Rafeindatækni fastra efna:

Virkur fjöldi frjálsra hleðslubera

Kafli 5

Jón Tómas Guðmundsson

tumi@hi.is

16. september 1999

Heimildir

- L. Solymar & D. Walsh: *Lectures on the Electrical Properties of Materials.* 5. ed., Oxford Science Publications, 1993, bls. 145 - 147

Spurning: Hvers vegna er Be (4 leiðnirafeindir) og Mg (12 rafeindir) málmar en ekki einangrarar eins og C (6 rafeindir) ?

Virkur fjöldi frjálsra rafeinda

Fjöldi leiðnirafeinda fæst útfrá

$$F = m^* a$$

$$e\,\mathcal{E} = \left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)^{-1}\frac{dv_g}{dt}$$

Summum $e\frac{d}{dt}\,(v_g)$ yfir allar rafeindir og fáum tímaafleiðuna af straumnum sem fæst vegna rafsviðs

$$\begin{aligned}\frac{dI}{dt} &= \sum_{\text{rafeindir}} \frac{d}{dt}\,(e\,v_g)\\ &= \frac{1}{\hbar^2}\,e^2\,\mathcal{E}\sum_{\text{rafeindir}}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\\ &= \frac{1}{\hbar^2}\,e^2\,\mathcal{E}\,\frac{1}{\pi}\int\frac{d^2E}{dk^2}\,dk\end{aligned}$$

þar sem summu er breytt í heildi með ástandsþéttleikann yfir dk sem dk/π.

Útskýring á $1/\pi$ liðnum hér á undan:

Höfum að

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

þannig að

$$\hbar^2 k^2 = \hbar^2\pi^2 n^2 = p^2$$

eða

$$p^2 = \frac{h^2 n^2}{2} \quad \text{og því er} \quad p = \frac{h}{2}n_x.$$

Fjöldi k-gilda á lengdareiningu er því

$$dn_x = \frac{2}{h}dp_x = \frac{2}{h}\,d(\hbar k_x) = \frac{1}{\pi}dk_x.$$

Þar sem $n_x > 0$ er

$$dn_x = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{\pi}dk_x.$$

Þéttleiki rafeinda á lengdareiningu í dk_x er því

$$dn_e = 2dn_x = \frac{1}{\pi}dk_x,$$

þar sem margfaldað er með 2 vegna spuna.

Fyrir rafeindir í kristalli er:

$$\frac{dI}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\, e^2\, \mathcal{E}\, \frac{1}{\pi} \int \frac{d^2E}{dk^2}\, dk$$

Fyrir N frjálsar og óháðar rafeindir er $I = Nev$ svo

$$\frac{dI}{dt} = Ne\frac{dv}{dt}.$$

Einnig er $e\,\mathcal{E} = m\; dv/dt$ svo

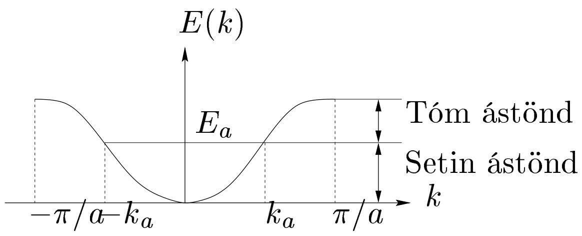
$$\frac{dI}{dt} = \frac{e^2\,\mathcal{E}}{m}\, N$$

Skilgreinum virkan fjölda rafeinda, N_{eff}, útfrá

$$\frac{dI}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\, e^2\, \mathcal{E}\, \frac{1}{\pi} \int \frac{d^2E}{dk^2}\, dk = \frac{e^2\,\mathcal{E}}{m}\, N_{eff}$$

þannig að

$$N_{eff} := \frac{1}{\pi}\frac{m}{\hbar^2} \int \frac{d^2E}{dk^2}\, dk \qquad \text{við } T = 0 \text{ K.}$$



Gerum ráð fyrir að öll ástönd séu fullsetin upp að $E = E_a$ (eða $k = \pm k_a$) ($T = 0$ K) en öll hærri ástönd tóm.

Þá er

$$\begin{aligned} N_{eff} &= \frac{1}{\pi}\frac{m}{\hbar^2}\int_{-k_a}^{k_a} \frac{d^2E}{dk^2}\, dk \\ &= \frac{1}{\pi}\frac{m}{\hbar^2}\left[\left(\frac{dE}{dk}\right)_{k=k_a} - \left(\frac{dE}{dk}\right)_{k=-k_a}\right] \end{aligned}$$

þannig að

$$N_{eff} = \frac{2m}{\pi\hbar^2}\left(\frac{dE}{dk}\right)_{k=k_a}$$

$$N_{eff} = \frac{2m}{\pi \hbar^2} \left(\frac{dE}{dk} \right)_{k=k_a}$$

Fjöldi rafeinda sem getur tekið þátt í leiðni er háður halla $E(k)$-ferils við hæsta fullsetna orkustig.

Við $k = \pi/a$ er $dE/dk = 0$ og því engin leiðni.

Holur

Nú var virkur massi skilgreindur sem

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$$

þannig að

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} &= \frac{1}{\hbar^2} e^2 \mathcal{E} \sum_{\text{setin ástönd}} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} && (1) \\ &= e^2 \mathcal{E} \sum_i \frac{1}{m_i^*} && (2) \end{aligned}$$

þar sem summað er yfir öll setin ástönd.

Ein rafeind í borða

Þá er jafna (2) á forminu

$$\frac{dI_e}{dt} = \frac{e^2\,\mathcal{E}}{m^*}$$

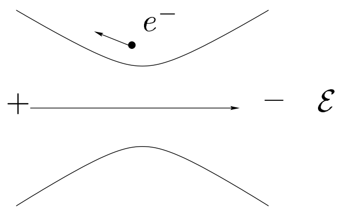


Figure 1: *Ein rafeind í borða. Stefna rafsviðsins $\mathcal{E}$ sést á myndinni og færsla rafeindarinnar.*

Borði fullsetinn

Virkur fjöldi rafeinda er þá

$$N_{eff} = \frac{2}{\pi}\,\frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{\partial E}{\partial k}\right)_{k=\frac{n\pi}{a}} = 0$$

svo jafna (2) gefur að

$$\frac{dI}{dt} = e^2\,\mathcal{E}\sum_i \frac{1}{m_i^*} = 0.$$

Eina rafeind vantar:

Ef rafeind númer j vantar gildir skv. jöfnu (2) að

$$\frac{dI_h}{dt} = e^2\,\mathcal{E}\sum_{i\neq j}\frac{1}{m_i^*}$$

Ef rafeind númer j er tekin með, fæst

$$\frac{dI}{dt} = e^2\,\mathcal{E}\left(\frac{1}{m_j^*} + \sum_{i\neq j}\frac{1}{m_i^*}\right) = 0$$

þ.e. fullur borði og því verður

$$\frac{dI_h}{dt} = -e^2\,\mathcal{E}\,\frac{1}{m_j^*}$$

Nú er $m_j^* < 0$ efst í borða þannig að

$$\frac{dI_h}{dt} = \frac{e^2\,\mathcal{E}}{|m_j^*|}$$

þ.e. sama jafna fyrir rafeindir og holur.

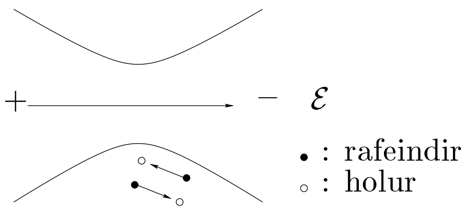


Figure 2: *Eina rafeind vantar í borða.*