

**Zadatak 1.**

Poluvodič silicija ima istu kristalnu strukturu kao i dijamant. U kubičnoj ćeliji stranice  $a = 5,43 \text{ \AA}$  nalazi se 8 atoma.

- (i) Odrediti broj atoma silicija u kubičnom metru kristala i odrediti gustoću materijala  $\rho$  !
- (ii) Odrediti koncentraciju elektrona u vodljivoj vrpici na temperaturi  $T = 300 \text{ K}$ , ako je poluvodički procijep  $E_g = 1,114 \text{ eV}$ , i ako su efektivne mase elektrona i šuplina su  $0,26 m_e$  i  $0,49 m_e$  redom, gdje je  $m_e$  elektronska masa.
- (iii) Za koliko se puta koncentracija elektrona u vodljivoj vrpici poveća, ako se kristal onečisti s fosforom 1% težinski. Neka je ionizacijska energija donorskih stanja fosfora  $0,044 \text{ eV}$ .

$$(M_{Si} = 28 \text{ amu}, M_P = 30,975 \text{ amu}, \text{amu} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}, k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}, h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}, 1 \text{ eV} = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J})$$

**Rješenje:**

- (i) Broj atoma silicija u jednom kubičnom metru je:

$$N_{Si} = \frac{8}{a^3} = \frac{8}{161,28} 10^{30} m^{-3} = 4,96 \cdot 10^{28} m^{-3}.$$

Gustoća je:

$$\rho = N_{Si} \cdot 28 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 2,31 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}.$$

Broj atoma silicija u kubičnom metru je  $4,96 \cdot 10^{28}$ , a gustoća je jednaka  $2,31 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ .

- (ii) Koncentracija vodljivih elektrona u intrinzičnom poluvodiču je jednaka:

$$N(T) = 2 \frac{(2\pi k_B T)^{3/2}}{h^3} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}.$$

Faktor u eksponentu izraza za koncentraciju elektrona na temperaturi  $T = 300 \text{ K}$  je:

$$\frac{E_g}{2k_B T} = \frac{1,114 \cdot 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300 \text{ J}} = 21,53,$$

pa je iznos eksponencijalne funkcije:  $e^{-21,53} = 4,46 \cdot 10^{-10}$ .

Prefaktor ispred eksponencijalne funkcije je:

$$N_1 = 2 \frac{(2\pi k_B T)^{3/2}}{h^3} (m_e^* m_h^*)^{3/4} = 2 \left( \frac{2\pi \cdot 300 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}{(6,62620)^2 \cdot 10^{-68} \text{ J}^2 \text{ s}^2} \right)^{3/2} (0,26 \cdot 0,49)^{3/4}$$

$$= 2 \left( \frac{2,37}{43,91} \right)^{3/2} (0,127)^{3/4} 10^{27} m^{-3} = 5,3487 \cdot 10^{24} m^{-3}.$$

Ovdje konačno izlazi da je

$$N(300 \text{ K}) = 5,3487 \cdot 10^{24} \cdot 4,46 \cdot 10^{-10} m^{-3} = 2,39 \cdot 10^{15} m^{-3}.$$

Koncentracija elektrona u vodljivoj vrpici je  $N = 2,39 \cdot 10^{15} m^{-3}$

(iii) U poluvodiču s donorskim primjesama broj elektrona u vodljivoj vrpici je:

$$N = \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} e^{-\frac{E_c - E_d}{2k_B T}},$$

gdje je

$$N_c = 2 \frac{(2\pi m_e^* k_B T)^{3/2}}{h^3},$$

$N_d$  je koncentracija primjesa, a  $E_c - E_d$  je energija ionizacije (donorskih) primjesa. Gustoća primjesa je 1% gustoće materijala:

$$N_d \cdot M_P = 0,01 \cdot N_{Si} M_{Si},$$

odnosno

$$N_d = N_{Si} \cdot 0,01 \frac{M_{Si}}{M_P} = 4,96 \cdot 10^{28} m^{-3} \cdot 0,01 \frac{28}{30,975} = 4,48 \cdot 10^{26} m^{-3}.$$

Koncentracija  $N_c$  proporcionalna je koncentraciji  $N_1$ , koju smo našli već u prethodnom dijelu zadatka:

$$N_c = N_1 \cdot \left(\frac{m_e^*}{m_h^*}\right)^{3/4} = 5,3487 \cdot 10^{24} m^{-3} \cdot 0,622 = 3,325 \cdot 10^{24} m^{-3}.$$

Iznos eksponenta je:

$$\frac{0,044 \cdot 1,60 \cdot 10^{-19} J}{2 \cdot 300 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}} = 0,85.$$

Konačno dobivamo da je koncentracija elektrona u vodljivoj vrpici:

$$N = \sqrt{\frac{4,48 \cdot 10^{26} \cdot 3,325 \cdot 10^{24}}{2}} e^{-0,85} = 2,73 \cdot 10^{25} m^{-3} \cdot 4,27 \cdot 10^{-1} = 1,167 \cdot 10^{25} m^{-3}.$$

Odnos koncentracija je:

$$\frac{1,167 \cdot 10^{25}}{2,39 \cdot 10^{15}} = 0,49 \cdot 10^{10}.$$

Koncentracija elektrona u vodljivoj vrpici se je povećala za  $0,49 \cdot 10^{10}$  puta.

## Zadatak 2.

Energija jedne od elektronskih vrpici u nekom materijalu može se približno opisati ovim izrazom:

$$E(\vec{k}) = -t_1 \sqrt{6 + \cos(a \cdot k_x) + 2 \cos\left(\frac{a \cdot k_x}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{a \cdot k_y \sqrt{3}}{2}\right)} - 2 t_2 \cos(c \cdot k_z),$$

gdje su  $t_1 = 0,80$  eV i  $t_2 = 0,46$  eV.

Izračunati tenzor efektivne mase elektrona za valni vektor  $\vec{k} = (0,0,0)$ . Neka su  $a$  i  $c$  jednaki  $3,083$  i  $3,521$  Å redom.

### Rješenje:

Umjesto da se efektivna masa računa direktno deriviranjem energije:

$$\left(\frac{1}{m_{eff}}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j},$$

izraz za energiju razvit ćemo u Taylorov red potencija do članova drugog reda po komponentama valnog vektora.

Dakle izraz pod korjenom je:

$$\begin{aligned} 6 + \left(1 - \frac{(ak_x)^2}{2}\right) + 2 \left(1 - \frac{(ak_x)^2}{8} - \frac{3(ak_y)^2}{8}\right) &\approx 9 - 3 \left(\frac{(ak_x)^2 + (ak_y)^2}{4}\right) \\ &= 9 \left(1 - \frac{(ak_y)^2 + (ak_x)^2}{12}\right). \end{aligned}$$

Stoga je konačni razvoj energije oko točke  $\vec{k} = (0,0,0)$  dana ovim izrazom:

$$E(\vec{k}) \approx -3t_1 - 2t_2 + t_1 \frac{(ak_y)^2 + (ak_x)^2}{8} + t_2 (ck_z)^2$$

Oдавде izlazi da je tenzor efektivne mase elektrona dijagonalna matrica, te da su mase u x i y smjeru iste i jednake

$$m_{xx} = m_{yy} = \frac{4\hbar^2}{t_1 a^2} = \frac{2(1,055)^2 10^{-68} J^2 s^2}{0,80 \cdot 1,60 \cdot 10^{-19} J (3,083)^2 10^{-20} m^2} = 3,66 \cdot 10^{-30} kg = 4,0 m_e,$$

dok je masa u z smjeru jednaka

$$m_{zz} = \frac{\hbar^2}{2t_2 c^2} = \frac{(1,055)^2 10^{-68} J^2 s^2}{2 \cdot 0,46 \cdot 1,60 \cdot 10^{-19} J (3,521)^2 10^{-20} m^2} = 6,1 \cdot 10^{-31} kg = 0,65 m_e.$$

Tenzor efektivne mase elektrona za valni vektor  $\vec{k} = (0,0,0)$  je dijagonalna matrica, gdje su  $m_{xx} = m_{yy} = 4 m_e$ , a  $m_{zz} = 0,65 m_e$ .

### Zadatak 3.

Neka je broj akustičkih fonona po elementarnoj ćeliji na temperaturi  $T = 30$  K jednak 0,13. Odrediti Debyeovu temperaturu  $\Theta$  ! Odrediti maksimalnu frekvenciju akustičkih fonona !

### Rješenje:

Omjer broja akustičkih fonona i broja elementarnih ćelija je jednak:

$$18 \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} = 21,636 \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3.$$

Oдавдје izlazi da je:

$$\left(\frac{T}{\Theta}\right) = \left(\frac{0,13}{21,636}\right)^{1/3} = 0,1817,$$

odnosno Debyeova temperatura je:

$$\Theta = \frac{30K}{0,1817} = 165K.$$

Maksimalna fononska frekvencija je:

$$\nu_{max} = k_B\Theta/h = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} JK^{-1} \cdot 165K}{6,63 \cdot 10^{-34} Js} = 3,25 \cdot 10^{12} Hz.$$