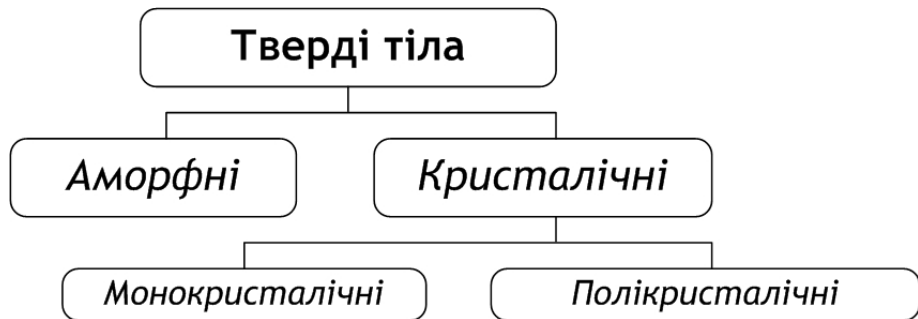


Основи зонної теорії твердого тіла

Модуль 2, лекція 6

Р. Коломієць

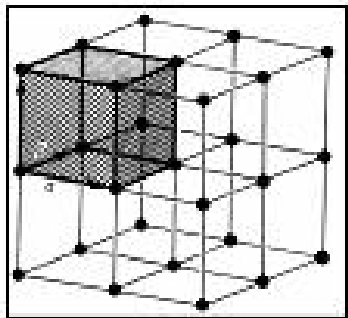
29 жовтня 2020 р.



Кристалічна будова твердих тіл

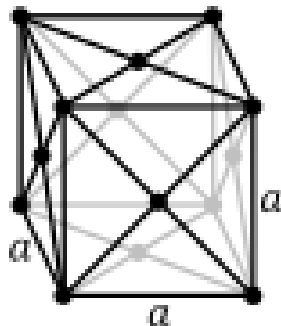


Тверді тіла — це фізичні тіла, що зберігають форму та об'єм. Тверді тіла поділяються на аморфні та кристалічні. В аморфних тілах якийсь помітний порядок в розміщенні атомів/молекул відсутній, а у кристалічних — наявний. В свою чергу кристалічні поділяються на монокристалічні та полікристалічні. Основна 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).

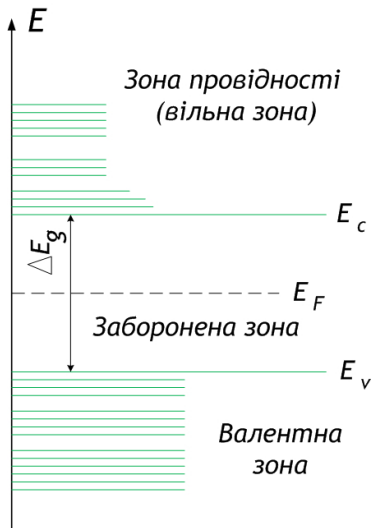


Кристалічна ґратка — геометрично правильне розміщення атомів (йонів, молекул), властиве речовині, що перебуває в кристалічному стані. Просторові фігури (наприклад, паралелепіпеди) у вершинах яких розміщено атоми, називаються комірками кристалічної ґратки. Для кристалічних тіл характерна регулярна нескінченна система геометричних точок (вузлів ґратки), 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
крихкі кристали з гранецентрованою
кубічною ґраткою типу алмазу.



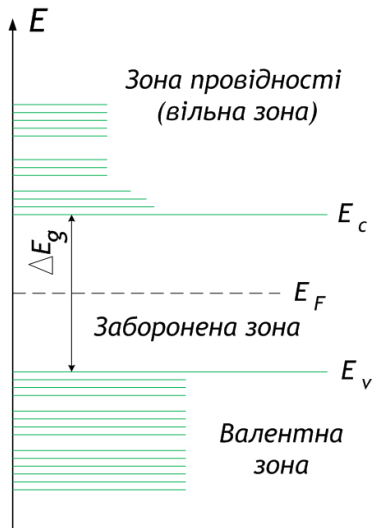
Розподіл електронів по енергіям у твердому тілі

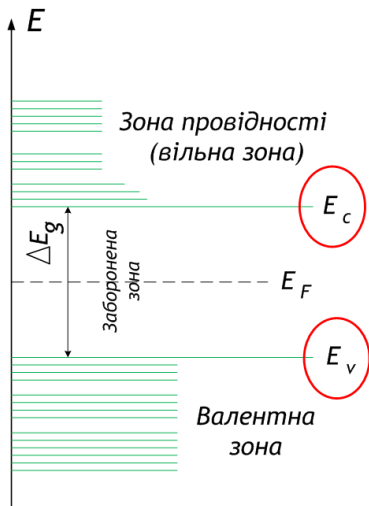


У речовині в околі атома електрони можуть знаходитися лише на певних енергетичних рівнях (які можна уявляти собі як відстані від електрона до ядра — чим далі від ядра, тим вищий енергетичний рівень). Доки електрон знаходиться на одному енергетичному рівні, він не випромінює енергію і не втрачає її. При 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

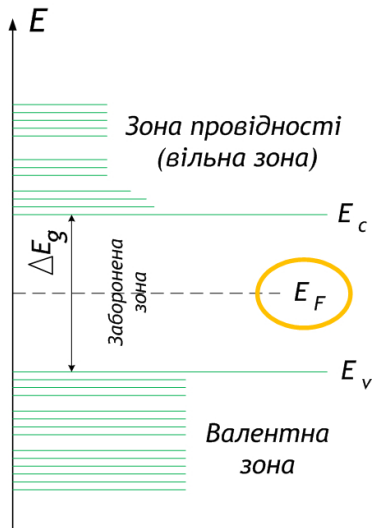
$$\Delta E_g = E_c - E_v.$$

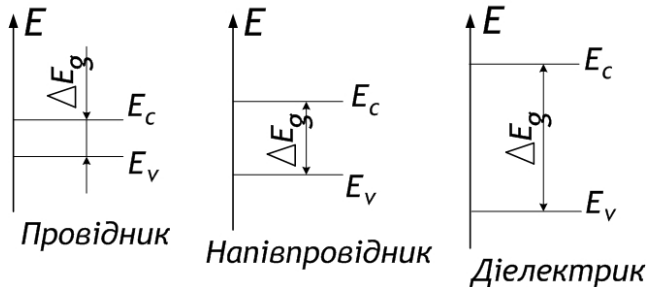
Заборонена зона — це така область енергій електронів, яка для даної речовини не характерна, і електронів з такими енергіями у цій речовині немає.

Рівень Фермі

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.

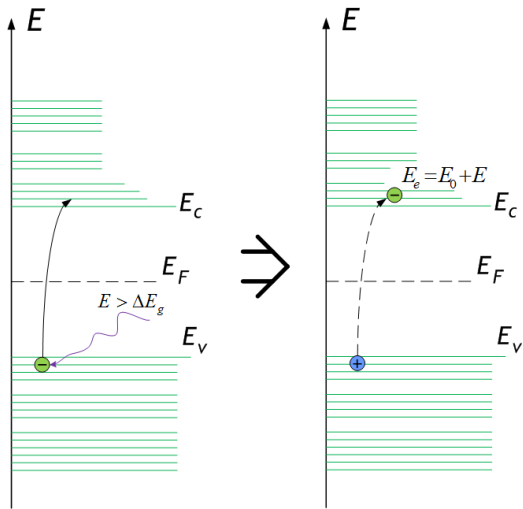




З точки зору зонної теорії речовини поділюється на провідники, напівпровідники та діелектрики по принципу ширини забороненої зони: якщо $\Delta E_g \lesssim kT$ — то це провідник, якщо $\Delta E_g > kT$ — то це напівпровідник, а якщо $\Delta E_g \gg kT$ — то це діелектрик (тут k — стала Больцмана, T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

Переходи електронів

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.



Власні напівпровідники

Концентрація електронів в зоні провідності

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:

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

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:

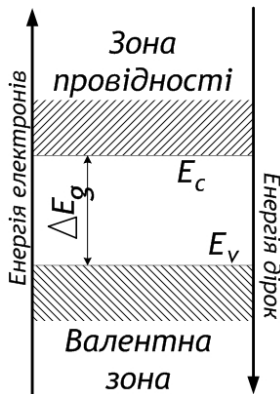
$$\Delta E_g = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta},$$

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

Також, строго

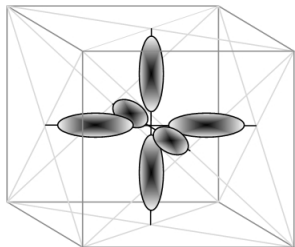
кажучи, лінії E_c та E_v не є прямими, вони є плавними кривими, що залежать від геометрії кристалічної ґратки.

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.

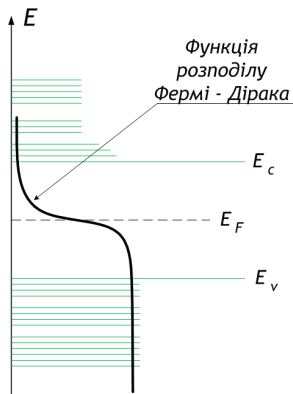
Власні напівпровідники

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:

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

а $F_{1/2}(\cdot)$ — 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

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

Тоді

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

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:

$$\begin{aligned} E_F &= \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_v}{N_c} \right) = \\ &= \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{3kT}{4} \ln \left(\frac{m_{dh}}{m_{de} M_c^{2/3}} \right) \end{aligned}$$

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.

Власна концентрація носіїв заряду

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 $11\text{ }^{\circ}\text{C}$. Таким чином, при достатньо високих температурах спостерігається ефект термогенерації, тобто появи електричної напруги (що знаходить своє застосування у напівпровідникових сенсорах температури та елементах Пельть'є).

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