3-1-3　キャリア密度

伝導帯の電子密度（または価電子帯の正孔密度）は状態密度 $N(E)$ と分布関数 $f(E)$ の積により決まる。エネルギー間隔 dE に存在する電子の密度 n は次式になる。

$$n = \int f(E)N(E)dE$$

伝導帯内の電子密度

伝導帯内に存在する電子密度は、伝導帯下端 E_c から伝導帯上端 E_{ct} までを積分して求める。

$$n = \int_{Ec}^{Ect} f(E)N(E)dE$$

状態密度 $N(E)$（(3.1)式）と分布関数 $f(E) \cong e^{-(E-E_F)/kT}$ を代入し、E_{ct} → ∞とすると($E > E_{ct}$ で $f(E) \cong 0$ であるので)、

$$n \cong 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} \int_{Ec}^{\infty} (E-E_c)^{1/2} e^{-(E-E_F)/kt} dE \qquad \cdots(3.8)$$

この積分範囲で n を求めると(※後述の「(3.9)式の導出を参照」)、

$$n = 2\left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-(E_c-E_F)/kt} = N_c \cdot e^{-(E_c-E_F)/kt} \qquad \cdots(3.9)$$

よって、伝導電子密度は

$$n = N_c \cdot e^{-(E_c-E_F)/kt} = N_c \cdot f(E_c) \qquad \cdots(3.11)$$

と表される。ここで、N_c は**有効状態密度(effective density of state)**と呼ばれ、伝導帯中の電子が伝導帯下端 E_c にのみに存在しているとした時の状態密度と考える。

正孔密度

正孔密度 p は、電子と同様の計算より

$$p = N_V \cdot e^{-(E_F-E_V)/kt} = N_V \cdot \{1 - f(E_V)\} \qquad \cdots(3.12)$$

となる。ここで、N_V は価電子帯の有効状態密度である。電子密度 n と正孔密度 p の積 np は

np 積：　$np = N_c N_V e^{-(E_c-E_V)/kt} = N_c N_V e^{-E_G/kt}$ $\qquad \cdots(3.14)$

E_G はエネルギーギャップで、(3.14)式より

$$E_G = kT \ln \frac{N_C N_V}{np}$$

となる。

状態密度 $N(E)$ と分布関数 $f(E)$、キャリア密度 $n(E)$、$p(E)$ の関係を図 1 に示す。すなわち、

状態密度 × 分布関数 = キャリア密度

となっており、状態密度の塗りつぶした範囲と分布関数の塗りつぶした範囲が重なっている面積がキャリア密度ということである(状態密度と分布関数の AND をとった部分)。

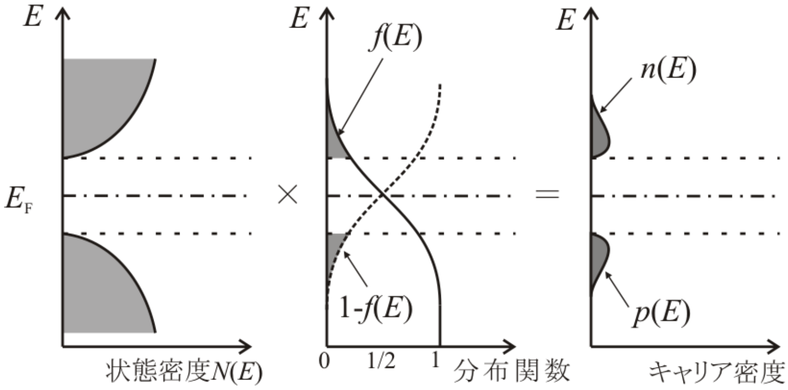

図 1　キャリア密度の算出

<u>(3.9)式の導出</u>

$x=(E-E_c)/kT$ とおとく、$E=E_c+kTx$ なので

$$dE=kTdx$$

よって、(3.8)式は

$$n\cong 4\pi\left(\frac{2m_n^*}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \sqrt{kTx}\cdot e^{-(E_c+kTx-E_F)/kt}kTdx$$

$$=4\pi\left(\frac{2m_n^*kT}{h^2}\right)^{3/2} e^{-(E_c-E_F)/kt}\int_0^\infty \sqrt{x}\cdot e^{-x}dx$$

上式の積分部分を I とおいて(「無次元化」という)、$I=\int_0^\infty \sqrt{x}\cdot e^{-x}dx$ を計算する。

$x=X^2$ とすると、$dx=2XdX$ より

$$I=\int_0^\infty Xe^{-X^2}2XdX=2\int_0^\infty X^2e^{-X^2}dX$$

ここで、$\int_0^\infty e^{-X^2}dX$ を考えると

$$\int_0^\infty e^{-X^2}dX=\left[Xe^{-X^2}\right]_0^\infty-\int_0^\infty X(-2X)e^{-X^2}dX=2\int_0^\infty X^2e^{-X^2}dX$$

となるので、I は

$$I=\int_0^\infty e^{-X^2}dX$$

$$I^2=\int_0^\infty e^{-X^2}dX\int_0^\infty e^{-Y^2}dY=\int_0^\infty e^{-(X^2+Y^2)}dXdY$$

ここで、極座標変換を行う。$(X,\ Y)\rightarrow(r,\ \theta)$

$$r^2=X^2+Y^2$$
$$dXdY=d\theta rdr$$

$$I^2=\int_0^\infty re^{-r^2}dr\int_0^{\pi/2}d\theta=\frac{\pi}{2}\int_0^\infty re^{-r^2}dr=\frac{\pi}{2}\left[\frac{-1}{2}e^{-r^2}\right]_0^\infty=\frac{\pi}{4}$$

よって

$$I=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

n を表す式は

$$n=4\pi\left(\frac{2m_n^*kT}{h^2}\right)^{3/2} e^{-(E_c-E_F)/kt}\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$=2\left(\frac{2\pi m_n^*kT}{h^2}\right)^{3/2} e^{-(E_c-E_F)/kt} \qquad \cdots(3.9)$$