

10. Elektrický transport

Pohyblivé náboje, vznikající excitací donorových, akceptorových nebo valenčních stavů, nesou ve vnějším elektrickém poli elektrický proud. Těmito „nosiči náboje“ jsou elektrony a/nebo díry. Ve slabých polích je proud úměrný intenzitě elektrického pole (Ohmův zákon).

Kvaziklasické přiblížení

Předpokládejme plyn neinteragujících elektronů vložený do externího pole s potenciálem Φ nezávislým na čase. Amplituda pravděpodobnosti nalezení nosiče v místě r se řídí časově závislou Schroedingerovou rovnicí

$$\left[H_0 - e\Phi(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t), \quad (10.1)$$

kde H_0 je jednoelektronový Hamiltonián krystalu bez vnějšího pole. Pokud se vnější pole mění málo na vzdálenostech řádu mřížkové konstanty, použijeme aproximaci efektivní hmotnosti podobně jako v případě popisu příměsových stavů. Pro určitost budeme popisovat elektrony ve stavech kolem dna vodivostního pásu, s izotropní disperzní relací

$$E_c(\vec{k}) = E_c(0) + \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2m^*}. \quad (10.2)$$

Analogicky ke vztahu (7.16) pro obálky Wannierových funkcí dostaneme časově závislou rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{\vec{R}} - e\Phi(\vec{R}) \right] C(\vec{R}, t) = \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E_c(0) \right] C(\vec{R}, t). \quad (10.3)$$

Poloha vlnového klubka je ovlivněna přítomností vnějšího pole, v kvaziklasické aproximaci v souladu s Newtonovou pohybovou rovnicí pro kvazičástici s hmotností m^* . Působící síla je gradientem potenciálu a udílí kvazičástici konstantní zrychlení. Bez „odporu“ proti zrychlování by driftová rychlost a elektrický proud neomezeně rostly s časem. V souladu s pozorovaným chováním vložíme do pohybové rovnice „tlumicí člen“, který vykompenzuje zrychlení kvazičástice vnějším polem. Poloha elektronu se pak řídí pohybovou rovnicí

$$m^* \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + \frac{m^*}{\tau} \frac{d\vec{r}}{dt} = -e\vec{E} , \quad (10.4)$$

kde E je intenzita elektrického pole (gradient potenciálu) a τ „relaxační doba“, tedy (střední) doba, za kterou elektron prodělá srážku vynulující jeho driftovou rychlost. Druhý člen na levé straně (10.4) se také označuje jako brzdicí. Po odeznění přechodových jevů má nosič náboje řídicí se pohybovou rovnicí konstantní driftovou rychlost v_d , což je přídavek k tepelné rychlosti způsobený přítomností vnějšího pole. Podmínkou dosažení stacionárního stavu je zřejmě nulové zrychlení, neboli hodnota driftové rychlosti

$$\vec{v}_d = \left\langle \frac{d\vec{r}}{dt} \right\rangle = -\frac{e\tau}{m^*} \vec{E} . \quad (10.5)$$

Úvahu o driftové rychlosti a zrychlení vlnového klubka můžeme provést také následujícím způsobem: jde o grupovou rychlost (rychlost přenosu energie) velikosti

$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk} . \quad (10.6)$$

Síla F vykoná za čas dt práci, o kterou se zvětší energie klubka:

$$dE(k) = F v_g dt = \hbar v_g dk , \quad F = \hbar \frac{dk}{dt} . \quad (10.7)$$

Zrychlení způsobené silou F je tedy

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F = \frac{F}{m^*}, \quad (10.8)$$

kde jsme použili kvadratickou disperzní relaci (10.2).

Proudová hustota, vodivost, pohyblivost

Náboj přenesený jednotkovou plochou za jednotku času je proudová hustota j ; pro objemovou hustotu nosičů n dostáváme

$$\vec{j} = -ne\vec{v}_d = \frac{ne^2\tau}{m^*} \vec{E}. \quad (10.9)$$

S izotropní disperzní relací (10.2) je konstanta úměrnosti mezi proudovou hustotou a intenzitou pole skalární vodivost σ :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}. \quad (10.10)$$

V anizotropním krystalu zřejmě nemusí být směr proudu a pole stejný a vodivost je tenzorem řádu 2,

$$\vec{j} = \hat{\sigma} \vec{E}. \quad (10.11)$$

Vodivost závisí na čtverci náboje nosiče (proud je úměrný náboji a rychlosti jeho přesunu, která je také úměrná náboji díky působící elektrické síle), proto se proudy nesené elektrony a děrami sčítají.

Protože koncentrace nosičů v polovodiči může významně záležet na teplotě, je vhodné udávat pohyblivost μ :

$$\vec{v}_d = \mu \vec{E} . \quad (10.12)$$

Z předchozího rozboru vychází pro pohyblivost relace

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} . \quad (10.13)$$

Pohyblivost a koncentrace elektronů (e) a děr (h) se mohou lišit, výsledná vodivost je zřejmě

$$\sigma = e(n_e \mu_e + n_h \mu_h) . \quad (10.14)$$

Charakteristické pohyblivosti elektronů a děr při pokojové teplotě jsou (v cm²/Vs)

	elektrony	díry
Si	1300	500
GaAs	8800	400

Boltzmannova transportní rovnice

Pravděpodobnost obsazení pásového stavu s energií E_k v krystalu bez vnějšího pole je dána Fermi-Diracovou statistikou,

$$f_{\vec{k}}^0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{\vec{k}} - E_F}{kT}\right) + 1} , \quad (10.15)$$

kde E_F je Fermiho energie (chemický potenciál). Přítomnost vnějšího pole a srážkových mechanismů tyto pravděpodobnosti mění; ve slabém poli (s malou intenzitou E) ponecháme v Taylorově rozvoji změny za jednotku času jen lineární člen:

$$\left(\frac{df_{\vec{k}}}{dt}\right)_{\vec{E}} = \frac{df_{\vec{k}}^0}{dE_{\vec{k}}} \frac{dE_{\vec{k}}}{dt} = \frac{df_{\vec{k}}^0}{dE_{\vec{k}}} \left[\frac{d\vec{r}_{\vec{k}}}{dt} \cdot (-e\vec{E}) \right] = -\frac{df_{\vec{k}}^0}{dE_{\vec{k}}} (e\vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{E}), \quad (10.16)$$

kde jsme jako v_k označili rychlost klubka centrovaného v poloze r v přímém prostoru a kolem vlnového vektoru k v reciprokém prostoru.

V ustáleném stavu se pravděpodobnosti obsazení jednoelektronových stavů v čase nemění; v aproximaci relaxační doby τ_k je tedy

$$\frac{df_{\vec{k}}}{\tau_{\vec{k}}} = -\left(\frac{df_{\vec{k}}}{dt}\right)_{\vec{E}}, \quad (10.17)$$

neboli

$$df_{\vec{k}} = \frac{df_{\vec{k}}^0}{dE_{\vec{k}}} e\tau_{\vec{k}} (\vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{E}). \quad (10.18)$$

Ze vztahu (10.15) vychází následující výsledek pro hustotu proudu („Ohmův zákon“):

$$\vec{j} = \int_{BZ} e\vec{v}_{\vec{k}} (f_{\vec{k}}^0 + df_{\vec{k}}) d^3\vec{k} = e^2 \int_{BZ} \tau_{\vec{k}} \vec{v}_{\vec{k}} \frac{df_{\vec{k}}^0}{dE_{\vec{k}}} (\vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{E}) d^3\vec{k}. \quad (10.19)$$

V dalším postupu budeme předpokládat nedegenerovaný elektronový plyn s parabolickou disperzní relací (10.2); zanedbání jedničky ve jmenovateli Fermi-Diracovy statistiky (10.15) vede k Boltzmannově statistice

$$f_{\vec{k}}^0 = \exp\left(\frac{E_F - E_{\vec{k}}}{kT}\right) = \exp\left(\frac{E_F - E_c(0)}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*kT}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\right). \quad (10.20)$$

Možné hodnoty k považujeme jako obvykle za (kvazi)kontinuum; „Gaussovský profil“ statistiky ze vztahu (10.20) má v každém ze tří směrů reciprokého prostoru disperzi

$$D(k_x) = D(k_y) = D(k_z) = \frac{m^*kT}{\hbar^2}. \quad (10.21)$$

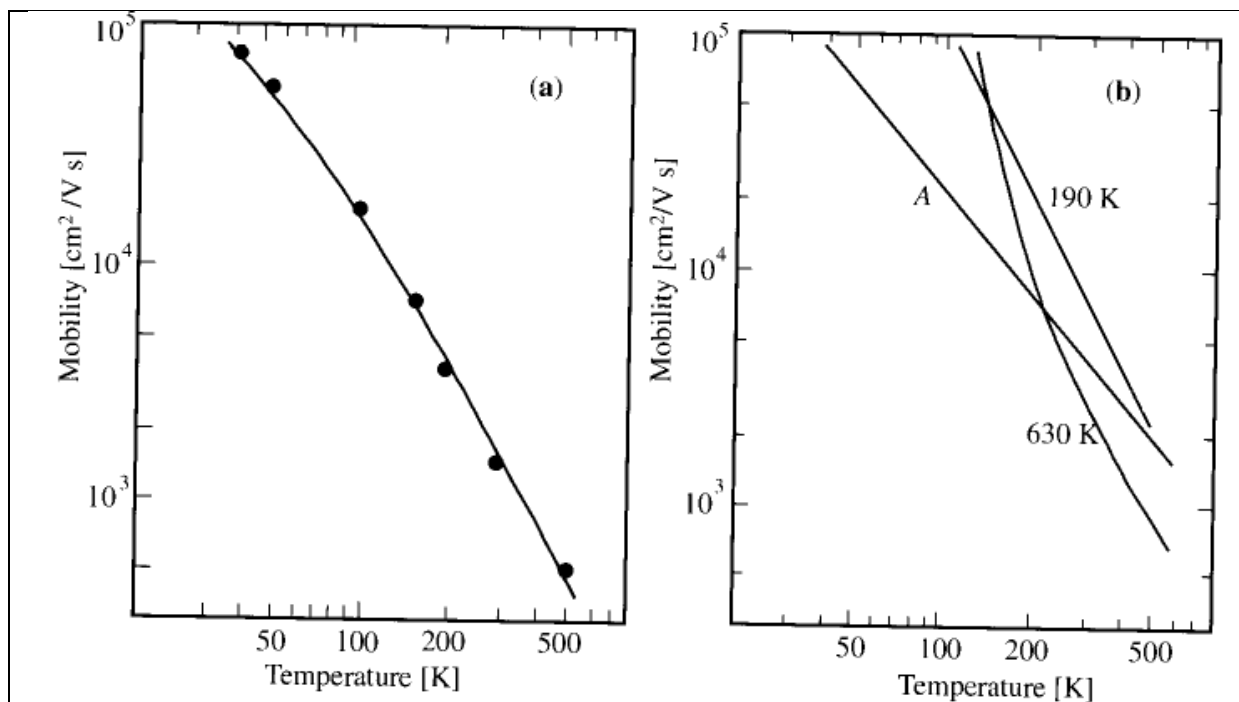
S izotropní disperzní relací jsou směry intenzity elektrického pole, driftové rychlosti a proudové hustoty stejné. Budeme tedy počítat skalární vodivost σ ; integrály v k -prostoru v (10.19) vyjádříme s pomocí hustoty stavů jako integrály přes energie. Hustota stavů v jednotkovém objemu, se započtením spinové degenerace, je podle (2.18)

$$\frac{D(E)}{V} = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E - E_c} \text{ pro } E > E_c. \quad (10.22)$$

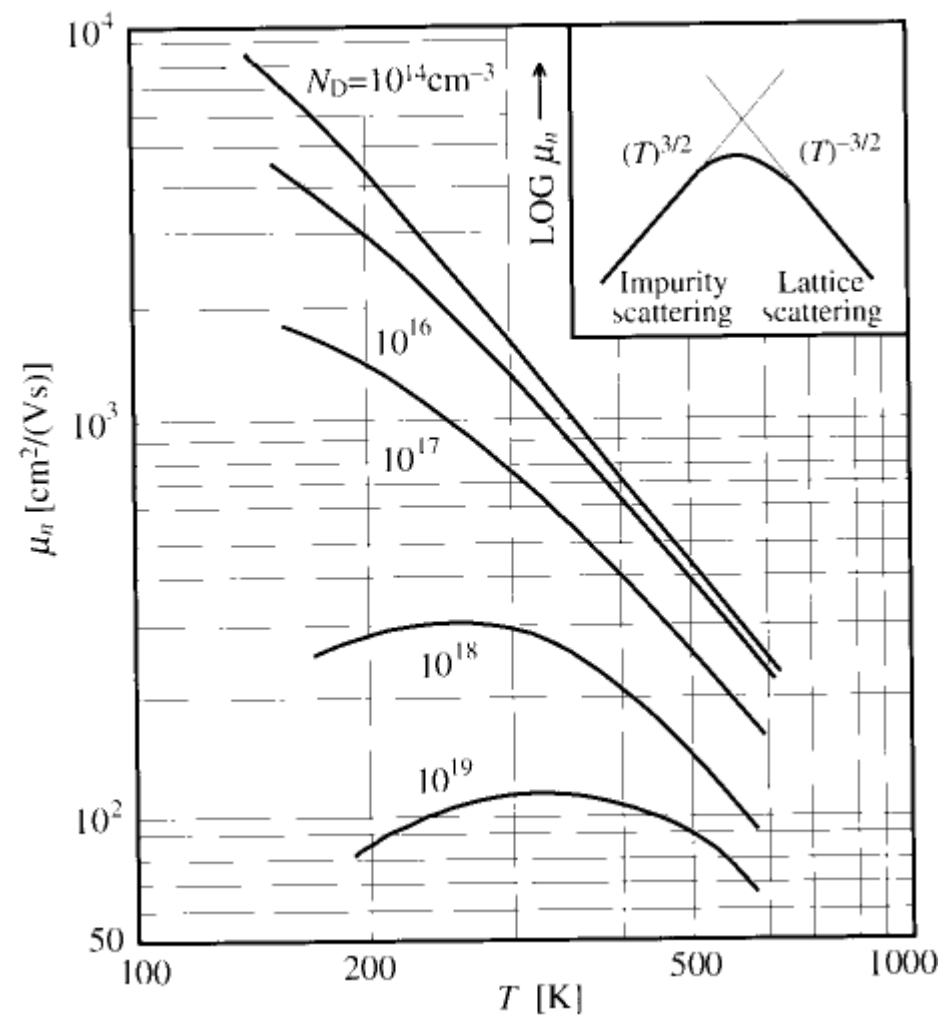
Vztah (10.19) dává skalární vodivost ve tvaru

$$\sigma = \frac{e^2}{3\pi^2 m^* kT} \int_0^\infty \tau(E) v^2(E) D(E) dE. \quad (10.23)$$

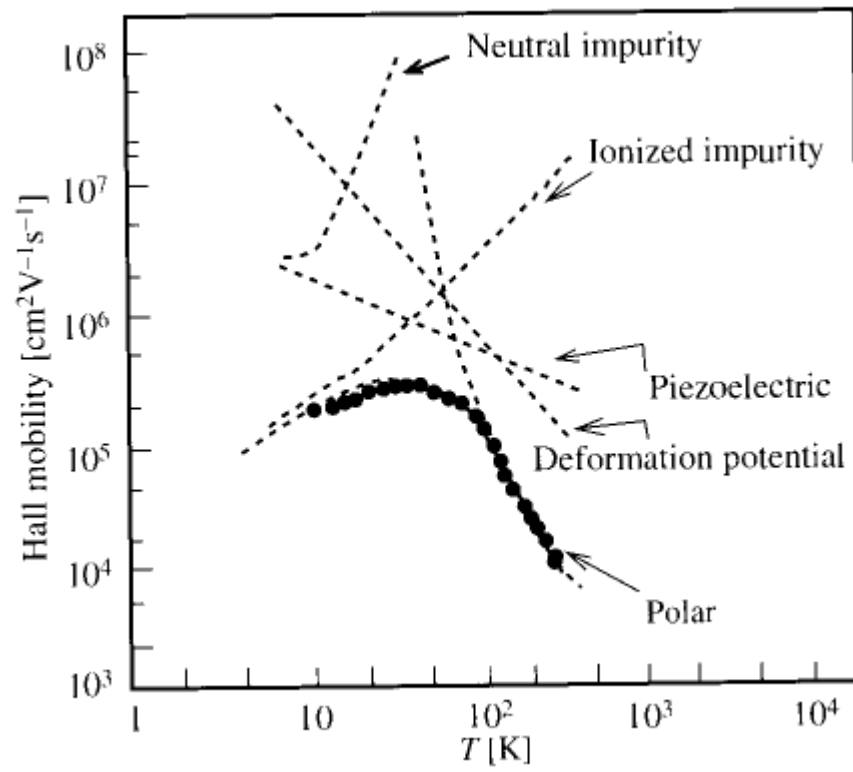
S konkrétní závislostí relaxační doby na energii můžeme modelovou představu o vodivosti zlepšit.



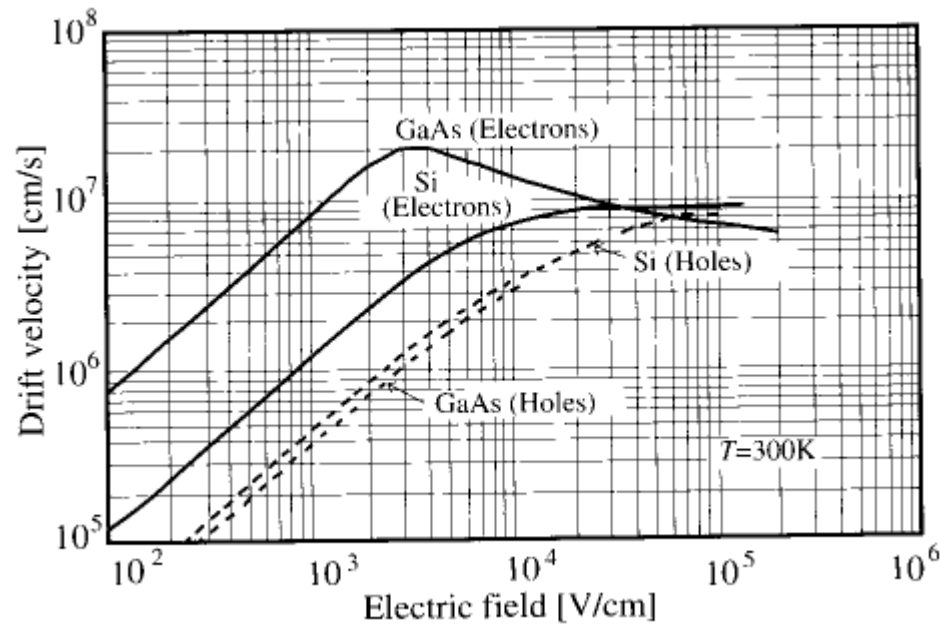
Změřená teplotní závislost pohyblivosti slabě legovaného n-typu Si (levý panel), spočtené příspěvky rozptylu na různých fononech (pravý panel: A - akustické fonony uvnitř vodivostních minim, 190 a 630 K – intervalley rozptyl s fonony s různými energiemi).



Teplotní závislost pohyblivosti n-typu Si pro různé úrovně koncentrace donorů.



Teplotní závislost pohyblivosti n-typu GaAs a příspěvky různých typů rozptylu.



Driftová rychlost elektronů a děr v GaAs a Si v závislosti na intenzitě vnějšího pole.

**Přechod kov-izolátor v silně legovaných polovodičích
(MIT, “Metal-Insulator Transition”)**

definice pomocí stejnosměrné (dc) vodivosti:

$$\begin{aligned}\sigma(T) &> 0 \quad \text{pro } T \rightarrow 0 \dots \text{kov,} \\ \sigma(0) &= 0 \quad \dots \text{izolator.}\end{aligned}\tag{10.24}$$

Přehled Si:P z Loehneysen 1998

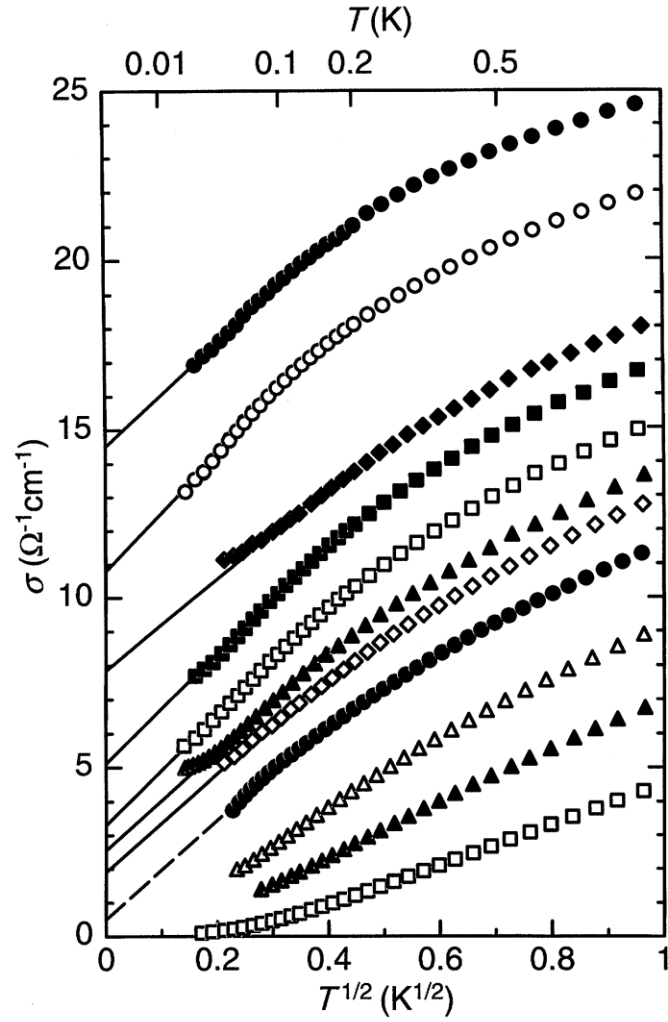


Figure 1. Electrical conductivity σ versus \sqrt{T} of Si:P close to the MIT. P concentrations (in 10^{18} cm^{-3}) are from top to bottom: 3.69, 3.67, 3.63, 3.60, 3.58, 3.56, 3.55, 3.52, 3.50, 3.45, 3.38 (after Stupp *et al.* 1993).

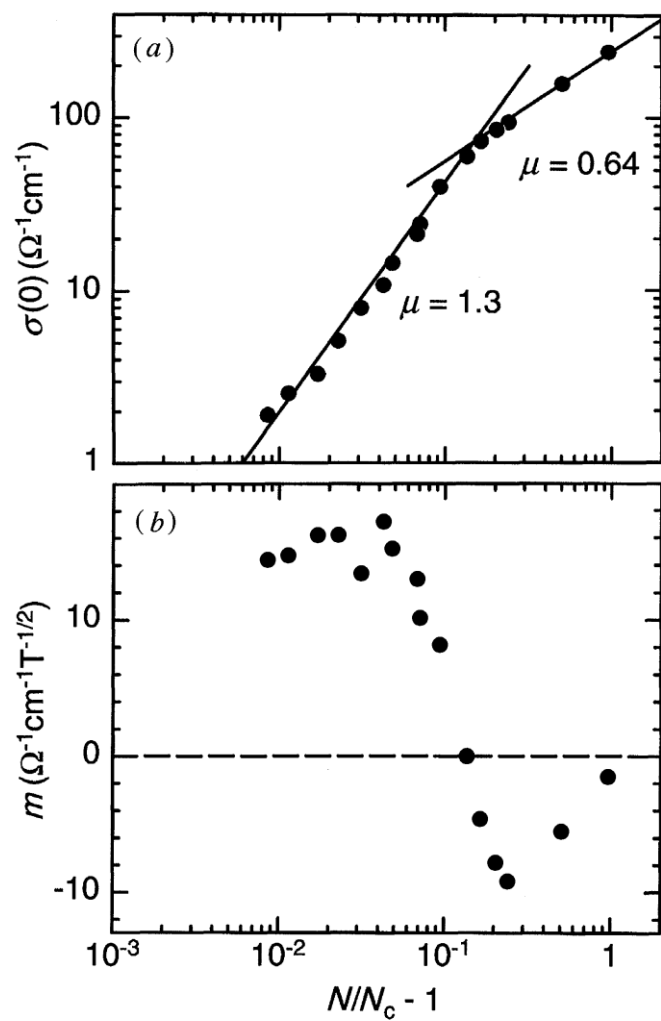


Figure 2. (a) $\sigma(0) = \sigma(T \rightarrow 0)$ and (b) $m = d\sigma/d\sqrt{T}$ versus reduced concentration $N/N_c - 1$, with $N_c = 3.52 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ (after Stupp *et al.* 1993).

Pohyblivost elektronů v grafénu

ovlivněná substrátem (z Ferry2013)

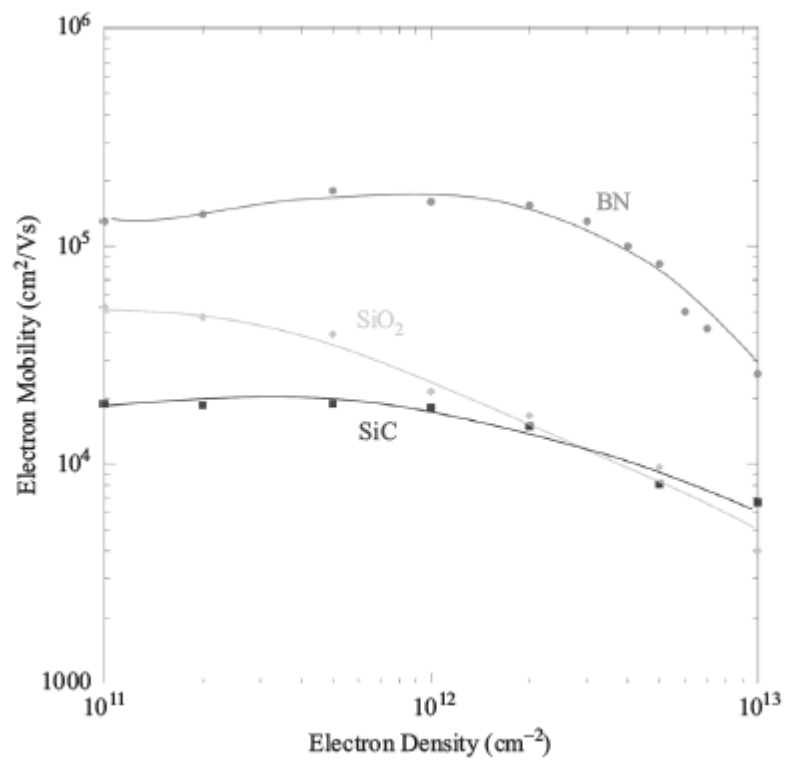


Figure 5.1. The 300 K mobility in graphene, on several different substrates, as a function of the electron density.