

講義資料

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/StatisticsC/index.html>

統計力学 (C)

フロンティア材料研究所 神谷利夫

元素戦略研究センター 松石 聡

講義予定 火・金 16:15~17:55

- | | | | |
|------|-------|--|------|
| 第01回 | 10/2 | 熱力学第一法則 | (松石) |
| 第02回 | 10/6 | 熱力学第二法則、熱力学関数 | (松石) |
| 第03回 | 10/13 | 気体分子運動論 | (松石) |
| 第04回 | 10/16 | 古典統計力学の基礎 I (気体分子運動論とMaxwell-Boltzmann分布) | (松石) |
| 第05回 | 10/20 | 古典統計力学の基礎 II
(微視的状态の数、エルゴード仮説、Boltzmann分布) | (松石) |
| 第06回 | 10/23 | カノニカル分布とグランドカノニカル分布 | (松石) |
| 第07回 | 10/27 | 量子統計力学の基礎 I (Fermi-Dirac分布、Bose-Einstein分布) | (神谷) |
| 第08回 | 10/30 | 量子統計力学の基礎 II (正準分布)
理想Bose気体、固体の比熱 (Einsteinの比熱式) | (神谷) |
| 第09回 | 11/6 | 休講 | |
| 第10回 | 11/10 | 理想Bose気体、固体の比熱 (Debyeの比熱式)、光子と黒体放射 | (神谷) |
| 第11回 | 11/13 | 理想Fermi気体、金属中の電子 | (神谷) |
| 第12回 | 11/17 | 半導体中の電子、Fermi準位、ドーピング | (神谷) |
| 第13回 | 11/20 | スピン系の磁化率 | (神谷) |
| 第14回 | 11/24 | Bose-Einstein凝縮 | (神谷) |
| 第15回 | 12/1 | 試験 (Zoom、資料持ち込み可。15:15までにZoomに入室すること) | |

課題 (11/13)

- 講義時間内 (~17:55) に解き、できたところまでを18:25までに OCWi より提出せよ。
- 手書きが要求される問題は、写真を撮って提出してもよい。
- 電子ファイルで提出できる場合は、なるべく MS-Word、Excel、PowerPoint、PDFファイルで提出すること。
- 解答ページには、学籍番号と氏名を書くこと

問題1 自由電子モデルにおいて、フェルミエネルギー E_F と、伝導帯内で E_F までのエネルギーを占めている自由電子密度 $N(E_F)/V$ は $N(E_F)/V = (2S + 1) \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{2}{3} E_F^{3/2}$ の関係がある。電子密度 $N(E_F)/V$ を横軸、 E_F を縦軸にとったグラフを描け。

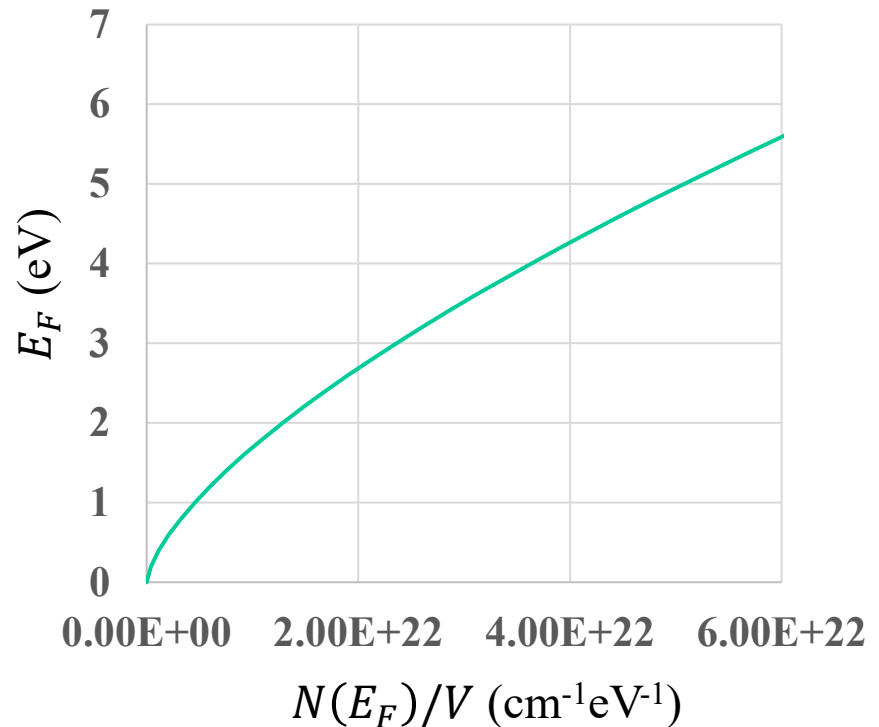
課題解答 (11/13)

問題1 自由電子モデルにおいて、フェルミエネルギー E_F と、伝導帯内で E_F までのエネルギーを占めている自由電子密度 $N(E_F)/V$ は $N(E_F)/V = (2S + 1) \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{2}{3} E_F^{3/2}$ の関係がある。電子密度 $N(E_F)/V$ を横軸、 E_F を縦軸にとったグラフを描け。

金属のFermi準位.xlsx

フェルミ準位の電子密度依存性

$$E_F = \left((2S + 1) \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{2}{3} \right)^{-1} \left(\frac{N(E_F)}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$$



典型的なミス

- ・ 電子密度の単位を cm^{-3} に変換していない
- ・ E_F の単位を eV に変換していない

状態密度の計算

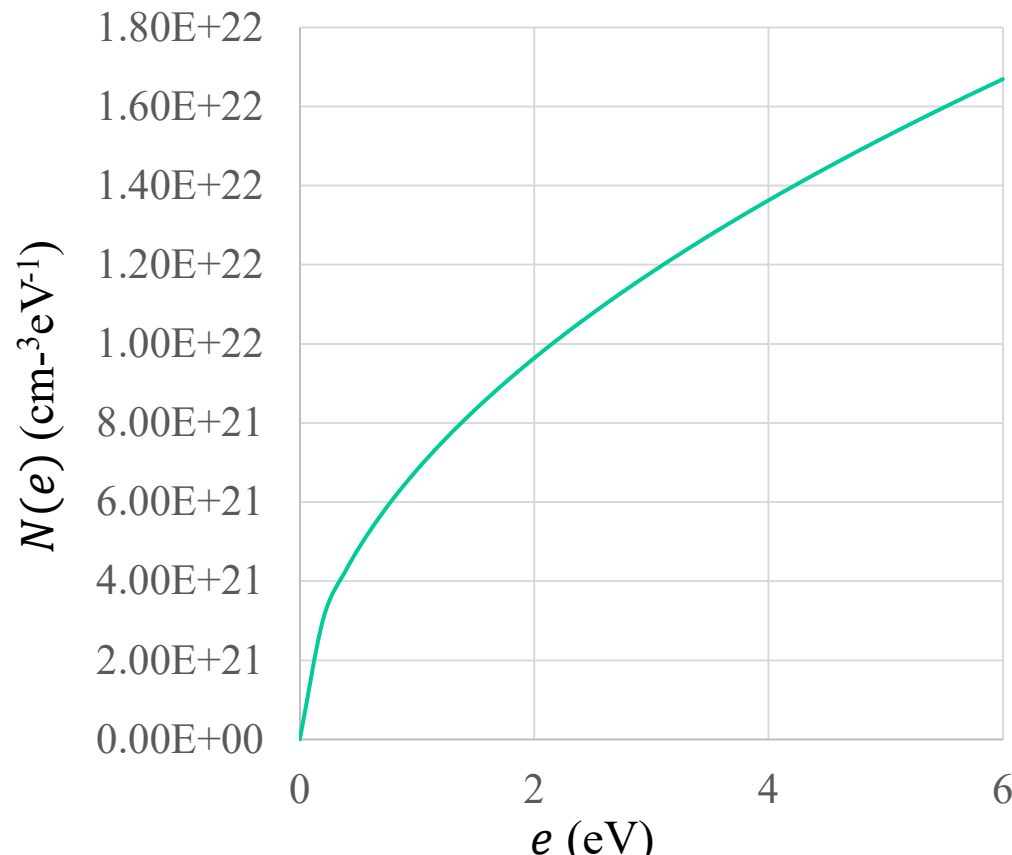
金属のFermi準位.xlsx

$N(E_F)/V$ (cm⁻¹eV⁻¹)

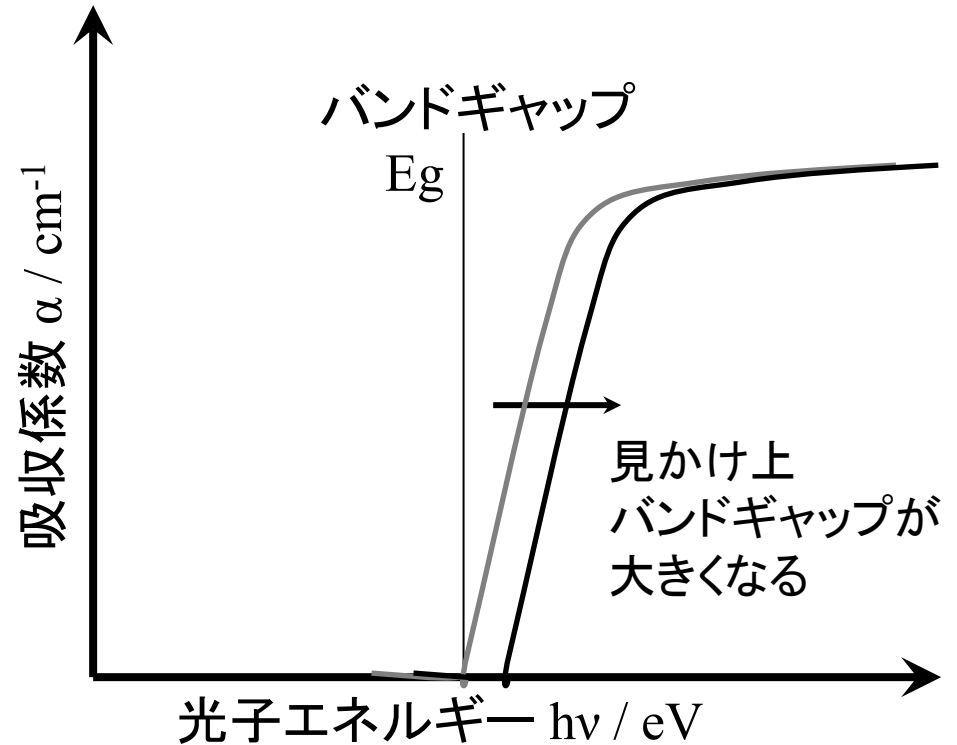
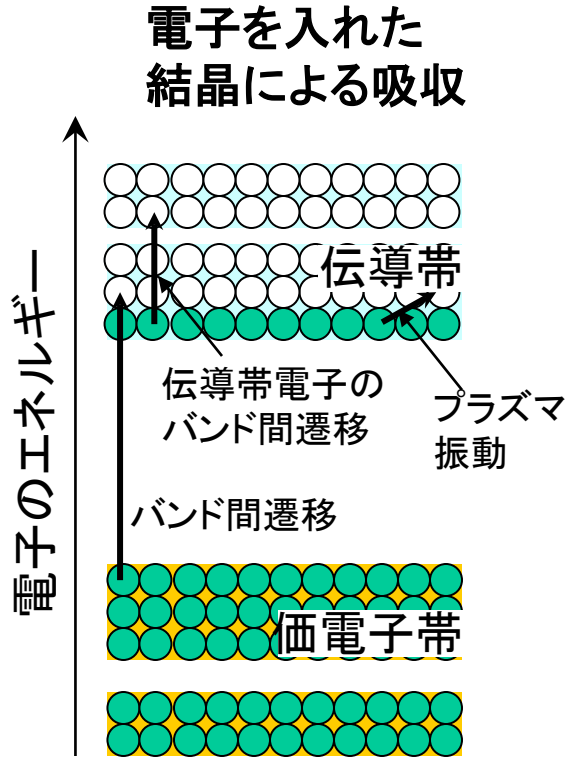
$$N(e) = (2S + 1)V \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{e}$$

注意: $N(e)$ の単位は cm⁻³eV⁻³

・ E_F の単位を eV に変換していない

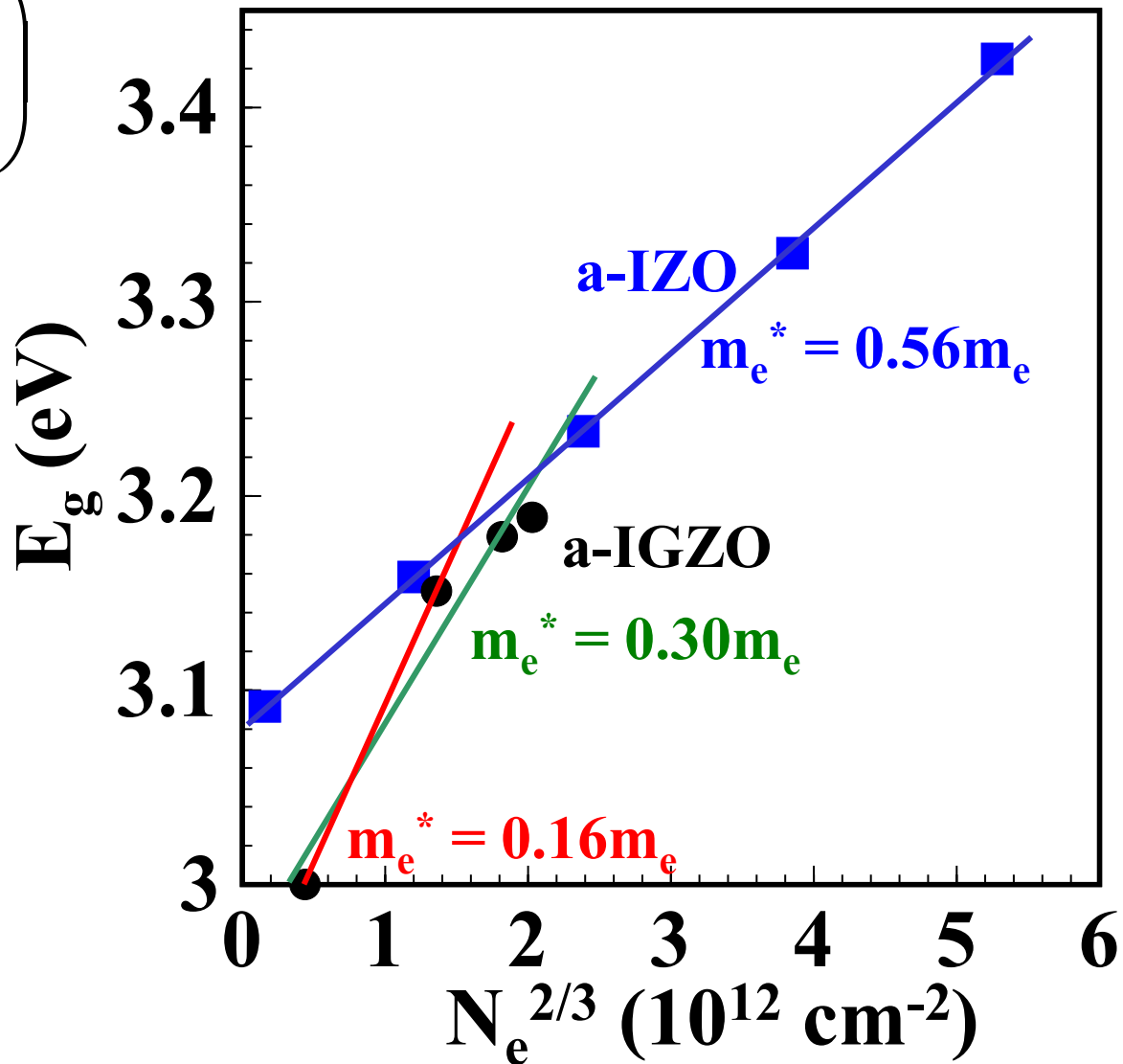
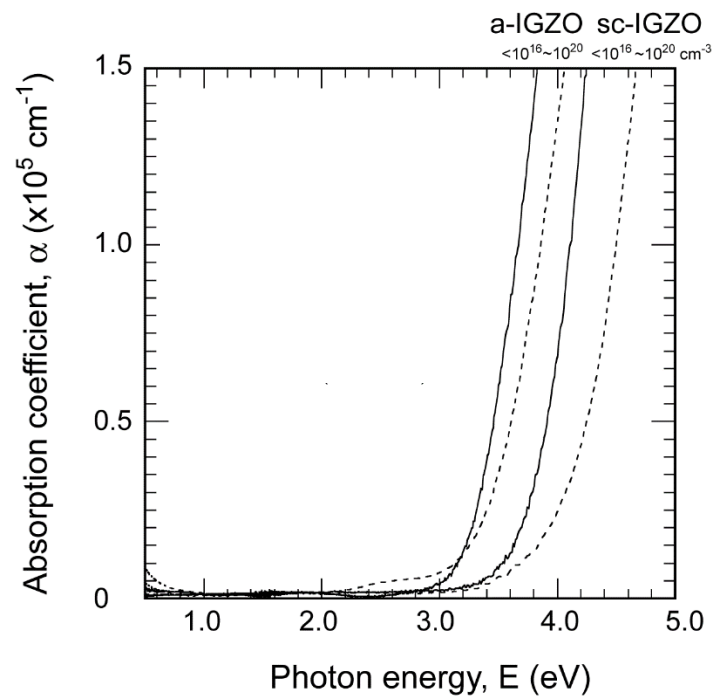


ドーピング半導体の光吸収

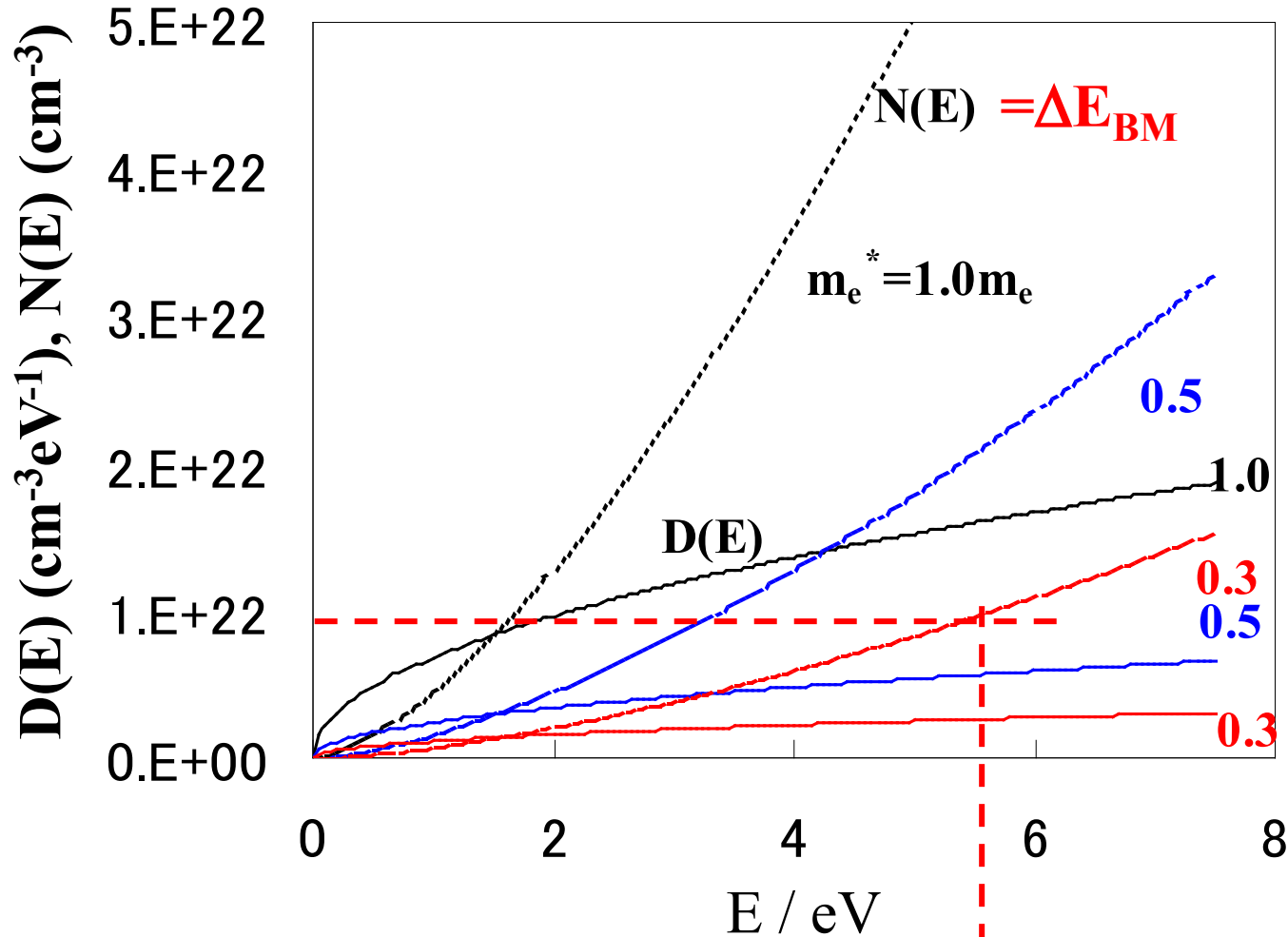


バンドフィリング効果: Burstein-Mossシフト

$$\Delta E_g^{BM} = \frac{h^2}{m_{de}} \left(\frac{3N_e}{16\sqrt{2}\pi} \right)^{2/3}$$



状態密度、電子数とフェルミ準位(BMシフト)



$n = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$: $\Delta E_{\text{BM}} \sim 5.6 \text{ eV}$

課題 (11/17)

- 講義時間内 (~17:55) に解き、できたところまでを18:25までに OCWi より提出せよ。
- 手書きが要求される問題は、写真を撮って提出してもよい。
- 電子ファイルで提出できる場合は、なるべく MS-Word、Excel、PowerPoint、PDFファイルで提出すること。
- 解答ページには、学籍番号と氏名を書くこと

問題1 Boltzmann近似が成立するとして、問(i)に答えよ。
室温の熱エネルギー $k_B T = 0.025$ eV とする。

x	10^2	1	10^{-3}	10^{-6}	10^{-9}
$\ln(x)$	5	0	-7	-14	20

(i) 代表的な半導体であるSiの物性値を次の値とし、キャリア密度 n_e が $10^{10} \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ の時の300Kにおけるフェルミエネルギー $E_C - E_F$ (E_C は伝導帯端のエネルギー) のグラフを描け。伝導帯有効状態密度は $N_C = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ とする。

正準集団のまとめ

小正準集団: N, E 一定の状態が出現する確率 $p(E)$ は等しい

等重率の原理

$$p(E, N) = 1 / W(E, N) \quad W(E, N): \{E, N\} \text{ をとる状態の数 (配置数)}$$

$$S = k_B \ln W(E, N) \Rightarrow \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$$

正準集団: N, T 一定 (外系とエネルギーのやり取りがある)

外系を合わせて全エネルギーが一定になる条件から指数分布が発生

$$p(E, T) \propto \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

大正準集団: μ, T 一定 (外系とエネルギー、粒子のやり取りがある)

外系を合わせて全粒子数が一定になる条件から指数分布が発生

$$p(\mu, T) \propto \exp\left(\frac{n\mu - E}{k_B T}\right)$$

統計分布関数と μ の意味

Maxwellの速度分布関数: 古典力学、理想気体、空間の等方性から導出

$$f(v)drdv = \rho \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) drdv \quad (3.29)$$

Maxwell-Boltzmann分布: 等重率の原理、最大確率の分布

$$f(E) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) = \exp\left(-\frac{E-\mu}{k_B T}\right) \quad (4.29)$$

(大)正準分布: 一般化された統計分布、すべての基本、M-B分布と同じ形

$$\text{大正準分布 } f(E, N) = \exp\left(-\frac{E-N\mu}{k_B T}\right)$$

Fermi-Dirac分布: スピンが半整数(波動関数が粒子の交換で反対称)の粒子

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu)/k_B T]+1} \quad (8.5) \quad (\text{電子})$$

Bose-Einstein分布: スピンが整数(波動関数が粒子の交換で対称)の粒子

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu)/k_B T]-1} \quad (7.20) \quad ({}^4\text{He, スピンのない原子核})$$

Planck分布: スピンが整数、波動関数が対称の粒子で、粒子数が保存されない

$$f(E) = \frac{1}{\exp[E/k_B T]-1} \quad (7.21) \quad (\text{光子、フォノン})$$

μ : 化学ポテンシャル (電子を扱う場合は、フェルミエネルギー E_F)

全粒子数 N の条件から決められる $N = \sum_i f(E_i) = \int D(E)f(E)dE$

分布関数から物理量を求める方法

1. 全粒子数 $\Rightarrow \mu$ を決定

$$N = \sum_i f(E_i) = \int f(E) \mathbf{drdp} = \int \mathbf{D}(E) f(E) dE$$

2. 全エネルギーを計算

$$E = \sum_i E_i f(E_i) = \int E(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \mathbf{drdp} = \int E \mathbf{D}(E) f(E) dE$$

3a. 統計平均として物理量 P を導出

$$P = \sum_i \langle \Psi_i | P | \Psi_i \rangle f(E_i) = \int P(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \mathbf{drdp} = \int P(E) \mathbf{D}(E) f(E) dE$$

3b. 分配関数の微分として物理量を導出

$$\text{平均エネルギー} \quad E = -N \frac{d \ln Z}{d(1/k_B T)} \quad (4.34)$$

$$\text{(平均) 粒子数 } \langle N \rangle \quad \frac{dZ}{dE_i} = -\frac{1}{k_B T} \sum \exp(-E_i/k_B T) = -\frac{1}{k_B T} \langle N \rangle$$

$$\text{(平均) 分極 } \langle \mu \rangle \quad \frac{dZ}{dB} = \frac{1}{k_B T} \sum \mu_i \exp(+\mu_i B/k_B T) = \frac{1}{k_B T} \langle \mu \rangle$$

3c. 自由エネルギーの微分として物理量を導出

$$\text{Helmholtzエネルギー} \quad F = -N k_B T \ln Z \quad (4.41)$$

$$\text{体積弾性率 } B_V : F = F_0 + (1/2) B_V (V/V_0)^2 \Rightarrow B_V = \frac{d^2 F}{d(V/V_0)^2}$$

状態密度 $D(E)$, $g(E)$, $Z(E)$

基本: 分布関数を使って物理量 P の統計平均を直接導出する

$$P \text{ の統計平均 } \langle P \rangle = \sum_i P_i f(E_i) = \frac{\sum_i P_i \exp(-\beta E_i)}{Z} \quad (6.8)$$

(量子統計力学では) 分布関数はエネルギー E の関数で与えられるので、 E における状態の数 **状態密度** $D(E)$ を使ったほうが簡単に計算できる

$$N(E) = D(E) f(E)$$

$$P \text{ の統計平均 } \langle P \rangle = \sum_i P_i f(E_i) = \int P(\mathbf{r}, \mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} d\mathbf{p} = \int P(E) D(E) f(E) dE$$

$$\text{自由電子} : D(E) = (2S + 1)V \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E} \quad (8.31)$$

$$\text{自由フォノン}: g(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^2} \omega^2 \quad (\omega < \omega_D) \quad (9.9)$$

$$\text{光子} : Z(\nu) = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2$$

Fermi-Dirac統計の応用: 理想フェルミ気体

金属中の電子

§ 8.4 有限温度での粒子数、エネルギー

波数 k に関する表式

$$e(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \tag{8.27}$$

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty k^2 \frac{1}{\exp(\beta(e(k)-\mu))+1} dk \tag{8.26}$$

$$U = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty e(k) k^2 \frac{1}{\exp(\beta(e(k)-\mu))+1} dk \tag{8.30}$$

状態密度の「密度」は
体積当たり状態数の
エネルギー密度

エネルギーに関する表式

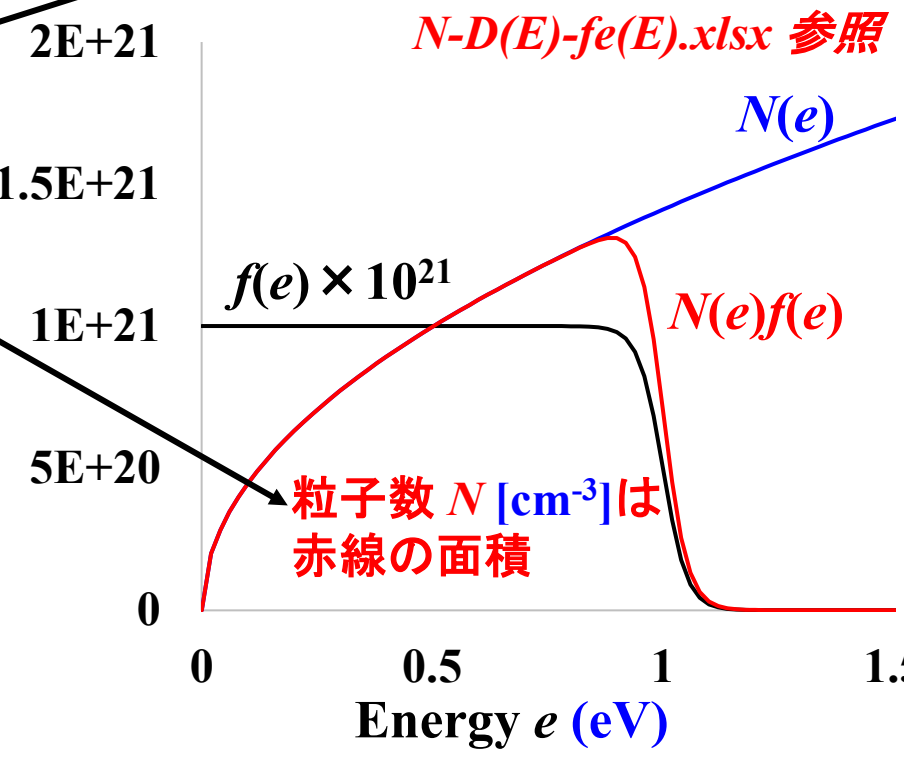
$$N(e) = (2S + 1)V \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{e} \tag{8.32}$$

$$N = \int_0^\infty N(e) f(e) de \tag{8.32}$$

$$U = \int_0^\infty e N(e) f(e) de \tag{8.33}$$

$$f(e) = \frac{1}{\exp(\beta(e-\mu))+1} \tag{8.34}$$

Density of states (cm⁻³eV⁻¹)



粒子数 N [cm⁻³] は
赤線の面積

N-D(E)-fe(E).xlsx 参照

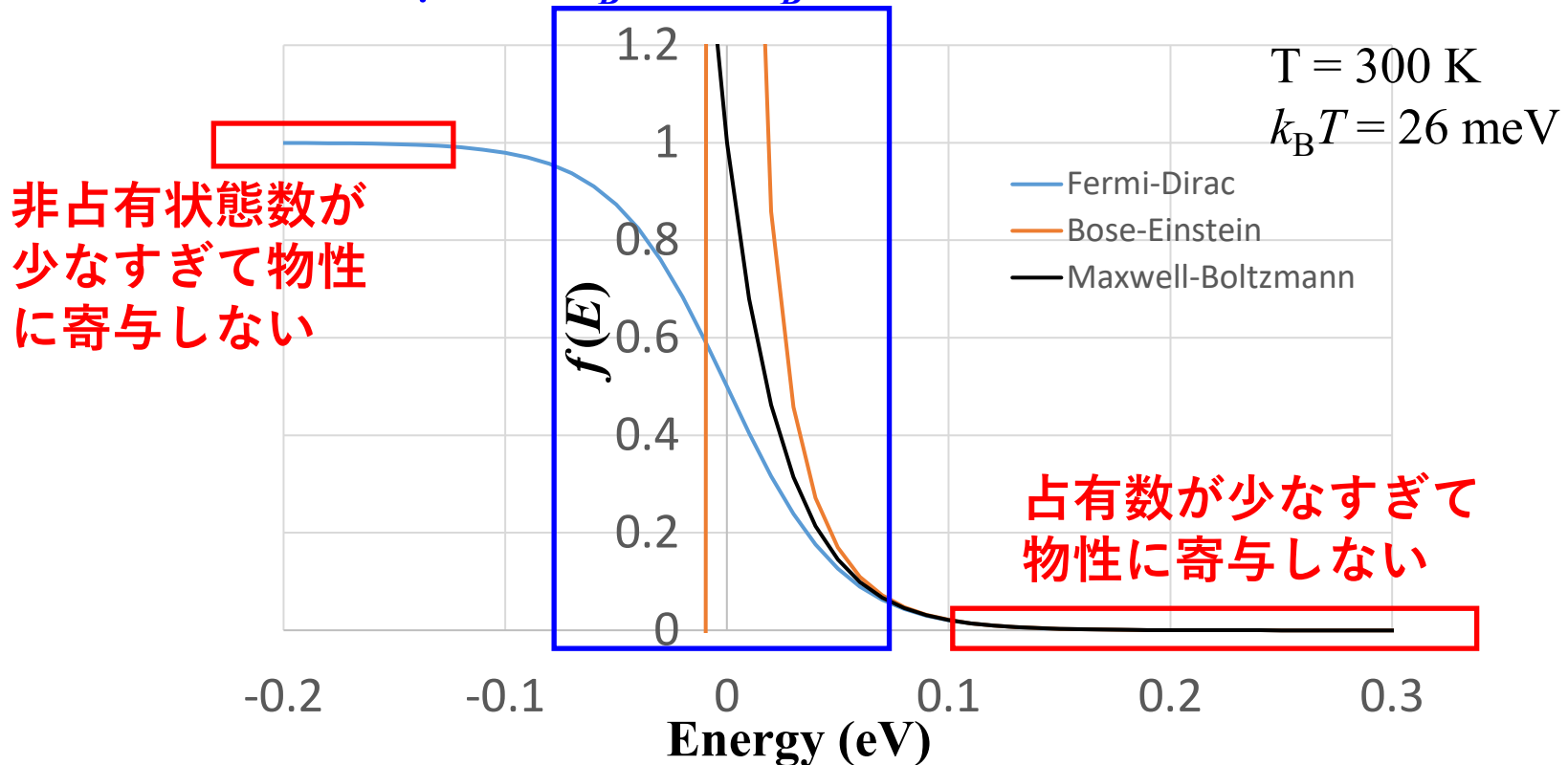
統計分布と物性

FD分布: $f(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] + 1}$ BE分布: $f(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] - 1}$

$(E - \mu) / k_B T \gg 1$ の場合: Maxwell-Boltzmann近似に漸近 (古典領域)

$$f(E) = \exp[-(E - \mu)/k_B T]$$

占有粒子が非占有状態に励起され、物性に寄与:
 μ から $k_B T \sim 3k_B T$ 程度のエネルギー範囲



§ 8.7 熱電子放出: 電子銃

光電効果 固体内の電子が
光子エネルギー $h\nu$ を
受け取って固体外部に
放出される

$W = E_{vac} - E_F$: 仕事関数
固体から電子を放出
させるのに必要な
最小エネルギー

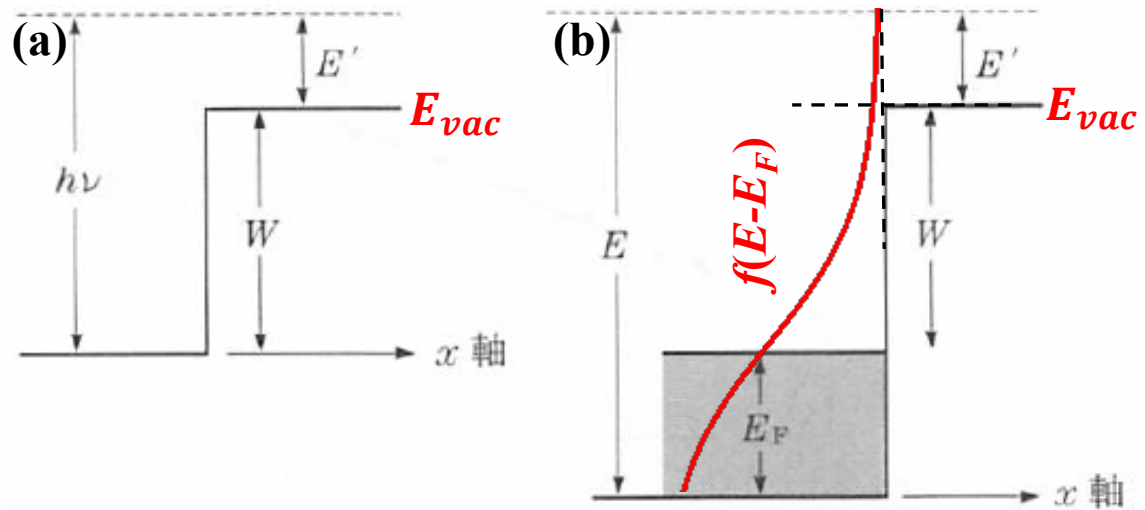
熱電子放出 固体内の電子が
熱エネルギーを
受け取って固体外部に
放出される

熱電子放出の条件: 電子エネルギー E が真空準位 E_{vac} より高い

$$E > E_{vac} = E_F + W$$

真空準位 E_{vac} : 他の物質から無限遠離れて静止した電子のエネルギー準位

8-6図 (a) 光電効果と (b) 熱電子放出の電子構造



熱電子放出

$$N_{\rightarrow} = \int_{E_{vac}}^{\infty} D(E) f(E) dE$$

$$N_{\leftarrow} = 0$$

$$N_{\rightarrow}, e^-, v_x$$

E_{vac} : 真空準位

x

W

$f(E)$

E_F

金属

金属=>真空の電流

N_{\rightarrow} の電子が ev_x で寄与

真空=>金属の電流

真空中に電子がないので、 $N_{\leftarrow} = 0$

※ 電流は電子密度の差によって流れる
拡散電流

⇔ 電界で流れる電流: ドリフト電流

§ 8.7 熱電子放出

k に関する状態密度 ($S = 1/2$) $g(\mathbf{k})d\mathbf{k} = \frac{2V}{(2\pi)^3} d\mathbf{k}$ (7.38)

運動量 $\mathbf{p} \sim \mathbf{p} + d\mathbf{p}$ 中の電子数は Fermi 分布 $f(\mathbf{p})$ を使って

$$\frac{2V}{h^3} f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (8.75)$$

体積 V を一般化し、 $\mathbf{r} \sim \mathbf{r} + d\mathbf{r}$ 中にある電子を考える ($V \Rightarrow d\mathbf{r}$)

$$\frac{2}{h^3} f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{r} \quad (8.76)$$

固体の表面が y - z 面内にあるとすると、 x 方向に正の速度 v_x をもつ電子が外部に放出され、負の速度 v_x をもつ電子は吸収される。

表面積 dS から単位時間に放出される電子数は

$$\frac{2}{h^3} v_x f(\mathbf{p}) dS d\mathbf{p} \quad (8.77)$$

$v_x < 0$ のときはこの値は負になって吸収される電子数になるので、

v_x を $0 \sim \infty$ で積分すれば、放出される正味の電子数になる。

電気素量 e をかけて単位面積当たりの電流密度にすると

$$j_x = \frac{2e}{h^3} \int v_x f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (8.80)$$

§ 8.7 熱電子放出

$$j_x = \frac{2e}{h^3} \int v_x f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (8.80)$$

電子が外部に放出されたとき、 v_y, v_z は変わらないとすると、外部に電子が放出される条件は

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = E_F + W + \frac{p_x'^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \quad (8.80a)$$

(8.80)の右辺の積分は次の範囲でとる

$$E_x = \frac{p_x^2}{2m} = E_F + W + \frac{p_x'^2}{2m} > E_F + W \quad (8.80a)$$

$$j_x = \frac{2e}{h^3} \int v_x f(\mathbf{p}) dp_x dp_y dp_z = \frac{2e}{h^3} \int f(\mathbf{p}) dE_x dp_y dp_z \quad (8.80)$$

E に関する積分範囲は

$$E > E_F + W + \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m} = E_1 \quad (8.81)$$

$$j_x = \frac{2e}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \int_{E_1}^{\infty} \frac{1}{\exp[\beta(E-\mu)]+1} dE \quad (8.82)$$

§ 8.7 熱電子放出

$$j_x = \frac{2e}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \int_{E_1}^{\infty} \frac{1}{\exp[\beta(E-\mu)]+1} dE \quad (8.82)$$

$$\begin{aligned} \int_{E_1}^{\infty} \frac{1}{\exp[\beta(E-\mu)]+1} dE &= \int_{E_1}^{\infty} \frac{\exp[-\beta(E-\mu)]}{\exp[-\beta(E-\mu)]+1} dE = -\frac{1}{\beta} \ln[e^{-\beta(E_1-\mu)} + 1] \Big|_{E_1}^{\infty} \\ &= \frac{1}{\beta} \ln[e^{-\beta(E_1-\mu)} + 1] \end{aligned} \quad (8.83)$$

$$j_x = \frac{2e}{\beta h^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln(e^{-X} + 1) \quad (8.83)$$

$$X = \beta(E_1 - \mu) = \beta \left(E_F - \mu + W + \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m} \right) \quad (8.85)$$

$T \ll T_F$ では $E_F \sim \mu$ なので、

$$X = \beta \left(W + \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m} \right) \quad (8.85a)$$

一般に仕事関数 W は数 eV、 $W \gg k_B T$ ($k_B T$ は 2000K でも 0.2 eV 程度) なので、 $X \gg 1$ 、 $\ln(e^{-X} + 1) \sim e^{-X}$ と近似できる (Boltzmann 近似)

$$\int_{E_1}^{\infty} \frac{1}{\exp[\beta(E-\mu)]+1} dE \sim \int_{E_1}^{\infty} \exp[-\beta(E-\mu)] dE = \frac{1}{\beta} e^{-\beta(E_1-\mu)} \quad (8.83)$$

§ 8.7 熱電子放出

$$j_x = \frac{2e}{h^3} \int v_x f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = \frac{2e}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \int_{E_1}^{\infty} \frac{1}{\exp[\beta(E-\mu)]+1} dE \quad (8.82)$$

$$\sim \frac{2ek_B T}{h^3} e^{-\beta W} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_y^2}{2m}} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_z^2}{2m}} dp_z$$

$$|j_x| = AT^2 e^{-\frac{W}{k_B T}} \quad \text{Richardson-Dashmannの式} \quad (8.87)$$

$$A = \frac{4\pi m_e k_B^2}{h^3} = 120.17 \text{ A}/(\text{cm}^2 \text{K}^2) \quad \text{Richardson-Dashman定数}$$

電子の有効質量 m^* を使うと

$$A^* = \frac{4\pi m^* k_B^2}{h^3} = 120.17 \frac{m^*}{m_e} \text{ A}/(\text{cm}^2 \text{K}^2) \quad \text{有効Richardson-Dashman係数}$$

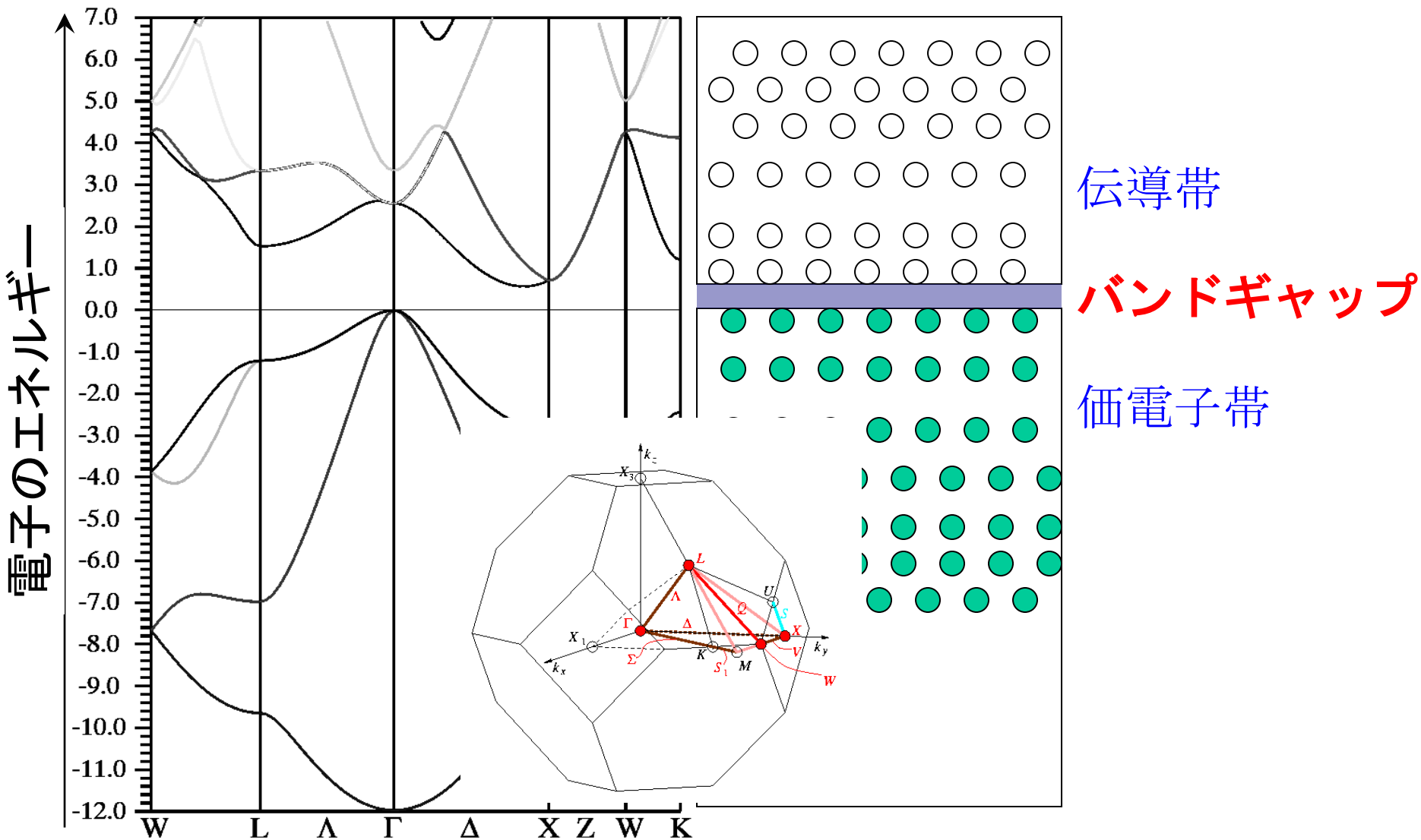
8-1表 A と W に対する実験値

	A (A/cm ² ·K ²)	W (eV)	W (eV, 光電効果)
W	75	4.5	4.49
Ta	55	4.2	4.16
Cs	160	1.8	2.14 ± 0.05

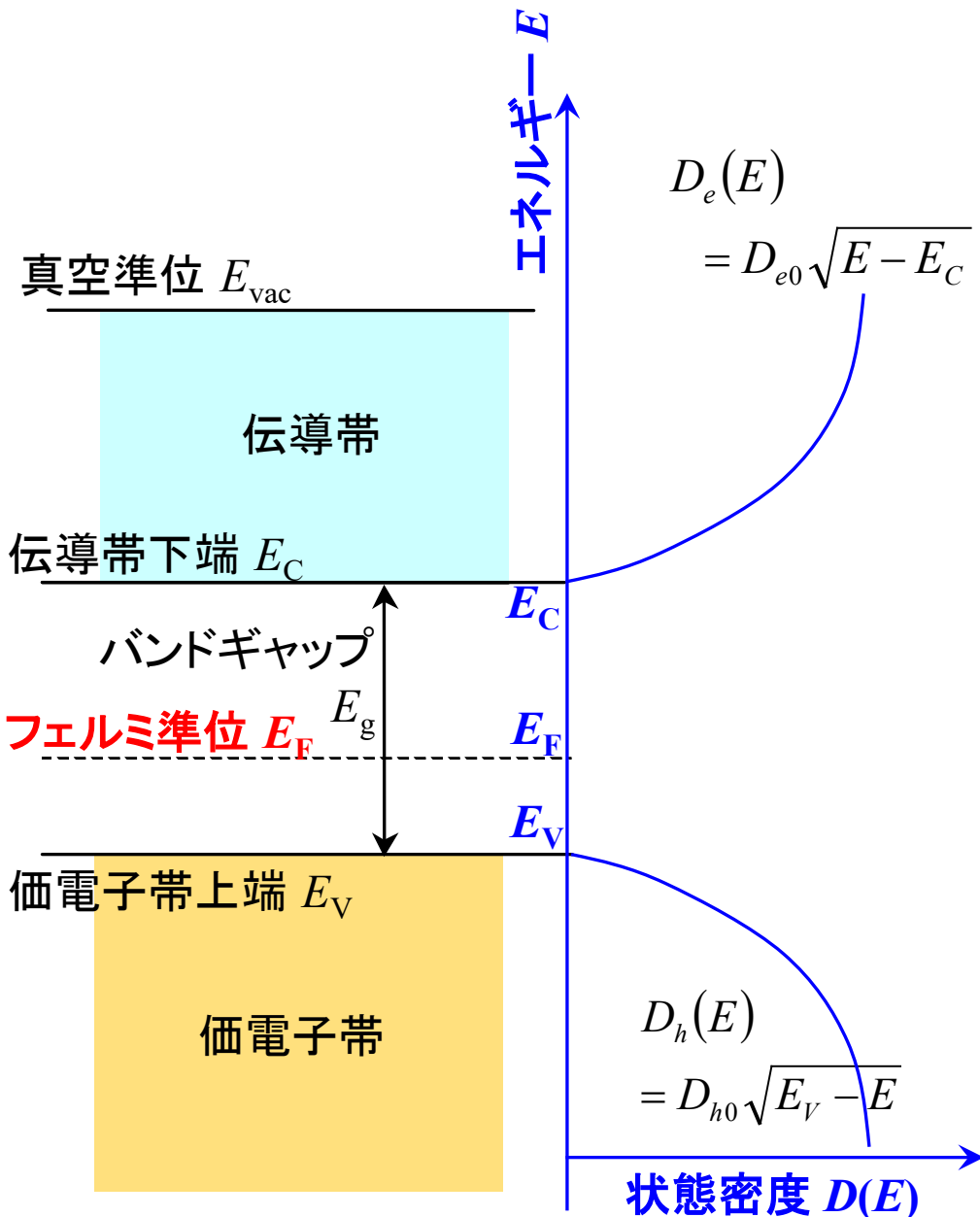
Fermi-Dirac統計の応用: 理想フェルミ気体

半導体中の電子

シリコンの電子構造 (バンド構造)



半導体の電子構造



$$E(k) \sim E_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$$

E に関する状態密度

$$D(E) = N(E)/V = \frac{2\pi(2m^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E} \quad (9.41)$$

Fermi-Dirac分布関数

$$f(E) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1} \quad (8.5)$$

半導体中:

原子核の総電荷 $Z = \sum Z_i$ と

総電子数 N_e

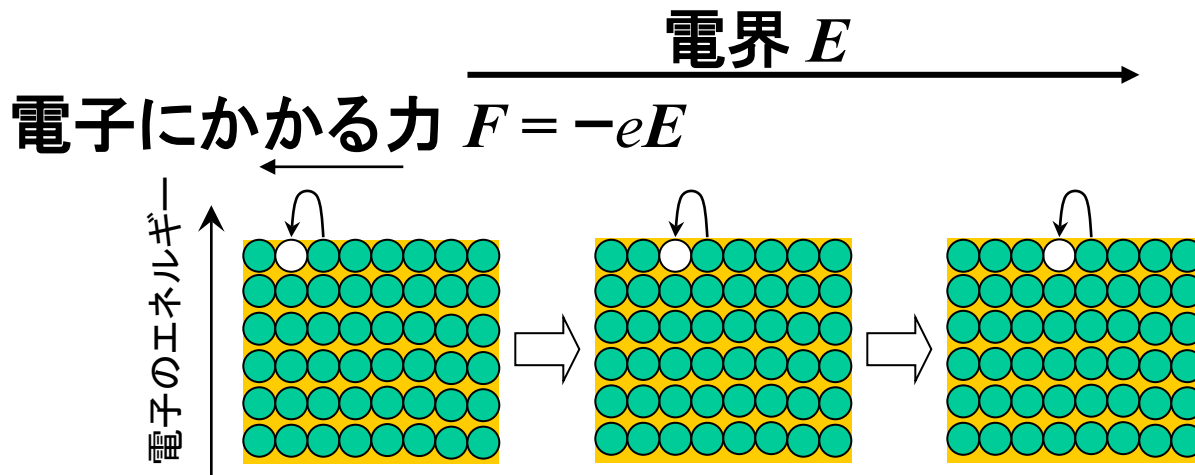
が等しく、**電荷中性条件**を満たす

- ・ 電子数の条件 (電荷中性条件)

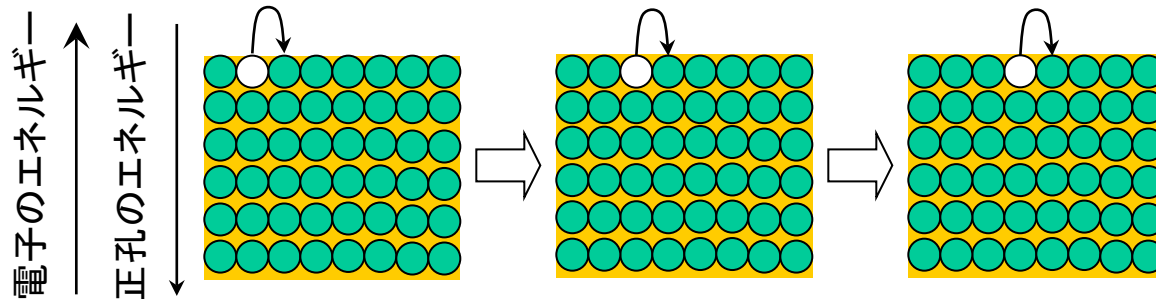
$$N_e = \int D(E) f(E) dE$$

- ・ 真性半導体では、0 Kでは価電子帯上端 E_V まで電子が詰まっている

正孔: 直観的な説明



電子の孔にかかる見かけの力 $F = +eE$



多数の電子の中に少数の”孔”があるとき、孔だけを扱う方がわかりやすい

=> 力と”孔”の加速の向きを合わせるため、電荷を正にする

電子と正孔: 電荷中性条件の書き換え

0 Kにおける全電子数の条件 $N_e = \int_{-\infty}^{\infty} f(E)D(E)dE = \int_{-\infty}^{E_V} D_h(E)dE$

有限温度における全電子数の条件 \Rightarrow 電荷中性条件に置き換える

$$N_e = \int_{-\infty}^{\infty} f(E)D(E)dE$$

N_e は N_A 程度の大きな数なので、扱いにくい

$$\Rightarrow N'_e = \int_{-\infty}^{\infty} f(E)D(E)dE - N_e = 0 \text{ を基準に考える}$$

$$N'_e = \int_{-\infty}^{E_V} f(E)D_h(E)dE - \int_{-\infty}^{E_V} D_h(E)dE + \int_{E_C}^{\infty} f(E)D_e(E)dE = -n_h + n_e = 0$$

$$n_h = \int_{-\infty}^{E_V} (1 - f(E))D_h(E)dE = \int_{-\infty}^{E_V} f_h(E)D_h(E)dE$$

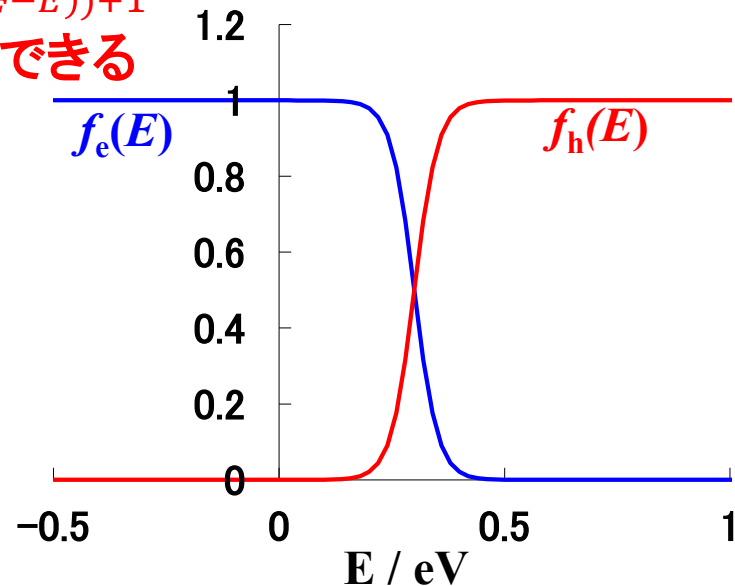
$$f_h(E) = 1 - f(E) = \frac{\exp(\beta(E - E_F))}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1} = \frac{1}{\exp(\beta(E_F - E)) + 1}$$

※ 正孔は電子が空いた“孔”とみなすことができる

$$n_e = \int_{E_C}^{\infty} f_e(E)D_e(E)dE$$

$$f_e(E) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1}$$

$$N'_e = -n_h + n_e = 0 \Rightarrow n_h = n_e: \text{電荷中性条件}$$



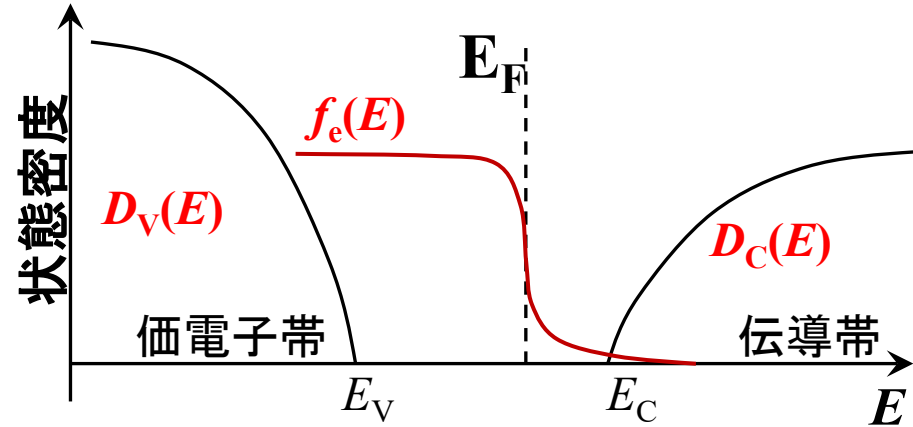
自由電子密度

$$n_e = \int_{E_C}^{\infty} f_e(E) D_e(E) dE$$

$$f_e(E) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1}$$

$$D_e(E) = D_{C0} \sqrt{E - E_C} \quad (9.41)$$

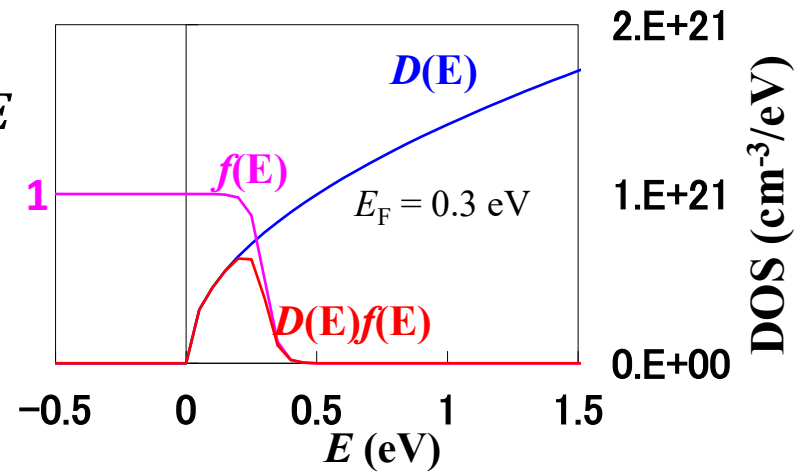
$$D_{C0} = \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$



非縮退半導体 $\beta(E - E_F) \gg 1$ では

$$n_e \sim \int_{E_C}^{\infty} \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C} \exp(-\beta(E - E_F)) dE$$

$$= \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)} \int_0^{\infty} \sqrt{e} \exp(-\beta e) de$$



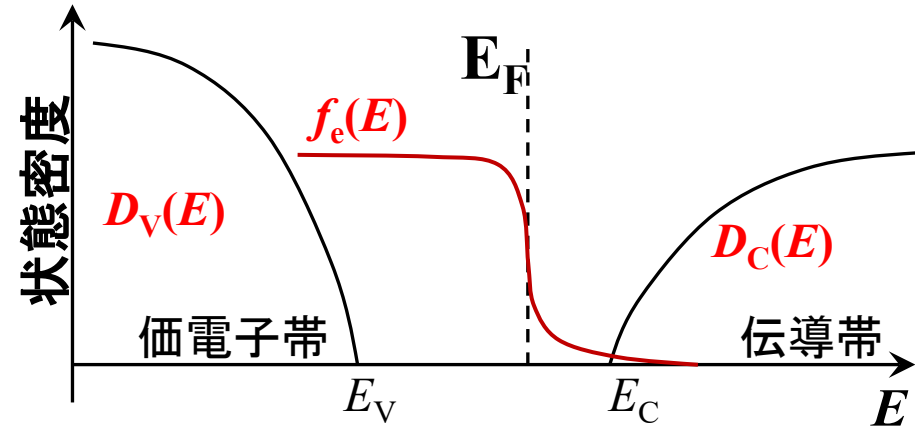
自由電子密度、自由正孔密度

$$n_e = \int_{E_C}^{\infty} f_e(E) D_e(E) dE$$

$$f_e(E) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1}$$

$$D_e(E) = D_{C0} \sqrt{E - E_C} \quad (9.41)$$

$$D_{C0} = \frac{\sqrt{2} m_e^*{}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$



非縮退半導体 $\beta(E - E_F) \gg 1$ では

$$n_e \sim \int_{E_C}^{\infty} \frac{\sqrt{2} m_e^*{}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C} \exp(-\beta(E - E_F)) dE$$

$$= \frac{\sqrt{2} m_e^*{}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)} \int_0^{\infty} \sqrt{e} \exp(-\beta e) de$$

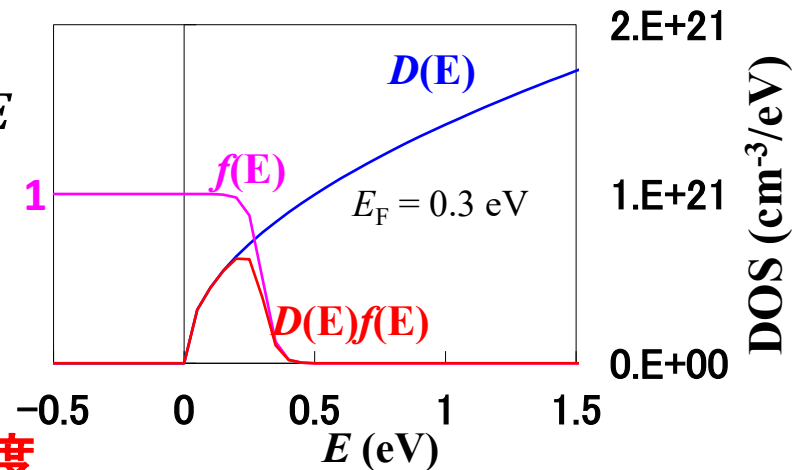
$$n_e = N_C \exp(-\beta(E_C - E_F))$$

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{伝導帯有効状態密度}$$

同様に

$$n_h = N_V \exp(-\beta(E_F - E_V))$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{価電子帯有効状態密度}$$



自由電子密度: 積分式の導出

$$n_e \sim \frac{\sqrt{2} m_e^{*2/3}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)} \int_0^\infty \sqrt{e} \exp(-\beta e) de$$

$$\sqrt{e} = x, e = x^2, de = 2x dx$$

$$\int_0^\infty \sqrt{e} \exp(-\beta e) de = \int_0^\infty 2x^2 \exp(-\beta x^2) dx$$

$$\int_0^\infty x^2 \exp(-x^2) dx = \frac{1}{4} \sqrt{\pi}$$

$$n_e \sim \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)} \int_0^\infty 2x^2 \exp(-\beta x^2) dx = \frac{1}{2\pi^{3/2}} \frac{1}{\beta^{3/2}} \frac{m_e^{*3/2}}{\hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)}$$

$$n_e = N_C \exp(-\beta(E_C - E_F))$$

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{伝導帯有効状態密度}$$

同様に

$$n_h = N_V \exp(-\beta(E_F - E_V))$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{価電子帯有効状態密度}$$

§ 8.3 Fermi統計を使わないといけない条件

$$e_i > \mu \text{ の状態に対して } \exp(\beta(e_i - \mu)) \gg 1 \quad (\text{A})$$

の場合は、Fermi-Dirac分布は Boltzmann分布の形に漸近する

$$f_i = \frac{1}{\exp(\beta(e_i - \mu)) + 1} \sim \exp(-\beta(e_i - \mu)) \quad (8.20)$$

自由電子 (金属) の場合に Boltzmann近似を使うと:

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty k^2 \exp(-\beta \left(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \mu \right)) dk = \frac{V}{4\pi^{3/2}} \left(\frac{2m}{\beta \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\beta\mu} \quad (8.23)$$

$$e^{\beta(e_i - \mu)} = \frac{3\pi^{1/2}}{4} \left(\frac{T}{T_F} \right)^{3/2} e^{\beta e_i} \sim 1.33 \left(\frac{T}{T_F} \right)^{3/2} e^{\beta e_i} \quad (8.25)$$

$T \gg T_F$ であれば、(A)式的前提を満たす (Boltzmann近似が使える)。

$$E_F = k_B T_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2mk_B} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} : \text{電子密度 } N/V \text{ が大きいと } E_F, T_F \text{ が高い}$$

※ Fermi統計を使わないといけない: 縮退電子ガス (「系は縮退している」)

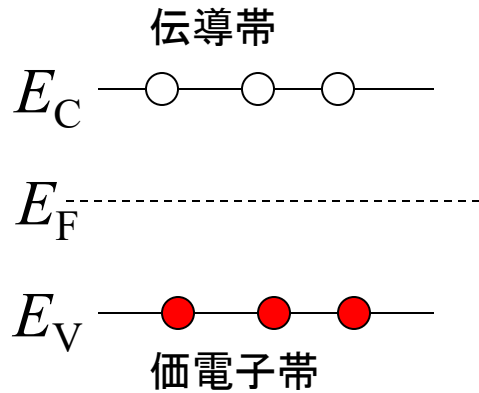
- ・ T が Fermi温度より十分低い: 金属では $T_F > 10^4$ K なので、通常は縮退している

※ 古典統計 (Boltzmann分布) を使える: 非縮退電子ガス

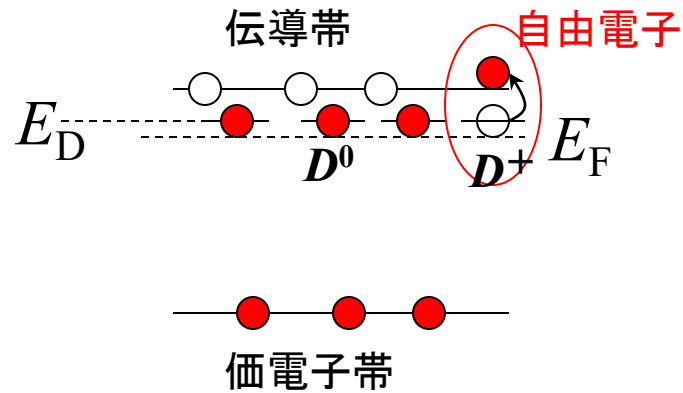
- ・ T が Fermi温度より十分高い: 半導体で電子密度 N/V が低い場合
高くなると「縮退半導体」になる

不純物 (ドーピング) 半導体

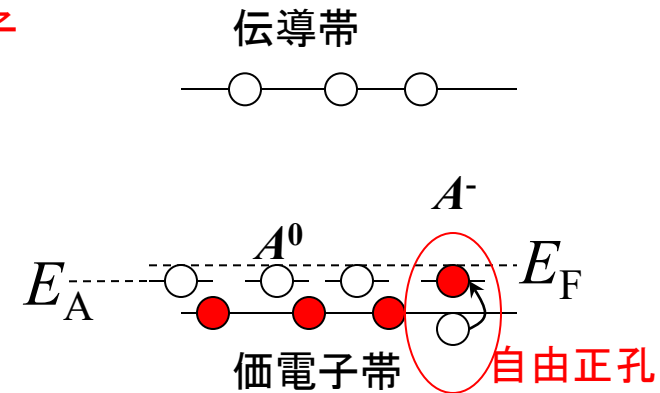
真性半導体



n型半導体



p型半導体



ドナー (donor): 電子を与える (donate) ことができる電子状態

はき出せる電子をもっている状態が電気的中性 : D^0

一部のドナーは電子をはき出してイオン化している: D^+

ドナー準位 E_D ドナー密度 N_D

アクセプター (acceptor): 電子を受け取る (accept) ことができる電子状態

電子を受け取れる状態が電気的中性 : A^0

一部のアクセプターは電子を受け取ってイオン化している: A^-

アクセプター準位 E_A アクセプター密度 N_A