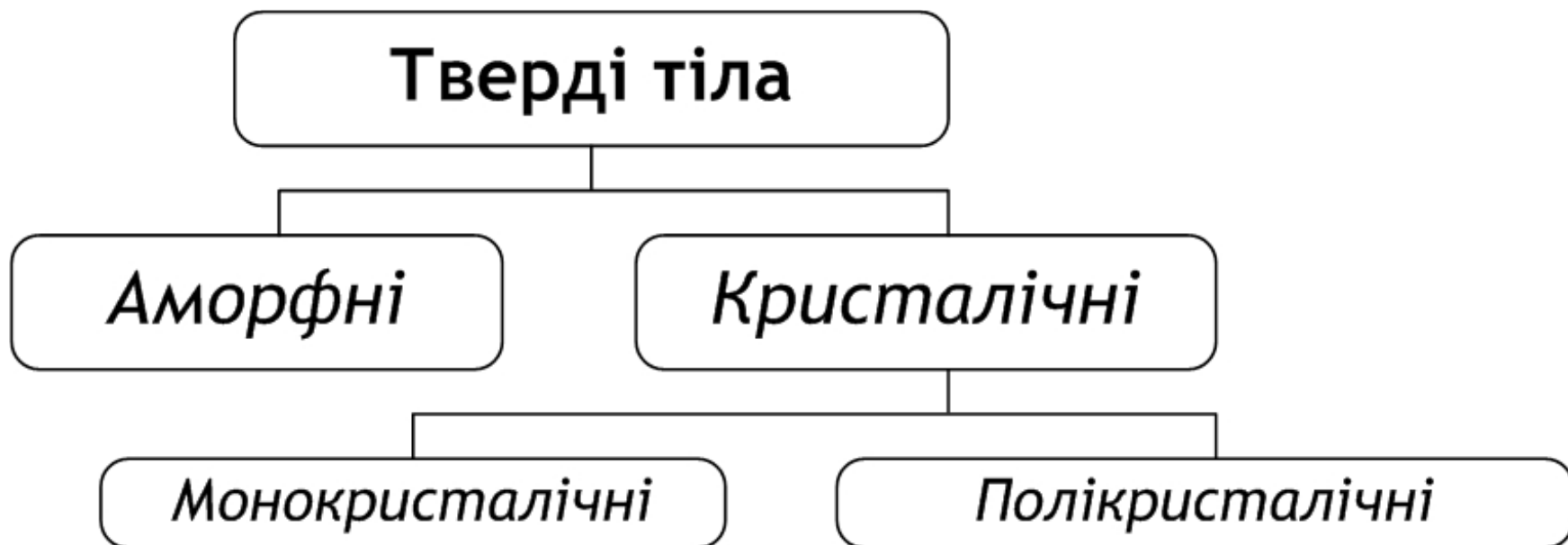


Основи зонної теорії твердого тіла

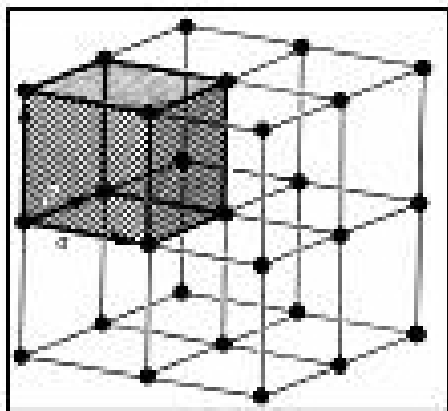
Класифікація твердих тіл



Кристалічна будова твердих тіл

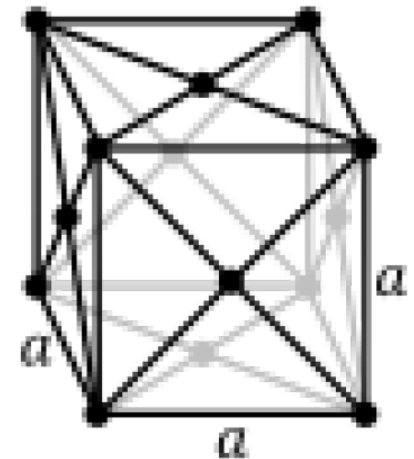
Тверді тіла – це фізичні тіла, що зберігають форму та об'єм. Тверді тіла поділяються на аморфні та кристалічні. В аморфних тілах якийсь помітний порядок в розміщенні атомів / молекул відсутній, а у кристалічних – наявний. В свою чергу кристалічні поділяються на монокристалічні та полікристалічні. Основна відмінність між ними полягає у тому, що в монокристалічних тілах зберігається строгий дальній порядок (тобто на відстані сотень і тисяч міжатомних відстаней структура розміщення атомів у кристалічній ґратці буде точно такою ж самою), а в полікристалічних – не зберігається (тобто кристалічна ґратка може бути трохи повернута або деформована).

Кристалічні ґратки

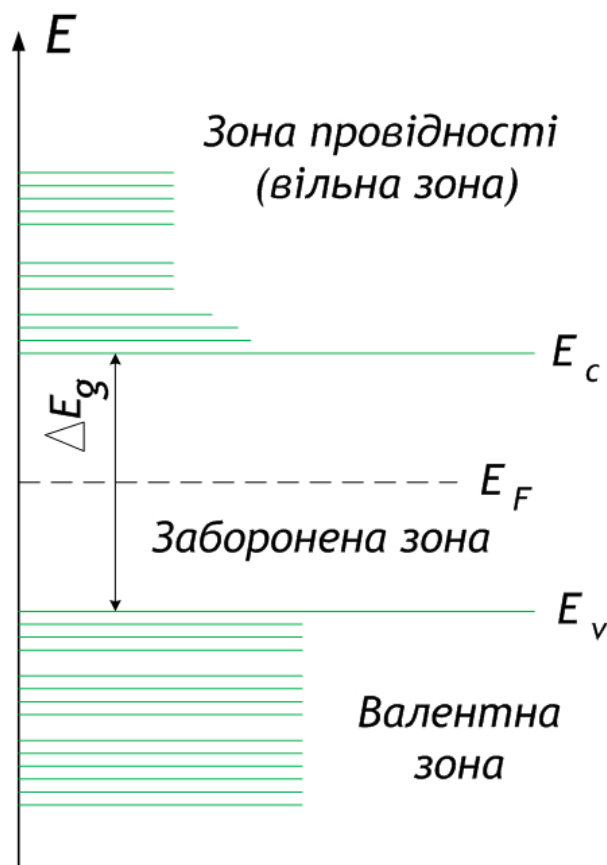


Кристалічна ґратка - геометрично правильне розміщення атомів (йонів, молекул), властиве речовині, що перебуває в кристалічному стані. Просторові фігури (наприклад, паралелепіпеди) у вершинах яких розміщено атоми, називаються комірками кристалічної ґратки. Для кристалічних тіл характерна регулярна нескінченна система геометричних точок (вузлів ґрати), що є ідеально періодичною в трьох вимірах простору. Існує 14 типів кристалічних ґраток, на яких ми детально зупинятися не будемо, оскільки основний напівпровідник - кремній (або силіцій) у кристалічному стані утворює лише кубічну гранецентровану ґратку.

Кремній, силіцій
(хімічний знак – Si, лат. silicium) –
хімічний елемент з атомним номером 14, що
належить до 4-ї групи, 3-го періоду
періодичної системи хімічних елементів.
Проста речовина – кремній,
утворює темно-сірі зі смолистим блиском
кристали з гранецентрованою
кубічною ґраткою типу алмазу.



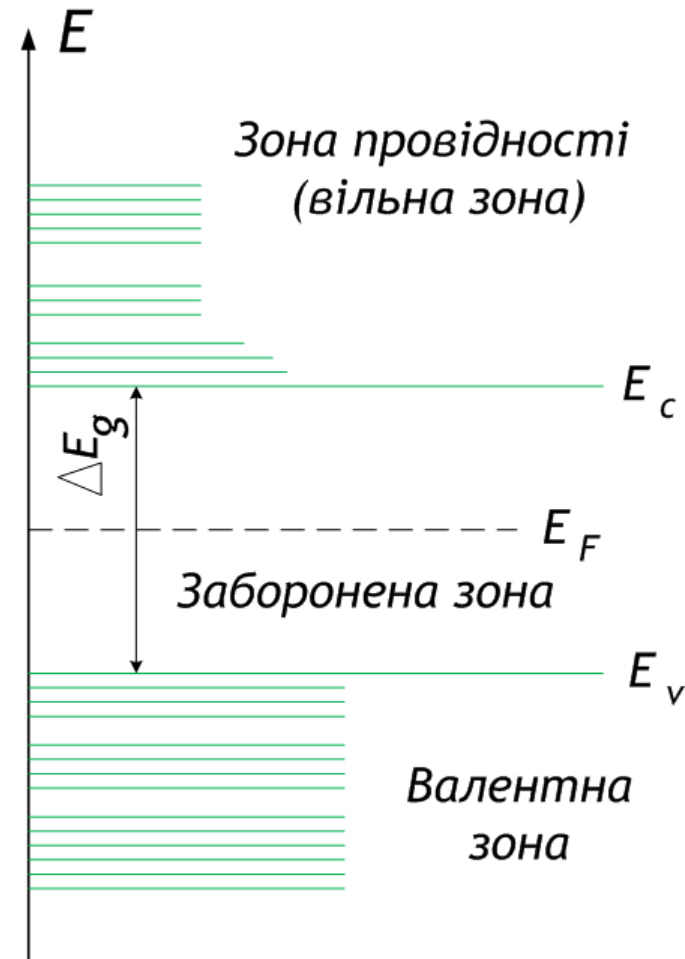
Розподіл електронів по енергіям у твердому тілі

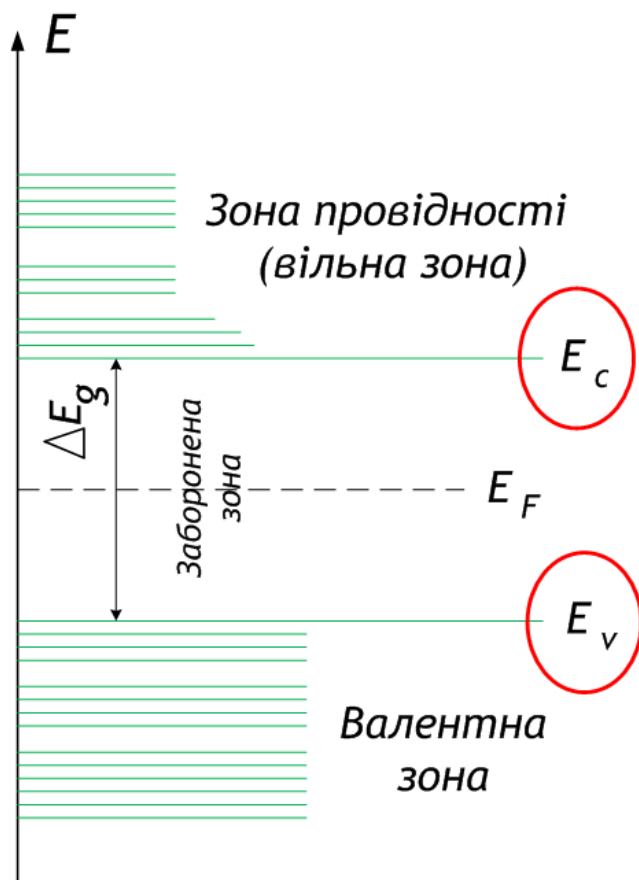


У речовині в околі атома електрони можуть знаходитися лише на певних енергетичних рівнях (які можна уявляти собі як відстані від електрона до ядра - чим далі від ядра, тим вищий енергетичний рівень). Доки електрон знаходиться на одному енергетичному рівні, він не випромінює енергію і не втрачає її. При переході електрона з вищого енергетичного рівня на нижчий енергія випромінюється, а для переходу з нижчого енергетичного рівня на вищий електрон повинен десь взяти енергію.

Розподіл електронів по енергіям у твердому тілі

Таким чином, практично всі електрони за своїми енергіями вкладаються у так звану валентну зону — це така область енергій, електрони у якій жорстко пов'язані із ядром атома і самостійно мігрувати по всьому об'єму речовини не можуть. Натомість деяка невелика кількість, електронів може мати значно більшу енергію, і вони утворюють так звану вільну зону (або зону провідності) — це ті електрони, які жорстко не пов'язані із ядрами атомів і можуть вільно мігрувати в межах об'єму твердого тіла.



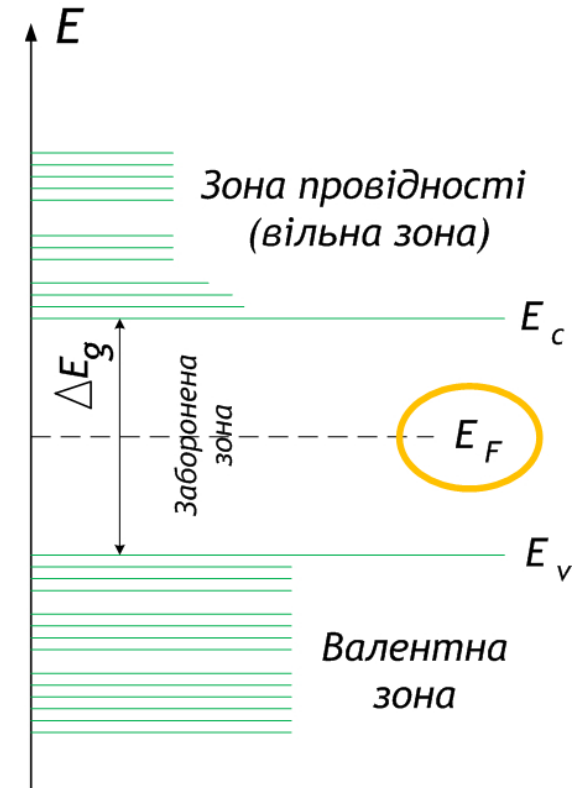


Саме електрони із зони провідності відповідають за протікання електричного струму. Максимальна енергія валентної зони позначається E_V , а мінімальна енергія зони провідності - E_C . Таким чином, ширина забороненої зони становить

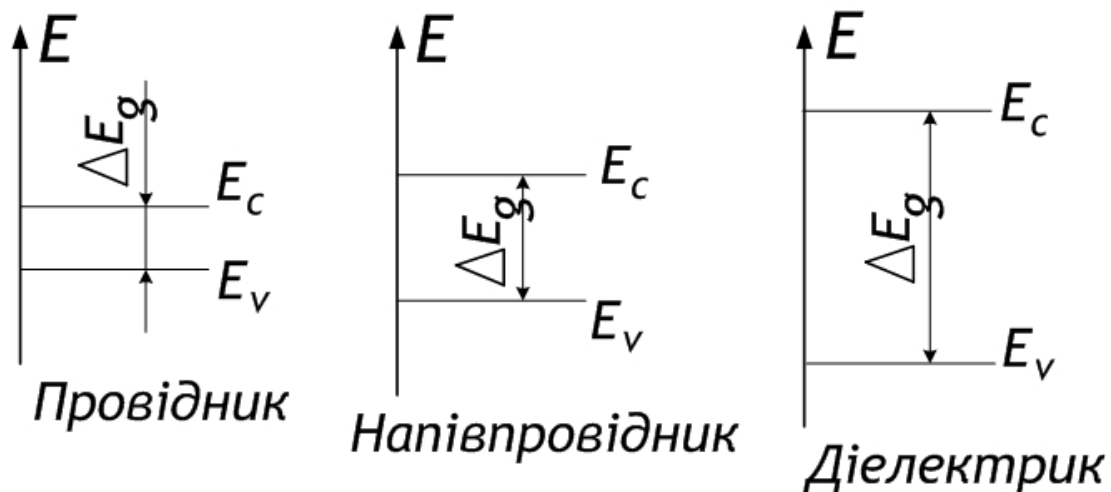
$$\Delta E_g = E_C - E_V.$$

Заборонена зона - це така область енергій електронів, яка для даної речовини не характерна, і електронів з такими енергіями у цій речовині немає.

Практично посередині забороненої зони знаходиться рівень Фермі E_F - середня енергія електронів в речовині. Рівень (або енергія) Фермі, як і ширина забороненої зони є однією із констант речовини. Ці значення наводяться у спеціальних довідниках. Показаний рисунок називається зонною діаграмою власного напівпровідника, тобто хімічно чистого напівпровідника без сторонніх домішок.

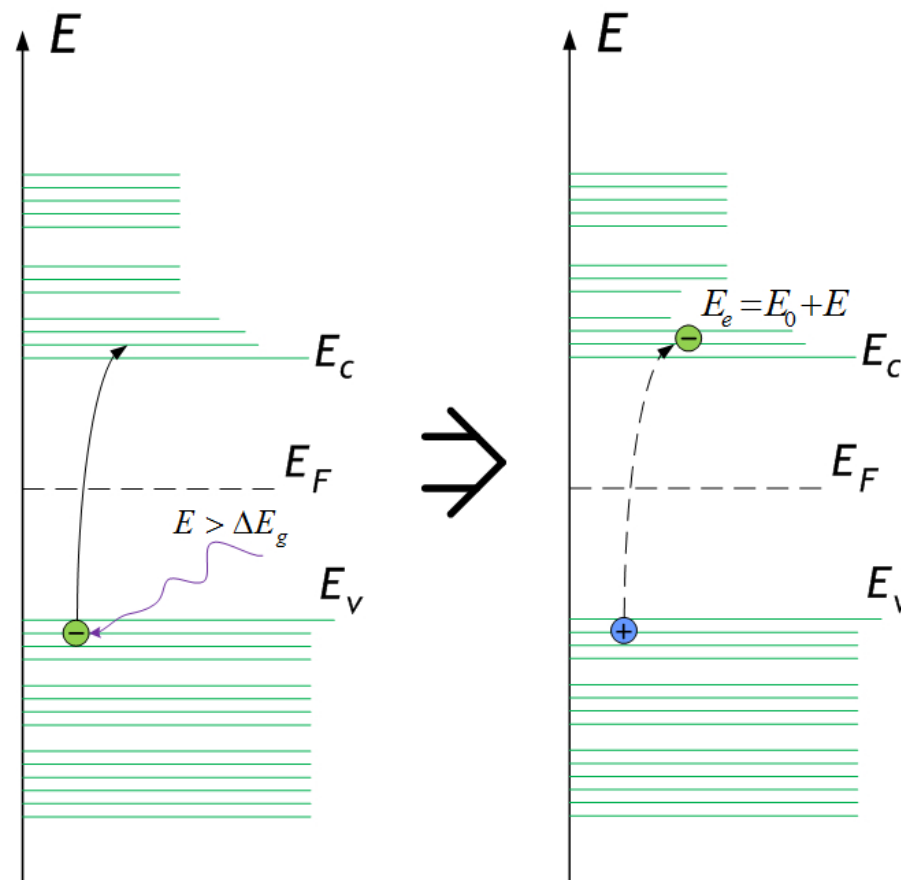


Провідники, напівпровідники та діелектрики



З точки зору зонної теорії речовини поділяються на провідники, напівпровідники та діелектрики по принципу ширини забороненої зони: якщо $\Delta E_g \approx kT$ - то це провідник, якщо $\Delta E_g > kT$ - то це напівпровідник, а якщо $\Delta E_g \gg kT$ - то це діелектрик (тут k - стала Больцмана, T - абсолютна температура).

Якщо електрон звідкись отримує енергію $E > \Delta E_g$, (а він може отримати її за рахунок нагрівання, освітлення або електричного поля), то він переходить з нижчого енергетичного рівня на вищий. При цьому на місці електрона залишається так звана "дірка" - місце де може бути електрон, але його там немає.



Власним називається хімічно чистий напівпровідник без сторонніх домішок. У такого напівпровідника концентрація електронів у зоні провідності точно дорівнює концентрації дірок у валентній зоні. Оскільки атом з "діркою" перетворюється на позитивний іон, то вважається, що дірка має заряд $+e$. Ця концентрація дорівнює:

$$n = \int_{E_C}^{E_{top}} N(E)F(E)d E,$$

де E_C та E_{top} – відповідно нижня та верхня енергія зони провідності; $N(E)$ – щільність енергетичних рівнів у зоні провідності; $F(E)$ – розподіл Фермі - Дірака.

Власні напівпровідники

Спрощена зонна діаграма

Строго кажучи, ширина забороненої зони не є сталою, а вона залежить від температури:

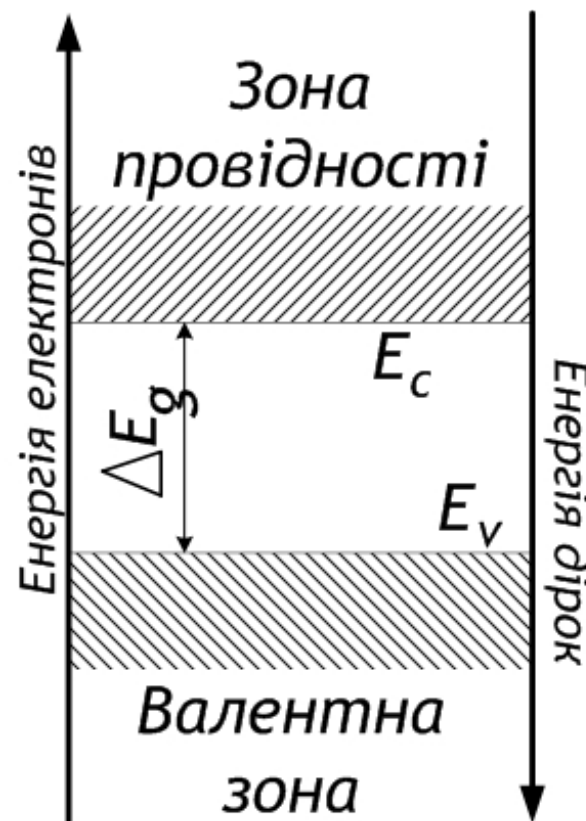
$$\Delta E_g = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

де $E_g(0)$ - ширина забороненої зони при нульовій температурі, α і β - спеціальні константи, що залежать від речовини.

Також, строго кажучи, лінії

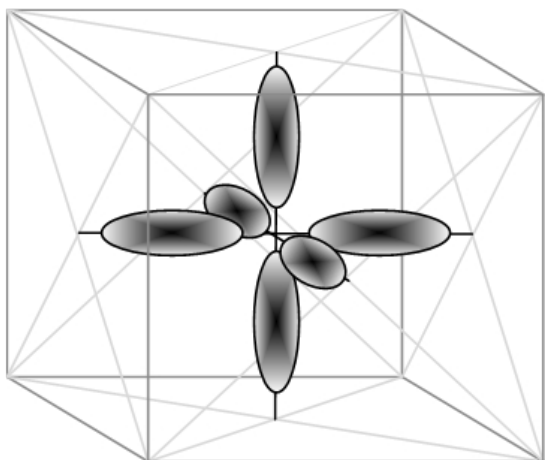
E_C та E_V не є прямими, вони є плавними кривими, що залежать від геометрії кристалічної ґратки.

При кімнатній температурі та атмосферному тиску ширина забороненої зони кремнію становить 1,12 еВ.



Власні напівпровідники

Щільність енергетичних рівнів в зоні провідності



При невеликій концентрації вільних електронів та приблизно за кімнатної температури щільність енергетичних рівнів біля низу зони провідності приблизно дорівнює:

$$N(E) = M_c \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(E - E_c)^{1/2}}{\hbar^3} (m_{de})^{3/2}$$

де M_c — число еквівалентних мінімумів в зоні провідності (залежить від геометрії кристалічної ґратки), \hbar — приведена стала Планка, m_{de} — електронна ефективна маса щільності станів:

$$m_{de} = (m_1^* m_2^* m_3^*)^{1/3},$$

де m_1^* , m_2^* , m_3^* — ефективні маси по головним вісям еліпсоїдів сталої енергії.

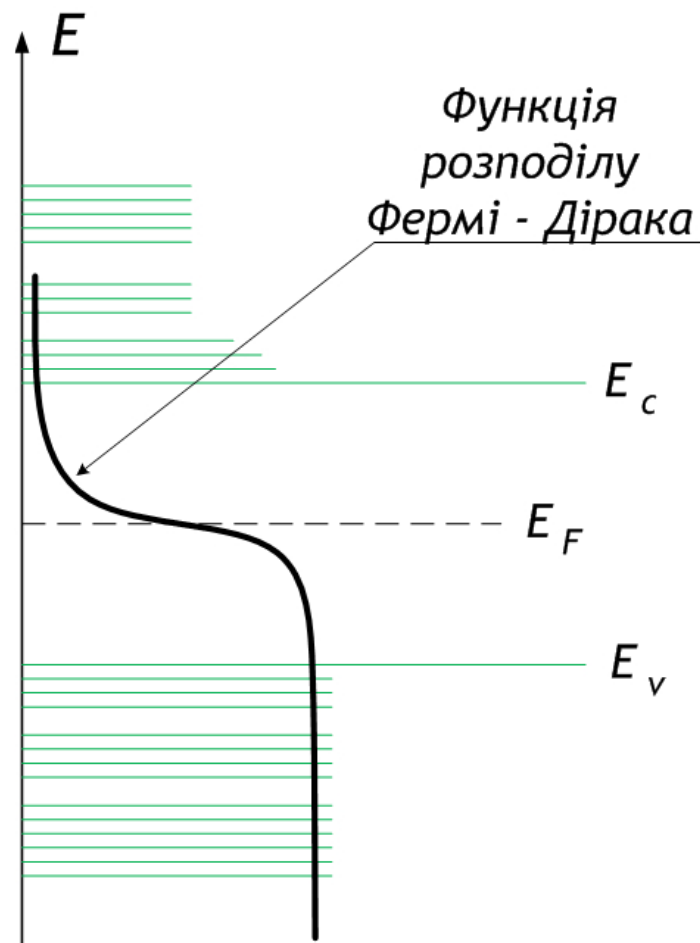
Власні напівпровідники

Розподіл Фермі – Дірака

Функція $F(E)$ із формули на слайді 12 називається функцією розподілу Фермі – Дірака, і вона описує розподіл електронів по енергіям в твердому тілі. Аналітично вона задається виразом:

$$F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)},$$

де k – стала Больцмана,
 T – абсолютна температура, E_F - енергія Фермі, величина якої визначається з умови електронейтральності.



Власні напівпровідники

Концентрація електронів у зоні провідності

Інтеграл із слайду 12 можна замінити наближеним виразом:

$$n = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_c}{kT} \right),$$

де N_c — ефективна щільність станів у зоні провідності:

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_{de} kT}{kT} \right)^{3/2} M_c,$$

а $F_{1/2}$ — інтеграл Фермі — Дірака.

Власні напівпровідники

Концентрація електронів у зоні провідності

Аналітично інтеграл Фермі - Дірака задається виразом

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\eta^{1/2} d\eta}{1 + \exp(\eta - \eta_F)},$$

Де $\eta_F = \frac{E_F - E_c}{kT}$.

У випадку звичайного напівпровідника, коли рівень Фермі лежить на пару kT нижче мінімуму зони провідності, інтеграл Фермі - Дірака наближено дорівнює:

$$F_{1/2}(\cdot) \approx \frac{\sqrt{\pi} \exp\left(-\frac{E_F - E_c}{kT}\right)}{2}.$$

Тоді

$$n \approx N_c \exp\left(-\frac{E_F - E_c}{kT}\right).$$

Власні напівпровідники

Концентрація дірок у валентній зоні

Аналогічним способом знаходиться концентрація дірок у валентній зоні:

$$p = N_V \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1,2} \left(-\frac{E_V - E_F}{kT} \right),$$

де N_V – ефективна щільність станів у валентній зоні:

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_{dh} kT}{h^2} \right)^{3/2},$$

а m_{dh} – ефективна маса щільності станів дірок.

Аналогічно

$$p \approx N_V \exp \left(-\frac{E_F - E_V}{kT} \right).$$

Власні напівпровідники

Положення рівня Фермі

Оскільки за нормальних умов у власного напівпровідника $n = p = n_i$ (остання величина – n_i – називається концентрацією носіїв заряду), то прирівнюючи вирази для n та p та виражаючи із

них E_F , можна отримати:

$$\begin{aligned}
 E_F &= \frac{E_V + E_C}{2} + \frac{kT}{2} \left(\frac{N_V}{N_C} \right) = \\
 &= \frac{E_V + E_C}{2} + \frac{3kT}{4} \ln \left(\frac{m_{dh}}{m_{de} M_C^{2/3}} \right)
 \end{aligned}$$

Оскільки ефективні маси електронів та дірок вельми близькі, то дріб під знаком логарифму близький до одиниці – а це означає, що значення такого логарифму близьке до нуля, і, відповідно, рівень Фермі знаходиться десь поблизу

$$E_F \approx \frac{E_V + E_C}{2},$$

тобто поблизу середини забороненої зони.

Якщо перемножити концентрацію електронів на концентрацію дірок, то можна отримати:

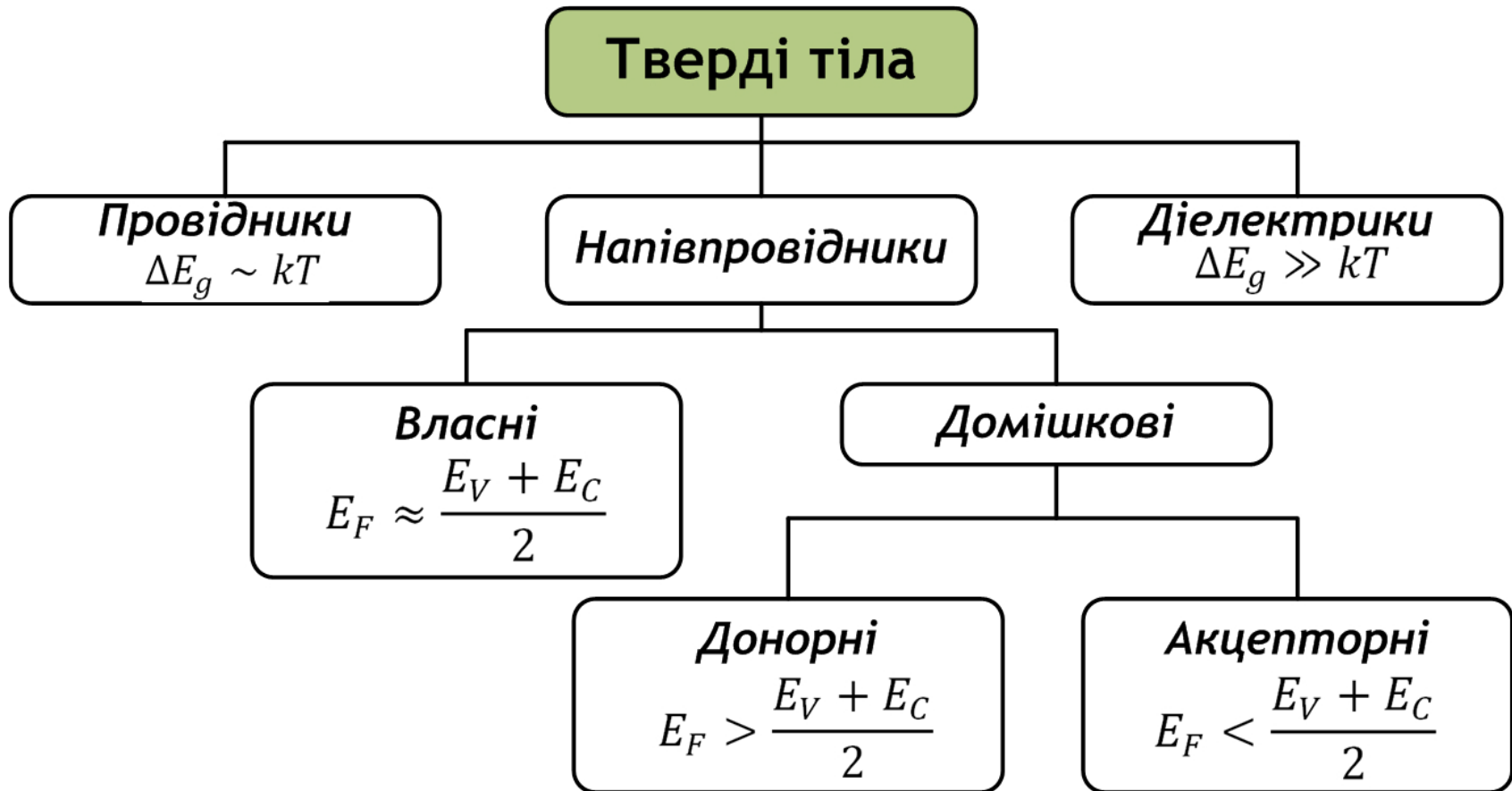
$$np = n_i^2 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right),$$

або

$$\begin{aligned} n_i &= \sqrt{N_c N_v \exp\left(\frac{E_g}{kT}\right)} = \\ &= 4,9 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_{de} m_{dh}}{m_e^2}\right)^{3/4} M_c^{1/2} T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right), \end{aligned}$$

де $E_g = E_c - E_v$ – ширина забороненої зони, m_e – маса вільного електрона.

При кімнатній температурі власна концентрація носіїв заряду невелика, але вона доволі стрімко зростає із підвищенням температури. Наприклад, у кремнії вона подвоюється на кожні 11°C . Таким чином, при достатньо високих температурах спостерігається ефект термогенерації, тобто появи електричної напруги (що знаходить своє застосування у напівпровідникових сенсорах температури та елементах Пельтьє).



Утворення вільних електронів та дірок – генерація носіїв заряду – відбувається під впливом теплового хаотичного руху атомів кристалічної ґратки (так звана теплова генерація), або під впливом поглинутих напівпровідником квантів світла (світлова генерація) та/або інших енергетичних факторів. Оскільки напівпровідник весь час знаходиться під впливом принаймні одного з цих факторів ($T \neq 0$), то генерація носіїв заряду відбувається безперервно.

Одночасно із генерацією відбувається зворотний процес — рекомбінація носіїв заряду, тобто повернення електронів із зони провідності назад у валентну зону, у результаті чого зникає пара електрон—дірка.

У стані термодинамічної рівноваги процеси генерації носіїв заряду та їх рекомбінації взаємно урівноважені. При цьому в напівпровіднику існують рівноважні концентрації електронів n_0 та дірок p_0 .

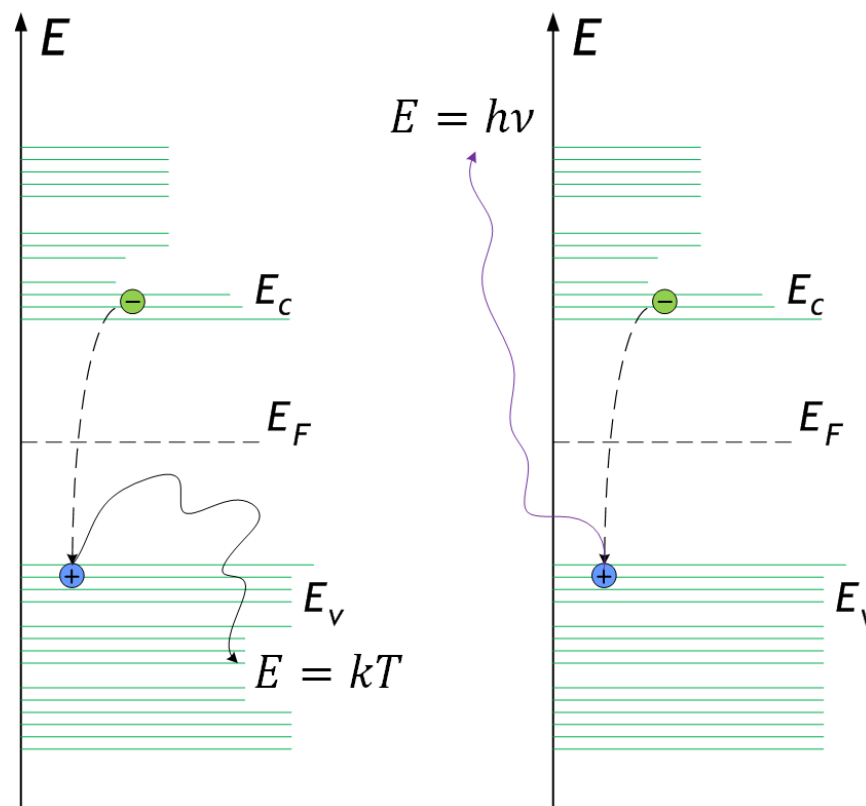
Надлишкова концентрація носіїв заряду

При впливі на напівпровідник нетеплового зовнішнього енергетичного фактора (світла, електричного поля тощо) внаслідок додаткової генерації носіїв заряду їх концентрація n і p буде перевищувати рівноважну концентрацію на деяку величину Δn (або Δp), яку називають надлишковою концентрацією. Таким чином:

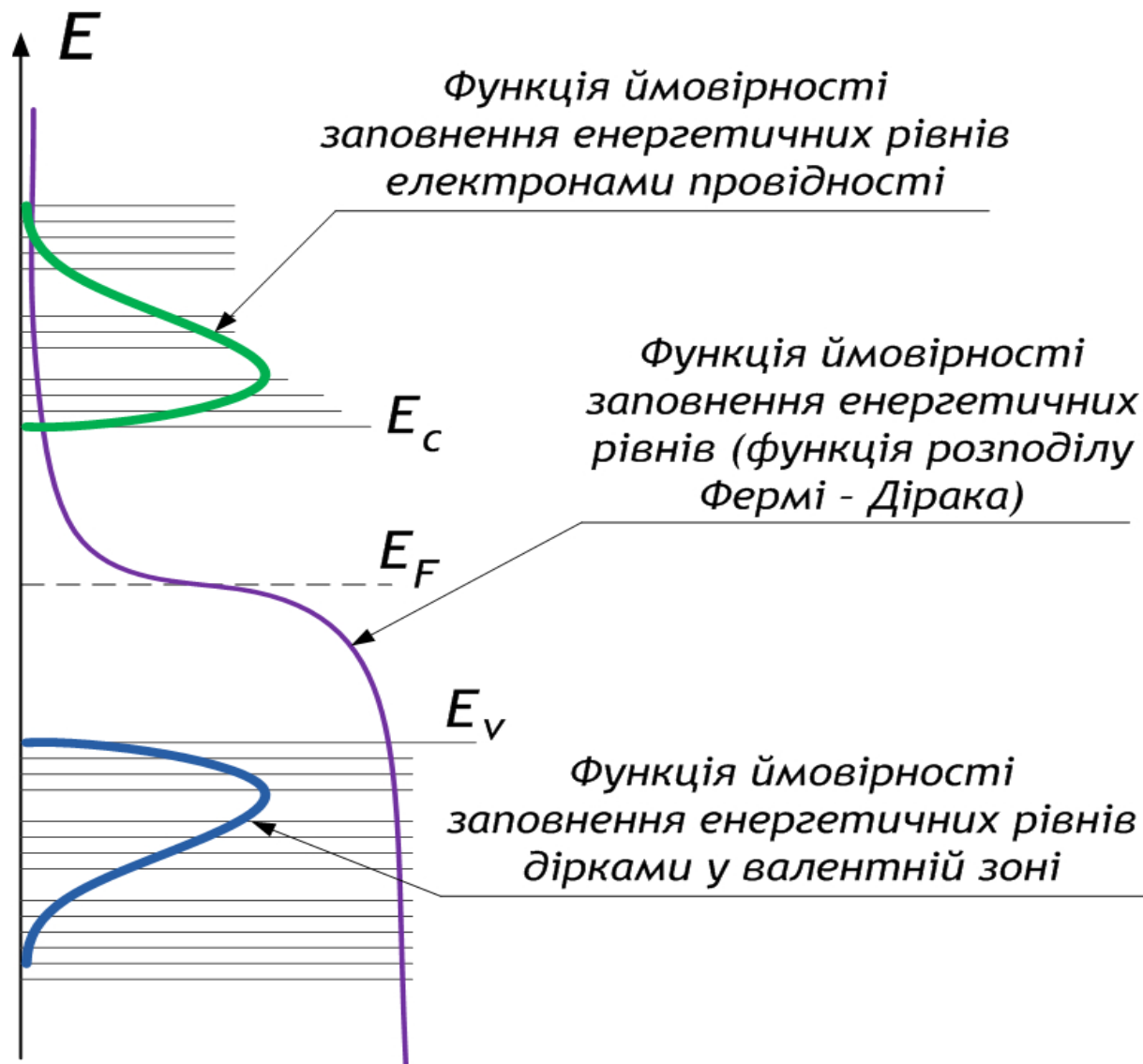
$$\Delta n = n - n_0; \quad \Delta p = p - p_0.$$

Надлишкова концентрація може виникати не лише у всьому об'ємі напівпровідника, але і локально, у малих областях за рахунок різних процесів (їжекції, екстракції, акумуляції).

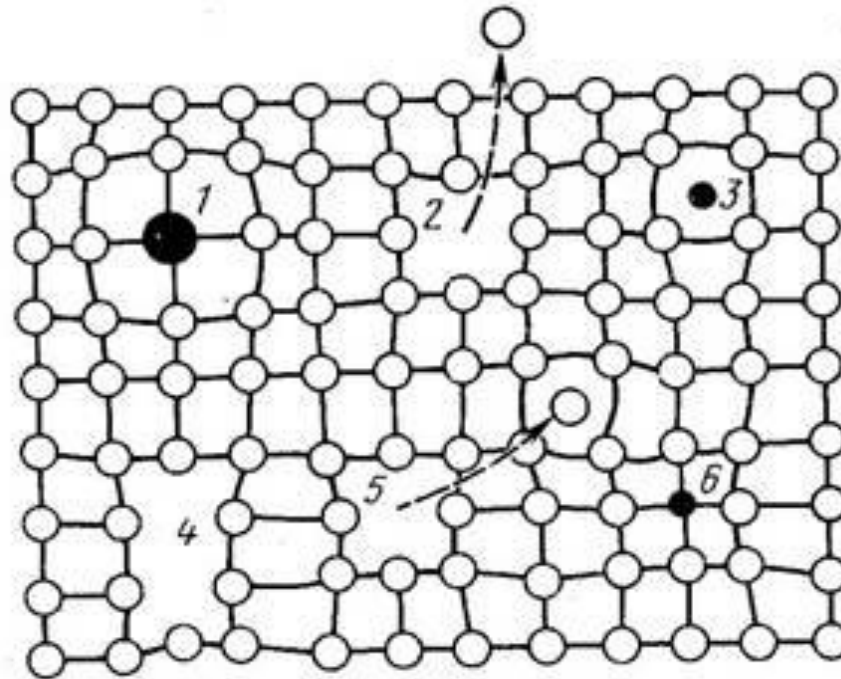
Види рекомбінації



Випромінювальна рекомбінація супроводжується випромінюванням Фотонів (квантів світлової енергії), а безвипромінювальна — Фотонів (“уявних” квантів теплової енергії).

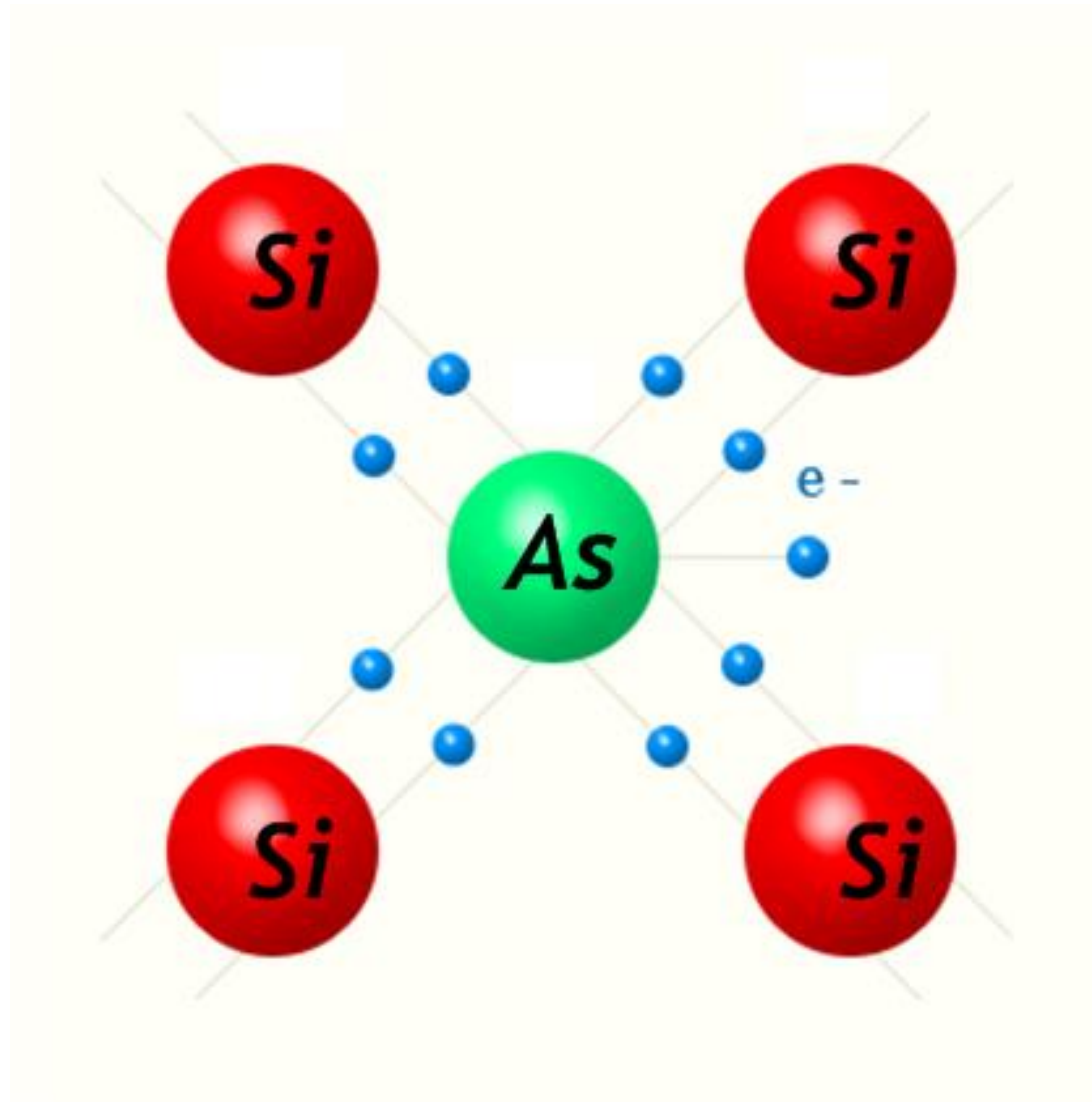


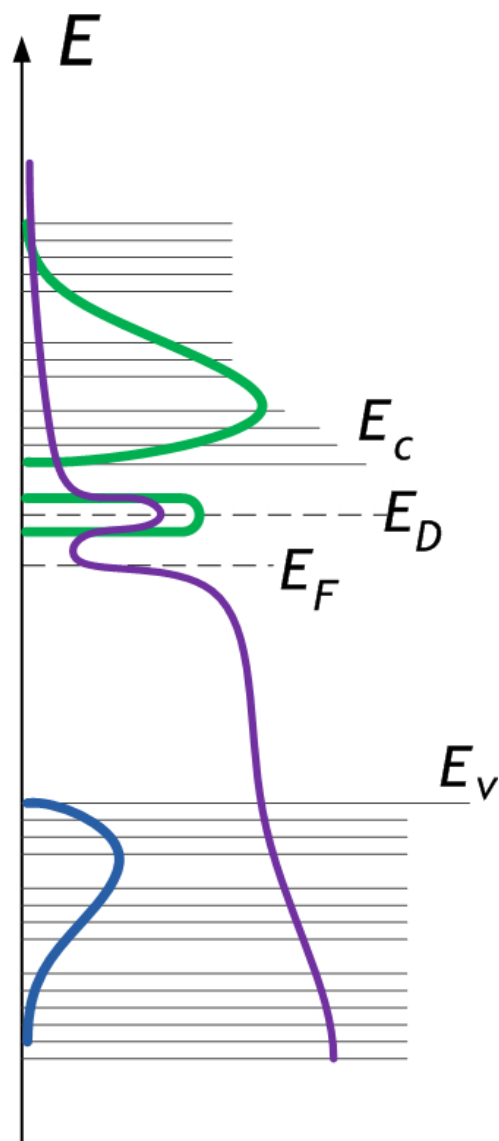
Домішки – спотворення кристалічної ґратки



1 – домішковий атом заміщення; 2 – дефект Шотткі; 3 – домішковий атом впровадження; 4 – дивакансія; 5 – дефект Френкеля (вакансія та міжвузловий атом); 6 – домішковий атом заміщення

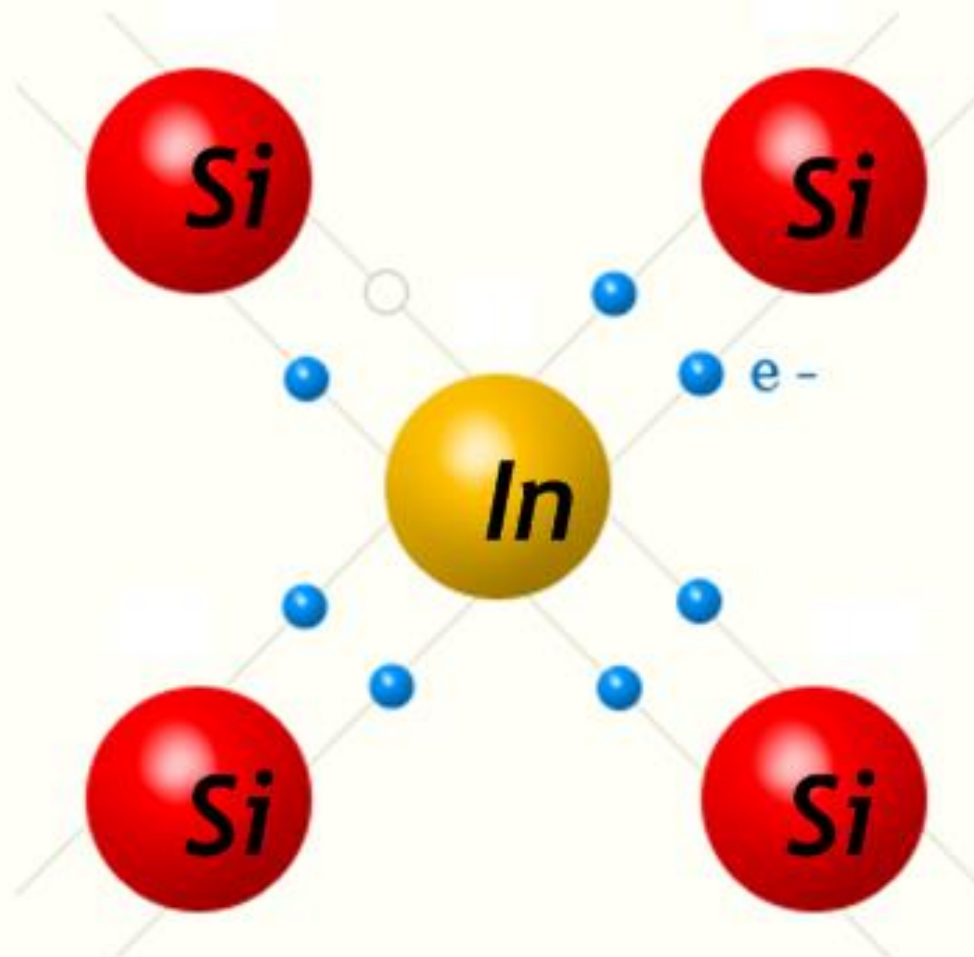
Домішка донорного типу



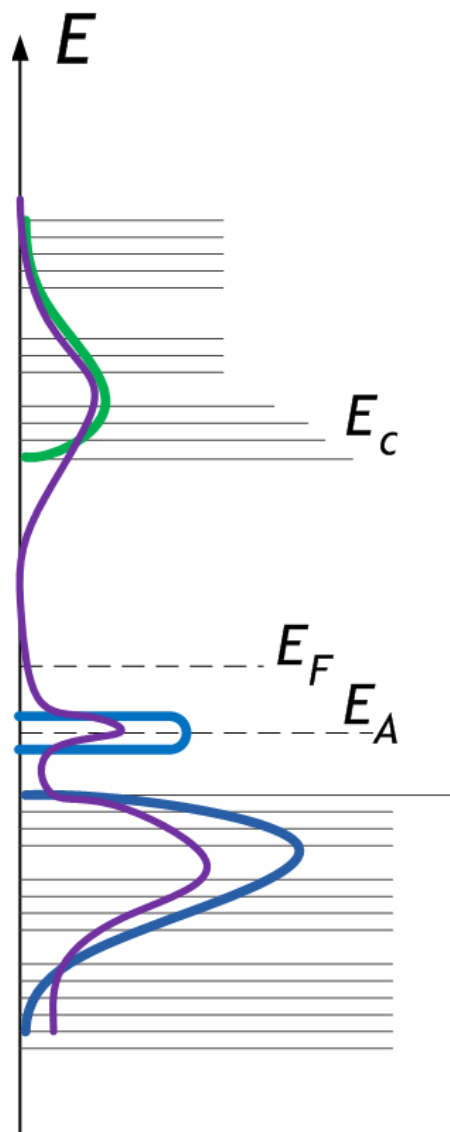


У донорного напівпровідника (або напівпровідника n-типу) на зонній діаграмі з'являється додатковий донорний рівень, утворений за рахунок незв'язаних електронів атомів домішки. Один атом домішки припадає на $10^5 \dots 10^6$ атомів кристалічної ґратки напівпровідника. Рівень Фермі у донорного напівпровідника зміщується вгору, вище середини забороненої зони. Донорний рівень знаходиться приблизно між рівнем Фермі та мінімумом зони провідності.

Домішка акцепторного типу

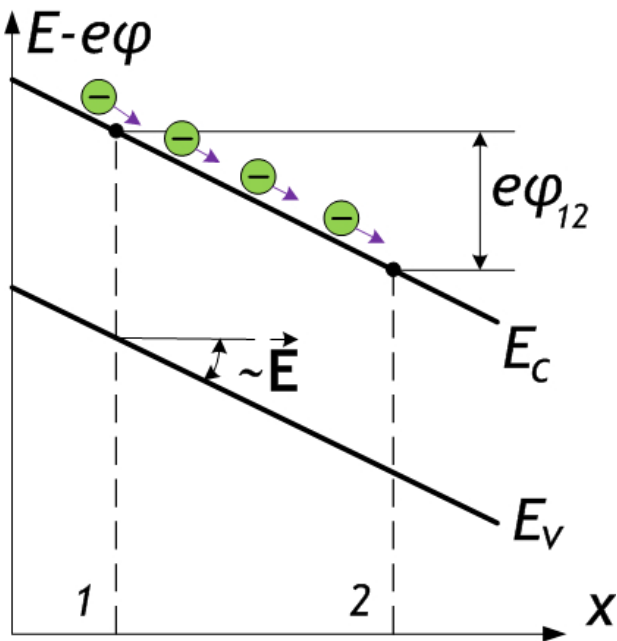


Зонна діаграма акцепторного напівпровідника



У акцепторного напівпровідника (або напівпровідника р-типу) на зонній діаграмі з'являється додатковий акцепторний рівень, утворений за рахунок додаткових дірок наколо атомів домішки. Один атом домішки також приходиться десь на $10^5 \dots 10^6$ атомів кристалічної ґратки напівпровідника. Рівень Фермі у акцепторного напівпровідника зміщується донизу, нижче середини забороненої зони. Додатковий акцепторний рівень знаходиться приблизно між рівнем Фермі та максимумом валентної провідності.

Зонна діаграма напівпровідника в електричному полі



На всіх попередніх зонних діаграмах вважалося, що електричного поля у напівпровіднику немає. Однак коли ми вводимо якусь напівпровідникову деталь у електричне коло, то отримується, що напівпровідник знаходиться в електричному полі, і електрони, які знаходяться у зоні провідності, створюють електричний струм. Тоді зонна діаграма напівпровідника якби "викривлюється" від точки з більшим потенціалом (1) до точки з меншим потенціалом (2).

Кутовий коефіцієнт нахилу енергетичних зон при цьому пропорційний напруженості електричного поля E .

Процеси перенесення зарядів у напівпровідниках

Процес перенесення зарядів може відбуватися у напівпровідниках при наявності електронів у зоні провідності та при неповному заповненні електронами валентної зони. При виконанні цих умов та за відсутності градієнта температури перенесення носіїв заряду може відбуватися або під впливом електричного поля, або під впливом градієнта концентрації носіїв заряду.

Направлений рух носіїв заряду під впливом електричного поля називають дрейфом.

У результаті дрейфу електрони рухаються в одну сторону, а дірки — в іншу. Таким чином, у напівпровіднику розрізняють електронний та дірковий струми, які направлені протилежно.

Щільність дрейфового струму

Для електронів у зоні провідності:

$$J_{n_{dr}} = e_0 n \mu_n E,$$

де e_0 – заряд електрона; n – концентрація електронів у зоні провідності; μ_n – рухливість електронів – фізична величина, яка чисельно дорівнює середній швидкості їх направленої руху в Електричному полі, напруженість якого дорівнює одиниці.

Для дірок у валентній зоні:

$$J_{p_{dr}} = e_0 p \mu_p E,$$

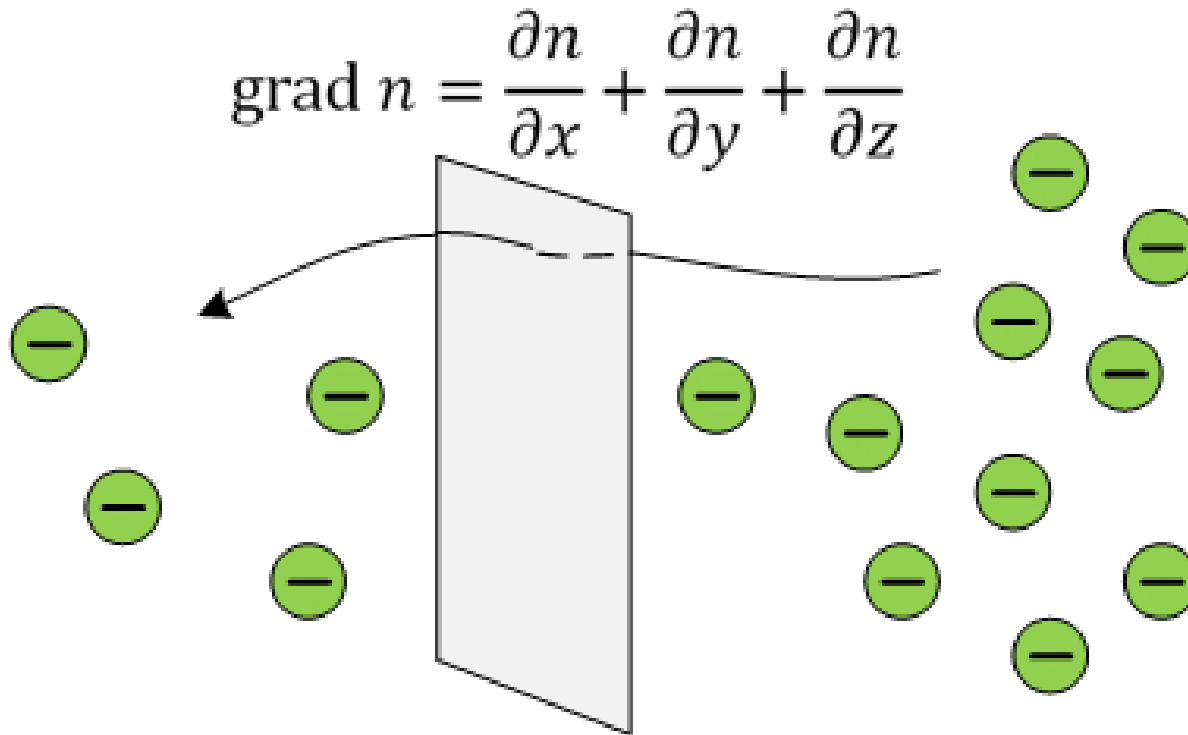
де μ_p – рухливість дірок.

Повна щільність дрейфового струму при наявності вільних електронів та дірок дорівнює сумі електронної та діркової складових:

$$J = J_{n_{dr}} + J_{p_{dr}} = e_0 (n \mu_n + p \mu_p) E = e_0 \gamma E,$$

Де $\gamma = n \mu_n + p \mu_p$ – питома провідність напівпровідника, [См·м].

Поведінка вільних електронів та дірок дещо нагадує поведінку молекул газу в замкненому просторі. Так само, як газ заповнює весь доступний йому простір, так і вільні електрони /дірки заповнюють весь об'єм напівпровідника. В цьому випадку відбувається дифузія – процес вирівнювання концентрації носіїв заряду по напівпровіднику.



Щільність потоку частинок при дифузії (тобто число частинок, яке перетинає одиничну площинку, перпендикулярну напрямку градієнту концентрації, за одиницю часу) пропорційна градієнту концентрації цих частинок:

$$\Phi = -D_m \text{grad}m,$$

де D_m – коефіцієнт дифузії, який дорівнює абсолютному значенню відношення потоку частинок до градієнту їх концентрації.

Вектор градієнта концентрації направлений у сторону зростання аргумента, а частинки дифундують з області, де їх більше – у область, де їх менше, тобто проти напрямку вектора градієнта.

Щільність дифузійного струму електронів та дірок

Оскільки електрони мають негативний заряд, то щільність Дифузійного струму електронів

$$J_{n\text{dif}} = e_0 D_n \text{grad} n$$

Аналогічно, щільність дифузійного струму дірок:

$$J_{p\text{dif}} = -e_0 D_p \text{grad} p$$

Коефіцієнти дифузії пов'язані із рухливістю співвідношеннями Ейнштейна:

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{kT}{e_0}$$

Рівняння струмів

При наявності електричного поля та градієнту концентрації носіїв Заряду в напівпровіднику загальна щільність струму електронів буде дорівнювати:

$$J_n = J_{n_{dr}} + J_{n_{dif}} = e_0 n \mu_n E + e_0 D_n \text{grad} n$$

а загальна щільність струму дірок буде дорівнювати:

$$J_p = J_{p_{dr}} + J_{p_{dif}} = e_0 p \mu_p E + e_0 D_p \text{grad} p$$

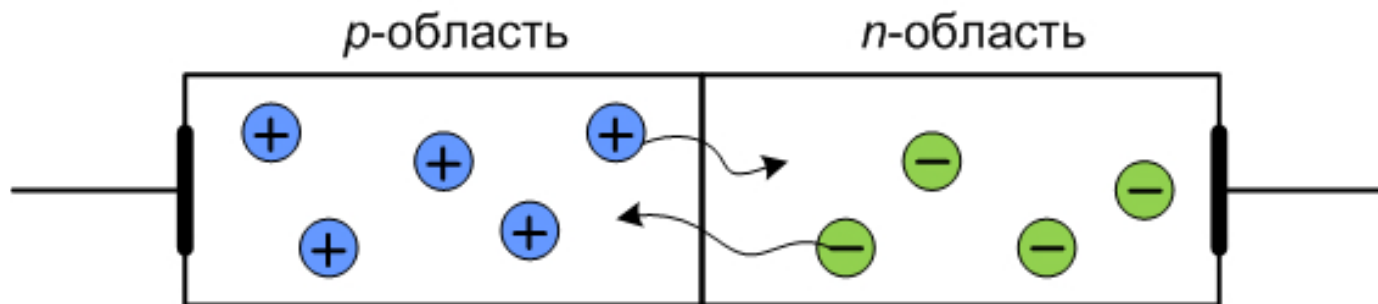
Для розрахунку повного струму слід додати ці дві складові струму І ще додати до них щільність струму зміщення:

$$J = J_n + J_p + \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}$$

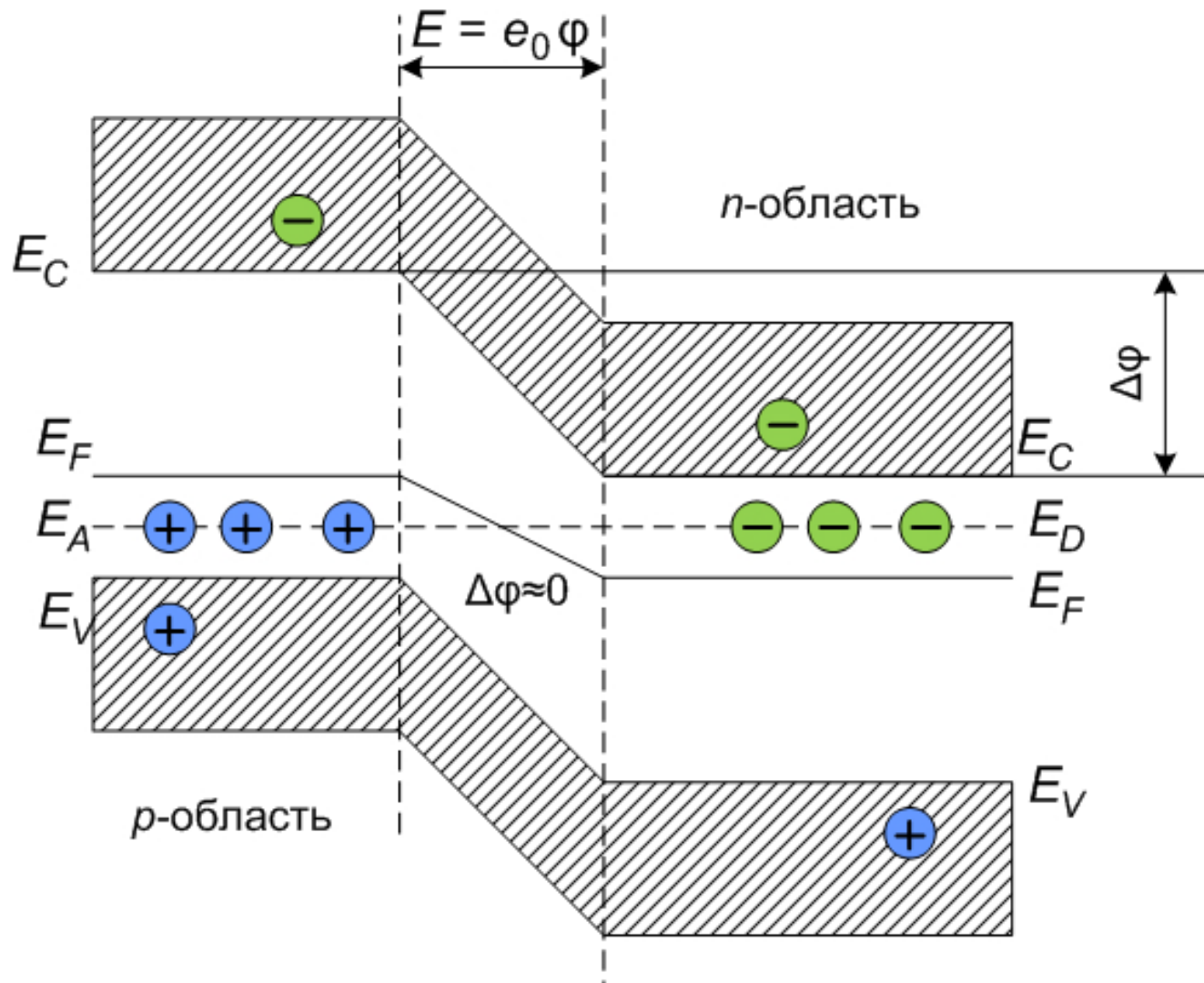
p-n – перехід

Електронно-дірковий перехід (або p-n перехід) – це перехідний шар між двома областями напівпровідника з різною електропровідністю, в якому існує дифузійне електричне поле. При ідеальному контакті двох напівпровідників з різним типом електропровідності внаслідок градієнту концентрації носіїв заряду виникає їх дифузія в області з протилежним типом провідності.

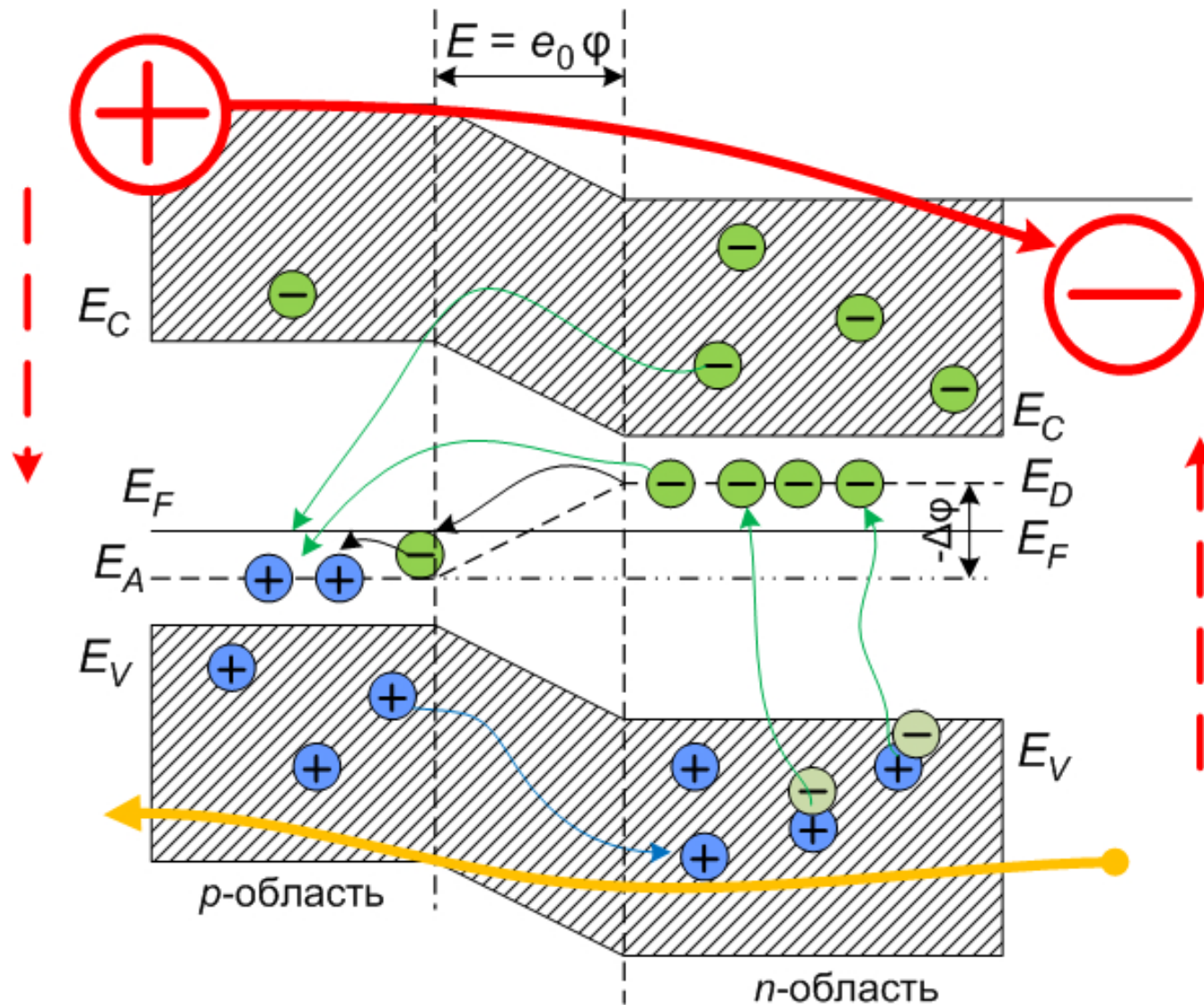
В n-області основними носіями заряду є електрони, а неосновними – дірки. В p-області навпаки: електрони є неосновними носіями заряду, а дірки – основними.



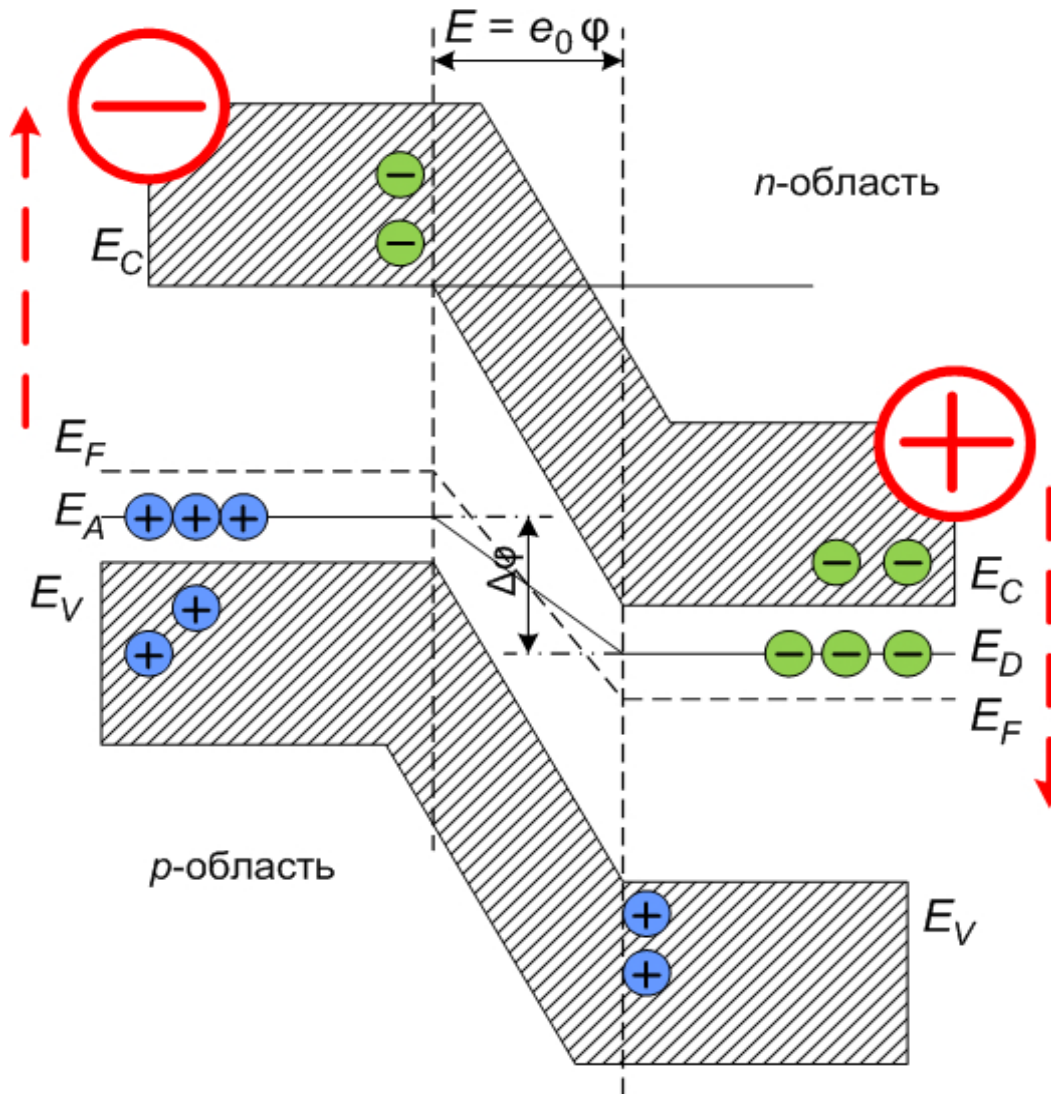
Зонна діаграма р-n-переходу за відсутності зовнішньої напруги



Зонна діаграма р-п-переходу при прямому зміщенні

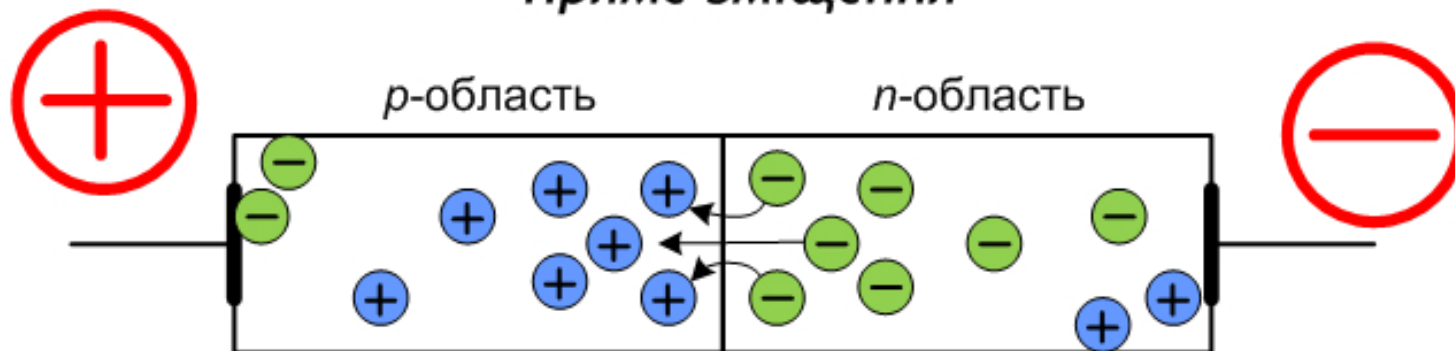


Зонна діаграма р-п-переходу при зворотному зміщенні

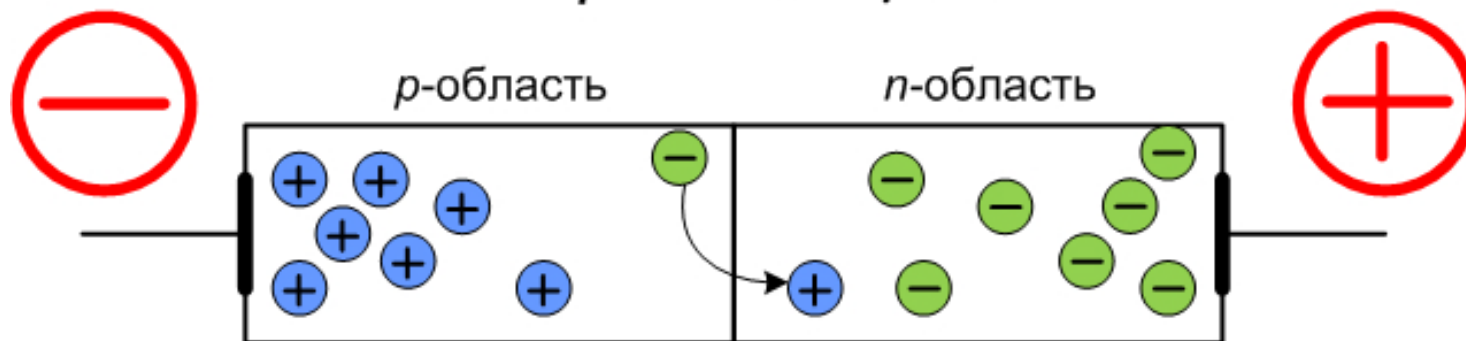


Схематичне зображення розподілу носіїв заряду

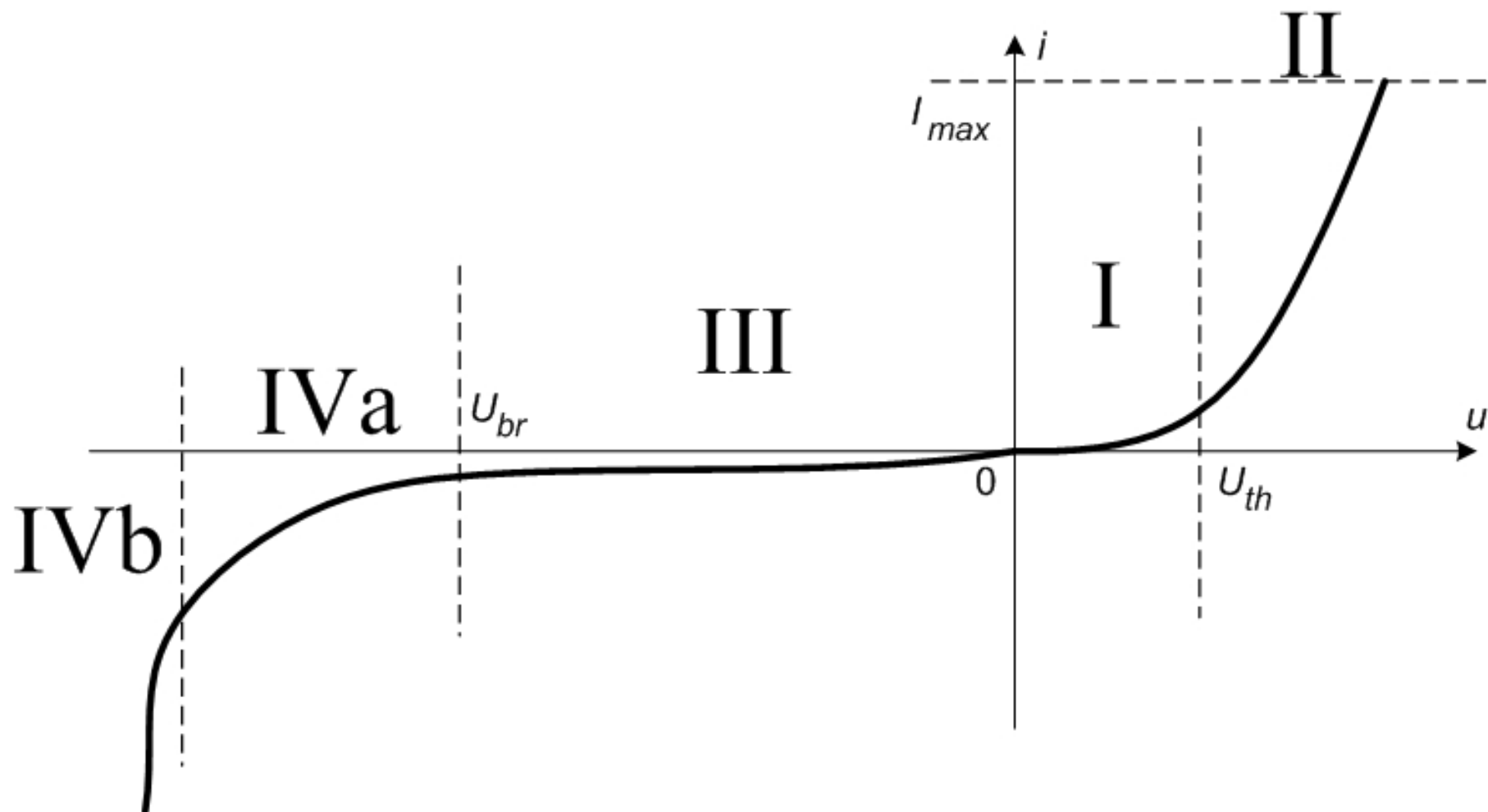
Пряме зміщення



Зворотне зміщення



Вольт-амперна характеристика р-n-переходу



Тут ми розглянули лише гомо-р-n-перехід. Багато цікавих ефектів (стабілізація напруги, випромінювання світла, тунельний ефект тощо) на ньому не реалізуються — вони реалізуються на гетеро-р-n-переході.

Література:

❖ Готра З.Ю., Лопатинський І.Є., Лукіянець Б.А. та ін. Фізичні основи електронної техніки: підручник — Львів: вид-во “Бескид Біт”, 2004. — 808 с.