TRDNA SNOV
Gašper Štifter
28010074

Statistika donorskih nivojev

1 NALOGA

(a) Pokaži, da je v primeru dvakrat okupiranega donorskega nivoja, energiji izbrana kot $2\epsilon_d+\Delta$, izračunamo povprečno število elektronov v termičnem ravnovesju kot:

$$n_d = N_d \frac{1 + e^{-\beta(\epsilon_d - \mu + \Delta)}}{\frac{1}{2}e^{\beta(\epsilon_d - \mu)} + 1 + \frac{1}{2}e^{-\beta(\epsilon_s - \mu + \Delta)}} \tag{1}$$

(b) Dokaži, da se enačba (1) poenostavi v enačbo:

$$n_d = \frac{N_d}{\frac{1}{2}e^{\beta(\epsilon_d - \mu)} + 1}, \tag{2}$$

ko gre $\Delta \to \infty$ in da preide v enačbo za proste elektrone, ko gre $\Delta \to 0$.

(c) Obravnavaj donorsko nečistočo z veliko vezanih stanj - orbitalskih nivojev z energijo ϵ_i. Predpostavimo, da Coulombski efekt med elektronoma prepoveduje vezavo več kot enega elektrona na nečistočo. Pokaži, da je primerna posplošitev enačbe (2) spodnji izraz:

$$\frac{N_d}{1 + \frac{1}{2}\left(\sum e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}\right)^{-1}} \tag{3}$$

2 REŠITEV

(a) V kolikor obravnavamo vsa stanja elektronov za primer, ko lahko donor v kristal odda 2 elektrona, ugotovimo da imamo naslednja možna stanja:
- elektron ni zasedel stanja,
- 1 elektron zasedel stanje, kar pomeni, da imamo dva možna stanja $(\uparrow, \downarrow)$,
- 2 elektrona sta zasedla stanje, vendar nam Paulijeve prepoved dovoli le eno takšno stanje $(\uparrow\downarrow)$

Vsega skupaj imamo 4 stanja. Razvijemo vrste v splošnem izrazu za izračun povprečnega števila elektronov v termičnem ravnovesju:

$$\begin{aligned}
\langle n \rangle &= \frac{\sum N_j e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}{\sum e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}} &(4)\\
&= \frac{2e^{-\beta(\epsilon_d - \mu)} + 2e^{-\beta(2\epsilon_d + \Delta - 2\mu)}}{1 + 2e^{-\beta(\epsilon_d - \mu)} + e^{-\beta(2\epsilon_d + \Delta - 2\mu)}} &(5)\\
&= \frac{2e^{-\beta(\epsilon_d - \mu)}\left(1 + e^{-\beta(\epsilon_d + \Delta - \mu)}\right)}{1 + e^{-\beta(\epsilon_d - \mu)}\left(2 + e^{-\beta(\epsilon_d + \Delta - \mu)}\right)} &(6)
\end{aligned}$$

Števec in imenovalec delimo z $2e^{-\beta(\epsilon_d - \mu)}$ in dobimo:

$$\langle n \rangle = \frac{1 + e^{-\beta(\epsilon_d + \Delta - \mu)}}{\frac{1}{2}e^{\beta(\epsilon_d - \mu)} + 1 + \frac{1}{2}e^{-\beta(\epsilon_d + \Delta - \mu)}} \tag{7}$$

Prepričamo se, da je rezultat enak enačbi (1), le pomnožen s številom donorjev N_d.

(b) Pogledamo enačbo (1) in limitiramo $\Delta \to \infty$. Členi, v katerih je v eksponentu argument Δ, imajo vsi negativen predznak v eksponentu. Po definiciji eksponentne funkcije dobimo:

$$\lim_{\Delta\to\infty} e^{-\beta(\epsilon_d-\mu+\Delta)} = 0. \tag{8}$$

Če to ugotovitev upoštevamo v enačbi (1), dobimo ravno enačbo (2):

$$n_d = \frac{N_d}{\frac{1}{2}e^{\beta(\epsilon_d-\mu)} + 1}, \tag{9}$$

V drugem primeru gledamo limito, ko gre $\Delta \to 0$. Z malo matematične telovadbe dobimo limito enačbe (1):

$$n_d = \frac{2e^{\beta\mu}}{e^{\beta\epsilon_d} + e^{\beta\mu}}, \tag{10}$$

delimo števec in imenovalec z $e^{\beta\mu}$ in dobimo povprečno število elektronov za proste elektrone:

$$n_d = \frac{2}{e^{\beta(\epsilon_d-\mu)} + 1}, \tag{11}$$

(c) Predpostavimo da imamo N različnih donorskih nivojev v kristalu in tako tudi N različnih energij ϵ_i; $i = 1, \ldots, N$. Naloga (c) predpostavlja, da je dovoljena le enoelektronska zasedenost na posamezni nečistoči. Zopet zapišemo enačbo za povprečno število elektronov v termičnem ravnovesju:

$$\langle n \rangle = \frac{2\sum e^{-\beta(\epsilon_i-\mu)}}{1 + 2\sum e^{-\beta(\epsilon_i-\mu)}}, \tag{12}$$

delimo s števcem in dobimo:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}(\sum e^{-\beta(\epsilon_i-\mu)})^{-1}} \tag{13}$$

V kolikor imamo zelo veliko koncentracijo nečistoč, se zgodi podoben efekt, kot pri opazovanju polprevodnika pri zelo nizki temperaturi. Preneha veljati pogoj:

$$\epsilon_d - \mu \gg k_b T \tag{14}$$
$$\mu - \epsilon_a \gg k_b T, \tag{15}$$

kjer je ϵ_d energija donorjev, ϵ_a energija akceptorev, μ pa je kemijski potencial. Nečistoče niso več popolnoma ionizirane s pomočjo termičnega vzbujanja, posledično pa se nam zmanjša gostota prevodnih elektronov.