



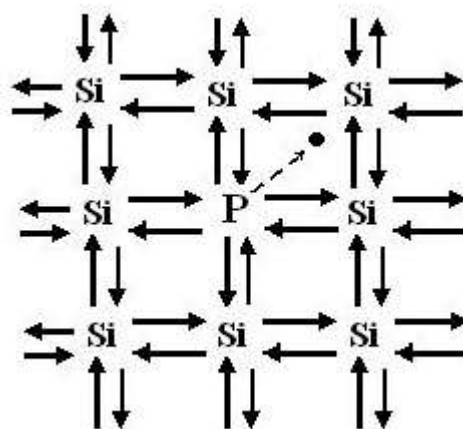
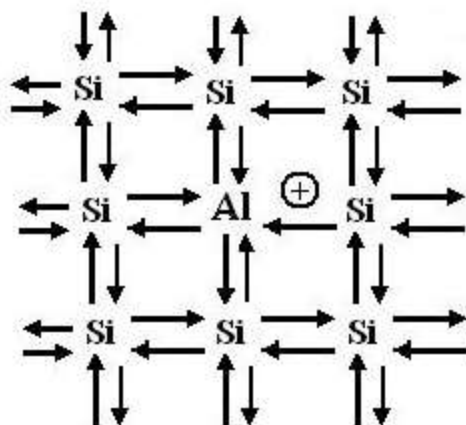
Ніконова А.О.
Небеснюк О.Ю.
Ніконова З.А.

ФІЗИКА ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ

Конспект лекцій

І частина

для студентів ЗДІА напрямку 6.050801 «Мікро- та наноелектроніка» денної та заочної форм навчання



Запоріжжя

2017

Міністерство науки і освіти України
Запорізька державна інженерна академія

ФІЗИКА ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ

Конспект лекцій

І частина

*для студентів ЗДІА напрямку 6.050801 «Мікро- та
наноелектроніка» денної та заочної форм навчання*

*Рекомендовано до видання
на засіданні кафедри ФБМЕ,
протокол № від 20.04.2017 р.*

Ніконова А.О., доцент
Небеснюк О.Ю., доцент
Ніконов З.А, професор

Відповідальний за випуск: зав. кафедри ФБМЕ,
професор Ю.С. Оселедчик

Н 644 Ніконова А.О., Небеснюк О.Ю., Ніконова З.А.,

Фізика електронних процесів: конспект лекцій (частина І) для студентів ЗДІА напряму 6.050801 «Мікро- та наноелектроніка» / А.О. Ніконова, О.Ю. Небеснюк., З.А. Ніконова.- Запоріжжя, ЗДІА, 2017.- с.50

Конспект лекцій призначено для студентів спеціальності «Мікро- та наноелектроніка » денної та заочної форм навчання, які виконують лабораторні, розрахунково-графічні, контрольні роботи та курсовий проект з курсу «Проектування біомедичної електроніки». Містить правила оформлення пояснювальної записки та графічної частини, теоретичні відомості, приклади виконання розрахунків, теми курсових проектів та список рекомендованої літератури для виконання роботи.

ЕЛЕКТРОННІ СТАНИ ТА ПРОВІДНІСТЬ ТВЕРДИХ ТІЛ

1 НАПІВПРОВІДНИКІ. ЕЛЕМЕНТАРНА ТЕОРІЯ

ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ	4
1.1 Напівпровідникові хімічні сполуки.....	5
1.2 Основи зонної теорії напівпровідників.....	6
1.2.1 Кристалічні та аморфні структури твердих тіл.....	6
1.2.2 Рівняння Шредінгера для кристала.....	7
1.2.3 Зони Бриллюена.....	11
1.2.4 Ефективна маса.....	14
1.3 Електропровідність власних напівпровідників.....	17
1.4 Електропровідність власних напівпровідників.....	22

2 СТАТИСТИКА ЕЛЕКТРОНІВ У НАПІВПРОВІДНИКАХ

В УМОВАХ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ РІВНОВАГИ.....	25
2.1 Вироджений та невироджений напівпровідники.....	27
2.2 Залежність положення рівня Фермі від температури.....	28
2.2.1 Рівняння електронейтральності.....	29
2.2.2 Напівпровідник, що має домішку одного типу.....	31
3 МЕХАНІЗМИ РЕКОМБІНАЦІЇ НОСІЇВ ЗАРЯДУ.....	37

3.1 Кінетика генерації і рекомбінації носіїв заряду у напівпровідниках.....	44
---	----

4 ДИФУЗІЯ ТА ДРЕЙФ НЕРІВНОВАЖНИХ НОСІЇВ ЗАРЯДУ. РІВНЯННЯ НЕПЕРЕРВНОСТІ

4.1 Кінетика генерації і рекомбінації носіїв заряду у напівпровідниках	
4.2 Дифузійний та дрейфовий струми	
4.3 Співвідношення Ейнштейна	
4.4 Дифузія та дрейф нерівноважних носіїв заряду в монополярному напівпровіднику	
4.5 Час релаксації Максвелла	

ЛІТЕРАТУРА.....	59
------------------------	-----------

ЕЛЕКТРОННІ СТАНИ ТА ПРОВІДНІСТЬ ТВЕРДИХ ТІЛ

1 Напівпровідники. Елементарна теорія електропровідності

Сучасна прикладна фізика, як правило, базується на електроніці, а електроніка, у свою чергу, побудована в основному на напівпровідниках.

Напівпровідники – широкий клас речовин, що по величині питомої провідності займають проміжне місце між провідниками і діелектриками: у металах провідність $\sigma > 10^5$ См/м, а для діелектриків $\sigma < 10^{-10}$ См/м (провідність зазначена при кімнатній температурі). Характерною рисою напівпровідників, що відрізняє їх від металів, є зростання провідності σ з ростом температури. Як правило, зростання $\sigma(T)$ експонентне і спостерігається у широкому інтервалі температур: $\sigma = \sigma_0 \exp(-E_g/2k_B T)$, де E_g – енергія активації електронів. З формули видно, що поблизу абсолютного нуля температури ($T \approx 0$) напівпровідники мають властивості ізоляторів: $\sigma \approx 0$.

Температурна залежність σ виникає внаслідок розриву зв'язку електронів у кристалічній решітці, так що частина електронів, пропорційна $\exp(-E_g/2k_B T)$, стає вільними носіями заряду. Зв'язок електронів у кристалі напівпровідника може бути розірваним не тільки тепловим рухом, але й різними зовнішніми впливами: світлом, потоком швидких частинок, сильним електричним полем, і т. ін. Крім різкої температурної залежності σ напівпровідники відрізняються від провідників також сильною залежністю провідності від концентрації домішок та різних видів випромінювання. Саме тому для напівпровідників характерна висока чутливість електропровідності до зовнішніх впливів, а також до концентрації домішок і дефектів у кристалах, оскільки енергія активації для електронів, локалізованих поблизу домішок або дефектів, істотно менша, ніж енергія активації електронів в ідеальному кристалі напівпровідника. Можливість у широких межах керувати електропровідністю напівпровідників електричним і магнітним полями, зміною температури, введенням домішок тощо є основою їх численних і різноманітних застосувань. Напівпровідникові матеріали (рис 1.1) поділяють за їх хімічним

складом на неорганічні й органічні, а за структурою – на кристалічні, аморфні й рідинні напівпровідники. Найбільшого практичного застосування набули неорганічні кристалічні напівпровідники, що містять кілька основних груп.



Рисунок 1.1 – Класифікація напівпровідникових матеріалів

1.1 Напівпровідникові хімічні сполуки

Кристалічна структура багатьох таких сполук характеризується тетраедричною координацією атомів, як це має місце й у гратці типу алмазу. Тому такі напівпровідникові сполуки одержали назву алмазоподібних напівпровідників. Серед них найбільший науковий і практичний інтерес представляють бінарні сполуки ($A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$), що у даний час є найважливішими матеріалами напівпровідникової оптоелектроніки. Сучасні технології напівпровідників використовують також трійні і більш складні хімічні сполуки. Треба також відзначити, що більшість алмазоподібних напівпровідників, що мають близькі властивості, утворюють між собою ізовалентні тверді розчини. У твердих розчинах шляхом зміни складу сполуки можна плавно й у досить широких межах керувати найважливішими властивостями напівпровідників, зокрема, шириною забороненої зони і рухливістю носіїв заряду. Це відкриває додаткові можливості для оптимізації

параметрів напівпровідникових приладів, дозволяє домогтися кращого узгодження фізичних характеристик різних компонентів електронної апаратури.

Бінарні сполуки. Перш за все, це біля 30 кристалів сполук трьох та п'ятивалентних елементів $A^{III}B^V = A^{+3}B^{+5}$, з яких найбільш важливим є арсенід галію GaAs, а також InP, InAs, GaN, InSb, AlAs, та ін. Відомі також (і широко застосовуються в електроніці) кристали групи $A^{II}B^{VI} - CdTe, CdS, ZnTe, ZnSe, ZnO, ZnSi$ т.д., їх також біля 30. До напівпровідників відносяться також і інші бінарні сполуки $A^I B^{VII} (CuCl, AgBr, \dots)$, $A^I B^{VI} (Cu_2O, CuS, \dots)$, $A^I B^V (KSb, K_3Sb, \dots)$, $A^{II}B^{IV} (Mg_2Sn, Ca_2Si, \dots)$, $A^{III}B^{VI} (GaS, In_2Fe_3, \dots)$, $A^{IV}B^{VI} (PbS, PbSe, \dots)$, $A^{IV}B^{IV} (SiC)$, $A^V B^{VI} (Sb_2Te_3, Bi_2S_3, \dots)$.

Трійні сполуки також можуть мати напівпровідникові властивості. З них найважливішими є куприти ($CuAlS_2, CuInS_2, CuSbS_2, CuFeSe_2$), сполуки цинкові ($ZnSiAs_2, ZnGeAs_2$), свинцю ($PbBiSe_2$), кадмію ($CdHgTe$) і т.д. Потрійні сполуки типу $A^{II}B^{IV}C^V$ кристалізуються звичайно в кристалічну ґратку халькопірита. Вони виявляють як магнітне, так і електричне упорядкування. Утворюють між собою тверді розчини. Сполуки $A^{II}B^{IV}C^V$ багато в чому є електронними аналогами сполук типу $A^{III}B^V$. Типові представники: $CdSnAs_2, CdGeAs_2, ZnSnAs_2$.

1.2 Основи зонної теорії напівпровідників

1.2.1 Кристалічні та аморфні структури твердих тіл

Сукупність атомів, яка утворює структуру з далеким порядком у розташуванні атомів, без дефектів і необмежену у просторі, називають ідеальною кристалічною решіткою. Реальну структуру з далеким порядком, обмежену у просторі і, до певної міри, дефектну називають монокристалом або просто кристалом. Сукупність атомів, яка утворює випадкову сітку атомів (довжина та просторова орієнтація валентних зв'язків – випадкові величини) з частково насиченими валентними зв'язками називають аморфною структурою.

Умовна межа між кристалічною і аморфною структурами: якщо в порядкуване розташування атомів спостерігається на протязі 8 – 10 міжатомних відстаней і більше, така структура має властивості кристалу, якщо менше – це структура з ближнім порядком і властивостями аморфної речовини.

1.2.2 Рівняння Шредінгера для кристала

Тверде тіло, як відомо, складається з атомів, тобто з ядер атомів та електронів. Ядра атомів створюють кристалічну ґратку, яка має властивості просторовості. При накладанні зовнішнього електричного поля ґратка практично не деформується, хоча ядра атомів заряджені. Це відбувається тому, що сили які утримують ядра атомів в вузлах кристалічної ґратки, зазвичай значно більші сил, які створюються зовнішнім електричним полем. Електрони, які не знаходяться близько до ядра атома і тому до нього не дуже сильно притягуються, можуть рухатись по твердому тілу утворюючи електричний струм. Однак при кількісному опису цього явища виникають труднощі. Вони зв'язані з тим, що електрони є зарядженими частинками і впродовж свого руху стикаються з іншими електронами. Але так як між електронами діють сили відштовхування, то рух електрона стає залежним від руху оточуючих його електронів. Таким чином, в даному випадку треба вирішити не одноелектронну, а багатоелектронну задачу. Тому для визначення стаціонарних станів та енергетичного спектру сукупності великого числа атомних ядер та електронів в кристалі треба вирішити рівняння Шредінгера:

Позначимо: координати ядер $R_1, R_2 \dots R_N$

Та координати всіх електронів: $r_1, r_2 \dots r_n$

Рівняння Шредінгера буде мати вигляд:

$$\hat{H}\psi = \mathcal{E}\psi \quad (1.1)$$

Де \hat{H} - гамільтоніан кристала (оператор повної енергії системи електронів і ядер)

ψ - його хвильова функція;

\mathcal{E} – енергія кристала.

Хвильова функція кристала залежить від координат всіх електронів r_i та всіх атомних ядер R_a

$$\psi = \psi(r_1, r_2, \dots, r_n, R_1, R_2, \dots, R_N)$$

Оператор Гамільтоніана включає в себе:

1) Оператор кінетичної енергії електронів

$$\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \Delta_i, \quad (1.2)$$

Де \hbar - постійна Планка h поділена на 2π ($\hbar = h/2\pi$)

m_0 – маса електрона;

$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$ - оператор Лапласа для i – го електрона

2) Оператор кінетичної енергії ядер

$$\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2M_a} \right) \Delta_a \quad (1.3)$$

Де M_a - маса ядра;

$$\Delta_a = \frac{\partial^2}{\partial x_a^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_a^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_a^2} \quad (1.4)$$

3) Потенційну енергію попарної взаємодії електронів

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (1.5)$$

4) Потенційну енергію попарної взаємодії ядер

$$V_0(R_1, R_2, \dots, R_N) \quad (1.6)$$

5) Потенційну енергію взаємодії електронів з ядрами

$$U(r_1, r_2, \dots, r_n, R_1, R_2, \dots, R_N) \quad (1.7)$$

З урахуванням цих складових гамільтоніана рівняння Шредингера матиме вигляд:

$$\left\{ \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \Delta_i + \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2M_a} \right) \Delta_a + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{r_{ij}} + V_0(R_1, R_2, \dots, R_N) + U(r_1, r_2, \dots, r_n, R_1, R_2, \dots, R_N) \right\} \psi = \epsilon \psi \quad (1.8)$$

Число незалежних змінних визначається загальним числом часток в кристалі, яке в 1 см^3 речовини складає біля 10^{23} . Така задача не може бути

вирішена в загальному виді. Можливе лише її наближене рішення, яке досягається за допомогою ряду послідовних приближень.

Адіабатичне і одноелектронне наближення

Розділимо всю систему частинок на легкі (електрони) та важкі (атомні ядра). В рівноважному стані середні значення кінетичної енергії цих частинок одного порядку. Так як маса ядра набагато більша за масу електрона, тобто $M_a \gg m_0$, то швидкість руху електронів набагато перевершує швидкості ядер (приблизно на два порядки). При кожній зміні положення атомних ядер практично миттєво встановлюється просторовий розподіл електронів, що відповідає новому положенню ядер. Тому можна вважати що рух електронів незалежний від руху ядер, тобто рух електронів і ядер відбувається без обміну між ними енергією. Це дозволяє в першому наближенні розглядати рух електронів в потенційному полі фіксованих ядер. В цьому випадку хвильова функція і енергія електронів будуть деякими функціями, адіабатично мінливими зі зміною розташування ядер, координати яких входять в ці функції як параметри. При вивченні руху ядер, навпаки, слід враховувати не миттєве положення електронів, а поле, що створюється їх середнім просторовим розподілом. Такий наближений розгляд називають *адіабатичним, або наближенням Борна-Оппенгеймера*.

Скористаємося більш грубим наближенням, вважаючи, що ядра спочивають. Для цього випадку координати ядер R_1, \dots, R_N вже не змінні, а параметри R_{10}, \dots, R_{N0} , що представляють собою координати вузлів кристалічної решітки. Для випадку ядер, що покояться, коли $R_a = R_{a0}$ кінетична енергія перетворюється на нуль, а енергія їх взаємодії V_0 набуває постійного значення. Вибором початку відліку енергії її можна обернути в нуль. З урахуванням цього рівняння (1.8) спрощується і тепер описує рух електронів в полі ядер, що покояться. Для цього випадку енергія електронів E_e і їх хвильова функція Ψ_e вже параметрично залежать від положення ядер R_{a0} . В результаті рівняння Шредінгера для електронів, що рухаються в полі ядер, що покояться, запишеться у вигляді:

$$\left\{ \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{r_{ij}} + U(r_1, \dots, r_n, R_{10}, \dots, R_{N0}) \right\} \Psi_e = E_e \Psi_e. \quad (1.9)$$

Для подальшого скорочення числа змінних в рівнянні (1.9) використовується валентна апроксимація. Приймається, що усі електрони атома, окрім валентних, разом з ядром утворюють нерухомий атомний залишок (іон). При цьому (2.3) записується тільки для валентних електронів, що рухаються в потенційному полі фіксованих іонів.

Незважаючи на проведені спрощення, рівняння (1.0) не може бути вирішене в загальному вигляді: як і раніше ми маємо справу із завданням багатьох часток, непіддатливим безпосередньому рішенню.

Одним з найбільш поширених методів рішення багатоелектронної задачі для кристала є метод Хартрі-Фока, що дозволяє багатоелектронну задачу звести до одноелектронної. Його ідея полягає в тому, що енергія попарної взаємодії електронів замінюється взаємодією кожного електрона з усередненим полем усіх інших електронів. Нехай потенційна енергія i -го електрона в тому полі буде Ω_i . Вона залежить від руху не лише усіх інших електронів, а й від руху даного електрона, так як його рух впливає на рух інших електронів. Оскільки поле визначає не лише рух даного електрона, але і саме залежить від його руху, то це дістало назву **самоузгодженого**. Введення самоузгодженого поля дозволяє в рівнянні (1.9) подвійну суму $\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{r_{ij}}$

замінити сумою $\sum_i \Omega_i(r_i)$,

кожен член якої залежить від координат одного електрона, тобто

$$\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{r_{ij}} = \sum_i \Omega_i(r_i), \quad (1.10)$$

де $\Omega_i(r_i)$ - потенційна енергія i -го електрона в полі всіх інших електронів.

Аналогічно потенційну енергію взаємодії електронів з ядрами можна також представити у вигляді суми

$$U(r_1, r_2 \dots) = \sum_i U_i(r_i), \quad (1.11)$$

де $U_i(r_i)$ - потенційна енергія i -го електрона в полі всіх ядер.

З урахуванням (1.10) і (1.11) рівняння (1.9) перетвориться до виду

$$\left\{ \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i + \Omega_i(r_i) + U_i(r_i) \right] \right\} \Psi_e = E_e \Psi_e. \quad (1.12)$$

Це рівняння можна записати як

$$\hat{H} \Psi_e = \left(\sum_i \hat{H}_i \right) \Psi_e = E_e \Psi_e, \quad (1.13)$$

де \hat{H}_i – гамільтоніан i -го електрона, що дорівнює:

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i + \Omega_i(r_i) + U_i(r_i). \quad (1.14)$$

Із співвідношення (1.13) витікає, що гамільтоніан кристала є сумою гамільтоніанів (1.14), кожен з яких залежить від координат однієї частки. Для цього випадку хвильова функція системи часток може бути представлена як добуток хвильових функцій, що описують стан окремих часток системи:

$$\Psi_e(r_1, r_2 \dots) = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \dots = \hat{H} \Psi_i(r_i). \quad (1.15)$$

Це означає, що електрони поведуться незалежно один від одного (як би не взаємодіючи), а повна енергія системи часток дорівнює сумі енергії окремих електронів:

$$E_e = E_1 + E_2 + \dots = \sum_i E_i. \quad (1.16)$$

Таким чином введення самоузгодженого поля дозволяє розглядати електрони в кристалі як невзаємодіючі частки, тобто що рухаються незалежно один від одного. Це і є основою для представлення електронів провідності у вигляді ідеального газу.

1.2.3 Зони Бріллюена

Стан електрона, що вільно рухається в просторі, як відомо, можна охарактеризувати енергією E і імпульсом P . При цьому зв'язок між енергією і імпульсом дається класичною формулою

$$E = \frac{p^2}{2m_0}, \quad (1.17)$$

Згідно де Бройлю вільному електрону маси, що рухається із швидкістю v , відповідає хвиля, довжина якої може бути визначена із співвідношення

$$\lambda = h/P = h/(m_0v), \quad (1.18)$$

де h – стала Планка.

Оскільки хвильове число - число хвиль, що укладаються на довжині 2π см, дорівнює:

$$k = 2\pi/\lambda, \quad (1.19)$$

то імпульс вільного електрона

$$P = \hbar k, \quad (1.20)$$

а його енергія

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (1.21)$$

де $\hbar = h/2\pi$ –квант дії.

Для електрона, що рухається в полі кристала, можна ввести величину $P = \hbar k$, що називається **квазіімпульсом**. Відповідно до дискретного спектру k , квазіімпульс P також повинен приймати ряд дискретних значень. В кубічній решітці квазіімпульс повинен змінюватися в межах

$$-\frac{\pi\hbar}{a} \leq p_i \leq \frac{\pi\hbar}{a}; \quad i = x, y, z. \quad (1.22)$$

Якщо у (2.55) замість k_i підставити значення p_i , знайдене з (1.22), то для енергії електрона в кубічному кристалі отримаємо:

$$E = E_a + C + 2A \left(\cos \frac{a}{\hbar} p_x + \cos \frac{a}{\hbar} p_y + \cos \frac{a}{\hbar} p_z \right). \quad (1.23)$$

Із співвідношення (1.23) витікає, що енергія електрона в кристалі - парна функція квазіімпульсу, тобто

$$E(p) = E(-p). \quad (1.24)$$

Оскільки імпульс p пропорційний хвильовому вектору k , то замість простору імпульсів можна розглядати також k - простір, який визначається за допомогою системи координат k_x, k_y, k_z .

Дозволеним енергетичним зонам в твердому тілі відповідають зони в k -просторі. У простому випадку для лінійного ланцюжка атомів маємо

одновимірний k -простір. На рис. (1.2) цей «простір» зображається по осі k . Першій енергетичній зоні відповідає по горизонталі ділянка від $-\pi/a$ до π/a . Ця ділянка осі абсцис завдовжки $2\pi/a$ є так звана перша зона Бріллюена в одновимірному k -просторі.

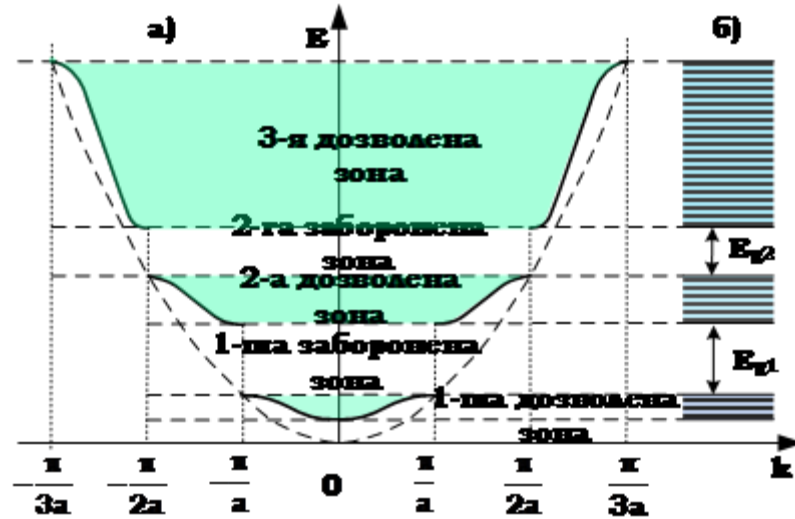


Рисунок 1. 2 – Залежність повної енергії електрона від волнового числа k

1. Зона Бріллюена являє собою область k -простору, де енергія є квазібезперервною функцією хвильового числа k . На межах зони Бріллюена спостерігається стрибкоподібна зміна енергії. У першій зоні Бріллюена є N станів, де N - число атомів кристала заданого об'єму. Але за наявності виродження рівнів в атомах, тобто для усіх станів, окрім S , слід рахувати число станів в зоні Бріллюена рівним gN , де $g=2l+1$ - кратність виродження. Число станів в зоні Бріллюена дорівнює числу станів в дозволеній енергетичній зоні.

2. Енергія електронів в кожній дозволеній енергетичній зоні є періодичною функцією k при переході з однієї зони Бріллюена в іншу. Період цієї залежності для лінійної решітки визначається величиною $2\pi/a$. Це означає, що подальші зони Бріллюена дають стани, еквівалентні станам першої зони Бріллюена. Інакше кажучи, можна зрушувати усі криві $E(k)$ в різних зонах Бріллюена на ціле число періодів $2\pi/a$, так, що вони лежатимуть, наприклад, в першій зоні Бріллюена. Сукупність кривих $E(k)$ для різних енергетичних зон, нанесених в першій зоні Бріллюена, дозволяє представити усю зонну схему в

межах однієї - приведеної зони Бріллюена. Поблизу дна дозволеної зони хід кривої $E(k)$ може бути близький до квадратичного, тобто закон дисперсії аналогічний формулі 1.6 для вільного електрона. Проте у більшості випадків дисперсійні залежності $E(k)$ мають складний характер.

1.2.4 Ефективна маса

Взаємодія електронів з кристалічною решіткою, така складна, що безпосередній облік цієї взаємодії представляє серйозні труднощі. Проте деякі труднощі можна обійти, якщо ввести так звану ефективну масу. При цьому вдається звести рух електронів в потенційних полях решітки до руху вільних електронів, тобто для зонних електронів можна застосовувати основні закони, справедливі для вільних електронів.

Зупинимось спочатку на вільних електронах. Згідно з визначеннями, даними в §1, маємо

$$v = \hbar k/m; \quad (1.25)$$

$$E = k^2 \hbar^2 / 2m. \quad (1.26)$$

Визначимо k з (1.26) шляхом диференціювання:

$$dE/dr = k \hbar^2 / m. \quad (1.27)$$

Після цього, підставляючи k в (1.25), отримаємо

$$v = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dr}. \quad (1.28)$$

Формула 1.28 придатна не лише для вільних електронів, але і для електронів, що знаходяться в потенційному полі решітки. У цьому можна переконатися, розглядаючи групову швидкість хвиль де Бройля $d\omega/dk$, рівну швидкості електрона v .

Припустимо далі, що енергія зонного електрона змінюється під деякою зовнішньою дією. Тоді можемо записати

$$dE = Fv dt, \quad (1.29)$$

де F - деяка зовнішня сила, що призводить до зміни енергії. Підставляючи (1.28) в рівняння (1.29) маємо

$$dE = \frac{F}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk} dt. \quad (1.30)$$

Звідси отримаємо

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} F. \quad (1.31)$$

З рівняння (1.28) також маємо

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2} \cdot \frac{dk}{dt}, \quad (1.32)$$

або з урахуванням (1.31)

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2} F. \quad (1.33)$$

Якщо позначити

$$m^* = \frac{1}{\frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (1.34)$$

і назвати цей вираз ефективною масою електрона, то рівняння (1.33) є закон Ньютона, що зв'язує силу, масу і прискорення. Головним тут являється те, що зовнішня сила - єдина причина прискорення, тобто електрон можна розглядати як вільний. Очевидно рівняння (1.34) можна також переписати у вигляді

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m^*}, \text{ або } (m^*)^{-1} = \frac{d^2 E}{dk^2} \cdot \frac{1}{\hbar^2} = \frac{d^2 E}{dp^2}. \quad (1.35)$$

У застосуванні до дійсно вільних електронів, для яких справедлива формула (1.26), згідно з виразом (1.34) $m^* = m$. Однак для зонних електронів m^* може мати схожість з масою лише остільки, оскільки справедливий закон Ньютона і відповідно справедливі інші закони, як для тіла з масою m^* . Сама ж величина m^* може змінюватися в широких межах залежно від значення d^2E/dk^2 .

Розглянемо три графіка (рис. 1.3). На рис. 1.3а зображена залежність $E(k)$ для однієї з енергетичних зон в межах першої зони Бріллюена; на рис. 1.3б - залежність $v(k)$, знайдена за формулою (1.28), і на рис. 1.3в - $m^*(k)$, визначена за формулою (1.34).

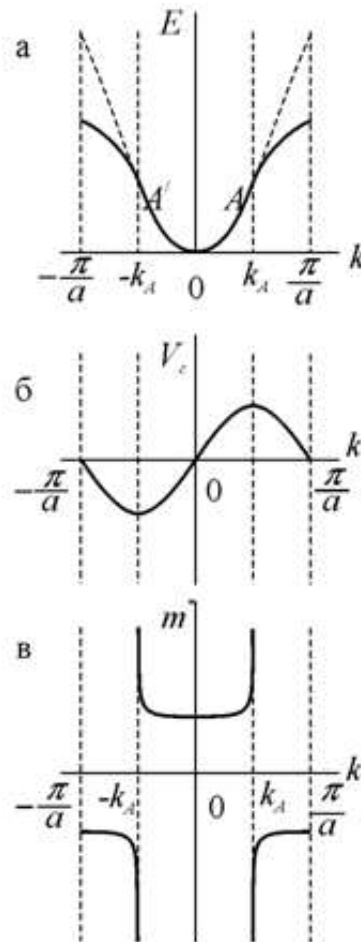


Рисунок 1.3 – Залежність енергії, швидкості та ефективної маси від волнового числа

Якщо поблизу $k = 0$ крива $E(k)$ має квадратичний вид, $v(k)$ в аналогічному місці є лінійною функцією k , m^* - постійною позитивною

величиною. Це, отже, відноситься до дна енергетичної зони, точніше до рівнів, розташованих поблизу дна зони.

Далі в точках перегину кривої $E(k)$ величина v досягає екстремальних значень, а m^* звертається в нескінченність. При підході до екстремуму з боку малих k (за абсолютним значенням) величина m^* прагне до $+\infty$, а при підході з боку великих k (за абсолютним значенням) – до $-\infty$.

Таким чином, в середній частині дозволеної енергетичної зони ефективна маса електронів є невизначеною величиною. Однак це не робить істотного впливу на подальші результати, оскільки майже всі явища в напівпровідниках і діелектриках пов'язані із заповненням (або звільненням) рівнів поблизу дна (або стелі) дозволеної зони.

Поблизу точок B і B_1 крива $E(k)$ майже виходить на горизонталь, а в самих точках B і B_1 величина $dE/dk = 0$. Тому згідно (1.28) швидкість електронів на межах зони Бриллюена дорівнює нулю. Це відповідає зупинці і відображенню електронів від решітки, так що імпульси і величини k змінюють знак на протилежний. Вважають, що електрон покидає точку B і з'являється в точці B_1 або навпаки. Поблизу стелі (вершини) зони величина m^* виявляється кінцевою, але негативною. Це можна представити як наслідок прискорення в протилежному напрямі в порівнянні з дією зовнішньої сили F . Вказане прискорення створюється внутрішньою силою, що діє з боку решітки.

Таким чином, ефективна маса електронів поблизу стелі дозволеної зони - величина негативна. Оскільки сила F має електричну природу, не важко зрозуміти, що якщо замість електрона розглядати дірку, тобто позитивну вакансію, що має елементарний позитивний заряд ($e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл), то в даному випадку вона прискорюватиметься у напрямі сили F . Отже, поблизу стелі дозволеної зони можна визначити позитивну ефективну масу дірки аналогічно ефективній масі електрона, тобто по формулі (1.34). При цьому знаходять абсолютне значення m^* . Як буде видно з подальшого, саме дірки і є носіями заряду, коли явища обумовлені процесами на рівнях поблизу стелі дозволеної зони.

1.3 Електропровідність власних напівпровідників

Усякий кристал, у тому числі і напівпровідниковий, характеризується закономірним розміщенням атомів, які утворюють так звані кристалічні решітки речовини. Взаємне розміщення атомів і відстані між ними визначаються силами міжатомної взаємодії і залежать від природи атомів.

Міжатомні зв'язки в кристалах, як і будь-які хімічні зв'язки, здійснюються завдяки валентним електронам, що знаходяться на зовнішньому шарі електронної оболонки атома. Зовнішній шар оболонки таких напівпровідників, які використовуються при виробництві напівпровідникових приладів (наприклад германій (Ge), кремній (Si) інші), складається з чотирьох електронів, які обертаються навколо ядра. При утворенні кристалів атоми настільки зближуються, що їх зовнішні електронні шари перекриваються. Взаємодія електронних шарів приводить до того, що валентні електрони сусідніх атомів стають загальними, рухаючись орбітами, на кожній з яких може знаходитися не більше двох електронів. Ці загальні орбіти зв'язують між собою атоми напівпровідника, утворюючи так звані ковалентні (двохвалентні) зв'язки. Причому електрони, що беруть участь у зв'язку, належать одночасно обом, зв'язаним між собою атомам.

Кристалічна решітка напівпровідникового елемента має вид куба, у вершинах якого знаходяться атоми. Така кристалічна решітка носить назву кристалічної решітки типу діаманта. Загальний вид кристалічної решітки кремнію (Si) наведена на рис. 1.4.

Для наочності атомні решітки напівпровідників зображують у виді плоскої сітки, у якій кожен атом з'єднаний ковалентним зв'язком з чотирма найближчими атомами.

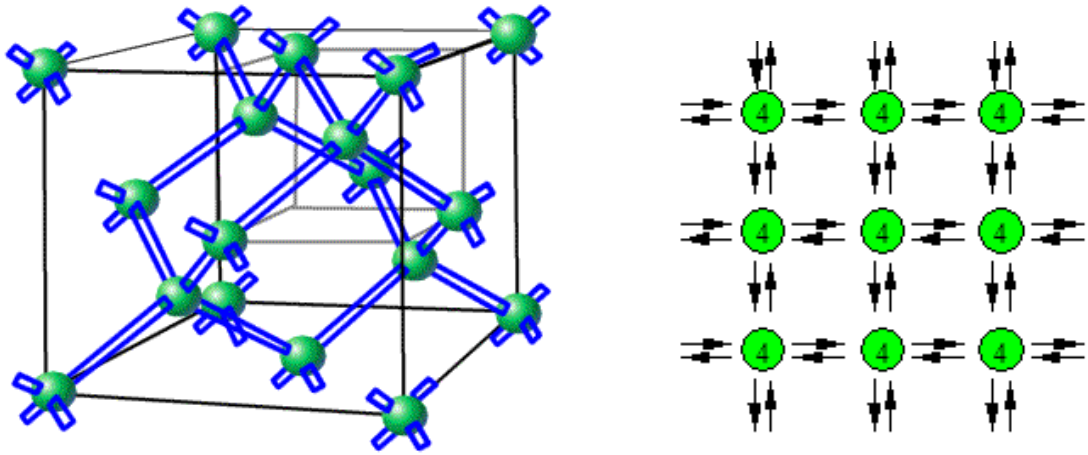


Рисунок 1.4 – Кристалічна решітка кремнію та схематичне зображення кристалічної решітки чистого напівпровідника

Кристалічні решітки, показані на рис. 1.4 є ідеальними. Напівпровідники з такими решітками називаються власними або напівпровідниками і-типу (від англійського *intrinsic* - власний, чистий). При температурі абсолютного нуля (-273°C) усі валентні електрони у власному напівпровіднику зв'язані, і якщо помістити такий кристал в електричне поле, то електричний струм не виникне, оскільки у власному напівпровіднику немає електронів провідності, отже, у цих умовах напівпровідник буде мати властивості ідеального ізолятора.

Вільний електрон (електрон провідності, який не зв'язаний з будь-яким окремим атомом і може переміщуватися кристалом) з'явиться у власному напівпровіднику тільки в тому випадку, якщо валентний електрон звільниться з якого-небудь зв'язку. Для цього необхідна визначена енергія. Ця енергія, яку необхідно надати валентному електрону для того щоб він став електроном провідності, залежить від сили зв'язку валентних електронів з атомами. Для різних напівпровідників сила зв'язку виявляється різною. Оскільки при звільненні електрон отримує додаткову енергію, то його повна енергія буде більшою, у порівнянні зі зв'язаними електронами, на величину, яка потрібна для розриву зв'язку. Якщо відкласти вертикальною віссю повну енергію вільних і зв'язаних електронів, то одержимо графік, показаний на рис. 1.5.



Рисунок 1.5 – Енергетична діаграма зон напівпровідника

Енергіями, які більші рівня E_c можуть володіти тільки вільні електрони, а енергіями, що менші рівня E_v — тільки зв'язані валентні електрони. Тому зону енергій вище рівня E_c називають зоною провідності (чи вільною зоною), а нижче рівня E_v — валентною зоною.

Оскільки в ідеальних кристалах електрони не можуть мати енергію, що лежить у зоні між E_c і E_v , цю зону називають зоною заборонених енергій, або просто забороненою зоною.

Ширина забороненої зони характеризує енергію, яка необхідна для звільнення електрона з валентного зв'язку. Чим більшою є ширина забороненої зони, тим більше потрібно затратити енергії, щоб перевести валентний електрон у вільний стан. Для прикладу: у германію ширина забороненої зони складає 0,72 еВ, кремнію — 1,12 еВ.

Звільнення валентних електронів може відбуватися за рахунок тепла, енергії електричного поля, різних видів випромінювання, чи інших видів енергії. Найбільше напівпровідникові матеріали піддаються впливові тепла.

При нагріванні напівпровідника атоми кристалічних решіток отримують коливальні рухи з амплітудами тим більшими, ніж вищою є температура кристала. Оскільки амплітуда коливань у всіх атомів неоднакова, то при температурі, відмінній від температури абсолютного нуля, завжди існує ймовірність того, що деякі електрони за рахунок теплових коливань атомів отримають енергію, яка більша за ширину забороненої зони, і, в результаті

цього, стануть вільними. Причому, чим вищою є температура і менша ширина забороненої зони, тим більше буде таких електронів.

Якщо валентний електрон став електроном провідності, то атом, якому він раніше належав, втрачає електричну нейтральність. Дійсно, якщо всі зв'язки заповнені, то позитивний заряд ядра компенсується негативним зарядом електронів, а звільнення одного з них спричиняє те, що в цьому місці буде переважати позитивний заряд ядра, за абсолютною величиною рівний зарядові електрона. Таким чином місце, яке звільнилося від електрона, має позитивний заряд. Ці вакантні місця, що з'являються у валентних зв'язках, називають дірками. Дірка може бути заповнена валентним електроном із сусіднього зв'язку. При цьому один зв'язок заповниться, а інший зв'язок розірветься і виявиться незаповненим (рис. 1.6). Отже, дірка може переміщуватися кристалом, а разом з нею буде переміщуватися і позитивний заряд. Дірки можуть брати участь в утворенні електричного струму, оскільки вони так само, як і електрони провідності, можуть пересуватися кристалом і при цьому переносять електричний заряд. Умовно дірку можна розглядати як частку, що є рухомим носієм позитивного заряду, який за значенням рівний зарядові електрона.

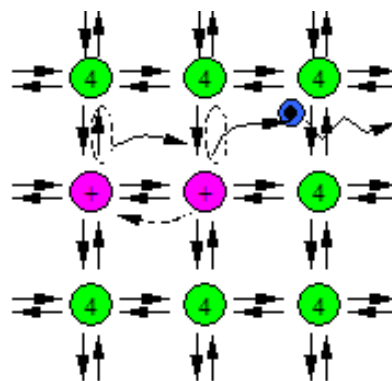


Рисунок 1.6 – Переміщення електрона та дірки кристалом

Оскільки у власному напівпровіднику дірка з'являється тільки при утворенні вільного електрона, то кількість дірок у ньому завжди рівна кількості вільних електронів, тобто $p=n=n_i$, де p — концентрація дірок, n_i — концентрація дірок чи електронів провідності в бездомішковому кристалі.

Процес утворення пари електрон провідності - дірка отримав назву генерації. Вільний електрон може зайняти дірку і знову стати валентним електроном, при цьому повинна виділитися енергія, витрачена спочатку на утворення вільного електрона і дірки, тобто енергія, рівна ширині забороненої зони (ця енергія переважно виділяється у виді тепла чи світла). Такий процес перетворення вільного електрона в зв'язаний, що викликає зникнення пари вільний електрон - дірка, називається рекомбінацією.

Із закону збереження енергії випливає, що в стаціонарних умовах кількість носіїв заряду (електронів і дірок), які рекомбінують повинна дорівнювати кількості генерованих. Таким чином, кожен з рухомих носіїв існує («живе») протягом деякого проміжку часу. Середнє значення цього проміжку часу називається часом життя носіїв, позначається для дірок τ_p та для електронів τ_n і визначається ймовірністю зустрічі даного носія з носієм протилежного знаку, тобто залежить від температури, концентрації рухомих носіїв протилежного знаку і деяких інших факторів.

При відсутності електричного поля в напівпровіднику електричний струм не виникає, оскільки всі напрямки теплового руху рухомих носіїв зарядів однаково ймовірні. Якщо ж в кристалі створити електричне поле, то електрони і дірки, продовжуючи брати участь у хаотичному тепловому русі, будуть зміщуватися під дією електричних сил уздовж поля, що і створить електричний струм.

1.4 Електропровідність домішкових напівпровідників

Розглянемо тепер механізм електропровідності напівпровідника з решіткою типу алмазу, в якому один з атомів заміщений атомом елементу V групи, наприклад миш'яку в решітці кремнію. *Напівпровідник, що має домішки, називають домішковим, а його електропровідність, обумовлену наявністю в кристалі домішки - домішкової. У атома миш'яку п'ять валентних*

електронів розташованих в 4s- і 4p- станах: $\text{As}^{(33)} (1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3)$. У решітці кремнію чотири валентні електрони атома миш'яку разом з чотирма електронами найближчих атомів кремнію беруть участь в утворенні ковалентного зв'язку. П'ятий електрон миш'яку, що не бере участі в утворенні ковалентного зв'язку, слабо пов'язаний з атомом миш'яку, оскільки він знаходиться в електричному полі електронів оточуючих атомів кремнію. При низьких температурах п'ятий електрон локалізований біля атома миш'яку, але при підвищених температурах він може бути відщепнутий від домішки і вільно переміщатиметься по кристалу. В цьому випадку також дотримується електронейтральність кристала, оскільки атом миш'яку, що віддав п'ятий електрон, буде тепер позитивним іоном.

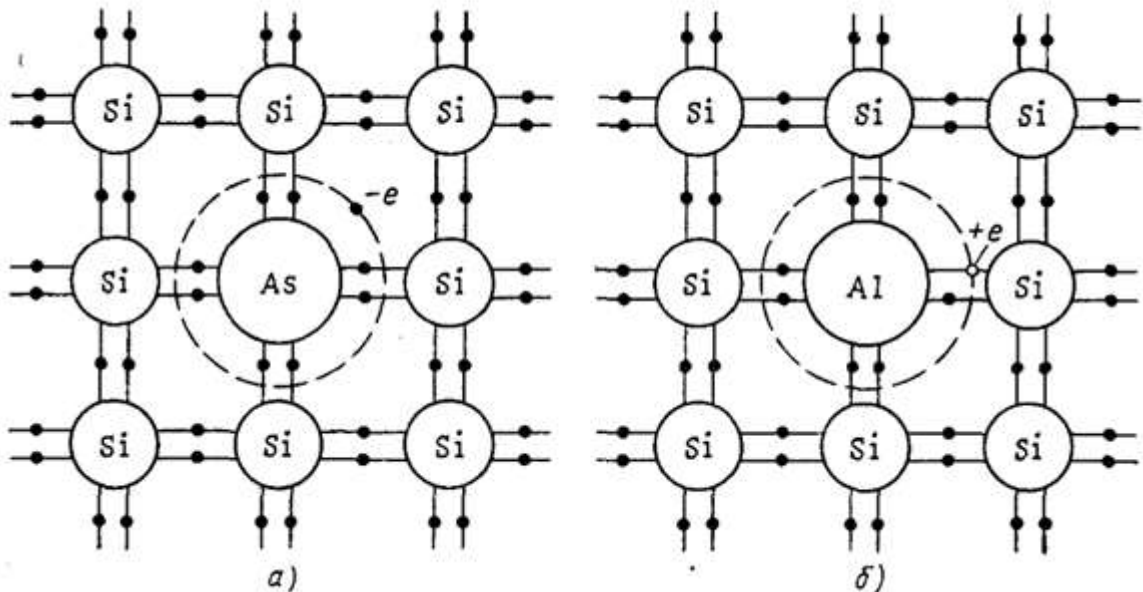


Рисунок 1.7 – Двовимірне положення зв'язків в гратці донорного (а) та акцепторного (б) напівпровідників

Поряд з іонізацією домішки може відбуватися і іонізація атомів основної речовини. Але в області температур нижче тієї, при якій має місце значна власна електропровідність, кількість електронів, відірваних від домішки, буде значно більше кількості електронів і дірок, що утворилися в результаті розриву ковалентних зв'язків. В силу цього *домінуючу роль в провідності напівпровідника гратимуть електрони, тому їх називатимемо основними носіями заряду, а дірки - неосновними носіями заряду. Такий напівпровідник*

називають електронним або n- типу, а домішку, що дає електрони, донорною або домішкою n- типу.

Наявність домішки в кристалі напівпровідника характеризуватиметься появою локальних рівнів, що лежать в забороненій зоні. Оскільки при іонізації атома миш'яку утворюється вільний електрон і для його виникнення потрібно значно меншу енергію, ніж для розриву ковалентного зв'язку кремнію, енергетичний рівень донорної домішки E_d повинен розташовуватися в забороненій зоні у безпосередній близькості до краю зони провідності (рис. 1.8).

Припустимо, що в якості домішки в кристалічну решітку напівпровідника з ковалентним зв'язком внесені атоми елемента третьої групи періодичної системи Менделєєва, наприклад алюміній в решітці кремнію. Оскільки вища валентність алюмінію дорівнює три: $Al^{(13)} (1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p)$ тј один зв'язок атома кремнію буде не завершений (рис. 1.7, б).

У незаповнений зв'язок біля атома алюмінію в результаті теплового збудження може перейти електрон від сусіднього атома кремнію. При цьому утворюються негативний іон алюмінію і вільна дірка, що переміщується по зв'язках кремнію і, отже, що бере участь в провідності напівпровідника. *Домішки, які захоплюють електрони, називають акцепторними. Для утворення вільної дірки за рахунок переходу електрона від атома кремнію до атома акцепторної домішки потрібно значно менше енергії, ніж для розриву ковалентного зв'язку кремнію. В силу цього кількість дірок значно більше кількості вільних електронів і тому в такому напівпровіднику основними носіями заряду будуть дірки, а електрони - неосновними носіями заряду. Напівпровідник з акцепторною домішкою носить назву діркового або p-типу.*

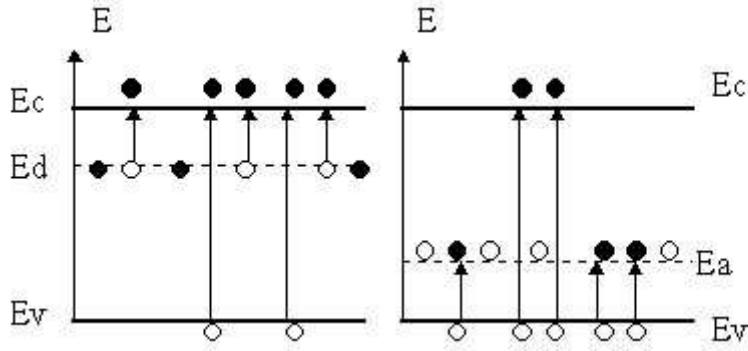


Рисунок 1.8 – Енергетичні діаграми донорного і акцепторного напівпровідників

На енергетичній діаграмі, зображеній на (рис. 1.8) акцепторна домішка має в забороненій зоні енергетичний рівень E_a , розташований на невеликій відстані над стелю валентної зони. При іонізації акцепторної домішки відбувається перехід електрона з валентної зони на рівень E_a , а у валентній зоні з'являється вакантний ковалентний зв'язок - дірка, яка є вільним носієм заряду. У напівпровідниках можуть одночасно бути присутніми як донорна так і акцепторна домішки.

2 СТАТИСТИКА ЕЛЕКТРОНІВ У НАПІВПРОВІДНИКАХ В УМОВАХ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ РІВНОВАГИ

Число електронів в елементі $d\Gamma$ фазового простору має залежати від точки фазового об'єму, де воно визначається, бути пропорційним об'єму $d\Gamma$ і змінюватись у часі. Оскільки ми розглядаємо частинки, що підлягають принципу Паулі, то числа заповнення кожного стану можуть набувати тільки значень 0 або 1. Тоді отримуємо

$$\Omega_k = -k_B T \ln\left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{k_B T}}\right) \quad (2.1)$$

Згідно із загальними принципами статистичної фізики середнє число частинок у системі дорівнює похідній від термодинамічного потенціалу за хімічним потенціалом μ , що береться зі знаком мінус

$$n_k = -\frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu} \quad (2.2)$$

Це середнє число частинок, які знаходяться у системі з енергією ε_k і є функцією розподілу частинок, що підлягають статистиці Фермі-Дірака. Рівноважна функція розподілу електронів за енергіями за заданої температури:

$$f_0(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_f}{k_B T}} + 1} \quad (2.3)$$

Ця функція називається функцією розподілу Фермі-Дірака. Тут враховано такий факт: у фізиці напівпровідників історично склалось, що хімічний потенціал називають рівнем Фермі. Однак відомо, що у системі ферміонів енергія Фермі (найвище значення енергії, що заповнено за заданої концентрації частинок) збігається з хімічним потенціалом лише за нульової температури. Таким чином у (2.3) через E позначено повну енергію, що характеризує стан електронів, через E_f - рівень Фермі. Функція розподілу (2.3)

визначає ймовірність того, що за температури T стан, який характеризується енергією E , зайнятий електроном. При $T \rightarrow 0$ з (2.3) знаходимо

$$\lim_{T \rightarrow 0} f_0(E, T) = \begin{cases} 1, & E < E_f \\ 0, & E > E_f \end{cases} \quad (2.4)$$

При $T = 0$ та $E = E_F$ функція не визначена - має розрив. У цій точці функцію $f_0(E, T)$ необхідно довизначити. Формула (2.4) показує, що при $T = 0$ усі стани з енергією, меншою від енергії Фермі, зайняті, а стани з $E > E_F$ - вільні. Таким чином, при $T = 0$ енергія Фермі є максимальною, яку мають електрони у металі. Це енергетичний рівень, що відділяє вільні стани від зайнятих. При $T \neq 0$ функція розподілу $f_0(E_F, T) = 1/2$. Таким чином, функцію розподілу Фермі при $T = 0$ можна довизначити як $f_0(E = E_F, T = 0) = 1/2$. Вигляд функції розподілу електронів у металах подано на рис.2.1. Завдяки тому, що у напівпровіднику в енергетичному спектрі є щілина (заборонена зона), розподіл електронів у власному напівпровіднику матиме інший вигляд (рис.2.2). При $T = 0$ у власному напівпровіднику всі електрони мали б заповнювати енергетичні рівні з енергіями $E < E_v$. При $T \neq 0$ частина електронів може перейти у збуджений стан і заповнити стани $E > E_c$ у зоні провідності. З іншого боку, у валентній зоні виникнуть незаповнені стани - дірки, які можна розглядати як деякі елементарні збудження, що мають усі властивості частинок

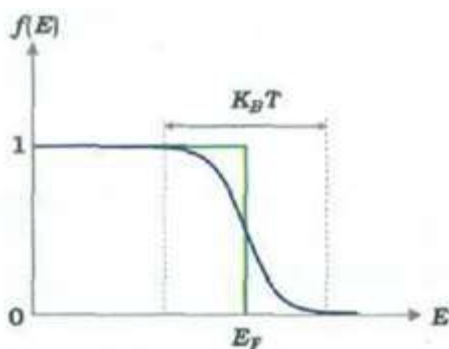


Рисунок 2.1 - Функція розподілу електронів у металах

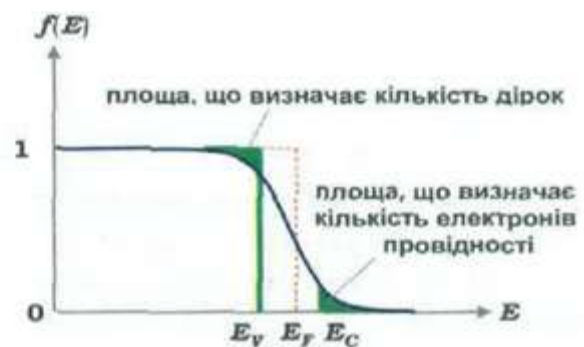


Рисунок 2.2 - Функція розподілу електронів у напівпровіднику

2.1 Вироджений та неvirоджений напівпровідники

Як відомо, що концентрація електронів і дірок у напівпровіднику є функцією температури та залежить від рівня Фермі, то в залежності від розташування рівня Фермі в забороненій зоні кажуть, що напівпровідник є виродженим або неvirодженим. Якщо рівень Фермі лежить нижче зони провідності не менше, ніж на величину kT , електрони підлягають класичній статистиці, і напівпровідник називається неvirодженим. Якщо ж рівень Фермі лежить вище дна зони провідності більше, ніж на $5kT$, то напівпровідник повністю вироджений.

Отже, у неvirодженому напівпровіднику рівень Фермі лежить нижче дна зони провідності та вище стелі валентної зони не менш ніж на величину kT .

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}}$$

Замінюючи параметри електронів на параметри дірок, маємо концентрацію дірок у неvirодженому напівпровіднику

$$p = N_v e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}}$$

$$N_v = 2 \left\{ \frac{2\pi m_{pd}^* kT}{h^2} \right\}^{3/2}$$

Умови повного виродження для дірок записуються у вигляді

$$E_c - E_f > 5kT \quad (2.5)$$

$$E_f - E_v > 5kT$$

Це означає, що у повністю виродженому напівпровіднику рівень Фермі лежить у валентній зоні нижче її стелі на величину, не меншу за $5kT$. Концентрація дірок для виродженого напівпровідника задається формулою

$$n = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} (E_f - E_c)^{3/2} \quad (2.6)$$

$$p = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_d^*}{h^2} \right)^{3/2} (E_v - E_f)^{3/2}$$

Зауважимо, що добуток концентрацій електронів і дірок у невідродженому напівпровіднику не залежить від рівня Фермі

$$np = N_c N_v e^{E_c - E_v / kT}, \quad E_v + kT < E_f < E_c - kT. \quad (2.7)$$

Це підкреслює, що добуток концентрацій електронів і дірок визначається шириною забороненої зони та добутком ефективних мас електронів і дірок. Це дуже важливе співвідношення, яке показує, що:

У невідродженому напівпровіднику в широкому інтервалі значень рівнів Фермі добуток концентрації електронів і дірок визначається тільки температурою та шириною забороненої зони й не залежить від положення рівня Фермі.

$$n(T)p(T) = n_i^2(T) \quad (2.8)$$

Часто співвідношення (2.8) називають законом діючих мас.

2.2 Залежність положення рівня Фермі від температури

Відомо, що статистика носіїв заряду (електронів і дірок) у напівпровіднику може змінюватись за зміни положення рівня Фермі. Далі детально розглянемо ефекти, що викликають зміни положення рівня Фермі.

2.2.1 Рівняння електронейтральності

Для визначення статистичних характеристик носіїв у напівпровіднику необхідно знати положення рівня Фермі E_f , для чого варто використати загальні закони, наприклад закон збереження заряду. Використовуватимемо

так званий принцип електронейтральності - у кристалі в цілому та в будь-якому фізично малому об'ємі речовини сумарний заряд має бути нульовим.

Електрони виникають унаслідок іонізації донорної домішки та атомів основної речовини. Перехід електрона із валентної зони до зони провідності або до атомів акцепторної домішки викликає утворення вільних дірок у валентній зоні. Таким чином, від'ємний заряд, який дорівнює $(n + N_A^-)e^-$, утворюють вільні електрони у зоні провідності та іони акцепторів. Позитивний заряд, який дорівнює $(p + N_D^+)e^+$, утворюють вільні дірки та іони донорів. Тут N_A^- та N_D^+ - кількість іонізованих акцепторів і донорів в одиниці об'єму, відповідно. Оскільки $e^+ = -e^-$, то умову електронейтральності можна записати як

$$(n + N_A^-) - (p + N_D^+) = 0$$

Ясно, що наявність (або відсутність) іонізованих домішок відіграє вирішальну роль у процесах формування електронних властивостей напівпровідника, тому питання про розподіл електронів або дірок на локальних домішкових рівнях є важливим і потребує додаткового розгляду із застосуванням відомих принципів статистичної фізики.

Розглянувши статистику розподілу концентрації електронів і дірок як на простих домішкових центрах так і для власного напівпровідника, можна зробити висновок, що при $m_n^* = m_p^*$ рівень Фермі не залежить від температури та лежить рівно посередині забороненої зони. При $m_n^* \neq m_p^*$ положення рівня Фермі залежить від температури. При $T = 0$ рівень Фермі лежить посередині забороненої зони й зі зростанням температури лінійно залежить від T . Із подальшим зростанням температури рівень Фермі наближається до зони із меншою щільністю станів і тому заповнюється швидіше. Концентрація власних носіїв заряду визначається формулою

$$n_i = n = p = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (2.9)$$

Логарифмуючи цей вираз, отримуємо

$$\ln n_i = \text{const} - \frac{3}{2} \ln \frac{1}{1} - \frac{E_g}{2kT}$$

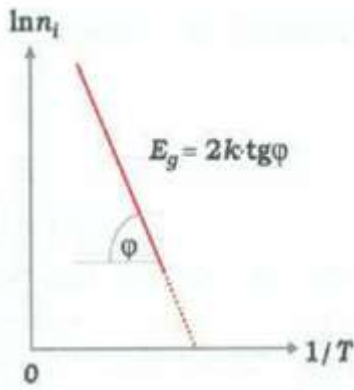
Логарифм змінюється набагато повільніше порівняно з лінійним (за $1/T$) доданком, тому доданком $-\ln(1/T)$ у правій частині можна знехтувати. Таким чином, ми отримали дуже важливий результат: залежність логарифма концентрації власних носіїв заряду від оберненої температури є прямою лінією з кутом нахилу, що пропорційний ширині забороненої зони

$$\text{tg}\varphi = -\frac{E_g}{2k}$$

$$E_g = 2k|\text{tg}\varphi|$$

Оцінка концентрації власних носіїв заряду для германію дає при $T = 300 \text{ K}$ $n_i = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ і, аналогічно, для кремнію $n_i = 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$. За допомогою побудови залежності логарифма концентрації носіїв заряду від оберненої температури в області власної провідності та визначення куту нахилу прямої можна отримати ширину забороненої зони напівпровідника. Однак визначення E_g за даними залежності концентрації носіїв від температури часто не дає правильних результатів, оскільки ширина забороненої зони в напівпровіднику залежить від температури. Зростання температури викликає збільшення коливань атомів в ґратці, що спричиняє ефективне зменшення міжатомних відстаней у кристалі. Це викликає зміну кристалічного потенціалу, яка впливає на параметри зонної структури. Експериментально доведено, що у більшості напівпровідників в області температур 175-350 K зростання температури призводить до зменшення ширини забороненої зони за лінійним законом:

$$E_g(T) = E_g^0 - \alpha T \quad (2.10)$$



Напівпровідник	Ge	Si	GaAs	InSb
$\alpha, 10^{-4} \text{eV} \cdot \text{K}^{-1}$	3,9	2,4	4,3	2,9

Рисунок 2.3 – Залежність $\ln n_i$ від оберненої температури

де E_g^0 - ширина забороненої зони за нульової температури, α -температурний коефіцієнт зміни ширини забороненої зони. У таблиці подано значення коефіцієнта α для найпоширеніших напівпровідників

2.2.2 Напівпровідник, що має домішку одного типу

Нехай у напівпровідник введено домішку одного типу. Для визначеності вважатимемо її донором ($N_d \neq 0$, а $N_A = 0$), У цьому випадку рівняння електронейтральності матиме такий вигляд

$$\begin{aligned} n + n_D - p &= N_D \\ n &= p + N_D^+ \end{aligned} \quad (2.11)$$

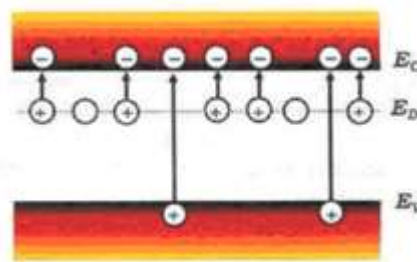


Рисунок 2.4 – Енергетична діаграма донорного напівпровідника

Рівняння (2.11) вказує на існування двох каналів виникнення вільних електронів у зоні провідності завдяки: по-перше прямим переходам із валентної зони до зони провідності (часто такий процес називають генерацією електронно-діркових пар при переході зона-зона); по-друге переходам електронів до зони провідності із домішкового рівня, у результаті чого з'являються N_d^+ іонів донорної домішки (рис. 2.4). У невідродженому напівпровіднику, як ми знаємо,

$$np = N_c N_v e^{-E_g/kT} \quad (2.12)$$

тобто добуток концентрації електронів і дірок не залежить від положення рівня Фермі, отже - від наявності домішок. Він дорівнює квадрату концентрації електронів у власному напівпровіднику. Із (2.11) доходимо такого висновку: оскільки $E_c - E_d < E_c - E_v$, то за низьких температур основну роль відіграватимуть переходи електронів із домішкового рівня. Можна припустити, що

$$p \ll N_D^+$$

Зі зростанням температури відбуватиметься подальша іонізація домішок, доки всі вони не будуть іонізовані, і зростання концентрації електронів проходитиме тепер за рахунок іонізації основної речовини. Цей процес супроводжується зростанням концентрації дірок у валентній зоні. За великих температур очевидно буде досягнуто умови $p \gg N_d^+ = N_d$, і напівпровідник стає *власним*. А величина критичної температури очевидно визначатиметься концентрацією домішки. Згідно із цими міркуваннями розглядатимемо різні випадки температур. Почнемо з *низьких температур*. У цьому граничному випадку маємо $p \ll N_d^+$. Тоді рівняння електронейтральності набуває вигляду

$$n = N_D^+ \quad \text{або} \quad n = p_D$$

Звідси випливає

$$N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} = \frac{N_D}{2e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}} + 1}$$

Розв'яжемо це рівняння щодо енергії Фермі, таким чином, маємо

$$E_f = kT \ln \left\{ \frac{1}{4} e^{\frac{E_D}{kT}} \left[\sqrt{1 + \frac{8N_D}{N_c} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}}} - 1 \right] \right\}$$

Зауважимо ще раз, що результат отримано для випадку, коли електрони у зоні провідності виникають в основному за рахунок іонізації донорів. Можна сподіватись, що для досить малих температур існує температурний інтервал, в якому

$$\frac{8N_D}{N_c} e^{\frac{E_c - E_D}{kT}} \gg 1$$

У цьому випадку, отримаємо

$$E_f = \frac{E_c + E_D}{2} + kT \ln \left(\frac{N_D}{2N_c} \right)^{1/2}$$

При $T=0$ це рівняння дає

$$E_f = \frac{E_c + E_D}{2} \tag{2.13}$$

тобто, на відміну від власного, у донорному напівпровіднику при $T=0$ рівень Фермі E_{F0} знаходиться посередині між дном зони провідності та рівнем донорної домішки. Зі зростанням температури рівень Фермі починає зростати, досягає максимуму й далі зменшується так, що за температури T^* (для якої $2N_c = N_D$) знов досягає енергії E_{F0} , Концентрація електронів у цьому випадку

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} = \sqrt{\frac{N_c N_D}{2}} e^{-\frac{\Delta E_d}{kT}}$$

Іншими словами, за малих температур концентрація електронів визначається коренем квадратним із концентрації домішок. Із цієї формули отримуємо

$$\ln n = \text{const} + \ln T^{3/4} - \frac{\Delta E_D}{2} \frac{1}{T} \quad (2.14)$$

Оскільки за зміни температури логарифм змінюється дуже повільно, то в основному поведінку концентрації визначатиме доданок, пропорційний $1/T$. При цьому тангенс кута нахилу прямої (2.24) визначатиме енергію іонізації донора (рис. 2.5)

$$\text{tg} \varphi = \frac{\Delta E_D}{2k}$$

Розглянемо тепер випадок

$$\frac{8N_D}{N_c} e^{\frac{E_c - E_D}{kT}} \ll 1 \text{ тобто } N_c \gg 8N_D \quad (2.15)$$

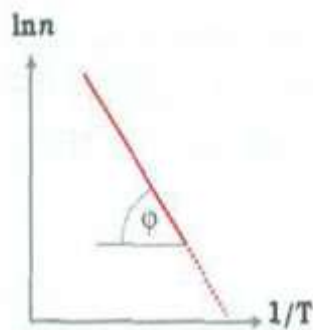


Рисунок 2.5- Визначення концентрації донорів із залежності $\lg n = f(1/T)$

З одного боку, температура тут має бути достатньо високою для генерування достатньої кількості електронів, а з іншого - досить малою для виконання нерівності $p \ll N_d^+$. Таким чином, маємо

$$E_f = E_c + kT \ln \frac{N_D}{N_c}$$

Оскільки ми розглядаємо область температур, де $N_c \gg N_d$, то логарифм є від'ємним. Зростання температури приводить до зменшення рівня Фермі. Концентрація електронів у цьому випадку

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} = N_c e^{\ln(N_D/N_c)} = N_D \quad (2.16)$$

не залежить від температури та дорівнює концентрації домішок. Це область збіднення (виснаження) домішки, де концентрація основних носіїв заряду лишається сталою, а концентрація неосновних носіїв заряду (дірок) швидко зростає за зростання температури

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{n_i^2}{N_D} = \frac{N_c N_v}{N_D} e^{-\frac{E_g}{kT}}$$

Але треба пам'ятати, що цей вираз є справедливим, доки виконується

$$p \ll N_D^+ = N_D$$

Часто носії заряду називають основними, якщо їхня концентрація більша за концентрацію власних носіїв заряду n_i за заданої температури; якщо ж їхня концентрація менша за n_i , то їх називають *неосновними*. Але таке визначення не є коректним для компенсованого напівпровідника - такого, що має домішки обох типів: як донорні, так і акцепторні. У подібному випадку концентрація електронів і дірок може бути більшою за концентрацію власних носіїв за заданої температури. Тому для коректного визначення основних і неосновних носіїв заряду в напівпровідниках варто скористатись правилом діючих мас і записати $pn = n_i^2$. Звідси видно, що при $n \gg n_i$, завжди $p \ll n_i$ (коректніше можна сказати, що у випадку, коли $n > p$ електрони є основними носіями

заряду, а дірки – неосновними. У випадку зворотної нерівності $n < p$ основними носіями є дірки, а неосновними – електрони.

Далі розглянемо випадок високих температур. Зі зростанням температури концентрація дірок зростає й може зрівнятися із концентрацією електронів. Розв'язуючи рівняння електронейтральності і враховуючи, що всі атоми домішки іонізовані, знаходимо енергію Фермі.

Проаналізуємо отримані вирази:

$$\bullet \text{ при } \frac{4n_i^2}{N_D^2} \ll 1 \quad n \cong N_D, \quad p \cong \frac{n_i^2}{N_D}, \quad \text{а для рівня Фермі } E_F = E_C + kT \ln \frac{N_D}{N_C}, \quad (2.17)$$

тобто маємо результат для області збіднення, коли концентрація носіїв визначається концентрацією донорів;

$$\bullet \text{ при } \frac{4n_i^2}{N_D^2} \gg 1 \quad n = p = n_i, \quad \text{а для рівня Фермі } E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + kT \ln \frac{N_V}{N_C}, \quad (2.18)$$

тобто маємо результат для власного напівпровідника.

Таким чином ми отримали вирази, які описують поведінку рівня Фермі у всьому температурному інтервалі від $T=0$ до температури збіднення T_d та за температур, більших від T_d

$$E_F = kT \ln \left\{ \frac{1}{4} e^{\frac{\epsilon_D}{kT}} \left[\sqrt{1 + \frac{8N_D}{N_C} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}}} - 1 \right] \right\}.$$

$$E_F = E_C + kT \ln \left[\frac{N_D}{2N_C} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4N_C N_V}{N_D^2} e^{-\epsilon_D/kT}} \right) \right].$$

Перехід від збіднення домішки до власної провідності відбувається в деякому температурному інтервалі. Зрозуміло, що за заданої величини енергетичної щілини (для конкретного напівпровідника) цей інтервал визначається концентрацією домішки. За заданої концентрації домішки інтервал визначається величиною щілини. Позначимо температуру нижньої

межі виснаження домішки через T_d^- а температуру верхньої межі - через T_d^+ . На рис. 4.7 проілюстровано поведінку рівня Фермі як

функції температури в напівпровіднику із донорною домішкою. Литерами *A* та *B* позначено області виморожування та виснаження домішок, *C*- область власної провідності. Тепер можна визначити поведінку концентрації носіїв заряду від температури у широкому інтервалі температур, можна побудувати графік залежності логарифма концентрації електронів від оберненої

$$\frac{N_c(T_d^-)}{8} \gg N_D > 2n_i(T_d^+).$$

температури (рис.4.8). Оскільки нижня межа області виснаження визначається нерівністю $N_c \gg 8N_D$, а верхня- $4n_i^2 \ll N_D^2$

Для чисельних оцінок використаємо, що

$$N_c(T) = 2,5 \cdot 10^{19} \left(\frac{m_d^*}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}.$$

Нижня оцінка межі виснаження домішки буде мати таке рівняння

$$\frac{T_d^-}{300} = \frac{m}{m_d^*} \cdot 2,5 \cdot \left(\frac{N_D}{10^{19}} \right)^{2/3}. \quad (2.19)$$

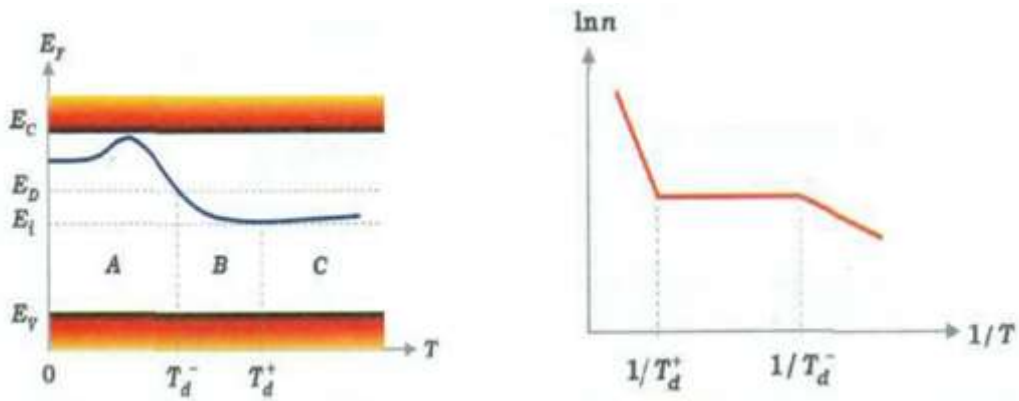


Рисунок 2.6 – Залежність рівня Фермі від температури в дозорному носіїв заряду в дозорному напівпровіднику
 Рисунок 2.7 – Залежність концентрації від температури в дозорному носіїв заряду в дозорному напівпровіднику

Взявши до уваги, що для Ge $m_d^* = 0,56m$ ($E_d = 0.01eV$) із (2.19) отримуємо, що для концентрації домішки $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ нижню межу області збіднення можна оцінити температурою $T_d^- = 1340K$. Для Si, становить $T_d^- = 694K$. За зменшення концентрації дозорів до рівня $N_d = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ температура нижньої межі області збіднення оцінюється для Ge як $T_d^- = 13,4K$ і для Si - як $T_d^- = 6,9K$. Іноді температуру T_d^- визначають з умови $E_F = E_d$, звідки

$$T_d^- = \frac{\Delta E_D}{k \ln(N_c / N_d)} \quad (2.20)$$

Оцінка за цією формулою дає такий самий порядок величин, як і оцінка за (4.19). Для визначення верхньої межі області виснаження домішки можна покласти $p = N_d$ та $n = 2N_d$. Звідси, використовуючи формулу для добутку концентрацій електронів і дірок, маємо

$$np = 2N_D^2 = N_V(T_d^+) N_C(T_d^+) e^{-\frac{E_g}{kT_d^+}} \quad (2.21)$$

Проведений аналіз дозволяє дійти таких висновків: поведінка рівня Фермі в дозорному напівпровіднику сильно залежить від температури і визначається матеріалом напівпровідника, типом її концентрацією домішок. Наприклад, за не дуже великих концентрацій домішки та нульової температури E_F лежить посередині між дном зони провідності й рівнем дозорної домішки. Зі зростанням температури рівень Фермі спочатку зростає до деякого максимального значення, а потім починає зменшуватись так, наче він зрівнюється зі значенням рівня дозорної домішки. Ця область температур називається областю слабкої іонізації, або областю вимороження дозора. За подальшого зростання температури рівень Фермі зменшується до енергій, що ненабагато перевищують середину забороненої зони, після чого починає повільно збільшуватись. Ця область температур називається областю

виснаження (збіднення) донорів й характеризується тим, що всі донори за таких температур є іонізованими. За подальшого збільшення температури основну роль у генерації носіїв відіграють переходи зона-зона, тобто напівпровідник поводитья як власний. При цьому, згідно із (2.20), температура, за якої настає власна провідність, буде тим меншаю, чим меншими є ширина забороненої зони та концентрація домішки. Вона також зменшується для важких носіїв заряду.

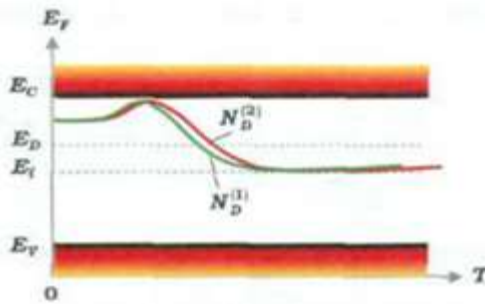


Рисунок 2.9 – Залежність рівня Фермі від температури в напівпровіднику n – типу при $N_D^{(2)} > N_D^{(1)}$

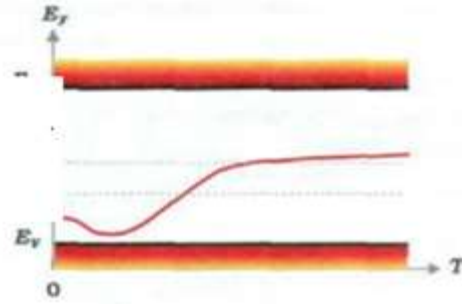


Рисунок 2.10 – Залежність рівня Фермі від температури в напівпровіднику p - типу

На рис. 2.9 та 2.10 подано залежність положення рівня Фермі від температури

3 МЕХАНІЗМИ РЕКОМБІНАЦІЇ НОСІЇВ ЗАРЯДУ

На відміну від металів, у напівпровідниках існують додаткові можливості, коли концентрація носіїв заряду може змінюватись із часом, лишаючи при цьому зразок електронейтральним. Наприклад, при освітленні світлом напівпровідника можуть розриватись валентні зв'язки, що спричинить появу "вільного" електрона у зоні провідності та дірки - у валентній зоні: виникне електронно-діркова пара (рис. 3.1 а). Процеси генерації можуть відбуватись також й за рахунок домішкового поглинання (рис. 3.1 б, в)

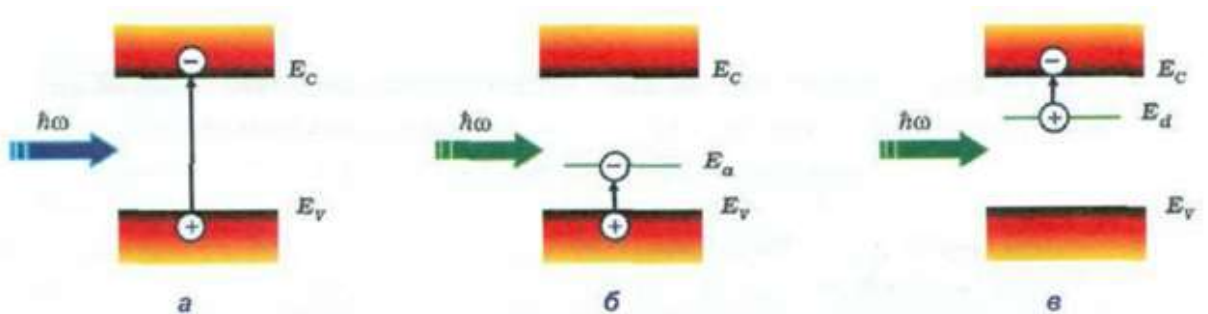


Рисунок 3.1 – Схема процесів генерації носіїв типу зона-зона: а – поглинання світла з енергією фотонів, більшу за ширину забороненої зони ($h\omega > E_g$); б – домішкове поглинання світла через акцепторний рівень ($h\omega > E_a - E_v$); в - домішкове поглинання світла через донорний рівень рівень ($h\omega > E_c - E_d$)

До такого самого результату може привести дія сильних електричних полів або інжекція носіїв та ін.

Якщо діє додаткове до теплового джерело виникнення носіїв заряду, то кажуть, що відбувається генерація нерівноважних носіїв заряду у напівпровіднику, унаслідок якої у зразку збільшується концентрація носіїв у зоні провідності та валентній зоні.

У той же час збільшується ймовірність зворотного процесу - їх зустріч і взаємна анігіляція (рекомбінація). Таким чином:

Рекомбінацією є процес, унаслідок якого одночасно зникають вільний електрон із зони провідності та дірка - із валентної зони.

Ілюстрацією цього визначення є рис. 3.2 а. За рекомбінації через домішкові рівні при переході електрона із домішкового рівня до валентної зони зникає дірка із валентної зони (рис. 3.2 б) або електрон - із зони провідності, який переходить на домішковий (донорний) рівень (рис. 3.2 в). При цьому енергія рекомбінованих носіїв може витрачатися на випромінювання фотона (випромінювальна рекомбінація) або на народження фононів і нагрівання зразка (безвипромінювальна рекомбінація).

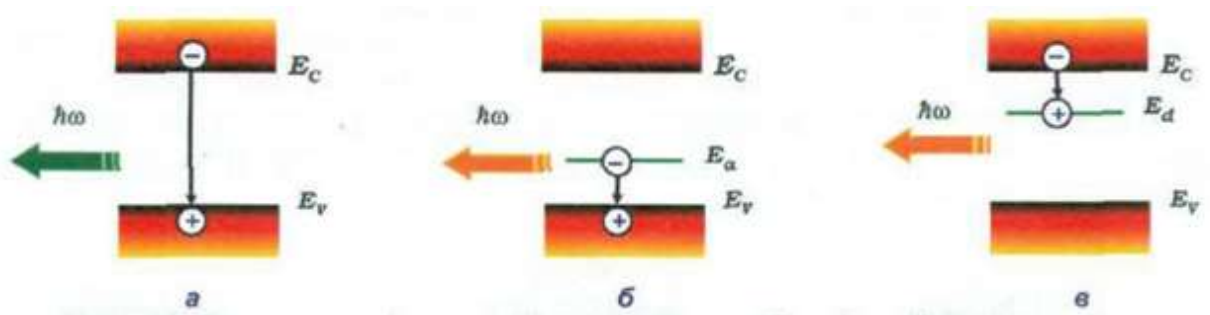


Рисунок 3.2 – Схема процесів випромінювальної рекомбінації носіїв типу зона-зона: а – через домішковий рівень ($h\omega \leq E_g$); б - через акцепторний рівень ($h\omega \leq E_a - E_v$); в – через донорний рівень ($h\omega \leq E_c - E_d$)

Процеси генерації і рекомбінації утворюють новий стаціонарний стан напівпровідника, що характеризується більшою концентрацією носіїв і не є рівноважним. Згідно із цим механізми рекомбінації зазвичай поділяють на три основних класи:

- ✓ *міжзонна рекомбінація*: вільний електрон із зони провідності рекомбінує з діркою із валентної зони за один елементарний акт;
- ✓ *рекомбінація через пастки* (домішки та дефекти): вільні електрони рекомбінують зі зв'язаними на домішках або дефектах дірками, а вільні дірки - зі зв'язаними на пастках електронами;
- ✓ *поверхнева рекомбінація* відбувається на поверхні зразка або на межі поділу гетерофазної системи. Однак поверхнева рекомбінація часто

не відокремлюється в клас, оскільки також може бути як міжзонною, так і рекомбінацією через пастки.

При переході електрона із зони провідності до валентної зони внаслідок прямої рекомбінації зона-зона мають виконуватись закони збереження енергії та імпульсу: якщо E' та \mathbf{k}' є енергією та хвильовим вектором електрона у зоні провідності, а E та \mathbf{k} - енергією та хвильовим вектором електрона у валентній зоні, то

$$\begin{aligned} E'(\mathbf{k}') &= E(\mathbf{k}) + \Delta E, \\ \hbar \mathbf{k}' &= \hbar \mathbf{k} + \Delta \mathbf{p}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

У цих формулах ΔE - енергія, що вивільняється за один акт рекомбінації, а $\Delta \mathbf{p}$ - зміна імпульсу електрона при переході із зони провідності до валентної зони. Іншими словами, для одночасного виконання умови (3.1) потрібна наявність третього агента. Якщо таким агентом є фотон, то кажуть, що відбувається випромінювальна рекомбінація. Тоді

$$\Delta E = \hbar \omega, \quad |\Delta \mathbf{p}| = \hbar \omega / c \quad (3.2)$$

- енергія та імпульс кванта світла, що випромінюється, відповідно.

У випадку безвипромінювальної рекомбінації надлишкова енергія та імпульс можуть передаватись фононам. Існують випадки, коли дефіцит енергії та імпульсу передаються іншому вільному електрону (у напівпровіднику n -типу) або вільній дірці (у напівпровіднику p -типу). Такі процеси називаються ударною рекомбінацією (або оже-процесами). Зрозуміло, що ймовірність таких процесів значно зростає за зростання концентрації носіїв, тобто оже-рекомбінація виявляється у сильно легованих напівпровідниках. Якщо електрон і дірка утворюють як проміжний стан екситон, то кажуть що відбувається екситонна рекомбінація. Якщо ширина забороненої зони не перевищує 0,2-0,3 еВ, то вважається, що в таких речовинах основну роль відіграє міжзонна рекомбінація. Розглянемо детальніше, як виконуються закони збереження енергії та імпульсу за міжзонної рекомбінації. Як відомо,

можуть існувати два типи зонної структури поблизу екстремумів енергії, які схематично подано на рис. 3.3.

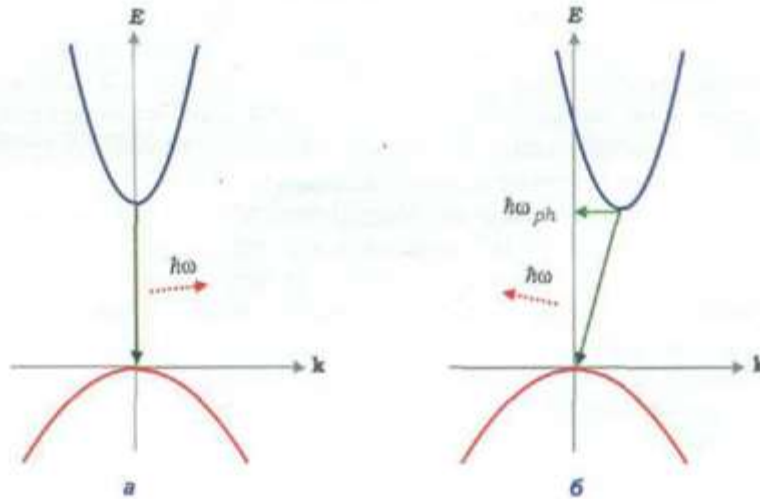


Рисунок 3.3 – Міжзонна випромінювальна рекомбінація у напівпровідниках: а – прямо зонному; б – непрямо зонному.

Якщо міжзонна рекомбінація є випромінювальною, то закон збереження енергії виконується за рахунок випромінювання фотона з енергією, яка дорівнює ширині забороненої зони. Для прямозонного напівпровідника процес міжзонної рекомбінації є дуже ефективним, оскільки не виникає проблем зі збереженням імпульсу. Він виконується автоматично, адже імпульс фотона набагато менший за імпульс електрона з відповідною енергією. Дійсно, у процесі прямої міжзонної рекомбінації у прямозонному напівпровіднику рекомбінують вільна дірка з вільним електроном, імпульси яких майже однакові (відрізняються на імпульс випроміненого фотона). У випадку непрямозонного напівпровідника для виконання законів збереження необхідний додатковий агент події рекомбінації, оскільки закон збереження імпульсу вимагає його значної зміни. Таким агентом виступає фонон. Отже, закони збереження енергії та імпульсу за міжзонної випромінювальної рекомбінації у непрямозонному напівпровіднику матимуть вигляд

$$\begin{aligned}
 E'(\mathbf{k}') &= E(\mathbf{k}) + \Delta E, \quad \Delta E = \hbar\omega + \hbar\omega_{\text{фон.}} \\
 \hbar\mathbf{k}' &= \hbar\mathbf{k} + \Delta\mathbf{p}, \quad \Delta\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}_{\text{фот.}} + \hbar\mathbf{k}_{\text{фон.}}, \quad \mathbf{k}_{\text{фот.}} \ll \mathbf{k}'
 \end{aligned}
 \tag{3.3}$$

Ймовірність процесу із трьома частниками є значно меншою за ймовірність двочастинкового процесу. Із цієї причини міжзонна рекомбінація проходить ефективно у прямозонних напівпровідниках і дає дуже незначний внесок до рекомбінаційних процесів у непрямоzonних напівпровідниках, де важливішою є рекомбінація через домішкові центри. Якщо ширина забороненої зони перевищує 0,5 еВ, то в таких речовинах рекомбінація зазвичай відбувається через локалізовані стани, які називаються рекомбінаційними пастками. Щодо рекомбінації через пастки необхідно зазначити два важливих аспекта:

- ✓ захоплюючись із зони провідності через пастку, електрон передає своєму оточенню меншу енергію, ніж якби він безпосередньо переходив до валентної зони. За таких обставин ймовірність першого процесу може бути істотно вищою, ніж другого;
- ✓ при захопленні носія на пастці виконання закону збереження імпульсу не є обов'язковим, оскільки носії, що потрапляють до області сильної неоднорідності поля, не знаходяться в умовах просторової однорідності, де збереження імпульсу є обов'язковим. Це значно спрощує виконання умови збереження енергії і тим самим збільшує ймовірність процесу рекомбінації через пастки.

У ролі рекомбінаційних пасток можуть виступати мілкі та глибокі рівні, при цьому процеси рекомбінації через пастки можуть відбуватись принципово по-різному. Дійсно, електронний стан на воднеподібному (мілкому) домішковому рівні характеризується досить сильною делокалізацією. Тому із принципу невизначеності імпульс такого електрона буде визначений досить точно. Цей факт на зонній діаграмі подано коротким відрізком на рівні E_d (рис. 6.4). Таким чином, процеси рекомбінації через мілкі рівні ефективно проходять у прямозонних напівпровідниках. Для глибоких рівнів (E_m на рис. 6.4), що характеризуються сильною локалізацією електронів (тобто точним визначенням координати), імпульс має широкі межі невизначеності, до яких можуть потрапляти значення дефіциту імпульсу при переході

електрона із зони провідності до валентної зони. Таким чином ймовірність процесу рекомбінації через глибокі рівні у непрямозонному напівпровіднику буде набагато більшою, ніж через мілкі. Якісні аспекти процесів генерації і рекомбінації носіїв потребують визначення поведінки кількісних характеристик таких процесів. Основними кількісними характеристиками генераційно-рекомбінаційних процесів є концентрація та час життя надлишкових нерівноважних носіїв заряду.

4 ДИФУЗИЯ ТА ДРЕЙФ НЕРІВНОВАЖНИХ НОСІЇВ ЗАРЯДУ. РІВНЯННЯ НЕПЕРЕРВНОСТІ

4.1 Кінетика генерації і рекомбінації носіїв заряду у напівпровідниках

Як зазначалося, генераційно-рекомбінаційні процеси, що можуть відбуватись у напівпровідниках, спричиняють виникнення або зникнення носіїв у валентній зоні та зоні провідності - виникає додаткова концентрація електронів і дірок, що відрізняється від рівноважної. Якщо концентрація електронів і дірок відрізняється від рівноважної, то кажуть, що в напівпровіднику є надлишкова концентрація носіїв, яка може виникати, наприклад при появі у напівпровіднику додаткової пари вільних носіїв. У такому випадку концентрації нерівноважних електронів та дірок є функціями просторових координат та часу $n(x, y, z, t)$ та $p(x, y, z, t)$, а швидкість їх зміни може бути виражена за допомогою рівняння неперервності.

Розглянемо одномірний однорідний зразок, в якому концентрація електронів змінюється тільки в напрямку координати X , як це показано на рис. 4.1. Визначимо в напівпровіднику шар товщиною dx та перерізом 1 см^2 . Об'єм цього шару буде чисельно дорівнювати dx . Припустимо, що в момент часу t концентрація електронів була $n(x, t)$, в об'ємі dx відповідно $n(x, t)dx$, а в момент часу $t+dt$ буде $n(x, t+dt dx)$ та зміна концентрації електронів за час dt в об'ємі dx складатиме:

$$n(x, t + dt dx) - n(x, t)dx = \frac{\partial n}{\partial t} dx dt \quad (4.1)$$

Ця зміна концентрації електронів може відбуватися в результаті процесів генерації, рекомбінації, дифузії та дрейфу носіїв заряду. Розглянемо ці процеси.

1. Під процесом генерації мають на увазі всі механізми, за допомогою яких електрони, що знаходяться в валентній зоні, на домішкових

рівнях або на пастках можуть бути переведені в зону провідності. В усіх цих випадках необхідно враховувати генерацію свободних носіїв заряду в результаті як теплових, так і зовнішніх впливів. До зовнішніх впливів відносяться дія світла, ядерних часток, нерівноважного випромінювання, що випромінює сам напівпровідник і т.д.

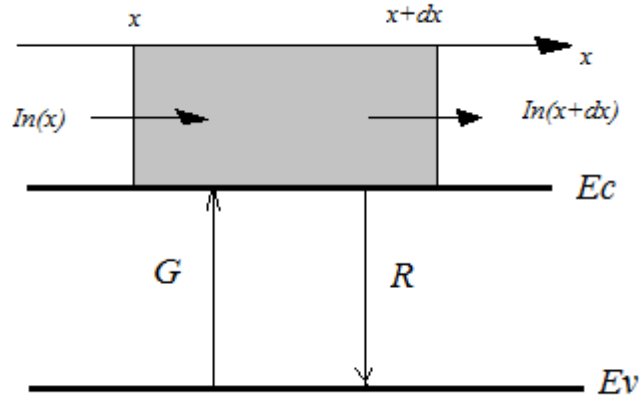


Рисунок 4.1 – Одномірний однорідний зразок

Швидкості цих двох типів генерації об означимо відповідно G_0 та G . Повна швидкість генерації носіїв буде дорівнювати $G_0 + G$. Будемо вважати, що в данному випадку збудження електронів відбувається за рахунок поглинання світла напівпровідником та в 1см^2 за 1с з'являється G пар електрон – дірка у кількості:

$$Gdxdt \quad (4.2)$$

2. Зміна концентрації носіїв заряду в об'ємі dx відбувається також і в результаті рекомбінації. Повну швидкість рекомбінації можна записати як R_0+R , де R_0 – швидкість рекомбінації при тепловій рівновазі, R – швидкість рекомбінації при наявності зовнішнього впливу. У разі лінійної рекомбінації, коли час життя нерівноважних електронів τ_n не залежить від концентрації електронів, зміна кількості електронів у разі рекомбінації R в об'ємі dx за час dt складатиме:

$$Rdxdt = -\left(\frac{dn}{dt}\right)_r dxdt = \frac{n-n_0}{\tau_n} dxdt \quad (4.3)$$

3. Зміна кількості носіїв заряду в об'ємі dx відбувається також в процесі дифузії та дрейфу. Якщо $I_n(x, t)$ – потік електронів, що проходить через 1 см^2 поверхні за 1 с , то за час dt через межу шару x в об'єм dx увійдуть електрони в кількості $I_n(x, t)dt$, а через межу $x+dx$ вийдуть $I_n(x+dx, t)dt$ електронів. Таким чином, зміна числа електронів за час dt в об'ємі dx внаслідок різності цих потоків:

$$I_n(x, t)dt - I_n(x + dx, t)dt = -\frac{\partial I_n}{\partial x} dx dt \quad (4.4)$$

Повна зміна концентрації електронів в об'ємі dx за час dt складатиме:

$$\frac{\partial n}{\partial t} dx dt = G dx dt - \frac{\partial I_n}{\partial x} dx dt - \frac{n-n_0}{\tau_n} dx dt \quad (4.5)$$

Звідки маємо:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - \frac{\partial I_n}{\partial x} - \frac{n-n_0}{\tau_n} \quad (4.6)$$

Рівняння (3.6) називають рівнянням неперервності для електронів.

Аналогічно рівняння неперервності для дірок запишемо у вигляді:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - \frac{\partial I_p}{\partial x} - \frac{p-p_0}{\tau_p} \quad (4.7)$$

Потоки електронів I_n та дірок I_p можливо виразити через щільність

$$\begin{aligned} J_n &= -eI_n \\ J_p &= -eI_p \end{aligned} \quad (4.8)$$

Якщо концентрації носіїв заряду є функціями координат (x, y, z) рівняння неперервності запишуться через відповідні щільності струмів наступним чином:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G + \frac{1}{e} \operatorname{div} J_n - \frac{n-n_0}{\tau_n} \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - \frac{1}{e} \operatorname{div} J_p - \frac{p-p_0}{\tau_p} \quad (4.10)$$

$$\text{Де } \operatorname{div} J = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}$$

Розглянемо стаціонарний випадок. Так як концентрація електронів та дірок не змінюється в часі, тобто $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$ та $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$, то рівняння неперервності в одномірному випадку приймає вид:

$$-\frac{1}{e} \frac{\partial J_n}{\partial x} = G - \frac{n-n_0}{\tau_n} \quad (4.11)$$

$$\frac{1}{e} \frac{\partial J_p}{\partial x} = G - \frac{p-p_0}{\tau_p} \quad (4.12)$$

Рівняння (4.11) та (4.12) являють собою умови збереження кількості носіїв заряду. Таким чином, в стаціонарному стані потоки носіїв заряду, що витікають з об'єма дорівнюють кількості носіїв, створених зовнішнім збудженням, за винятком носіїв заряду, що прорекомбінували в цьому об'ємі.

4.2 Дифузійний та дрейфовий струми

Розглянемо тепер неоднорідний напівпровідник, в якому концентрація електронів $n(r)$ та дірок $p(r)$ змінюються від точки до точки. З цієї причини в неоднорідному напівпровіднику повинен виникнути дифузійний ток електронів та дірок, який буде визначатися дифузійною швидкістю носіїв заряду з областей, де їх концентрація більше в області з меншою концентрацією.

Припустимо, що в провіднику концентрація носіїв заряду зростає в напрямку осі x , як це показано на рис. 4.2. Проведемо через точку x площину, перпендикулярну осі x , і розглянемо рух носіїв заряду в шарах 1 і 2 товщиною dx , розташованих праворуч і ліворуч від цієї площини. В результаті хаотичного руху носіїв заряду підуть з шару 1, але оскільки кожен електрон може з рівною імовірністю рухатися вправо і вліво, половина їх піде з шару 1 в шар 2. Однак за цей час в шар 1 придуть носіїв заряду з шару 2. Так як їх кількість в шарі 2 більше, ніж в 1, то зворотний потік електронів буде більше

за прямий. Якщо $n(x - \frac{dx}{2})$ – середня концентрація електронів у шарі 1, а $n(x + \frac{dx}{2})$ – у шарі 2, то різниця концентрацій електронів в цих шарах буде дорівнювати:

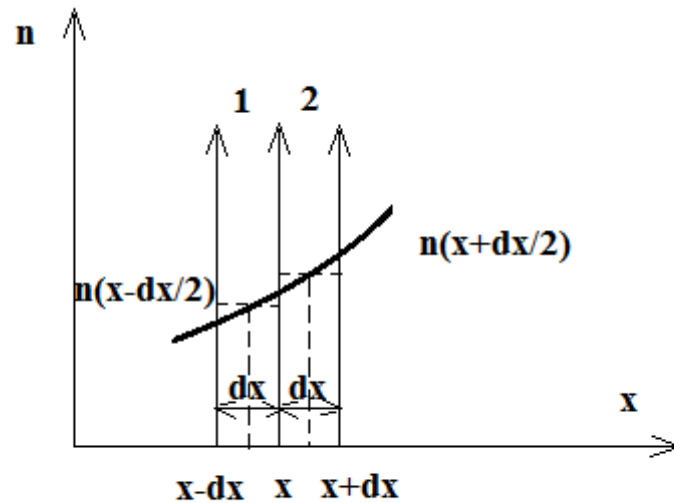


Рисунок 4.2 – До розрахунку градієнта концентрації носіїв

$$n(x - \frac{dx}{2}) - n(x + \frac{dx}{2}) = -\frac{dn}{dx} dx. \quad (4.13)$$

Згідно (4.13) різниця концентрацій електронів пропорційна градієнту їх концентрації, тому і потік електронів I_n , що виникає в результаті їх дифузії в напрямку x , буде пропорційний градієнту концентрації електронів в цьому напрямку. Його можна записати

$$I_n = -D_n \frac{dn}{dx}, \quad (4.14)$$

де D_n – коефіцієнт дифузії електронів.

Аналогічно дифузійний потік дірок

$$I_p = -D_p \frac{dp}{dx}, \quad (4.15)$$

де D_p – коефіцієнт дифузії дірок.

Потоки електронів і дірок, як випливає з рівнянь (4.14) і (4.15), течуть у бік менших концентрацій носіїв заряду. Дифузійним потокам носіїв заряду відповідають дифузійні струми електронів $J_{n \text{ диф}}$ та дірок $J_{p \text{ диф}}$:

$$J_{n \text{ диф}} = eD_n \frac{dn}{dx}; \quad (4.16)$$

$$J_{p \text{ диф}} = -eD_p \frac{dp}{dx}. \quad (4.17)$$

У тому випадку, якщо n і p є функціями координат (x, y, z) , дифузійний струм у векторній формі має вигляд для електронів

$$J_{n \text{ диф}} = eD_n \text{grad } n(r) \quad (4.18)$$

та для дірок

$$J_{p \text{ диф}} = -eD_p \text{grad } p(r) \quad (4.19)$$

Дифузійний струм, що виник із-за наявності градієнта концентрацій носіїв заряду, приведе до просторового розділення зарядів, що викличе появу статичного електричного поля, яке створить дрейфові струми електронів і дірок. При термодинамічній рівновазі в кожній точці напівпровідника дрейфовий струм урівноважуватиме дифузійний струм, тому сумарний струм дорівнюватиме нулю.

Припустимо, що неоднорідний провідник знаходиться в зовнішньому постійному електричному полі напруженістю \mathcal{E} . Під дією цього поля електрони і дірки придбають спрямований рух, в результаті чого з'являться електронні та діркові струми провідності. Якщо зовнішнє електричне поле

слабке і не змінює характеру руху носіїв заряду, то дрейфові складові щільності струму запишуться на підставі закону Ома у вигляді

$$J_{n \text{ др}} = en\mu_n \mathcal{E}; \quad (4.20)$$

$$J_{p \text{ др}} = er\mu_p \mathcal{E}.$$

Повний струм складатиметься з дифузійного і дрейфового струмів. Для електронів і дірок він буде дорівнювати:

$$J_n = J_{n \text{ др}} + J_{n \text{ диф}} = en\mu_n \mathcal{E} + eD_n \frac{dn}{dx}; \quad (4.21)$$

$$J_p = J_{p \text{ др}} + J_{p \text{ диф}} = er\mu_p \mathcal{E} - eD_p \frac{dp}{dx}. \quad (4.22)$$

Таким чином, щільність загального струму J у будь-якій точці не однорідного напівпровідника у будь-який момент часу визначатиметься рівнянням

$$J = J_n + J_p = e(n\mu_n + p\mu_p) \mathcal{E} + e(D_n \frac{dn}{dx} - eD_p \frac{dp}{dx}). \quad (4.23)$$

Необхідно зауважити, що дифузійний струм існує тільки в напівпровідниках. Це відбувається тому, що в напівпровідниках концентрація електронів та дірок можуть змінюватись в широких межах при постійній сумарній концентрації заряду. В металах концентрація електронів практично постійна.

4.3 Співвідношення Ейнштейна

В неоднорідному напівпровіднику при термодинамічній рівновазі струм дорівнює нулю. Тобто $J = J_n + J_p = 0$. В цьому випадку струми провідності урівноважують дифузійні струми і на основі (4.23) можна записати:

$$n\mu_n \mathcal{E} = -D_n \frac{dn}{dx}. \quad (4.24)$$

Оскільки в напівпровіднику є статичне електричне поле $\mathcal{E}_{ст}$, то електрони, які знаходяться в цьому полі, будуть мати потенційну енергію $U = -e\phi$. Тому при відсутності виродження концентрація електронів в зоні провідності буде задовольняти співвідношенню Больцмана виду:

$$n = N_c e^{-(E_c + U - F)/kT} = n_0 e^{e\phi/kT} \quad (4.25)$$

Де $n_0 = N_c e^{-(E_c - F)/kT}$ - рівноважна концентрація електронів;

ϕ – електростатичний потенціал.

Враховуючи, що $\mathcal{E}_{ст} = -\frac{d\phi}{dx}$ та підставляючи значення n і $\frac{dn}{dx}$ в рівняння (4.24), отримаємо:

$$-\mu_n n_0 e^{e\phi/kT} \frac{d\phi}{dx} = -D_n \frac{en_0}{kT} e^{e\phi/kT} \frac{d\phi}{dx} \quad (4.26)$$

Звідки для електронів будемо мати:

$$\frac{\mu_n}{D_n} = \frac{e}{kT} \quad (4.27)$$

Аналогічно для дірок :

$$\frac{\mu_p}{D_p} = \frac{e}{kT} \quad (4.28)$$

Рівняння, що зв'язує коефіцієнт дифузії носіїв заряду з їх дрейфовою рухливістю в умовах термодинамічної рівноваги має назву співвідношення Ейнштейна.

4.4 Дифузія та дрейф нерівноважних носіїв заряду в монополярному напівпровіднику

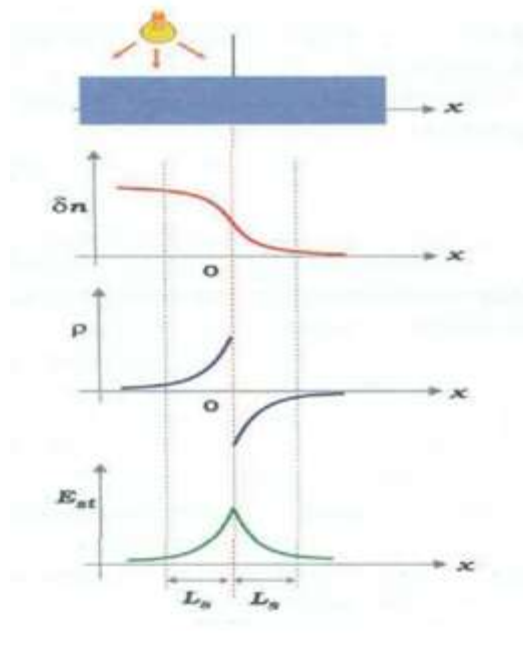


Рисунок 4.3 – Розподіл надлишкових носіїв заряду

Розглянемо дифузію та дрейф нерівноважних носіїв заряду в монополярному напівпровіднику, коли вільні носії заряду виникають тільки завдяки іонізації домішок. Для визначеності візьмемо довгий однорідний зразок напівпровідника *n*-типу, частина якого ($x < 0$) освітлена (рис. 7.2) У цій частині напівпровідника внаслідок іонізації донорів і переходу електронів із донорних рівнів до зони провідності відбувається генерація електронів. Концентрація нерівноважних електронів n визначається концентрацією рівноважних електронів n_0 і надлишкових електронів δn , які емітували до зони провідності з донорних рівнів. За відсутності в напівпровіднику центрів захоплення рівняння електронейтральності матиме вигляд

$$\delta n = \Delta N_d^+ \quad (4.29)$$

Концентрація електронів в освітленій частині зразка перевищує їх концентрацію у неосвітленій. У результаті нерівноважні електрони дифундують з освітленої частини напівпровідника до неосвітленої, відбувається локальне порушення електронейтральності та виникає об'ємний заряд, що спричиняє виникнення електричного поля. Оскільки в освітленій частині зразка

концентрація електронів зменшується, а в неосвітленій - збільшується, то освітлена частина буде заряджена позитивно, а неосвітлена - негативно. Ці заряди індукують електричне поле E_{st} , напрямом дії якого заважатиме дифузії нерівноважних електронів. У результаті встановиться стаціонарний стан, за якого сумарний струм електронів - його дрейфова (під дією електричного поля E_{st}) та дифузійна складові - дорівнюватимуть нулю. Таким чином, виникнення дифузійного струму $J_{diff} = eD_n U_x n$ викликає появу електростатичного поля, яке, у свою чергу, спричиняє появу дрейфового струму $J_{dr} = en\mu_n E_{st}$. Обидва процеси приводять до встановлення стаціонарного стану, який характеризується відсутністю електричного струму. Таким чином можна стверджувати, що повний струм $J_{tot} = J_{diff} + J_{dr}$ має дорівнювати нулю. Звідси маємо рівняння

$$eD_n \frac{dn}{dx} = -en\mu_n E_{st} \quad (4.30)$$

Використовуючи співвідношення Ейнштейна, отримуємо

$$E_{st} = -\frac{kT}{en} \frac{dn}{dx} \quad (4.31)$$

Таким чином, на межі тінь-світло виникає електрорушійна сила Дембера.

Зважаючи на те, що $n = n_0 + \delta n$, і у випадку малих рівнів оптичного збудження, коли $n_0 \gg \delta n$, маємо

$$E_{st} = -\frac{kT}{en_0} \frac{d\delta n}{dx} \quad (4.32)$$

Після диференціювання (4.32) за координатою, знайдемо

$$\frac{d^2 \delta n}{dx^2} - \frac{4\pi e^2 n_0}{\epsilon kT} \delta n = 0$$

Введемо параметр розмірності довжини

$$L_s = \sqrt{\epsilon k T / 4 \pi e^2 n_0} \quad (4.33)$$

Тоді (4.32) переписеться у вигляді диференційного рівняння

$$\frac{d^2 \delta n}{dx^2} - \frac{1}{L_s} \delta n = 0 \quad (4.34)$$

яке має загальний розв'язок

$$\delta n = C_1 e^{x/L_s} + C_2 e^{-x/L_s} \quad (4.35)$$

Для неосвітленої області зразка, де при $x \rightarrow +\infty$, $\delta n = 0$ розв'язком буде

$$\delta n = \delta n(0) e^{-x/L_s} \quad (4.36)$$

Це означає, що для напівпровідника з монополярним типом провідності концентрація надлишкових носіїв заряду в неосвітленій частині зразка зменшується експоненційно зі сталою спадання L_s при заглибленні до неосвітленої частини. Величина L_s називається довжиною екранування (або дебаєвським радіусом екранування) і, як видно із (4.33), визначається концентрацією основних носіїв. Довжина екранування може варіюватись у широкому інтервалі значень залежно від питомої провідності матеріалу та складати величину $\sim 10^{-4}$ - 10^{-6} см

4.5 Час релаксації Максвелла

Вище було введено параметр L_s , що має сенс характерної довжини, на якій надлишкова концентрація носіїв заряду зменшується при заглибленні до неосвітленої частини зразка. Використовуючи співвідношення Ейнштейна, перепишемо цей вираз у вигляді

$$L_s = \sqrt{\frac{\epsilon k T}{4 \pi e^2 n_0}} = \sqrt{\frac{D_n \epsilon}{\mu_n 4 \pi e n_0}} = \sqrt{D_n \tau_M} \quad (4.37)$$

де $\tau_M = \epsilon/4\pi\sigma_0$ - максвеллівський час релаксації. Згадаємо, що при розгляді релаксації надлишкової концентрації нерівноважних носіїв після вимкнення оптичного збудження ми з'ясували: вона відбувається із характерним часом τ_f і після вимкнення збуджуючого світла зменшується в часі за законом

$$\delta n = \delta n(0)e^{-t/\tau_M} \quad (4.37)$$

Отже:

Розповсюдження носіїв заряду в монополярному напівпровіднику на відстань довжини екранування відбувається протягом максвеллівського часу релаксації, що відіграє роль ефективного часу встановлення дифузійно-дрейфової рівноваги.

Можна також розглянути прямокутний зразок із матеріалу, що характеризується питомою провідністю σ_0 , електричний опір якого можна записати у вигляді

$$R = \frac{1}{\sigma_0} \frac{l}{S} \quad (4.37)$$

де l - довжина зразка, S - його поперечний переріз. Ємність такого зразка можна записати як $C = \epsilon S/4\pi l$. Тоді резонансною частотою коливань електромагнітного поля у зразку (частота власної моди коливань електромагнітного поля) буде $\Omega_{\Gamma} = 1/RC = 4\pi\sigma_0/\epsilon = 1/\tau_M$, тобто τ_M є сталою часу даного матеріалу. А оскільки коливання електромагнітного поля в розглянутій моделі викликано наявністю носіїв заряду, то характерні періоди коливань поля є ні чим іншим, як часом встановлення дифузійно-дрейфової рівноваги в матеріалі. Характерні значення максвеллівського часу релаксації - від 10^{-7} до 10^{-12} сек.

Література

1. І.О. Вакарчук. Квантова механіка.-Львів.; Вид. ЛНУ, 2007.-847с.
2. Шимони К. Физическая электроника. Пер. с нем. М.; Энергия. 1977-608с.
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики - М.; Наука, 1983. - 664 с..
4. Ферми Э. Квантовая механика: конспект лекций.-М.; Наука, 1968.-367с.
6. Бонч-Бруевич В.Л..Калашников С.Г. Физика полупроводников.-М: Наука.1977.-672с.
7. Фистуль В.И. Введение в физику полупроводников.-М: Высшая школа.-1984-352с.
8. Смит Р. Полупроводники –М.Мир.-1982-558с.:
9. Волькенштейн Ф.Ф. Электроны и кристаллы.М.Наука.1983-126с.
10. Електротехніка, основи електроніки та мікропроцесорної техніки. Навч. посібник / Шкрабець Ф. П., Циценков Д. В., Куваєв Ю. В., Іванов О. Б.; НДУ. - Дн-вськ.;, 2004. - 514 с.
11. Дудюк Д. Л. та ін. Електричні вимірювання: Навч. посібник / Укр. держ. лісотехн. ун-т. - 2-ге вид., випр. - Львів: Афіша, 2003. - 265 с.
12. Бушманов Б.Н., Хромов Ю.А. Физика твердого тела. – М; «Высшая школа» 1971.-224с.
13. Балеста І.М. Фізика твердого тіла.- Львів; Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2003.-480 с.
14. Ч.Уерт, Р. Томсон. Физика твёрдого тела. – М; «Мир», 1969. – 560с.
15. Шаскольская М.П. Кристаллография. – М; « Высшая школа », 1984. – 376с.

16. Введение в физику твёрдого тела. Ч. Киттель. Перевод с 4-го амер. изд. А.А.Гусева. – М; «Наука», 1978. – 792с.

17. Третяк О.В., Лозовський В.З. Основи фізики напівпровідників: підручник: У 2 т. – К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2009.

18. Оселдчик Ю.С., Король А.С., Швець Є.Я. та ін. «Інтерактивний модульний курс загальної фізики». Навч. посіб. - Запоріжжя; Видавництво ЗДІА, 2002, - 440

с