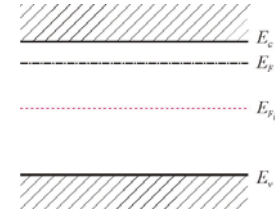


Sl. 4.10 a) Električno polje i b) potencijal duž heterospoja poluprovodnika p- i n-tipa

4.4 NEHOMOGENI POLUPROVODNIK

Posmatračemo trodimenzionalni poluprovodnik koji je beskonačan i izotropan ali nehomogeno dopiran atomima primesa, što znači da se koncentracija slobodnih nosilaca menja sa koordinatom. Analiziraćemo samo slučaj totalne nedegeneracije, kada se Fermi-Dirac-ova funkcija raspodele može aproksimirati Maxwell-Boltzmann-ovom, pretpostavljajući takode da su na posmatranoj temperaturi sve primese jonizovane.

Podsetimo se prvo poznate situacije kada je poluprovodnik homogeno dopiran donorima koncentracije N_D i akceptorima koncentracije P_A ($\vec{\nabla}_r N_D = 0$, $\vec{\nabla}_r P_A = 0$), a dijagram relevantnih energetske nivoa izgleda kao na Sl. 4.11.



Sl. 4.11 Zonski dijagram homogenog poluprovodnika

Koncentracije elektrona i šupljina u ovom homogenom poluprovodniku date su izrazima:

$$n = B_c e^{\frac{E_f - E_c}{k_B T}} \quad (4.67a)$$

$$p = B_v e^{\frac{E_v - E_f}{k_B T}} \quad (4.67b)$$

a sopstveni Fermi-jev nivo bi se nalazio na energiji

$$E_{F_i} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_p^*}{m_n^*} \quad (4.68)$$

Uvešćemo novu promenljivu ϕ koja predstavlja razliku između energije Fermi-jevog nivoa (usled prisustva primesa) i sopstvenog Fermi-jevog nivoa:

$$\phi = E_{F_i} - E_{F_i} \quad (4.69)$$

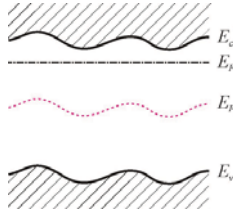
Koncentracija elektrona se može napisati u obliku:

$$n = B_c e^{\frac{E_f - E_c}{k_B T}} e^{\frac{E_c - E_f}{k_B T}} = B_c e^{\frac{E_f - E_c}{k_B T}} e^{\frac{\phi}{k_B T}} = n_i e^{\frac{\phi}{k_B T}} \quad (4.70)$$

gde je $n_i = B_c e^{\frac{E_c - E_f}{k_B T}}$ (prema (1.233a) i (1.234)) sopstvena koncentracija elektrona, a $\tilde{\phi} = \phi / k_B T$. Na sličan način koncentraciju šupljina možemo prikazati u formi:

$$p = B_v e^{\frac{E_v - E_f}{k_B T}} e^{\frac{E_f - E_v}{k_B T}} = n_i e^{-\tilde{\phi}} \quad (4.71)$$

Vratimo se sada na slučaj nehomogeno dopiranog poluprovodnika, kod koga je raspodela primesa oblika $N_D(\vec{r})$ i $P_A(\vec{r})$, pa su i koncentracije elektrona i šupljina funkcije koordinate ($n = n(\vec{r})$, $p = p(\vec{r})$). Ponovo ćemo smatrati da su na datoj temperaturi svi primesni atomi jonizovani, i da se poluprovodnik nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže kada je Fermi-jev nivo konstantan ($E_F \neq E_c(\vec{r})$). S obzirom da je Fermi-jev nivo fiksiran, da bi koncentracije nosilaca mogle da se menjaju mora doći do promene položaja dna provodne zone ($E_c = E_c(\vec{r})$), a naravno i do identičnog krivljenja vrha valentne zona da bi energetski procep kao karakteristika poluprovodničkog materijala ostao nepromenjen (Sl. 4.12). Vrednost sopstvenog Fermi-jevog nivoa, čije rastojanje od dna provodne zone je takođe određeno samo osobinama osnovnog materijala, menjaće se na isti način.



Sl. 4.12 Krivljenje zona u nehomogeno dopiranom poluprovodniku

Poisson-ova jednačina će u slučaju nehomogenog poluprovodnika imati oblik:

$$\nabla^2 \Upsilon(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (4.72)$$

gde je $\Upsilon(\vec{r})$ potencijal koji je posledica nehomogenosti, a zapreminska gustina naelektrisanja iznosi:

$$\rho(\vec{r}) = e[N_D(\vec{r}) + p(\vec{r}) - P_A(\vec{r}) - n(\vec{r})] \quad (4.73)$$

Određićemo vezu između potencijala $\Upsilon(\vec{r})$ i uvedene veličine $\varphi(\vec{r})$. Na osnovu izraza (4.69) imamo:

$$E_F(\vec{r}) = E_F - \varphi(\vec{r}) \quad (4.74)$$

a s druge strane, pošto se $E_F(\vec{r})$ menja na identičan način kao $E_c(\vec{r})$, možemo napisati

$$E_F(\vec{r}) = -e\Upsilon(\vec{r}) + Const \quad (4.75)$$

Odavde je

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_r (E_F - \varphi(\vec{r})) &= \vec{\nabla}_r (-e\Upsilon(\vec{r}) + Const) \\ \Rightarrow \vec{\nabla}_r \varphi(\vec{r}) &= e\vec{\nabla}_r \Upsilon(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.76)$$

Zamenom u Poisson-ovu jednačinu (4.72) dobijamo:

$$\nabla^2 \Upsilon(\vec{r}) = \frac{1}{e} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (4.77)$$

Prethodni izraz možemo napisati u obliku:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) &= -\frac{e^2}{\epsilon_r \epsilon_0} [N_D(\vec{r}) + p(\vec{r}) - P_A(\vec{r}) - n(\vec{r})] \\ &= -\frac{e^2 n_i}{\epsilon_r \epsilon_0} \left[\frac{n(\vec{r}) - p(\vec{r})}{n_i} - \frac{N_D(\vec{r}) - P_A(\vec{r})}{n_i} \right] \end{aligned} \quad (4.78)$$

Na osnovu (4.70) i (4.71) prvi sabirak u uglastoj zagradi iznosi

$$\frac{n - p}{n_i} = e^{\bar{\varphi}} - e^{-\bar{\varphi}} = 2 \sinh \bar{\varphi} \quad (4.79)$$

pa (4.78) postaje

$$\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = -\frac{e^2 n_i}{\epsilon_r \epsilon_0} [2 \sinh \bar{\varphi} - \tilde{N}(\vec{r})] \quad (4.80)$$

gde je

$$\tilde{N}(\vec{r}) = \frac{N_D(\vec{r}) - P_A(\vec{r})}{n_i} \quad (4.81)$$

Jednačinu (4.80) podelićemo termalnom energijom $k_B T$, što će dati:

$$\nabla^2 \bar{\varphi}(\vec{r}) = -\frac{e^2 n_i}{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T} [2 \sinh \bar{\varphi} - \tilde{N}(\vec{r})] \quad (4.82)$$

Veličina $\sqrt{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T / (e^2 n_i)}$ predstavlja karakteristiku svakog (nedopiranog) poluprovodnika, nezavisnu od vrste i količine primesa, i naziva se **Debye-eva besprimesna dužina**:

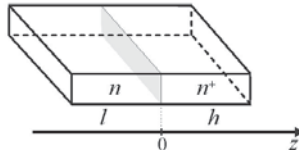
$$\Lambda_{D_1}^2 = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T}{e^2 n_i} \quad (4.83)$$

Prema tome, izraz (4.82) možemo napisati u formi:

$$\Lambda_{D_1}^2 \nabla^2 \tilde{\varphi}(\vec{r}) = 2 \sinh \tilde{\varphi} - \tilde{N}(\vec{r}) \quad (4.84)$$

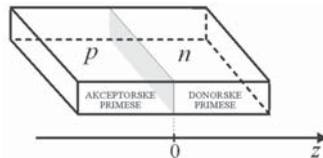
Ova nelinearna diferencijalna jednačina se zbog složenosti može rešiti samo u specijalnim slučajevima, a mi ćemo u okviru ovog teksta razmatrati isključivo jednodimenzionalne probleme. Uobičajeno je da se analiziraju sledeća dva profila nehomogenog dopiranja:

1) l-h prelaz (engl., light-heavy), gde se u poluprovodniku mogu izdvojiti dve oblasti dopirane primesama istog tipa ali značajno različitih koncentracija, kao što je ilustrovano na Sl. 4.13 za slučaj donorskih primesa. Ovaj prelaz može biti interesantan u nekim primenama ali ga mi ovde nećemo detaljnije analizirati.



Sl. 4.13 Primer l-h prelaza

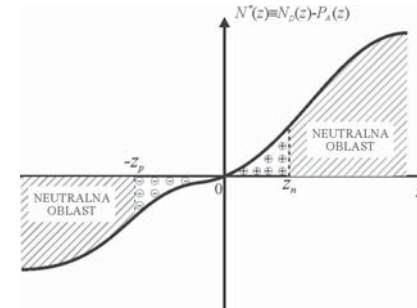
2) p-n prelaz kod koga je jedna oblast poluprovodnika dopirana samo akceptorskim, a druga samo donorskim primesama (Sl. 4.14). Ovaj tip prelaza ima mnogo veći praktičan značaj pa ćemo za njega izložiti detaljan postupak određivanja profila potencijala na spoju, širine oblasti prostornog naelektrisanja i ostalih relevantnih veličina.



Sl. 4.14 Ilustracija p-n prelaza

Pretpostavimo da je profil primesa ($N^*(z) = N_D(z) - P_A(z)$) u okolini p-n spoja oblika kao na Sl. 4.15. Elektroni iz n-oblasti prelaziće na levu stranu tačke metalurškog prelaza ($z=0$), gde im je koncentracija manja, a za sobom će ostaviti pozitivno naelektrisane jonizovane donorske primese. Istovremeno, šupljine će se prebacivati iz p- u n-oblast, ostavljajući negativne akceptorske jone. Do ravnoteže će doći kada unutrašnje električno polje u okolini spoja, koje se javlja između suprotno naelektrisanih jona primesa, uravnoteži difuzionu težnju nosilaca da prelaže u oblast manje koncentracije. Koristićemo aproksimaciju totalnog osiromašenja, smatrajući da se oblast prostornog naelektrisanja prostire u granicama ($-z_p, z_n$), pa uzimamo:

- 1) $\rho(z) = 0, z \leq -z_p \wedge z \geq z_n$
- 2) $n(z) = p(z) = 0, \rho(z) = e[P_A(z) - N_D(z)], -z_p < z < z_n$



Sl. 4.15 Profil primesa kod p-n spoja

Vrednosti funkcije φ na granici oblasti prostornog naelektrisanja označićemo na sledeći način:

$$\varphi(-z_p) = \varphi_p \quad (4.85a)$$

$$\varphi(z_n) = \varphi_n \quad (4.85b)$$

dok za koncentracije, prema aproksimaciji totalnog osiromašenja, možemo pisati

$$p(-z_p) = P_A(-z_p) \quad (4.86a)$$

$$n(z_n) = N_D(z_n) \quad (4.86b)$$

Na osnovu izraza (4.70) i (4.71) dalje imamo:

$$N_D(z_n) = n_i e^{\frac{\varphi_n}{k_B T}} \Rightarrow \varphi_n = k_B T \ln \frac{N_D(z_n)}{n_i} \quad (4.87a)$$

$$P_A(-z_p) = n_i e^{\frac{\varphi_p}{k_B T}} \Rightarrow \varphi_p = -k_B T \ln \frac{P_A(-z_p)}{n_i} \quad (4.87b)$$

Razlika potencijala na granicama oblasti prostornog naelektrisanja, prema (4.76) iznosi:

$$U_D = \frac{\varphi_n - \varphi_p}{e} = \frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_D(z_n) P_A(-z_p)}{n_i^2} \quad (4.88)$$

Zamenjujući izraz za sopstvenu koncentraciju (1.240), dobijamo

$$U_D = \frac{E_g}{e} + \frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_D(z_n) P_A(-z_p)}{B_s B_v} \quad (4.89)$$

Pošto je obično $N_D(z_n) P_A(-z_p) < B_s B_v$, sledi da je maksimalna vrednost ovog napona

$$U_{D_{\max}} = \frac{E_g}{e} \quad (4.90)$$

što znači da bi za Si ili Ge p-n spojeve $U_{D_{\max}}$ iznosio 1.1eV odnosno 0.72eV, respektivno.

U aproksimaciji totalnog osiromašenja, p-n spoj se sastoji od totalno osiromašene oblasti ($-z_p < z < z_n$) i dve polubeskonačne neutralne oblasti ($-\infty < z < -z_p$ i $z_n < z < \infty$). Poisson-ova jednačina u ovim oblastima je oblika:

$$\Lambda_D^2 \frac{d^2 \tilde{\varphi}}{dz^2} = \begin{cases} -\tilde{P}_A(z), & -z_p < z < 0 \\ \tilde{N}_D(z), & 0 < z < z_n \\ -e^{-\tilde{\varphi}} + \tilde{P}_A(z), & -\infty < z < -z_p \\ e^{\tilde{\varphi}} - \tilde{N}_D(z), & z_n < z < -z_p \end{cases} \quad (4.91)$$

Analizirajmo samo jednačinu za oblast $z > z_n$:

$$\Lambda_D^2 \frac{d^2 \tilde{\varphi}}{dz^2} = e^{\tilde{\varphi}} - \frac{N_D}{n_i} \quad (4.92)$$

Ako važi potpuna lokalna neutralnost u celoj oblasti, mora biti ispunjeno $\rho(z) = 0$ za sve vrednosti $z > z_n$, odnosno $e^{\tilde{\varphi}} - N_D / n_i = 0$, što znači da je i

$$\Lambda_D^2 \frac{d^2 \tilde{\varphi}}{dz^2} = 0 \quad (4.93)$$

Iz izraza (4.93) jednostavno sledi

$$\tilde{\varphi} = C_1 z + C_2 \quad (4.94)$$

pri čemu su C_1 i C_2 realne konstante. Ako se ova zavisnost $\tilde{\varphi}$ unese u jednačinu $e^{\tilde{\varphi}} - N_D / n_i = 0$, nalazi se profil primesa za koji je za sve $z > z_n$ ispunjen uslov lokalne neutralnosti $\rho(z) = 0$:

$$\frac{N_D(z)}{n_i} = e^{\frac{C_1 z + C_2}{k_B T}} = C_0 e^{\frac{C_1 z}{k_B T}} \quad (4.95)$$

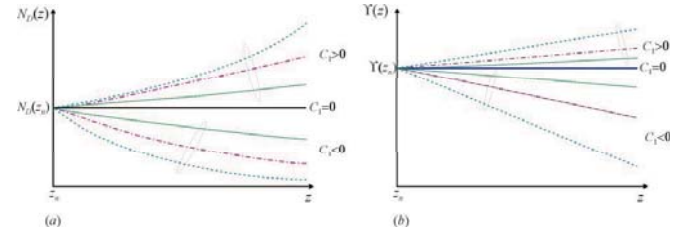
Ako koncentracija primesa u tački z_n iznosi $N_D(z_n)$, tada izraz (4.95) dobija oblik

$$N_D(z) = N_D(z_n) e^{\frac{C_1(z-z_n)}{k_B T}} \quad (4.96)$$

dok je

$$\varphi(z) = k_B T C_1 (z - z_n) + \varphi(z_n) \quad (4.97)$$

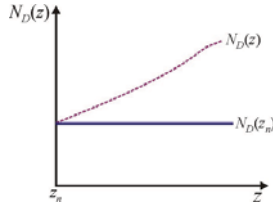
pri čemu je naravno $N_D(z_n) = n_i e^{\frac{\varphi(z_n)}{k_B T}}$. Ako je profil primesa za $z > z_n$ dat u obliku (4.96), tada se odgovarajući potencijal $Y(z)$, prema (4.76), menja sa koordinatom na način opisan izrazom (4.97) i u svakoj tački oblasti $z > z_n$ važi uslov lokalne neutralnosti, što je ilustrovano na Sl. 4.15.



Sl. 4.16 a) Profil primesa i b) profil potencijala u oblasti $z > z_n$

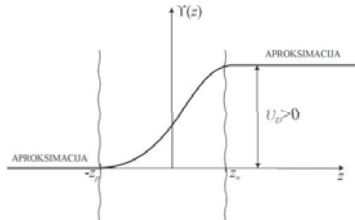
Sa Sl. 4.16. vidi se da je potencijal konstantan za sve vrednosti $z > z_n$, ako i samo ako je $N_D(z) = N_D(z_n)$, tj. ako je dopiranje u posmatranoj oblasti uniformno (ova situacija prikazana je punom linijom na Sl. 4.16). U svim ostalim slučajevima kada je oblast $z > z_n$ neutralna, potencijal je linearna funkcija koordinate z .

Profili primesa koji se sreću u realnim p-n spojevima manje ili više odstupaju od eksponencijalnog profila (uključujući i slučaj $C_1 = 0$, tj. $N_D(z) = const$), što znači da oblast $z > z_n$ strogo govoreći nije neutralna. U literaturi se ovaj problem prevazilazi na sledeći način: pretpostavi se kao da je koncentracija primesa za $z > z_n$ jednaka vrednosti u tački z_n , tj. $N_D(z_n)$, videti Sl. 4.17. Tada je oblast $z > z_n$ približno neutralna – uvodi se termin **kvazineutralnost**, a potencijal konstantan. Ovakva aproksimacija je utoliko tačnija ukoliko je profil primesa bliži konstantnoj vrednosti, tj. $N_D(z)/dz$ manje (funkcija je sporopromenljiva).



Sl. 4.17 Zavisnost profila primesa za $z > z_n$ (isprekidana linija) i aproksimacija ove zavisnosti sa $N_D(z) = N_D(z_n)$

Primenom identične aproksimacije na p-oblast, u uslovima kvazineutralnosti potencijal duž p-n spoja se može približno prikazati kao na Sl. 4.18.



Sl. 4.18 Profil potencijala duž p-n spoja, aproksimiran konstantnim vrednostima u neutralnim oblastima

Razmatraćemo funkciju profila primesa u obliku:

$$N^*(z) = \begin{cases} N_D(z), & z > 0 \\ P_A(z), & z < 0 \end{cases} \quad (4.98)$$

Za određivanje granica oblasti prostornog naelektrisanja neophodno je uzeti u obzir sledeća dva uslova: uslov globalne neutralnosti i uslov jednakosti ukupnih dipolnih momenata u oblasti prostornog naelektrisanja.

1) Jednačina globalne neutralnosti

U oblasti prostornog naelektrisanja mora biti zadovoljen uslov globalne neutralnosti koji se u opštem slučaju može napisati u obliku:

$$\int_{(V')} \rho(z) dV = 0 \quad (4.99)$$

odnosno, u konkretnom slučaju

$$\int_{-z_p}^{z_n} \rho(z) S dz = 0 \quad (4.100)$$

gde je S površina poprečnog preseka poluprovodnika. Ovaj uslov se dalje može prikazati kao

$$\int_{-z_p}^0 -P_A(z) dz + \int_0^{z_n} N_D(z) dz = 0 \quad (4.101a)$$

$$\Rightarrow \int_{-z_p}^0 P_A(z) dz = \int_0^{z_n} N_D(z) dz \quad (4.101b)$$

ili u kompaktnom obliku

$$\int_{-z_p}^{z_n} N^*(z) dz = 0 \quad (4.102)$$

Na osnovu izraza (4.101b) zaključujemo da površine ispod krive na Sl. 4.15, u p- i n- delu oblasti prostornog naelektrisanja, moraju biti jednake.

2) Jednačina ukupnog dipolnog momenta

Ukupni dipolni momenat možemo napisati u obliku:

$$D_M = \int_{-z_p}^{z_n} \rho(z)z dz \quad (4.103)$$

Pošto na osnovu Poisson-ove jednačine imamo

$$\frac{dK}{dz} = \frac{\rho(z)}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (4.104)$$

dalje možemo pisati:

$$D_M = \int_{-z_p}^{z_n} \epsilon_r \epsilon_0 \frac{dK}{dz} z dz = \epsilon_r \epsilon_0 \int_{-z_p}^{z_n} dK z dz \quad (4.105)$$

Parcijalnom integracijom izraza (4.105) dobijamo:

$$D_M = \epsilon_r \epsilon_0 \left[z_n K(z_n) + z_p K(-z_p) + \int_{-z_p}^{z_n} K dz \right] \quad (4.106)$$

Pošto je

$$\int_{-z_p}^{z_n} K dz = -[Y(z_n) - Y(-z_p)] = -\frac{1}{e}[\varphi(z_n) - \varphi(-z_p)] = -\frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_D(z_n) P_A(-z_p)}{n_i^2} \quad (4.107)$$

i kako su polja $K(z_n)$ i $K(-z_p)$ u aproksimaciji totalnog osiromašenja jednaka nuli, sledi

$$D_M = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T}{e} \ln \frac{N_D(z_n) P_A(-z_p)}{n_i^2} \quad (4.108)$$

Izraz (4.103) za ukupni dipolni momenat može se napisati i u obliku:

$$D_M = \int_{-z_p}^{z_n} e N^*(z) z dz \quad (4.109)$$

pa izjednačavanjem sa (4.109) dolazimo do jednačine:

$$\int_{-z_p}^{z_n} e N^*(z) z dz = \epsilon_r \epsilon_0 U_D \quad (4.110)$$

pri čemu je U_D određeno izrazom (4.89). Na osnovu izraza (4.110), zajedno sa jednačinom (4.102), određuju se granice oblasti prostornog naelektrisanja $-z_p$ i z_n . Za poznate vrednosti

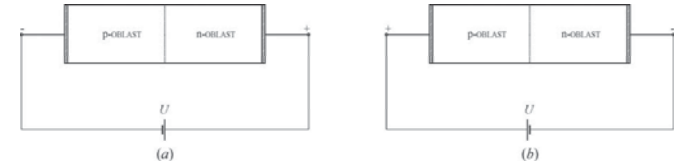
$N_D(z_n)$, $P_A(-z_p)$, n_i i T , izračunava se ugrađeni napon na spoju U_D , a zatim se iz sistema jednačina

$$\int_{-z_p}^{z_n} N^*(z) dz = 0 \quad (4.111a)$$

$$\int_{-z_p}^{z_n} e N^*(z) z dz = \epsilon_r \epsilon_0 U_D \quad (4.111b)$$

izračunava širina oblasti prostornog naelektrisanja.

Ukoliko je na p-n spoj primenjen spoljašnji napon U , tada se menja širina oblasti prostornog naelektrisanja tj. imamo $z_p = z_p(U)$, $z_n = z_n(U)$, pa se prema tome menja i ugrađeni napon na spoju $U_D = U_D(U)$. U zavisnosti od smera spoljašnjeg električnog polja razlikujemo inverzno i direktno polarisani p-n spoj (Sl. 4.19).



Sl. 4.19 Ilustracija a) inverzno polarisanog i b) direktno polarisanog p-n spoja

Jednačina (4.111b) će u ovom slučaju dobiti oblik:

$$\int_{-z_p}^{z_n} N^*(z) z dz = \frac{\epsilon_r \epsilon_0}{e} (U_D - U) \quad (4.112)$$

gde je $U > 0$ za direktnu polarizaciju, a $U < 0$ za inverznu.

Analiziraćemo samo slučaj inverzne polarizacije jer se tada, sa dovoljnom tačnošću, može primeniti aproksimacija totalnog osiromašenja. Sve jednačine u ovom poglavlju izvedene su pretpostavljajući važenje ove aproksimacije. Slučaj direktne polarizacije je znatno složeniji zbog proticanja značajne struje kroz p-n spoj i ovde ga nećemo razmatrati.

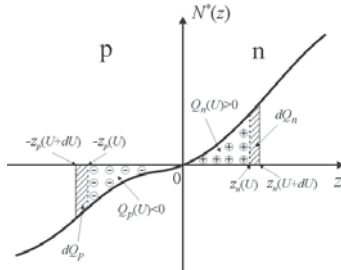
4.4.1 Kapacitivnost p-n spoja

Kod p-n spoja se mogu definisati *kapacitivnost oblasti prostornog naelektrisanja*, koja se zasniva na činjenici da dolazi do promene količine naelektrisanja u oblasti prostornog naelektrisanja sa promenom inverznog spoljašnjeg napona, i *difuziona kapacitivnost*, čiji je uzrok injekcija većinskih nosilaca u p- i n-oblast pri direktnoj polarizaciji. U ovom tekstu difuziona kapacitivnost neće biti detaljnije analizirana.

Posmatračemo inverzno polarisani p-n spoj, prikazan na Sl. 4.19 a), i odredićemo **kapacitivnost oblasti prostornog naelektrisanja** koja se definiše na sledeći način:

$$C \equiv \left| \frac{dQ}{dU} \right| \quad (4.113)$$

gde je $Q = -Q_p = Q_n$ apsolutna vrednost ukupnog naelektrisanja u p- odnosno n-delu oblasti prostornog naelektrisanja, a $U < 0$. Kada se p-n spoj nalazi pod dejstvom inverznog napona, tada se povećava ukupno električno polje na spoju, što odgovara širenju oblasti prostornog naelektrisanja. Pri promeni napona za $dU < 0$ (tj. pri povećanju inverznog napona), dolazi do pomeranja granica $-z_p(U)$ i $z_n(U)$ na levu, odnosno desnu stranu, kao što je prikazano na Sl. 4.20.



Sl. 4.20 Promena širine oblasti prostornog naelektrisanja p-n spoja pod dejstvom spoljašnjeg inverznog napona

Ukupna količina naelektrisanja u p- i n- delovima oblasti prostornog naelektrisanja iznosi:

$$Q_p(U) = \int_{-z_p(U)}^0 \rho(z) S dz < 0 \quad (4.114a)$$

$$Q_n(U) = \int_0^{z_n(U)} \rho(z) S dz > 0 \quad (4.114b)$$

$$Q_n(U) = -Q_p(U) \quad (4.114c)$$

Diferenciraćemo gornje izraze po spoljašnjem naponu, pretpostavljajući da gustina naelektrisanja $\rho(z)$ ne zavisi od napona, što je ispunjeno u slučaju inverzne polarizacije u oblasti prostornog naelektrisanja, dok za direktne napone svakako ne bi važno.

$$\frac{Q_p(U)}{dU} = \frac{d}{dU} \int_{-z_p(U)}^0 \rho(z) S dz = S \frac{dz_p(U)}{dU} \rho(-z_p) > 0 \quad (4.115a)$$

$$\frac{Q_n(U)}{dU} = \frac{d}{dU} \int_0^{z_n(U)} \rho(z) S dz = S \frac{dz_n(U)}{dU} \rho(z_n) < 0 \quad (4.115b)$$

$$\frac{Q_n(U)}{dU} = -\frac{Q_p(U)}{dU} \quad (4.115c)$$

S druge strane, imamo i izraz za ukupni dipolni moment:

$$\int_{-z_p}^{z_n} \rho(z) z dz = \epsilon_r \epsilon_0 (U_D - U) \quad (4.116)$$

koji ćemo takođe diferencirati po U , što će dati

$$z_n \rho(z_n) \frac{dz_n(U)}{dU} - z_p \rho(-z_p) \frac{dz_p(U)}{dU} = \epsilon_r \epsilon_0 \left(\frac{dU_D}{dU} - 1 \right) \quad (4.117)$$

Kombinovanjem sa (4.115a)-(4.115c) dobijamo:

$$\frac{1}{S} \frac{dQ_n}{dU} (z_n + z_p) = \epsilon_r \epsilon_0 \left(\frac{dU_D}{dU} - 1 \right) \quad (4.118)$$

odakle sledi

$$\frac{dQ_n}{dU} = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 S}{z_n + z_p} \left(\frac{dU_D}{dU} - 1 \right) \quad (4.119)$$

Pošto je uvek $dU_D/dU < 1$, izraz u zagradi ima negativnu vrednost, pa kapacitivnost možemo konačno napisati u obliku:

$$C = \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 S}{z_n + z_p} \left(1 - \frac{dU_D}{dU} \right) \quad (4.120)$$

4.4.2 Određivanje profila primesa na osnovu merenja kapacitivnosti p-n spoja

U dosadašnjim razmatranjima pretpostavljeno je da je $N_D(z)$ poznata veličina i polazeći od te činjenice vršena je dalja analiza. Realno, nije uvek jednostavno unapred znati oblik zavisnosti $N_D(z)$ i postoji veliki broj metoda koje omogućavaju njeno određivanje. Pored destruktivnih metoda, koje naravno nisu uvek pogodno, postoji i niz nedestruktivnih metoda.

Jedna od nedestruktivnih metoda za određivanje profila primesa p-n spoja zasniva se na merenju kapacitivnosti oblasti prostornog naelektrisanja. Pretpostavićemo da su ispunjeni sledeći uslovi:

1) jedna oblast poluprovodnika je znatno jače dopirana od druge, što znači da će se oblast prostornog naelektrisanja praktično nalaziti na strani na kojoj je dopiranje slabije. Ako je npr. $P_A \gg N_D$, sledi da je $z_n(U) \gg z_p(U)$ da bi mogla biti zadovoljena globalna neutralnost.

2) ugrađeni napon na spoju U_D praktično ne zavisi od priključenog napona pa se može smatrati da je $dU_D/dU = 0$.

Takođe ćemo smatrati da su površina poprečnog preseka S i relativna dielektrična konstanta poluprovodnika ε_r poznate veličine.

Ukoliko su ispunjeni gornji uslovi, izraz za kapacitivnost (4.120) dobija oblik

$$C = \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 S}{z_n(U)} \quad (4.121)$$

a jednačina (4.117) postaje:

$$z_n \frac{dz_n(U)}{dU} N_D(z_n) = - \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0}{e} \quad (4.122)$$

Iz prethodnog izraza možemo odrediti vrednost koncentracije primesa na granici oblasti prostornog naelektrisanja za datu vrednost spoljašnjeg napona:

$$N_D(z_n) = - \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0}{e} \frac{1}{z_n(U) \frac{dz_n(U)}{dU}} = \quad (4.122)$$

Pošto je na osnovu (4.121)

$$z_n(U) = \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 S}{C(U)} \quad (4.123)$$

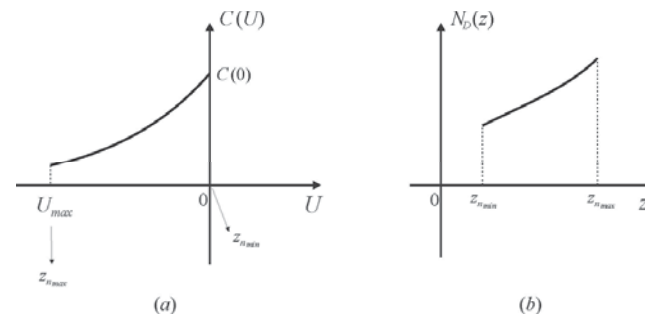
sledi

$$\frac{dz_n(U)}{dU} = - \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 S}{[C(U)]^2} \frac{dC(U)}{dU} \quad (4.124)$$

Kombinovanjem sa jednačinom (4.122) dobijamo:

$$N_D(z_n(U)) = \frac{[C(U)]^3}{eS^2 \varepsilon_r \varepsilon_0 \frac{dC(U)}{dU}} \quad (4.125)$$

Određivanje profila primesa vrši se tako što se snimi zavisnost kapacitivnosti u funkciji inverznog napona, koji se menja u granicama od 0 do neke maksimalne vrednosti koja mora biti dovoljno niža od probojnog napona. Na taj način dobija se zavisnost kao na Sl. 4.21a). Zatim se za posmatrane vrednosti napona izračunaju granice oblasti prostornog naelektrisanja $z_n(U)$ prema formuli (4.123) i vrednosti koncentracije primesa na osnovu (4.125), što daje odgovarajuću zavisnost nalik onoj sa Sl. 4.21b). Na ovaj način može se dobiti profil primesa samo za slabije dopiranu oblast i to u opsegu koordinata $(z_{n_{\min}}, z_{n_{\max}})$.



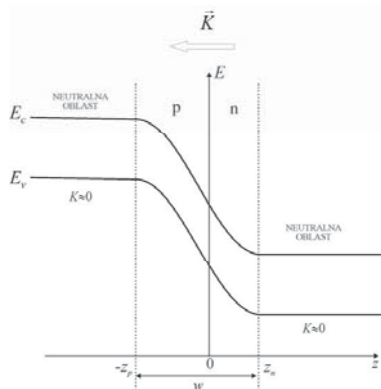
Sl. 4.21 Ilustracija određivanja profila primesa na bazi merenja kapacitivnosti p-n spoja a) Zavisnost kapacitivnosti od spoljašnjeg inverznog napona b) Izračunati profil primesa za dati opseg napona

Napomenimo na kraju da se može odrediti profil primesa i ako $P_i \gg N_D$ nije ispunjen. U tom slučaju mora se početi od eksperimentalno dobijene zavisnosti kapacitivnosti od temperature i napona, a zatim vrlo složenom analizom izvesti relacije koje povezuju koncentracije donora i akceptora i odgovarajuće zavisnosti širina u p- i n-oblasti.

4.4.3 Proboj p-n spoja

Kada se napon inverzne polarizacije na p-n spoju poveća iznad neke kritične vrednosti, dolazi do proboja, odnosno do naglog porasta broja slobodnih nosilaca u oblasti prostornog naelektrisanja, tj. velike struje koja protiče kroz spoj. Razmotrićemo dva najznačajnija mehanizma proboja do kojih dolazi pri najnižim vrednostima električnog polja, a to su **lavinski** ili **avalanche** (engl., lavina) proboj i **tunelski proboj**.

Kao što je poznato, pod dejstvom električnog polja u oblasti prostornog naelektrisanja dolazi do krivljenja zona i ovo krivljenje može biti vrlo izraženo kada se napon inverzne polarizacije približi kritičnim vrednostima, što je ilustrirano na Sl. 4.22.



Sl. 4.22 Zonski dijagram p-n spoja pod dejstvom veoma jakog spoljašnjeg električnog polja u slučaju inverzne polarizacije

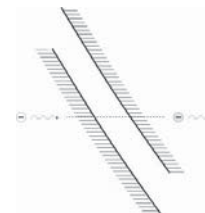
Do lavinskog proboja dolazi pri električnim poljima koja su reda $K \sim 10^5$ V/cm i dovoljno su jaka da dovedu do raskidanja kovalentnih veza u atomima osnovnog poluprovodnika i prebacivanja elektrona iz valentne u provodnu zonu (Sl. 4.23). Na taj način generišu se parovi

elektron-šupljina koji mogu dalje nastaviti proces jonizacije. Na primer, slobodni elektroni koji pod dejstvom polja dobiju veliko ubrzanje, u stanju su da putem sudara dovedu do dodatnog raskidanja veza i daljeg umnožavanja slobodnih nosilaca i taj proces naziva se lavinska jonizacija. Lavinski proboj odvija se praktično u oblasti prostornog naelektrisanja, pošto je u neutralnim oblastima $K \approx 0$, pa ne dolazi do lavinskih efekata.



Sl. 4.23 Generacija parova elektron-šupljina u procesu lavinske jonizacije

Tunelski (ili Zener-ov) proboj javlja se kao posledica velikog nagiba zona u oblasti prostornog naelektrisanja, pri jakim električnim poljima, kada je povećana verovatnoća za prelazak elektrona u provodnu zonu putem tunelskog efekta. Krivljenje zona dovodi do izjednačavanja energija elektrona u provodnoj i valentnoj zoni (Sl. 4.24), a efekat tunelovanja je naročito izražen kod p-n spojeva kod kojih su koncentracije primesa $P_A(z)$ i $N_D(z)$ visoke, pošto povećanje nivoa dopiranosti smanjuje širinu oblasti prostornog naelektrisanja i time sužava efektivnu barijeru koju elektroni treba da savladaju. Ovaj mehanizam proboja nećemo detaljnije analizirati u okviru ovog teksta.



Sl. 4.24 Tunelski efekat u inverzno polarisanom p-n spoju

Lavinski proboj

Pretpostavićemo da je nivo dopiranja u p-n spoju dovoljno nizak tako da pri posmatranoj vrednosti električnog polja ne dolazi do tunelskog proboja. Kao što je prethodno objašnjeno, pod dejstvom velikog inverznog napona može doći do prebacivanja valentnih elektrona u provodnu zonu, a ako su ti elektroni dovoljno ubrzani, oni mogu nastaviti proces generisanja novih parova elektron-šupljina. Da bi došlo do ostvarivanja lavinskog efekta potrebno je da širina oblasti prostornog naelektrisanja bude dovoljno velika, kako bi slobodan elektron na svom putu mogao da jonizuje dodatne atome pre nego što pređe u neutralnu oblast u kojoj ne dolazi do formiranja lavine nosilaca. Definisaćemo **koeficijent jonizacije** $\alpha_{n,p}$ kao broj parova elektron-šupljina koji je generisan putem jonizacije atoma poluprovodnika od strane jednog nosioca (elektrona ili šupljine) na putu dužine l , podeljen tom dužinom l :

$$\alpha_{n,p} = \frac{\text{BROJ PAROVA } e-h \text{ NA } l}{l} \quad (4.126)$$

Takođe ćemo definisati fluks elektrona i šupljina na sledeći način:

$$n^* = n v_n \quad (4.127a)$$

$$p^* = n v_p \quad (4.127b)$$

gde su v_n i v_p brzine elektrona i šupljina, respektivno, na posmatranom preseku, kao što je prikazano na Sl. 4.25. Dodatni fluks parova elektron-šupljina, koji se proizvede elektronima fluksa n^* na segmentu dz oblasti prostornog naelektrisanja, iznosi:

$$dn_1^* = dp_1^* = \alpha_n n^* dz \quad (4.128)$$

dok fluks parova elektron-šupljina proizveden šupljinama, na istom segmentu, iznosi:

$$dn_2^* = dp_2^* = \alpha_p p^* dz \quad (4.129)$$

$\alpha_n = \alpha_n(z)$ i $\alpha_p = \alpha_p(z)$ su koeficijenti jonizacije elektrona i šupljina, respektivno, definisani izrazom (4.126). Ukupan priraštaj fluksa šupljina predstavlja zbir doprinosa datih izrazima (4.128) i (4.129):

$$dp^* = dp_1^* + dp_2^* = \alpha_n n^* dz + \alpha_p p^* dz \quad (4.130)$$

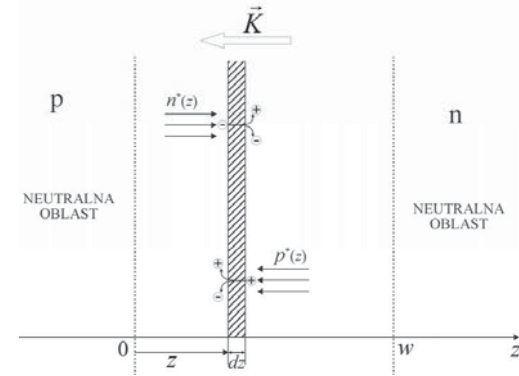
Na osnovu toga možemo pisati:

$$\frac{dp^*}{dz} = \alpha_n n^* + \alpha_p p^* \quad (4.131)$$

Kako je gustina struje šupljina data izrazom $J_p(z) = epv_p = ep^*(z)$, sledi:

$$\frac{dJ_p}{dz} = \alpha_n en^* + \alpha_p ep^* = \alpha_n J_n(z) + \alpha_p J_p(z) \quad (4.132)$$

gde je $J_n(z) = en^*(z)$ gustina struje elektrona.



Sl. 4.25 Ilustracija procesa lavinske jonizacije u oblasti prostornog naelektrisanja

Ukupna gustina struje, na osnovu jednačine kontinuiteta, nije funkcija koordinate z , odnosno

$$J = J_n(z) + J_p(z) = J(z) \quad (4.133)$$

Prema tome, izraz (4.132) možemo zapisati u formi:

$$\frac{dJ_p}{dz} = (\alpha_p - \alpha_n) J_p + \alpha_n J \quad (4.134)$$

a iz (4.133) sledi i:

$$\frac{dJ_n}{dz} = -\frac{dJ_p}{dz} = (\alpha_p - \alpha_n) J_n - \alpha_p J \quad (4.135)$$

Jednačine (4.134) i (4.135) predstavljaju linearne diferencijalne jednačine po strujama J_n i J_p . Poznato je da diferencijalna jednačina u obliku

$$y'(x) + \tilde{p}(x)y(x) + \tilde{q}(x) = 0 \quad (4.136)$$

sa graničnim uslovom

$$y(x_0) = y_0 \quad (4.137)$$

ima rešenje:

$$y(x) = e^{-\int_{x_0}^x \tilde{p}(x') dx'} \left[y_0 - \int_{x_0}^x \tilde{q}(x') e^{\int_{x_0}^{x'} \tilde{p}(x'') dx''} dx' \right] \quad (4.138)$$

Prvo ćemo odrediti struju J_p rešavajući jednačinu

$$\frac{dJ_p}{dz} - \alpha^* J_p - \alpha_n J = 0 \quad (4.139)$$

gde smo uveli oznaku $\alpha^*(z) = \alpha_p(z) - \alpha_n(z)$. Pretpostavićemo da u tački $z_0 = 0$ struja šupljina iznosi $J_p(0) = J_{p_0}$. Poređenjem (4.139) sa (4.136) zaključujemo da je

$$\tilde{p}(z) = -\alpha^*(z) \quad (4.140a)$$

$$\tilde{q}(z) = -\alpha_n(z) \quad (4.140b)$$

što daje rešenje za J_p u obliku

$$J_p(z) = e^{\int_0^z \alpha^*(z') dz'} \left[J_{p_0} + J \int_0^z \alpha_n(z') e^{-\int_0^{z'} \alpha^*(z'') dz''} dz' \right] \quad (4.141)$$

Jednačinu za gustinu struje elektrona (4.135) rešavaćemo koristeći granični uslov na desnom kraju oblasti prostornog naelektrisanja, tj. $J_n(z=w) = J_{n_0}$, pri čemu je sada $\tilde{p}(z) = -\alpha^*(z)$, $\tilde{q}(z) = \alpha_p(z)$, pa imamo

$$J_n(z) = e^{\int_0^z \alpha^*(z') dz'} \left[J_{n_0} - J \int_w^z \alpha_p(z') e^{-\int_w^{z'} \alpha^*(z'') dz''} dz' \right] \quad (4.142)$$

U tački $z = w$ izraz (4.141) ima vrednost

$$J_p(z) = e^{\int_0^w \alpha^*(z') dz'} \left[J_{p_0} + J \int_0^w \alpha_n(z') e^{-\int_0^{z'} \alpha^*(z'') dz''} dz' \right] = J - J_n(w) = J - J_{n_0} \quad (4.143)$$

odakle je moguće izraziti ukupnu struju J :

$$J = \frac{J_{n_0} + J_{p_0} e^{\int_0^w \alpha^*(z') dz'}}{1 - e^{\int_0^w \alpha^*(z') dz'} \cdot \int_0^w \alpha_n(z') e^{-\int_0^{z'} \alpha^*(z'') dz''} dz'} \quad (4.144)$$

S druge strane, za $z = 0$, izraz (4.142) dobija vrednost:

$$J_n(0) = e^{\int_0^0 \alpha^*(z') dz'} \left[J_{n_0} - J \int_w^0 \alpha_p(z') e^{-\int_w^{z'} \alpha^*(z'') dz''} dz' \right] = J - J_p(0) = J - J_{p_0} \quad (4.145)$$

odakle je

$$J = \frac{J_{p_0} + J_{n_0} e^{-\int_0^w \alpha^*(z') dz'}}{1 - e^{-\int_0^w \alpha^*(z') dz'} \cdot \int_0^w \alpha_p(z') e^{\int_0^{z'} \alpha^*(z'') dz''} dz'} \quad (4.146)$$

Do proboja nastaje kada $J \rightarrow \infty$, odnosno kada imenilac u izrazima (4.144) i (4.146) postane jednak nuli:

$$e^{\int_0^w \alpha^*(z') dz'} \cdot \int_0^w \alpha_n(z') e^{-\int_0^{z'} \alpha^*(z'') dz''} dz' = 1 \quad (4.147)$$

ili

$$e^{-\int_0^w \alpha^*(z') dz'} \cdot \int_0^w \alpha_p(z') e^{\int_0^{z'} \alpha^*(z'') dz''} dz' = 1 \quad (4.148)$$

Prethodne dve jednačine definišu **uslov proboja**, a mogu se napisati i u obliku:

$$\int_0^w \alpha_n(z') e^{-\int_0^{z'} \alpha'(z'') dz''} dz' = 1 \quad (4.149a)$$

$$\int_0^w \alpha_p(z') e^{-\int_0^{z'} \alpha'(z'') dz''} dz' = 1 \quad (4.149b)$$

Pošto veličine w , α_n , i α_p zavise od električnog polja, odnosno od veličine inverznog napona na p-n spoju ($w = w(U)$, $\alpha_n = \alpha_n(U)$, $\alpha_p = \alpha_p(U)$), jednačine (4.149a) i (4.149b) mogu se izraziti i u formi:

$$f(U_b) = 1 \quad (4.150)$$

gde je U_b **probojni napon** (engl., breakdown voltage). Izrazi (4.149a) i (4.149b) su međusobno ekvivalentni i daju isti rezultat za uslov proboja. Ukoliko su koeficijenti jonizacije elektrona i šupljina međusobno jednaki ($\alpha_n(z) = \alpha_p(z) = \alpha(z)$), ovi izrazi se pojednostavljuju i svode na jednačinu

$$\int_0^w \alpha(z') dz' = 1 \quad (4.151)$$

Zavisnost koeficijenta jonizacije od električnog polja je u opštem slučaju veoma složena, pa se najčešće koriste aproksimativne formule, na primer:

$$\alpha = \alpha_0 \left(\frac{K}{K_0} \right)^m \quad (4.152)$$

ili nešto tačniji izraz

$$\alpha = A e^{\left(\frac{b}{K} \right)^m} \quad (4.153)$$

gde su m , α_0 , K_0 , A i b odgovarajući parametri koji zavise do vrste materijala.

ODABRANI PROBLEMI

Problem 4.1. Izvesti izraz za gustinu struje termoelektronske emisije ne zamenjujući Fermi-Dirac-ovu funkciju raspodele Maxwell-Boltzmann-ovom. Na šta se svodi dobijeni izraz kada je izlazni rad znatno veći od termalne energije?

Rešenje: Gustina struje termoelektronske emisije određena je izrazom (4.7), u formi:

$$J = 2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{v_{y0}}^{\infty} \frac{v_z dv_z}{e^{\left(\frac{m^* v_x^2 + v_y^2}{2} - E_F \right) / k_B T} + 1} \quad (P.4.1)$$

gde je $v_{y0} = \sqrt{2\chi / m^*}$. Komponente brzine v_x i v_y zameničemo promenljivim v_{xy} i φ , gde je $v_{xy} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$, $\varphi = \arctan(v_y / v_x)$. Na taj način dobijamo:

$$J = 2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi \int_{v_{xy=0}}^{\infty} dv_{xy} \int_{v_z}^{\infty} \frac{v_{xy} v_z dv_z}{e^{\left(\frac{m^* v_{xy}^2 + v_z^2}{2} - E_F \right) / k_B T} + 1} \quad (P.4.2)$$

Posmatrajmo integral

$$I = \int_{v_{xy=0}}^{\infty} \frac{v_{xy} dv_{xy}}{e^{\left(\frac{m^* v_{xy}^2}{2} - E_F \right) / k_B T} + 1} \quad (P.4.3)$$

i uvedimo oznake $x = \frac{m^*}{2k_B T} (v_{xy}^2 + v_z^2)$ i $\eta = E_F / k_B T$:

$$I = \frac{k_B T}{m^*} \int_{\frac{\eta}{2k_B T}}^{\infty} \frac{dx}{e^{x-\eta} + 1} \quad (P.4.4)$$

Rešenje gornjeg integrala glasi

$$I = -\frac{k_B T}{m^*} \ln \left[1 + e^{\eta-x} \right]_{\frac{\eta}{2k_B T}}^{\infty} = \frac{k_B T}{m^*} \ln \left[1 + e^{\eta - \frac{\eta}{2k_B T}} \right] \quad (P.4.5)$$

Prema tome, izraz (P.4.2) dobija oblik

$$J = \frac{4\pi e k_B T m^{*2}}{h^3} \int_{v_z=v_{y0}}^{\infty} v_z \ln \left[1 + e^{\eta - \frac{m^* v_z^2}{2k_B T}} \right] dv_z \quad (P.4.6)$$

Dobijeni integral dalje ćemo rešavati uz pomoć smene $y = \eta - \frac{m^* v_z^2}{2k_B T}$, što daje

$$J = \frac{4\pi e(k_B T)^2 m^*}{h^3} \int_{-\infty}^{\frac{m^* v_{z0}^2}{2k_B T}} \ln[1 + e^y] dy \quad (\text{P.4.7})$$

Posmatrajmo gornju granicu integracije

$$\eta = \frac{m^* v_{z0}^2}{2k_B T} = \frac{E_F - m^* v_{z0}^2 / 2}{k_B T} = \frac{E_F - \chi}{k_B T} = -\frac{\Phi}{k_B T} \quad (\text{P.4.8})$$

Na osnovu toga izraz (P.4.7) dobija formu

$$J = \frac{4\pi e(k_B T)^2 m^*}{h^3} \int_{-\infty}^{-\Phi/k_B T} \ln[1 + e^y] dy \quad (\text{P.4.9})$$

što možemo zapisati i na sledeći način:

$$J = AT^2 \varphi\left(\frac{\Phi}{k_B T}\right) \quad (\text{P.4.10})$$

gde je

$$A = \frac{4\pi e k_B^2 m^*}{h^3} \quad (\text{P.4.11a})$$

$$\varphi\left(\frac{\Phi}{k_B T}\right) = \int_{-\infty}^{-\Phi/k_B T} \ln[1 + e^y] dy \quad (\text{P.4.11b})$$

Ako je $\Phi / k_B T \gg 1$, tada je $\ln[1 + e^y] \approx e^y$, pa dobijamo

$$\varphi\left(\frac{\Phi}{k_B T}\right) \approx \int_{-\infty}^{-\Phi/k_B T} e^y dy = e^{-\frac{\Phi}{k_B T}} \quad (\text{P.4.12})$$

odnosno

$$J = AT^2 e^{-\frac{\Phi}{k_B T}} \quad (\text{P.4.13})$$

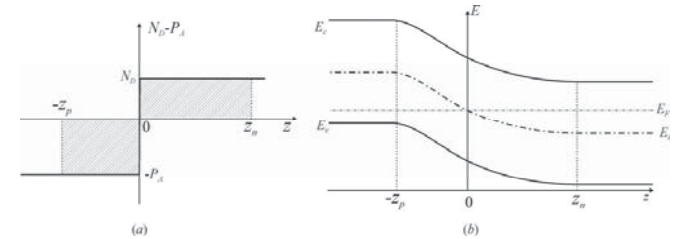
što je identično izrazu (4.15).

Problem 4.2. Za strmi p-n spoj, koristeći aproksimaciju totalnog osiromašenja, naći izraze za električno polje i potencijal u funkciji koordinate i skicirati ih. Takođe odrediti širinu oblasti prostornog naelektrisanja ako su poznate vrednosti koncentracija primesa N_D i P_A , sopstvena koncentracija n_i , kao i relativna dielektrična konstanta ϵ_r .

Rešenje: Profil primesa strmog p-n spoja prikazan je na Sl. P.4.1a, a odgovarajući zonski dijagram na Sl. P.4.1b. U aproksimaciji totalnog osiromašenja, gustina prostornog naelektrisanja ima oblik:

$$\rho(z) = \begin{cases} 0, & z < -z_p \wedge z > z_n \\ -eP_A, & -z_p < z < 0 \\ eN_D, & 0 < z < z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.14})$$

gde su $-z_p$ i z_n granice oblasti prostornog naelektrisanja.



Sl. P.4.1 a) Profil primesa i b) zonski dijagram strmog p-n spoja

Polazeći od Poisson-ove jednačine

$$\frac{d^2 \varphi}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (\text{P.4.15})$$

dobijamo izraz za električno polje $K(z) = -d\varphi/dz$ u obliku

$$K(z) = \begin{cases} 0, & z < -z_p \wedge z > z_n \\ -\frac{eP_A}{\epsilon_0 \epsilon_r} z + C_1, & -z_p \leq z < 0 \\ \frac{eN_D}{\epsilon_0 \epsilon_r} z + C_2, & 0 < z \leq z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.16})$$

U neutralnim oblastima ($z < -z_p \wedge z > z_n$) električno polje je jednako nuli, a pošto $K(z)$ mora biti neprekidno, sledi:

$$\begin{aligned} K(-z_p) &= 0 \\ K(z_n) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{P.4.17})$$

odakle dobijamo vrednost konstanti C_1 i C_2

$$\begin{aligned} C_1 &= -\frac{eP_A z_p}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \\ C_2 &= -\frac{eN_D z_n}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \end{aligned} \quad (\text{P.4.18})$$

Prema tome, zavisnost električnog polja od koordinate je oblika

$$K(z) = \begin{cases} 0, & z < -z_p \wedge z > z_n \\ -\frac{eP_A}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} (z + z_p), & -z_p < z < 0 \\ \frac{eN_D}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} (z - z_n), & 0 < z < z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.19})$$

Integracijom prethodnog izraza određujemo potencijal

$$\varphi(z) = \begin{cases} \varphi_p, & z < -z_p \\ \frac{eP_A}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(\frac{z}{2} + z_p \right) z + C_3, & -z_p \leq z < 0 \\ \frac{eN_D}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(\frac{z}{2} - z_n \right) z + C_4, & 0 \leq z \leq z_n \\ \varphi_n, & z > z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.20})$$

gde su φ_p i φ_n konstantne vrednosti potencijala u p- i n- delu neutralne oblasti. Pošto potencijal mora biti neprekidan, dobijamo nove granične uslove:

$$\varphi(0^-) = \varphi(0^+) \Rightarrow C_3 = C_4 \quad (\text{P.4.21a})$$

$$\varphi(-z_p^-) = \varphi(-z_p^+) \Rightarrow \varphi_p = C_3 - \frac{1}{2} \frac{eP_A}{\varepsilon_r \varepsilon_0} z_p^2 \quad (\text{P.4.21b})$$

$$\varphi(z_n^-) = \varphi(-z_n^+) \Rightarrow \varphi_n = C_4 + \frac{1}{2} \frac{eN_D}{\varepsilon_r \varepsilon_0} z_n^2 \quad (\text{P.4.21c})$$

Na osnovu ovih izraza zaključujemo da je

$$\varphi_n - \varphi_p = U_D = \frac{eP_A}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} z_p^2 + \frac{eN_D}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} z_n^2 \quad (\text{P.4.22})$$

Do ovih rezultata mogli smo doći i uz pomoć jednačine ukupnog dipolnog momenta:

$$\int_{-z_p}^{z_n} z \rho(z) dz = \int_{-z_p}^0 -eP_A z dz + \int_0^{z_n} eN_D z dz = \varepsilon_r \varepsilon_0 U_D \quad (\text{P.4.23})$$

Zamenom (P.4.21a)-(P.4.21c) u (P.4.20) dobijamo konačan izraz za zavisnost potencijala od koordinate:

$$\varphi(z) = \begin{cases} \varphi_p, & z < -z_p \\ \frac{eP_A}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} (z + z_p)^2 + \varphi_p, & -z_p \leq z < 0 \\ \frac{eN_D}{\varepsilon_r \varepsilon_0} (z - z_n)^2 + \varphi_n, & 0 \leq z \leq z_n \\ \varphi_n, & z > z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.24})$$

Pored (P.4.22), dodatnu relaciju za određivanje granica oblasti prostornog naelektrisanja dobijamo iz jednačine kontinuiteta:

$$\int_{-z_p}^{z_n} \rho(z) dz = 0 \Rightarrow P_A z_p = N_D z_n \quad (\text{P.4.25})$$

tako da imamo

$$U_D = \frac{eP}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} z_p^2 \left(1 + \frac{P_A}{N_D} \right) \quad (\text{P.4.26})$$

odakle sledi:

$$z_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_r U_D}{e} \frac{N_D}{P_A(N_D + P_A)}} \quad (\text{P.4.27a})$$

$$z_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_r U_D}{e} \frac{P_A}{N_D(N_D + P_A)}} \quad (\text{P.4.27b})$$

Koncentracije elektrona i šupljina u neutralnim oblastima mogu se izraziti u obliku

$$n(z) = B_c e^{\frac{E_c - E_c(z)}{k_B T}} = B_c e^{\frac{E_c - E_c(\infty)}{k_B T}} e^{\frac{E_c(\infty) - E_c(z)}{k_B T}} = n_i e^{\frac{e\varphi(z)}{k_B T}} \quad (\text{P.4.28a})$$

$$p(z) = B_v e^{\frac{E_v(z) - E_v}{k_B T}} = B_v e^{\frac{E_v(\infty) - E_v}{k_B T}} e^{\frac{E_v(z) - E_v(\infty)}{k_B T}} = n_i e^{-\frac{e\varphi(z)}{k_B T}} \quad (\text{P.4.28b})$$

Na granicama oblasti prostornog naelektrisanja imamo:

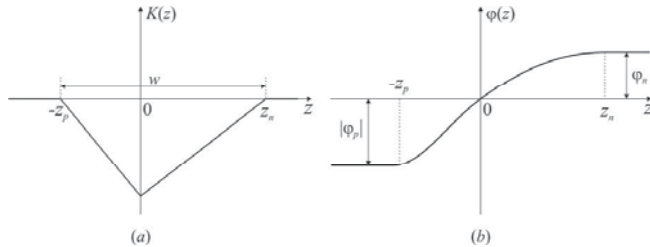
$$\varphi_p = \varphi(-z_p) = -\frac{k_B T}{e} \ln \frac{p(-z_p)}{n_i} = n(z) = \frac{k_B T}{e} \ln \frac{n_i}{P_A} \quad (\text{P.4.29a})$$

$$\varphi_n = \varphi(z_n) = \frac{k_B T}{e} \ln \frac{n(z_n)}{n_i} = \frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_D}{n_i} \quad (\text{P.4.29a})$$

pa je difuzioni napon na spoju jednak

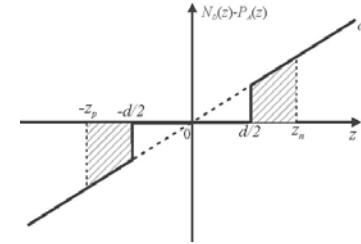
$$U_D = \varphi_n - \varphi_p = \frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_D P_A}{n_i^2} \quad (\text{P.4.30})$$

Na osnovu izračunate vrednosti U_D , određuje se širina oblasti prostornog naelektrisanja $w = z_n + z_p$ prema izrazima (P.4.27a) i (P.4.27b). Zavisnost električnog polja i potencijala od koordinate prikazane su na Sl. P.4.2a i P.4.2b, respektivno, gde je referentni nivo za potencijal postavljen u tačku $z = 0$.



Sl. P.4.2 Profil a) električnog polja i b) potencijala kod strmog p-n spoja

Problem 4.3. Za p-i-n spoj čiji je profil primesa prikazan na Sl. P.4.3, koristeći aproksimaciju totalnog osiromašenja, naći zavisnost električnog polja i potencijala od koordinate z , širinu oblasti prostornog naelektrisanja, kao i maksimalnu vrednost električnog polja (po apsolutnoj vrednosti). Smatrati da je difuzioni napon U_D poznat, kao i konstante ε_r , a i d .



Sl. P.4.3 Profil primesa linearnog p-i-n spoja

Rešenje: Gustina prostornog naelektrisanja za p-i-n spoj sa Sl. P.4.3, u aproksimaciji totalnog osiromašenja, iznosi:

$$\rho(z) = \begin{cases} 0, & z < -z_p \\ -eP_A(z) = eaz, & -z_p < z < -\frac{d}{2} \\ 0, & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \\ eN_D(z) = eaz, & \frac{d}{2} < z < z_n \\ 0, & z > z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.31})$$

Granice oblasti prostornog naelektrisanja $-z_p$ i z_n određujemo uz pomoć jednačine globalne neutralnosti i jednačine ukupnog dipolnog momenta:

$$\int_{-z_p}^{z_n} \rho(z) dz = 0 \quad (\text{P.4.32a})$$

$$\int_{-z_p}^{z_n} z \rho(z) dz = \varepsilon_r \varepsilon_0 U_D \quad (\text{P.4.32b})$$

Kombinovanjem izraza (P.4.31) i (P.4.32a) dobijamo

$$\int_{-z_p}^{-d/2} eaz dz + \int_{d/2}^{z_n} eaz dz = 0 \quad (\text{P.4.33a})$$

$$\Rightarrow z_p = z_n \quad (\text{P.4.33b})$$

Jednačina (P.4.32b) u razvijenom obliku glasi

$$\int_{-z_p}^{-d/2} eaz^2 dz + \int_{z_n}^{d/2} eaz^2 dz = 0 \quad (\text{P.4.34a})$$

$$\Rightarrow \frac{ea}{3} \left[-\frac{d^3}{4} + z_p^3 + z_n^3 \right] = \varepsilon_r \varepsilon_0 U_D \quad (\text{P.4.34b})$$

Zamenom (P.4.33b) u (P.4.34b) dobijamo

$$z_n = z_p = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon_r \varepsilon_0 U_D}{2ea} + \frac{d^3}{8}} \quad (\text{P.4.35})$$

Širina oblasti prostornog naelektrisanja, prema tome, iznosi:

$$w = z_n + z_p = \sqrt[3]{\frac{12\varepsilon_r \varepsilon_0 U_D}{ea} + d^3} \quad (\text{P.4.36})$$

Električno polje i potencijal odredićemo rešavajući Poisson-ovu jednačinu

$$\frac{d^2 \varphi}{dz^2} = \frac{\rho(z)}{\varepsilon_r \varepsilon_0} = \begin{cases} -\frac{eaz}{\varepsilon_r \varepsilon_0}, & -z_p < z < -\frac{d}{2} \\ 0, & z < -z_p \wedge -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \wedge z > z_n \\ -\frac{eaz}{\varepsilon_r \varepsilon_0}, & \frac{d}{2} < z < z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.37})$$

Integracijom jednačine (P.4.37), smatrajući da je električno polje $K(z) = -d\varphi/dz$ u oblasti $z < -z_p \wedge z > z_n$ približno jednako nuli, dolazimo do izraza:

$$K(z) = \begin{cases} \frac{eaz^2}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} + C_1, & -z_p \leq z < -\frac{d}{2} \\ 0, & z < -z_p \wedge z > z_n \\ C_2, & -\frac{d}{2} \leq z \leq \frac{d}{2} \\ \frac{eaz^2}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} + C_3, & \frac{d}{2} < z \leq z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.38})$$

Vrednosti integracionih konstanti $C_1 - C_3$ dobijamo iz uslova neprekidnosti električnog polja na razdvojnim površinama različitih oblasti, što daje:

$$\begin{aligned} C_1 = C_3 &= -\frac{eaz_n^2}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} \\ C_2 &= -\frac{ea}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(z_n^2 - \frac{d^2}{4} \right) \end{aligned} \quad (\text{P.4.39})$$

Konačno, zavisnost električnog polja od koordinate dobija oblik

$$K(z) = \begin{cases} -\frac{ea}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} (z_n^2 - z^2), & -z_p \leq z < -\frac{d}{2} \\ 0, & z < -z_p \wedge z > z_n \\ -\frac{ea}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(z_n^2 - \frac{d^2}{4} \right), & -\frac{d}{2} \leq z \leq \frac{d}{2} \\ -\frac{ea}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} (z_p^2 - z^2), & \frac{d}{2} < z \leq z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.40})$$

kao što je prikazano na Sl. P.4.4a, a maksimalna vrednost električnog polja (po apsolutnoj vrednosti) iznosi:

$$|K_{\max}| = |C_2| = \frac{ea}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(z_n^2 - \frac{d^2}{4} \right) \quad (\text{P.4.41})$$

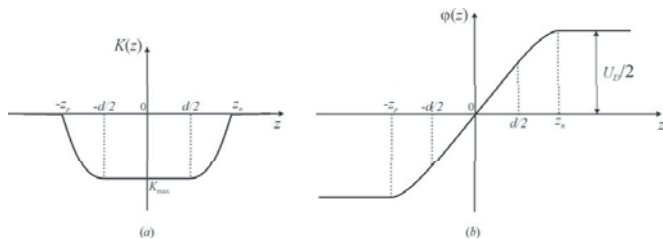
Potencijal $\varphi(z)$ dobijamo integracijom jednačine (P.4.40), što daje

$$\varphi(z) = \begin{cases} \varphi_p, & z < -z_p \\ \frac{ea}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(z_n^2 - \frac{z^2}{3} \right) z + \tilde{C}_1, & -z_p \leq z < -\frac{d}{2} \\ \frac{ea}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(z_n^2 - \frac{d^2}{4} \right) z + \tilde{C}_2, & -\frac{d}{2} \leq z \leq \frac{d}{2} \\ \frac{ea}{2\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(z_p^2 - \frac{z^2}{3} \right) z + \tilde{C}_3, & \frac{d}{2} < z \leq z_n \\ \varphi_n, & z > z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.42})$$

gde je $\varphi_p - \varphi_n = U_D$. Pošto je struktura simetrična, a referentni nivo za potencijal se može proizvoljno izabrati, uzećemo $\varphi(0) = 0$, odakle sledi $\varphi_n = |\varphi_p| = U_D / 2$. Nove integracije konstante $\tilde{C}_1 - \tilde{C}_3$, određujemo iz uslova kontinualnosti potencijala na granicama različitih oblasti, tako da zavisnost potencijala od koordinate konačno dobija oblik:

$$\varphi(z) = \begin{cases} -\frac{U_D}{2}, & z < -z_p \\ \frac{ea}{2\epsilon_r \epsilon_0} \left(z_p^2 - \frac{z^2}{3} \right) z + \frac{d^3}{24} \frac{ea}{\epsilon_r \epsilon_0}, & -z_p \leq z < -\frac{d}{2} \\ \frac{ea}{2\epsilon_r \epsilon_0} \left(z_n^2 - \frac{d^2}{4} \right) z, & -\frac{d}{2} \leq z \leq \frac{d}{2} \\ \frac{ea}{2\epsilon_r \epsilon_0} \left(z_n^2 - \frac{z^2}{3} \right) z - \frac{d^3}{24} \frac{ea}{\epsilon_r \epsilon_0}, & \frac{d}{2} < z \leq z_n \\ \frac{U_D}{2}, & z > z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.43})$$

što je ilustrovano na Sl. P.4.4b.



Sl. P.4.4 Profil a) električnog polja i b) potencijala polja kod linearnog p-i-n spoja

Problem 4.4. Kod p-n spoja p-oblast je znatno jače dopirana od n-oblasti. U ovakvom spoju potrebno je ostvariti zavisnost kapacitivnosti oblika $C(U) = C_0 - gU^2$. Odrediti potrebni profil primesa u n-oblasti, smatrajući da kontaktna razlika potencijala ne zavisi od primenjenog inverznog napona. Poznatim veličinama smatrati konstante C_0 i g , površinu spoja S , i relativnu dielektričnu konstantu ϵ .

Rešenje: Kapacitivnost p-n spoja kod koga je p-oblast znatno jače dopirana od n-oblasti data je izrazom

$$C = \frac{\epsilon S}{z_n(U)} \quad (\text{P.4.44})$$

pošto je u tom slučaju $z_n \gg z_p$. Diferenciranjem gornjeg izraza po primenjenom inverznom naponu ($U < 0$) dobijamo:

$$\frac{dC}{dU} = -\frac{\epsilon S}{z_n^2} \frac{dz_n}{dU} \quad (\text{P.4.45})$$

Jednačina ukupnog dipolnog momenta glasi

$$e \int_0^{z_n} N_D(z) z dz = \epsilon (U_D - U) \quad (\text{P.4.46})$$

odakle sledi

$$N_D(z_n) z_n \frac{dz_n}{dU} = -\epsilon \quad (\text{P.4.47})$$

Kombinovanjem (P.4.47) i (P.4.45) dobijamo

$$\frac{dC}{dU} = \frac{\epsilon^2 S}{ez_n^3 N_D(z_n)} \quad (\text{P.4.48})$$

odnosno

$$N_D(z_n) = \frac{\epsilon^2 S}{ez_n^3} \frac{dC}{dU} \quad (\text{P.4.49})$$

Kako je kod posmatranog p-n spoja potrebno ostvariti $C(U) = C_0 - gU^2$, sledi

$$\frac{dC}{dU} = -2gU = 2g|U| = 2\sqrt{g(C_0 - C)} = 2\sqrt{g(C_0 - \epsilon S / z_n)} \quad (\text{P.4.50})$$

Konačno, na osnovu izraza (P.4.49) i (P.4.50) dobijamo traženi profil primesa u obliku:

$$N_D(z) = \frac{\epsilon^2 S}{2ez^3} \frac{1}{\sqrt{g(C_0 - \epsilon S / z)}} \quad (\text{P.4.51})$$

Problem 4.5. Smatrajući da su koeficijenti jonizacije elektrona i šupljina jednaki i da zavise od električnog polja na sledeći način:

$$\alpha_n = \alpha_p = \alpha = a|K|^m \quad (\text{P.4.52})$$

gde su a i m konstante, izvesti izraz za probojni napon kod strmog p-n spoja.

Rešenje: Uslov proboja p-n spoja u slučaju kada su koeficijenti jonizacije elektrona i šupljina jednaki, prema izrazu (4.151), glasi:

$$\int_{-z_p}^{z_n} \alpha(z) dz = 1 \quad (\text{P.4.53})$$

što se za oblik (P.4.52) ovih koeficijenata svodi na izraz:

$$\int_{-z_p}^{z_n} |K|^m dz = \frac{1}{a} \quad (\text{P.4.54})$$

Zavisnost električnog polja od koordinate kod strmog p-n spoja određena je u primeru P.4.2 (izraz (P.4.19)) i glasi:

$$K(z) = \begin{cases} -\frac{eP_A}{\varepsilon_0\varepsilon_r}(z+z_p), & -z_p < z < 0 \\ -\frac{eN_D}{\varepsilon_0\varepsilon_r}(z_n-z), & 0 < z < z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.55})$$

što zamenom u (P.4.54) daje:

$$\left(\frac{eP_A}{\varepsilon_0\varepsilon_r}\right)^m \int_{-z_p}^0 (z+z_p)^m dz + \left(\frac{eN_D}{\varepsilon_0\varepsilon_r}\right)^m \int_0^{z_n} (z_n-z)^m dz = \frac{1}{a} \quad (\text{P.4.56})$$

odnosno,

$$\frac{1}{m+1} \left(\frac{eP_A z_p}{\varepsilon_0\varepsilon_r}\right)^m + \frac{1}{m+1} \left(\frac{eN_D z_n}{\varepsilon_0\varepsilon_r}\right)^m = \frac{1}{a} \quad (\text{P.4.57})$$

Maksimalna vrednost $|K(z)|$ iznosi $K_{\max} = |K(0)| = \frac{eP_A z_p}{\varepsilon_0\varepsilon_r} = \frac{eN_D z_n}{\varepsilon_0\varepsilon_r}$ pa se izraz (P.4.57) može napisati u obliku:

$$\frac{aK_{\max}^m w}{m+1} = 1 \quad (\text{P.4.58})$$

$w = z_p + z_n$. Za inverzno polarisani strmi p-n spoja granice oblasti prostornog naelektrisanja iznose:

$$z_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r(U_D-U)}{e} \frac{N_D}{P_A(N_D+P_A)}} \quad (\text{P.4.59a})$$

$$z_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r(U_D-U)}{e} \frac{P_A}{N_D(N_D+P_A)}} \quad (\text{P.4.59b})$$

pa je

$$K_{\max} = \sqrt{\frac{2e(U_D-U)}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{N_D P_A}{(N_D+P_A)}} \quad (\text{P.4.60a})$$

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r(U_D-U)}{e} \frac{(N_D+P_A)}{P_A N_D}} \quad (\text{P.4.60b})$$

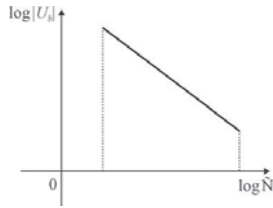
Kombinovanjem prethodnih izraza sa (P.4.58) dobijamo

$$U_D - U_b = \frac{1}{2} \left(\frac{m+1}{a}\right)^{\frac{2}{m+1}} \left[\frac{\varepsilon_0\varepsilon_r(N_D+P_A)}{P_A N_D}\right]^{\frac{m-1}{m+1}} \quad (\text{P.4.61})$$

Ukoliko uvedemo oznake $q = \frac{m-1}{m+1}$ i $\tilde{N} = P_A N_D / (N_D + P_A)$, izraz za probojni napon postaje

$$|U_b| = -U_D + \frac{1}{2} \left[\frac{2}{(q-1)a}\right]^{1-q} \left(\frac{e\tilde{N}}{\varepsilon_0\varepsilon_r}\right)^{-q} \quad (\text{P.4.62})$$

Zavisnost probojnog napona od efektivne koncentracije primesa \tilde{N} prikazana je na Sl. P.4.4.



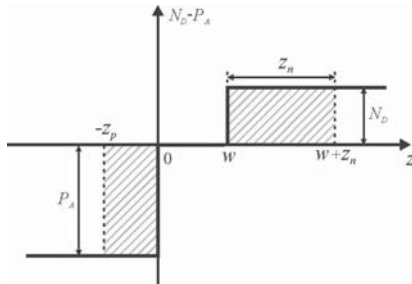
Sl. P.4.5 *Probojni napon strmog p-n spoja u funkciji efektivne koncentracije primesa*

Važno je napomenuti da dobijeni izraz za probojni napon važi samo za koncentracije primesa koje su ispod nekih kritičnih vrednosti kada dolazi do izražaja tunelski proboj.

Problem 4.6. Polazeći od uslova za lavinski proboj u obliku

$$\int_{-z_p}^{z_n+w} \alpha_n(z) dz = \frac{\ln \gamma}{\gamma - 1}, \quad \gamma = \frac{\alpha_p}{\alpha_n} \quad (\text{P.4.63})$$

gde su α_n i α_p odgovarajući koeficijenti jonizacije elektrona i šupljina, respektivno, i uzimajući aproksimativnu zavisnost $\alpha_n = \alpha_0 (|K|/K_0)^n$, ($n > 1$), naći vezu između probojnog napona i parametara strukture za p-i-n prelaz sa Sl. P.4.6. ($P_A \gg N_D$).



Sl. P.4.6 *Profil primesa strmog p-i-n spoja*

Smatrati poznatim konstante α_0 , n , γ , K_0 ($K_0 = U_0 / w$). Koristeći dobijenu zavisnost, pokazati da se za dovoljno široku i -oblast ($w \gg z_n$) dobija:

$$\frac{\ln \gamma}{\gamma - 1} \approx \alpha_0 \left(\frac{U_b}{U_0} \right)^n w \quad (\text{P.4.64})$$

Problem rešavati uz korišćenje aproksimacije totalnog osiromašenja

Rešenje: Na osnovu aproksimacije totalnog osiromašenja, Poisson-ovu jednačinu možemo napisati u obliku:

$$\frac{d^2 \varphi}{dz^2} = \begin{cases} \frac{eP_A}{\epsilon}, & -z_p < z < 0 \\ 0, & 0 < z < w \\ -\frac{eN_D}{\epsilon}, & w < z < w + z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.65})$$

Integracijom ove jednačine dobijamo:

$$K(z) = \begin{cases} -\frac{eP_A}{\epsilon} z + C_1, & -z_p < z < 0 \\ C_2, & 0 < z < w \\ -\frac{eN_D}{\epsilon} z + C_3, & w < z < w + z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.66})$$

gde se konstante C_1 , C_2 i C_3 dobijaju iz graničnih uslova.

$$K(-z_p) = 0 \Rightarrow C_1 = -\frac{eP_A z_p}{\epsilon} \quad (\text{P.4.67a})$$

$$K(0^-) = K(0^+) \Rightarrow C_2 = C_1 \quad (\text{P.4.67b})$$

$$K(w + z_n) = 0 \Rightarrow C_3 = -\frac{eN_D(w + z_n)}{\epsilon} \quad (\text{P.4.67c})$$

Prema tome, zavisnost električnog polja do koordinate je oblika:

$$K(z) = \begin{cases} -\frac{eP_A}{\epsilon} (z + z_p), & -z_p < z < 0 \\ -\frac{eP_A z_p}{\epsilon}, & 0 < z < w \\ \frac{eN_D}{\epsilon} (z - w - z_n), & w < z < w + z_n \end{cases} \quad (\text{P.4.68})$$

Zamenom ovog rezultata u uslov proboja (P.4.63) dobijamo:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_0}{K_0^n} \int_{-z_p}^{z_n+w} |K|^n dz &= \frac{\alpha_0}{K_0^n} \left(\frac{eP_A}{\varepsilon} \right)^n \left[\int_{-z_p}^0 (z+z_p)^n dz + z_p^n \int_0^w dz + \left(\frac{N_D}{P_A} \right)^n \int_w^{w+z_n} (w+z_n-z)^n dz \right] \\ &= \frac{\alpha_0}{K_0^n} \left(\frac{eP_A z_p}{\varepsilon} \right)^n \left[\frac{z_p}{n+1} + w + \left(\frac{N_D z_n}{P_A z_p} \right)^n \frac{z_n}{n+1} \right] = \frac{\ln \gamma}{\gamma-1} \end{aligned} \quad (\text{P.4.69})$$

Iz jednačine globalne neutralnosti sledi $P_A z_p = N_D z_n$, a kako je $P_A \gg N_D$, imamo $z_n \gg z_p$, pa izraz (P.4.69) dobija oblik

$$\frac{\alpha_0}{K_0^n} \left(\frac{eN_D z_n}{\varepsilon} \right)^n \left[\frac{z_p}{n+1} + w + \frac{z_n^{n+1}}{n+1} \right] \approx \alpha_0 \left(\frac{eN_D z_n}{\varepsilon K_0} \right)^n \left[w + \frac{z_n}{n+1} \right] = \frac{\ln \gamma}{\gamma-1} \quad (\text{P.4.70})$$

Potrebno je još odrediti zavisnost $z_n(U)$, što se može postići korišćenjem jednačine ukupnog dipolnog momenta

$$\int_{-z_p}^{w+z_n} \rho(z)z dz = \varepsilon(U_D - U) \quad (\text{P.4.71})$$

odnosno

$$- \int_{-z_p}^0 eP_A z dz + \int_w^{w+z_n} eN_D z dz = \varepsilon(U_D - U) \quad (\text{P.4.72})$$

gde je $U < 0$ napon inverzne polarizacije. Na osnovu izraza (P.4.72) dolazimo do kvadratne jednačine po z_n :

$$z_n^2 \left(\frac{N_D}{P_A} + 1 \right) \frac{eN_D}{2} + z_n eN_D w - \varepsilon(U_D - U) = 0 \quad (\text{P.4.73})$$

čije rešenje glasi:

$$z_n = \frac{-w + \sqrt{w^2 + \frac{2\varepsilon(U_D - U)}{e} \left(\frac{1}{P_A} + \frac{1}{N_D} \right)}}{N_D \left(\frac{1}{P_A} + \frac{1}{N_D} \right)} \approx -w + \sqrt{w^2 + \frac{2\varepsilon(U_D - U)}{eN_D}} \quad (\text{P.4.74})$$

Pošto za probojni napon U_b svakako važi $|U_b| \gg U_D$, prethodni izraz možemo napisati u obliku

$$z_n(U_b) \approx -w + \sqrt{w^2 + \frac{2\varepsilon U_b}{eN_D}} \quad (\text{P.4.75})$$

što zamenom u (P.4.70) daje

$$\alpha_0 \left[\frac{eN_D}{\varepsilon K_0} \left(-w + \sqrt{w^2 + 2\varepsilon U_b / eN_D} \right) \right]^n \left(w + \frac{-w + \sqrt{w^2 + 2\varepsilon U_b / eN_D}}{n+1} \right) = \frac{\ln \gamma}{\gamma-1} \quad (\text{P.4.76})$$

Ukoliko je $w \gg z_n$, tada na osnovu (P.4.73) imamo ($P_A \gg N_D$):

$$z_n eN_D \left(w + \frac{z_n}{2} \right) \approx z_n eN_D w = \varepsilon(U_D - U) \quad (\text{P.4.77})$$

odakle je

$$\begin{aligned} z_n(U) &= \frac{\varepsilon(U_D - U)}{eN_D w} \\ \Rightarrow z_n(U_b) &\approx \frac{\varepsilon U_b}{eN_D w} \end{aligned} \quad (\text{P.4.78})$$

Prema tome, izraz (P.4.70) dobija oblik

$$\alpha_0 \left(\frac{U_b}{U_0} \right)^n w = \frac{\ln \gamma}{\gamma-1} \quad (\text{P.4.79})$$

LITERATURA

1. Ashcroft N. W, Mermin N.D, "Solid State Physics", (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976).
2. Anselm A., "Introduction to Semiconductor Theory", (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1981).
3. Bassani F., "Electronic States and Optical Transitions in Solids", (Pergamon, London, 1975).
4. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С. Г., "Физика полупроводников", (Наука, Москва, 1977).
5. Davies J. H, "The Physics of Low Dimensional Semiconductors: an Introduction", (Cambridge University Press, 1998).
6. Haug H., Koch S.W., "Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors", (World Scientific, 1990).
7. Harrison W.A, "Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond", (Dover, New York, 1989).
8. Ikonić Z., Milanović V., "Poluprovodničke kvantne mikrostrukture", (Elektrotehnički fakultet, Beograd, 1997).
9. Kasap S. O., "Principles of Engineering Materials and Devices", (McGraw-Hill, New York, 1997).
10. Киреев, П. С., "Физика полупроводников", (Высшая школа, Москва, 1975).
11. Kittel C., "Quantum Theory of Solids", (John Wiley and Sons, New York, 1987).
12. Leighton R. B, "Principles of Modern Physics" (McGraw-Hill, Inc., New York, 1959).
13. Lundstrom M, "Fundamentals of carrier transport Second Edition", (Cambridge University Press, 2000).
14. Madelung O., "Introduction to Solid State Theory", (Springer, New York, 1978).
15. Martin R. M., "Electronic Structure Basic Theory and Practical Methods", (Cambridge University Press, 2004).
16. Ng K. K, "Complete Guide to Semiconductor Devices", (Wiley, New York, 2002).

17. Patterson J. D., Bailey B. C, "Solid State Physics: Introduction to the Theory", (Springer, 2007).
18. Peierls R. E, "Quantum theory of solids", (Clarendon Press, Oxford, 2001).
19. Pierret R. F, "Advanced Semiconductor Fundamentals", (Addison-Wesley, Reading, MA, 1989).
20. Ridley B. K., "Quantum Processes in Semiconductors", (Clarendon, Oxford, 1988).
21. Sander L. M., "Advanced Condensed Matter Physics", (Cambridge University Press, 2009).
22. Seeger K., "Semiconductor Physics", (Springer, 1997).
23. Seitz F., "The Modern Theory of Solids", (McGraw-Hill Book Company, New York, 1940).
24. Singh J., "Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures", (Cambridge University Press, 2003).
25. Singh J., "Physics of Semiconductors and their Heterostructures", (McGraw-Hill, Inc., New York, 1993).
26. Singh J., "Semiconductor Devices: basic principles", (Wiley, 2000).
27. Sze S. M., "Semiconductor Devices", (Wiley, New York, 1985).
28. Sze S.M., Ng Kwok. K., "Physics of semiconductor devices", (Wiley-Interscience, 2006).
29. Sharma B. L., Purohit R. K, "Semiconductor Heterojunctions", (Pergamon, London, 1974).
30. Shockley W., Read W. T. Jr., "Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons", Phys. Rev. 87, 835 (1952).
31. Shur M., "Physics of Semiconductor Devices", (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1990).
32. Streetman B. G., "Solid State Electronic Devices", (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1990).
33. Taylor P., "A Quantum Approach to Condensed Matter Physics", (Cambridge University Press, 2002).

34. Tjapkin D, "Fizička elektronika i elektronska fizika čvrstog tela", (Elektrotehnički fakultet, Beograd, 1988).
35. Tjapkin D., Smiljanić M., Milanović V., Ikonić Z., Indin D., "Zbornik problema iz fizičke elektronike i elektronske fizike čvrstog tela", (Elektrotehnički fakultet, Beograd, 1994).
36. Yu P.Y., Cardona M., "Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties", (Springer, 2001).
37. Wang S., "Fundamentals of Semiconductor Theory and Device Physics", (Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1989).
38. Зеерер К., "Физика полупроводников", (Москва: Мир, 1977).
39. Ziman J. M, "Principles of the Theory of Solids", (Cambridge University. Press, Cambridge, 1972).

INDEKS POJMOVA

akceptorski nivo	61
akceptorske primese	60-65, 208, 250, 256, 260, 272
akumulacija nosilaca	217, 249
aproksimacija totalnog osiromašenja	246, 251, 261, 267, 280, 285, 293
apsorpcija	184, 224
Bloch-ova teorema	10, 35, 71, 117, 121
Bohr-ov radijus	59, 60
Boltzmann-ova kinetička jednačina	135, 166
Born-von Karman-ovi granični uslovi	15, 16
Brillouin-ova zona	14, 15, 28, 88-90, 99, 106, 109
brzina drifta	148, 150, 160, 173
brzina generacije	195, 204, 205
brzina rekombinacije	195, 196, 199, 200, 203, 205
centar zahvata	202, 203
Corbino disk	174
ciklotronska frekvencija	166, 187
ciklotronska rezonancija	188, 189
Debye-eva besprimesna dužina	259
degeneracija	32, 33, 97, 98, 122, 123, 127, 156, 170
dielektrični pomeraj	255
difuziona struja	154, 210, 223
difuziona dužina	213
direktna polarizacija p-n spoja	267, 268
direktna rekombinacija	191, 192
dipolni momenat	265, 266, 269, 283, 294
dispersiona relacija	7, 8, 13, 44, 70, 72, 76, 83, 111, 124, 128, 167, 187
donorski nivo	61, 131, 132
donorske primese	59, 61-63, 208, 245, 250, 256, 260, 272
dopirani poluprovodnik	60-62, 68, 135, 192, 237, 248, 250, 256, 260, 270, 273, 288
dozvoljene zone	1, 6-10, 34, 55, 57, 77, 79, 83, 101
driftovska struja	154, 210
efektivna masa	23-25, 44, 47, 60, 83, 86, 94, 186
efektivna masa lakih šupljina	48
efektivna masa teških šupljina	48
Einstein-ova relacija	153, 155, 230
ekskluzija nosilaca	217
ekstrakcija nosilaca	218
ekvienergetski elipsoid	26-28, 86, 179, 188

ekvienergetske površi	21, 26-29, 86, 103, 149
elektrohemijski potencijal	137, 147, 154
elektronska struktura	1, 53, 109, 237
elektronski afinitet	237, 238, 243, 244, 250
energetski procep	40, 44, 49, 50, 61, 115, 192, 202, 219, 221, 243, 250, 258
energetski spektar	8, 9, 54, 61, 86, 166
energija jonizacije	62
energetske zone	1, 6, 7
faktor neprozračnosti	77, 82
faktor spinske degeneracije	61, 131, 204
Fermi-Dirac-ova funkcija raspodele	17, 30, 32, 61, 86, 129, 135, 172, 193, 203
Fermi-jev nivo	17, 32, 98, 124, 128, 194, 205, 219, 243, 251
fononi	87, 88, 151, 153, 164, 166
fundamentalni granični uslovi	3, 5, 74
galvanomagnetne pojave	156
generacija	191, 193, 198, 204, 221, 225, 232, 273
gustina stanja	15-17, 21, 27, 28, 45, 61, 93, 106, 115
gustina struje naelektrisanja	141
gustina struje energije	142
Hall-ov efekat	160, 162, 183
Hall-ova konstanta	161, 162, 164, 183
Hamiltonian	36
hemijski potencijal	137, 143, 146, 153, 154, 170
heterospoj	237, 238, 241, 244, 247, 250, 252, 256
heterospoj metal-poluprovodnik	241, 244, 274, 249
heterospoj poluprovodnik.-poluprovodnik	250-252
homospoj	237
indirektna rekombinacija	192, 202, 204
injekcija nosilaca	215, 217, 229, 268
inverzna polarizacija p-n spoja	267, 268, 269, 271-274, 278
izlazni rad	237, 238, 241, 243, 244, 249, 250
jedinična ćelija	1, 15, 19
jednačina kontinuiteta	210, 223, 227, 232
jednačina totalne neutralnosti	63, 208, 255, 265, 294
jednoelektronska aproksimacija	1, 7
Kane-ova relacija	122, 124, 127
kapacitivnost p-n spoja	268, 270, 271, 288
kinetički koeficijenti	143, 145, 148, 167, 169

koeficijent difuzije	154, 155
koeficijent jonizacije	274, 278
koeficijent termo-elektromotorne sile	147
konstanta rešetke	1, 88
krivljenje zona	243, 248, 258, 272
Kronig-Penney-ev delta model	76, 77, 81
Kronig-Penney-ev pravougani model	54, 70, 73
kvadratna rekombinacija	200, 202
kvantno-mehanička srednja vrednosti	35, 37, 38
kvazi-Fermi-jev nivo	193-195
kvazineutralnost	264
lake šupljine	45, 47, 48
Landau-ov indeks	166
lavinski proboj	272, 274, 275, 292
l-h prelaz	260
linearna rekombinacija	199, 200
Lorentz-ov modela transporta	174
Lorentz-ova sila	135
magnetno polje	91, 135, 156, 160, 162, 163, 166, 173, 184
magnetootpornost	161, 174
Maxwell-Boltzmann-ova funkcija raspodele	87, 159, 172, 207, 242
metalurški prelaz	261
nehomogeni poluprovodnik	256, 258, 260
neravnotežna funkcija raspodele	135, 141, 143, 173, 193
neravnotežna koncentracija nosilaca	191, 194, 196, 202, 222, 224, 229, 231, 234
n-tip poluprovodnika	69, 199, 201, 219, 221, 242, 249-252
oblast iscrpljenja	68
oblast prostornog naelektrisanja	246, 248, 255, 261, 265, 268, 272, 275, 280
Peltier-ov koeficijent	146, 147, 170
periodični granični uslovi	82
periodični potencijal	1-3, 8, 70, 117
p-i-n spoj	285, 288, 292
plitke primese	60, 61
p-n spoj	260, 261, 267, 272, 280
pokretljivost	150, 154
površinska stanja	58, 221
površinska rekombinacija	221, 222, 232
potpuna nedegeneracija	31, 46, 87, 151, 155, 194, 207, 244, 256
prividna masa gustine stanja	28

primesni poluprovodnik (videti: dopirani poluprovodnik) 278, 290, 292
 probojni napon 261, 263, 265, 270, 281, 285, 289
 profil primesa 69, 199, 201, 219, 226, 231, 242, 249, 250
 p-tip poluprovodnika 40, 44, 59, 60, 86, 91, 93, 103, 105, 111, 131, 166, 167, 191, 193
 provodna zona 203, 237, 243, 245, 258, 273

 rasejanje 87, 151, 153, 164, 166
 ravnotežna funkcija raspodele 135-137, 151, 172, 239
 redukovani zonski dijagram 14, 90
 rekombinacija 191-193, 195, 196, 199, 200, 202, 204
 rekombinacioni centar 192, 202-204, 210, 222
 Richardson-Dushman-ova formula 241

 Schottky-jeva aproksimacija (videti i: aproksimacija totalnog osiromašenja) 241, 246
 Schrodinger-ova jednačina 2, 3, 5, 9-11, 24, 35, 55, 70, 81, 249
 Seebeck-ov efekat 147, 170
 Shockley-Read model rekombinacije 202, 219
 sopstvena koncentracija 48-50, 52, 62, 68, 88, 191, 257
 sopstvena oblast 68, 69
 sopstveni poluprovodnik 48-50, 59
 specifična električna provodnost 93, 94, 147, 148, 150, 167, 184
 spinska degeneracija 61, 131, 132, 204
 spin-orbitna interakcija 47
 srednja dužina slobodnog puta 168-170
 strmi p-n spoj 280, 282, 284, 290, 292

 supljine 40, 43-48, 59, 63, 65, 174, 191-193
 203, 212, 217, 222, 231, 234, 249, 257, 261, 274

 talasna funkcija 3, 4, 9-12, 15, 19, 35, 37, 55-58, 71, 116
 tamovska stanja 55, 58
 tenzor inverzne efektivne mase 25, 26, 39, 40, 94, 189
 termodinamička ravnoteža 191, 192, 196, 203, 208, 238, 242, 251, 258
 termoelektrične pojave 143
 termoelektronska emisija 237, 241, 279
 teške šupljine 45, 47, 48, 51
 Thomson-ova relacija 147
 toplotna provodnost 146
 trenutno vreme života 199, 201
 tunelski probroj 272, 273

 ubrzanje elektrona 38, 39, 273
 ugrađeni napon 267, 270

vakuumski nivo 55, 237, 240, 244, 251
 valentna zona 26, 40-47, 50, 59, 61, 86, 191, 193, 202, 204, 248, 250, 251, 258, 273
 vreme relaksacije 135, 141, 150-153, 162, 163, 184
 vreme života neravnotežnih nosilaca 198-201, 209, 210

Wronskian 5

zabranjene zone 1, 6-9, 11, 40, 54-56, 58, 119, 221
 Zener-ov probroj 273