

ВВЕДЕНИЕ

1. Элементы зонной теории

Разнообразие электрофизических свойств кристаллических твердых тел объясняется тесным сочетанием зонной теории, квантовой статистической физики и кинетической теории.

Задачей зонной теории является отыскание волновых функций электронов в твердом теле с учетом симметрии кристалла.

Статистическая физика рассматривает вопросы заполнения этих состояний электронами и позволяет получить термодинамические соотношения для электронного газа.

В кинетической теории исследуются механизмы рассеяния электронов на несовершенствах кристаллической структуры при наличии внешних полей, что позволяет вычислить различные кинетические эффекты: электропроводность, эффект Холла, термоЭДС и другие. Особенность состояний электронов в кристаллах объясняется зонной теорией. Свое название она получила оттого, что предсказывает наличие разрешенных и запрещенных зон энергии. Суть зонной теории сводится к решению уравнений Шредингера с учетом специфических свойств кристаллов. Теория эта достаточно сложна, однако ее результаты можно понять из достаточно простых соображений.

Ниже будет рассмотрен подход, который в литературе известен как приближение слабой связи.

В первую очередь необходимо обратить внимание на симметрию кристаллов, а точнее, лишь на трансляционную симметрию. На основе трех базисных векторов \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} можно построить семейство векторов $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$, где n_1, n_2, n_3 - целые числа, включая 0.

На рис.1 на примере двумерной решетки показаны три вектора $\vec{T}_1(n_1=1, n_2=1)$, $\vec{T}_2(n_1=1, n_2=3)$, $\vec{T}_3(n_1=1, n_2=-1)$. Если представить, что кристалл бесконечный, то нетрудно догадаться, что вектор трансляции разделяет физические эквивалентные точки (например, точки α и β на рис.1). Это свойство носит название трансляционной симметрии.

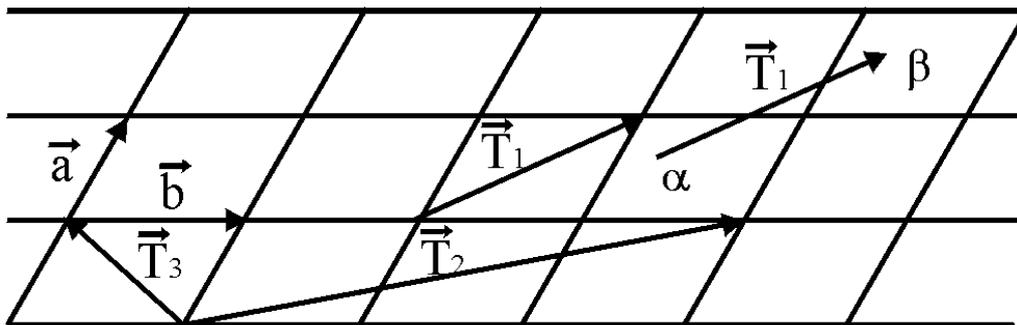


Рис. 1

В силу периодичности атомов в кристалле потенциальная энергия электрона также периодическая и, следовательно, удовлетворяет трансляционной симметрии.

Теперь поставим вопрос о волновой функции. Для простоты рассмотрим одномерную цепочку из $(N+1)$ атомов (одномерный кристалл (рис.2)) с межатомным расстоянием a .

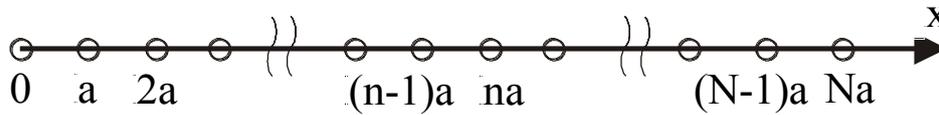


Рис.2

Поток свободных электронов описывается волновой функцией вида

$$\Psi(x) = \Psi_0 e^{(\pm ikx)}, \quad (1)$$

где Ψ_0 – постоянная амплитуда, k – волновое число, знак (+) относится к волне, распространяющейся вправо по оси x , знак (-) – к волне, распространяющейся влево.

Подстановка такой волны в уравнение Шредингера $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \varepsilon \psi = 0$ дает

дисперсионное соотношение $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (закон дисперсии). В случае кристалла

волновой множитель $e^{(\pm ikx)}$, описывающий бегущие волны, должен также присутствовать в волновой функции. Однако амплитуда не может быть просто константой. Причина этого очевидна. Запишем волновую функцию в виде

$$\Psi(x) = U(x) e^{(\pm ikx)}. \quad (2)$$

Плотность вероятности обнаружения электрона в точке x

$$\Psi(x) \Psi^*(x) = U^2(x) \quad (3)$$

должна, очевидно, обладать той же трансляционной симметрией, что и потенциальная энергия. Ведь плотность электронного блока определяется потенциальной энергией решетки. Таким образом,

$$U^2(x+a) = U^2(x+na) = U^2(x) \quad (4)$$

Это справедливо и для самой амплитуды: $U(x+a) = U(x)$. Теперь можно сделать вывод о том, что волновая функция должна иметь вид (2) при условии, что амплитуда $U(x)$ обладает периодичностью решетки. Такие волновые функции носят название функций Блоха. Если мысленно представить себе, что потенциал решетки стремится к нулю или к постоянной величине, то волновая функция (2) переходит в волновую функцию (1).

Обсудим теперь вопрос о волновых числах k . Электрон в твердом теле находится в потенциальной яме. Поэтому, как и для бесконечно глубокой потенциальной ямы, половина волны должна укладываться целое число раз на размере ямы l : $\lambda/2 = l/j$. Соответственно $k = 2\pi/\lambda = (\pi/l)j$, $j = 1, 2, \dots$. Для решетки $l = Na$ и $k = (\pi/Na)j$. Из всех чисел j только числа в интервале от 1 до N имеют смысл, так как при $j > N$ число j может быть представлено как $j = n + j'$. Тогда

$$\exp(ikx) = \exp\left(i \frac{\pi N}{Na} jx\right) = \exp\left(i \frac{\pi N}{Na} x + i \frac{\pi}{Na} j'x\right) = \exp\left(i \frac{\pi}{a} x\right) \exp\left(i \frac{\pi}{Na} j'x\right).$$

Экспонента $\exp(i\frac{\pi}{a}x)$ обладает той же периодичностью, что и решетка

$$\exp(i\frac{\pi}{a}(x+na)) = \exp(i\pi n) \exp(i\frac{\pi}{a}x) = \pm \exp(i\frac{\pi}{a}x).$$

Величину $\exp(i\frac{\pi}{a}x)$ можно внести в амплитуду $U(x)$, что не меняет соотношения (3) и (4), так как $|\exp(i\frac{\pi}{a}x)|=1$. Если еще учесть, что существуют волны, распространяющиеся вправо и влево вдоль оси x , то физически различимые состояния лежат в интервале волновых чисел от $-\pi/a$ до π/a . Этот интервал носит название первой зоны Бриллюэна.

Рассмотрим вопрос об особенностях закона дисперсии электронов в кристалле. Для начала можно представить себе, что решетка есть, но потенциал, создаваемый ей, равен нулю. Таким образом, осуществлен переход к потенциальной яме размером $l=Na$ с нулевым потенциалом внутри. В этом случае закон дисперсии представляет собой квадратичную параболу $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (рис.3) без особенностей в точках $\pm \frac{\pi}{a} j$. Волновые числа принимают дискретный ряд с шагом $\Delta k = \frac{\pi}{Na}$.

Рассмотрим ситуацию, когда потенциал, создаваемый атомами, отличен от нуля. В этой ситуации распространяющиеся волны становятся волнами Блоха и взаимодействуют с кристаллом тем больше, чем больше потенциал. Взаимодействие приводит к особенностям в законе дисперсии в точках $\pm \frac{\pi}{a} j$.

Для волн с такими волновыми числами выполняется условие дифракции Вульфа-Брегга для волн, распространяющихся вдоль цепочки атомов: $2a \cdot \sin\theta = j\lambda$ при $\theta=0$ (наш случай) $\lambda = \frac{2a}{j}$ или для k выполняется условие $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a} j$.

Это означает следующее. Волна, соответствующая, например, состоянию (1) (рис.4), последовательно отражаясь от атомной цепочки, переходит в волну

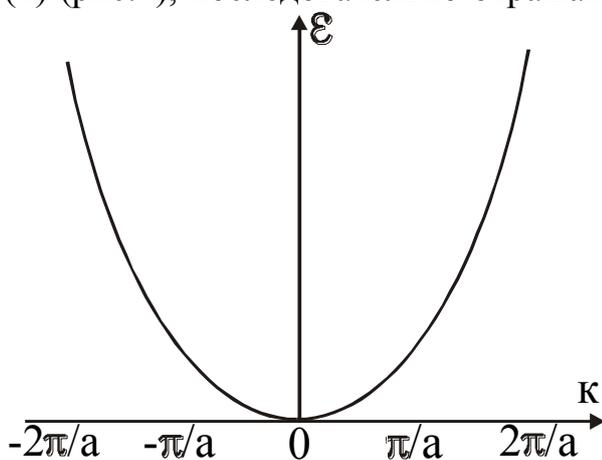


Рис.3

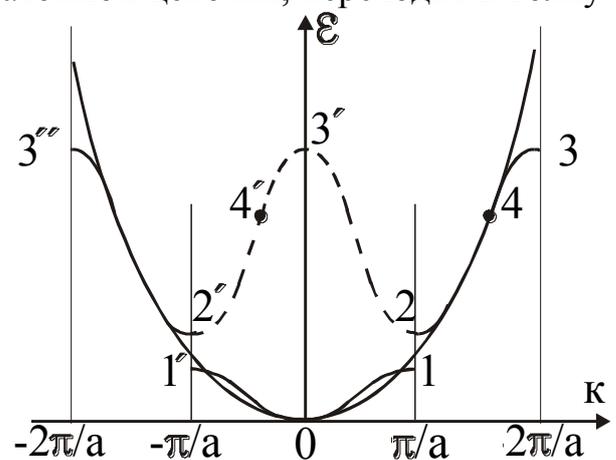


Рис.4

1'. Та, в свою очередь, переходит в (1) и т.д. Иначе говоря, состояния 1 и 1' не могут существовать независимо, а только в паре с $k = \pm \frac{\pi}{a}$, что соответствует стоячей волне. Следовательно, состояния 1 и 1' представляют собой одно единственное состояние в отличие от любой произвольной пары состояний с k и $-k$, которые независимы и реализуются тогда, когда они заполнены.

Однако и для состояний с $k = \pm \frac{\pi}{a}$ существует два варианта образования стоячих волн, связанных с отражением в фазе и противофазе:

$$\Psi_1 = U_1(x) \exp(i \frac{\pi}{a} x) + U_1(x) \exp(-i \frac{\pi}{a} x) = 2U_1(x) \cos(\frac{\pi}{a} x); \quad (5)$$

$$\Psi_2 = U_1(x) \exp(i \frac{\pi}{a} x) - U_1(x) \exp(-i \frac{\pi}{a} x) = 2iU_1(x) \sin(\frac{\pi}{a} x). \quad (6)$$

Соответственно плотности вероятностей этих двух состояний имеют вид:

$$\Psi_1 \Psi_1^* = 4U_1^2(x) \cos^2(\frac{\pi}{a} x); \quad (7)$$

$$\Psi_2 \Psi_2^* = 4U_2^2(x) \sin^2(\frac{\pi}{a} x). \quad (8)$$

Из последних формул видно, что волновая функция Ψ_1 соответствует вблизи атомов решетки, а Ψ_2 - максимуму в промежутке между атомами. Так как

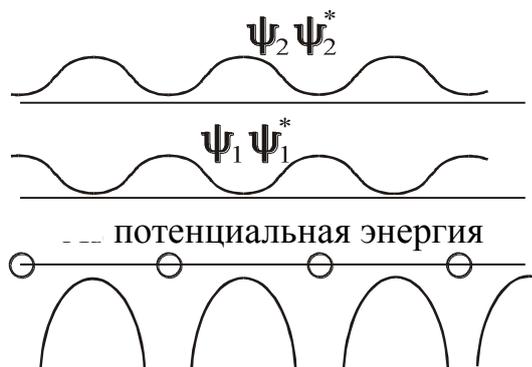


Рис.5

атомы заряжены положительно, то энергия состояния (1) будет меньше энергии состояния (2). Таким образом, в точках $\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{a}$ и т.д.

образуется энергетические щели, или, как их принято называть, запрещенные зоны энергий.

Отметим еще одну особенность в законе дисперсии. Как известно, стоячие волны не переносят ни энергии, ни импульса, и их групповая скорость

$v_{\text{г}} = \frac{dw}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} = 0$. Следовательно, в точках $\pm \frac{\pi}{a} j$ производные $\frac{d\varepsilon}{dk}$ должны быть

равны нулю, что соответствует экстремумам в законе дисперсии. Необходимо отметить последнюю деталь закона дисперсии. Детальный анализ показывает,

что в зонах разрешенных энергий состояния, разделенные интервалом $\frac{2\pi}{a}, \frac{4\pi}{a}$ и

т.д., эквивалентны. На рис.4 они отмечены цифрами. Это обстоятельство позволяет проделать операцию произведения закона дисперсии к первой зоне Бриллюэна. Так кривая 2, 3, 4 перейдет в кривую 2', 3', 4', а кривая 2', 3'' перейдет в кривую 2, 3'.

2. Механизм переноса заряда

В зависимости от того, как заполнены зоны электронами, кристаллы разделяют на диэлектрики, полупроводники и металлы.

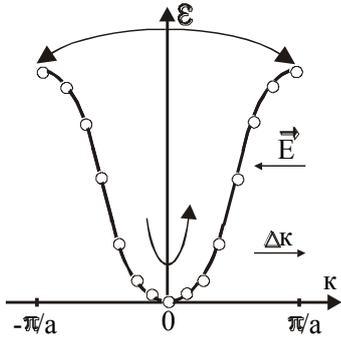


Рис.6

Рассмотрим сначала полностью заполненную зону (рис.6). Под действием электрического поля \vec{E} за промежуток времени Δt волновое число электронов меняется на величину $\Delta k = -\frac{eE\Delta t}{\hbar}$. При этом электроны переходят по состояниям (направление переходов указано стрелкой на рис.6), оставляя состояния заполненными, как и в случае отсутствия поля. Для каждого заполненного состояния с волновым числом k есть симметричное ему состояние с $-k$. Два состояния с k и $-k$ интерферируют и дают стоячую волну. Это справедливо для всей зоны.

Поэтому полностью заполненная зона не дает вклада в перенос заряда (ток).

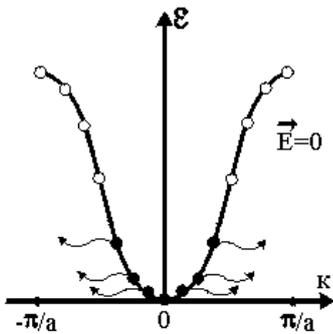


Рис.7а

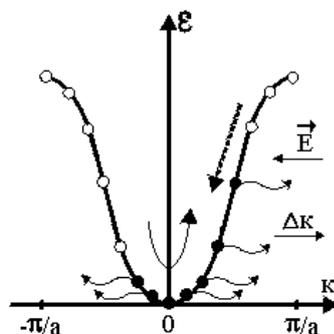


Рис.7б

Рассмотрим теперь зону, заполненную частично так, как показано на рис.7а. В отсутствие электрического поля (рис.7а) состояния заполнены симметрично и описываются стоячими волнами.

Электрическое поле, увеличивая волновые числа, создает асимметрию в заполнении состояний (рис.7б). (Пунктирной стрелкой показано изменение волнового числа за счет расстояния.) В этом случае для состояний, отмеченных волнистой стрелкой, нет состояний с отрицательными волновыми числами. Поэтому эти состояния будут описываться бегущими волнами и, следовательно, создавать поток электронов в направлении, противоположном полю. Таким образом, не полностью заполненная зона при наличии электрического поля дает вклад в перенос заряда. (Отклонение заполнения состояний в зоне за счет тепловых возбуждений от симметричного заполнения приводит к появлению случайных токов (шумы).)

Определенный интерес представляет рассмотрение поведения электронов почти заполненной зоны. Будем считать, что все состояния, кроме малой доли, вблизи потолка зоны, заполнены электронами. Эту ситуацию можно проанализировать, исходя из двух законов дисперсии (рис.8а, рис9а).

Как видно из рисунков, под действием электрического поля электроны заполняют состояния, смещаясь вправо в сторону увеличения волнового числа k . (Напомним, что волнистыми стрелками указано направление распространения волн, соответствующее направлению групповой скорости

$v_{\phi} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$, а стрелки, соединяющие состояния в точках $\pm \frac{\pi}{a}$, означают, что это одно и то же состояние.)

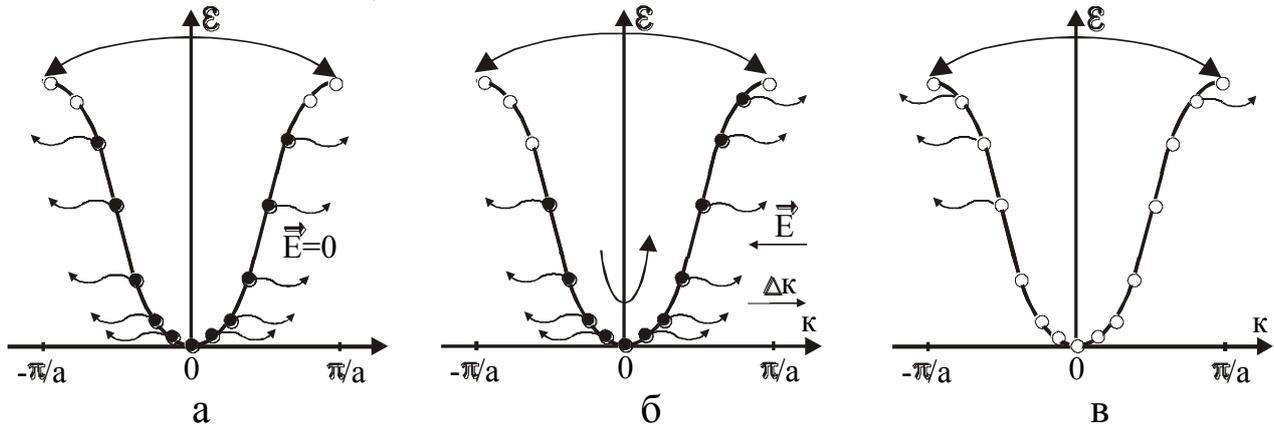


Рис.8

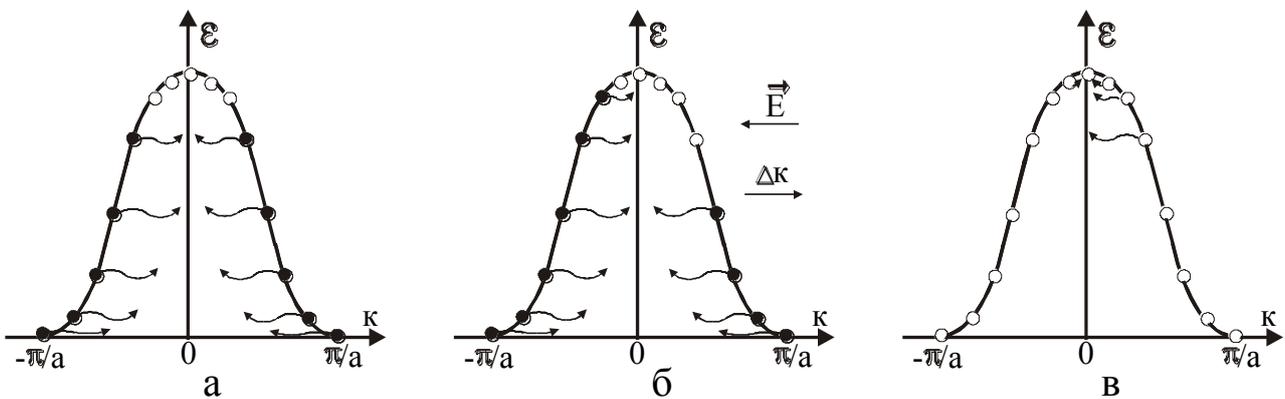


Рис.9

Результат асимметрии заполнения состояний (рис.8б, рис.9б) – бегущие волны в положительном направлении оси x , что соответствует электрическому току в направлении электрического поля и полностью совпадает с ранее рассмотренной ситуацией для частично заполненной зоны вблизи ее дна.

Если вспомнить исходный момент рассмотрения, то возникает вполне естественное желание перейти от описания через большое число электронов (тем более что большая их часть заполняет состояния, соответствующие стоячим волнам) к малому числу незаполненных состояний. Как видно из рис.8б, 9б, перенос осуществляют только те электронные волны, для которых состояния, противоположные по волновому числу k , не заполнены. Если представить себе, что незаполненные состояния заполнены “электронами” с положительным зарядом и им приписаны соответствующие электронные волны, а в остальных состояниях электроны отсутствуют (рис.8в, 9в), то результат совпадает с исходной кривой (рис.8б, 9б).

С другой стороны, рассмотренная ситуация эквивалентна показанной на рис.10. На этом рисунке рассмотрены те же законы дисперсии, только перевернутые по энергии (рис.10а соответствует рис.8б; рис.10в – рис.9в), и

заполненные положительными частицами. Нетрудно убедиться в том, что, например, ситуации на рис.8б, 8в, 10а фактически не различимы. Другими словами, движение электронов почти заполненной зоны может быть заменено эквивалентным им “движением” незаполненных состояний как положительно заряженных частиц. Таким образом, подходят к понятию дырки.

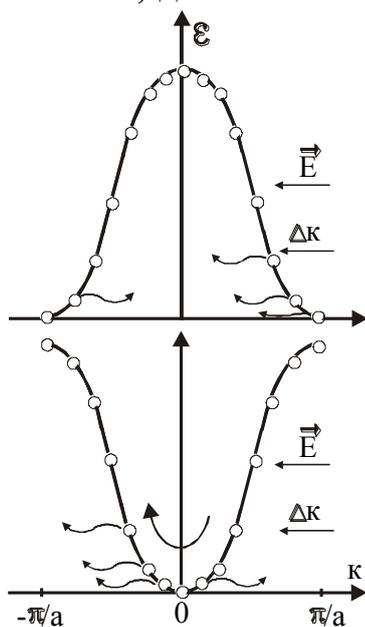


Рис.10

Рассмотренные особенности поведения электронов в зонах позволяют разделить твердые тела на металлы, диэлектрики и полупроводники. С этой точки зрения последняя зона для металлов должна быть заполнена частично, что обуславливает проводимость металлов вплоть до абсолютного нуля температуры. В полупроводниках и диэлектриках должны существовать две разрешенные зоны, разделенные между собой запрещенной зоной, причем нижняя зона при абсолютном нуле температуры должна быть полностью заполнена, а верхняя – пуста. В такой ситуации проводимость при $T=0$ К отсутствует. С ростом температуры в полупроводниках электроны заполненной зоны, называемой валентной, переходят в

верхнюю (зону проводимости) за счет термического возбуждения при относительно малой ширине запрещенной зоны ($\Delta\varepsilon \sim 1$ эВ). При этом перенос заряда осуществляется как электронами зоны проводимости, так и дырками валентной зоны. Отличие диэлектриков от полупроводников – только в наличии более широкой запрещенной зоны, что практически исключает тепловое возбуждение носителей заряда.

3. Приближение сильной связи

В рассмотренном приближении слабой связи предполагается, что периодический потенциал кристалла является слабым возмущением движения свободного электрона.

Возможен другой переход к описанию движения электрона в твердом теле. В основу описания можно взять волновые функции изолированных атомов и предположить, что при образовании кристалла эти функции слабо меняются. Такой подход к описанию движения электронов называется приближение сильной связи. Очевидно, такое приближение должно лучше описывать поведение электронов относительно глубоких энергетических состояний.

Конкретных методов расчета достаточно много. Однако в основе всех методов заложен принцип – волновая функция электрона в кристалле строится как линейная комбинация волновых функций изолированных атомов, причем построенная волновая функция должна удовлетворять как трансляционной симметрии кристалла, так и всем другим симметриям кристалла. Как и в приближении слабой связи, метод сильной связи показывает, что отдельные

уровни энергий изолированных атомов преобразуются в зоны разрешенных и запрещенных энергий.

К такому выводу можно прийти исходя из довольно простых соображений. При сближении атомов, образующих кристалл, до расстояний порядка $\Delta r = 10^{-10}$ м, волновые функции электрона с энергией ϵ_i изолированного атома начинают перекрываться, что приводит к обобществлению электронов.

В изолированном атоме электрон в состоянии с энергией ϵ_i находится неограниченно долго. При обобществлении электронов, каждый электрон, переходя от одного атома к другому, находится вблизи атома некоторое время Δt . Из соотношения неопределенностей следует, что уровень с энергией ϵ_i размывается в зону с шириной $\Delta \epsilon_i \approx \frac{\hbar}{\Delta t}$. Оценку ширины зоны можно сделать из простых соображений. Скорость электрона в атоме можно оценить из соотношения неопределенностей $\Delta r \Delta p \approx \hbar$, где $\Delta r \approx 10^{-10}$, $\Delta p = p - 0 = mv$. Отсюда $v = 10^6$ м/с. Время прохождения электроном атомного пространства $\tau \approx \frac{\Delta r}{v} = 10^{-16}$ с. Двигаясь вблизи атома, электрон совершает 10^{16} колебательных движений в секунду.

В кристалле электроны туннелируют от одного атома к другому. Оценить вероятность туннелирования можно по известной формуле потенциального барьера $\exp(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U - \epsilon)'})$, где $U - \epsilon \approx 10$ эВ, что соответствует по порядку величины энергии ионизации атомов. Из формул следует, что вероятность туннелирования ~ 0.04 . Следовательно, из 10^{16} колебательных движений $10^{16} \cdot 0.04 = 4 \cdot 10^{14}$ раз секунду электрон покидает атом. Следовательно, через $\Delta t = 1/4 \cdot 10^{14} = 2.5 \cdot 10^{15}$ сек электрон покидает атом. Отсюда $\Delta \epsilon = \frac{\hbar}{\Delta t} \approx 0.26$ эВ.

Эта грубая оценка показывает, что уровень расщепляется в достаточно широкую зону для валентных электронов.

Что касается электронов внутренних оболочек, то расщепление этих уровней несущественно из-за малой вероятности туннелирования.

Расщепление атомарного уровня в зону также должно удовлетворять принципу Паули. В случае если уровень ϵ_i в атоме не вырожден, то он должен расщепляться на N уровней в кристалле, содержащем N атомов. (Заметим, что расстояние между отдельными уровнями в зоне $\Delta \epsilon / N$ очень мало, если $N \sim N_A \sim 10^{26}$.) Так s-состояние должно расщепляться на N уровней, p-состояние на $3N$ уровней и т.д. С учетом спина, в s-состояниях может находиться $2N$ электронов, в p-состояниях $6N$ электронов.

Расчеты для реальных кристаллов показывают, что, например, возможно как перекрытие зон, так и перемешивание. Так, например, натрий ($N_a = [1s^2 2s^2 2p^6] 3s^1$) с внутренней конфигурацией неона имеет один валентный электрон в 3s-состоянии. Это состояние расщепляется на N уровней в зону. Чтобы полностью заполнить зону необходимо $2N$ электронов с учетом спина. Таким образом, 3s-зона заполнена наполовину и натрий является металлом. Казалось

бы, что следующий элемент в таблице Менделеева – магний ($Mg=[1s^22s^22p^6]3s^2$), имеющий два электрона в $3s$ -состоянии, должен быть диэлектриком. Однако известно, что магний является металлом. Это объясняется тем, что более высокая по энергии зона, образованная из $3p$ -состояний, перекрывается с зоной из $3s$ -состояний, образуя общую зону, которая полностью не заполнена.

В этом периоде таблицы Менделеева за алюминием следует кремний ($Si=[1s^22s^22p^6]3s^23p^2$), который является полупроводником. Расчеты показывают, что в кремнии $3s$ - и $2p$ -состояния перемешаны и образуют две зоны энергий, разделенных запрещенной зоной ~ 1.1 эВ. Нижняя зона, содержащая четыре состояния на атом, при температуре абсолютного нуля оказывается полностью заполненной. При относительно малой ширине запрещенной зоны кремния с ростом температуры часть электронов переходит в более высокую по энергии зону, обеспечивая проводимость двумя зонами (дырками и электронами).

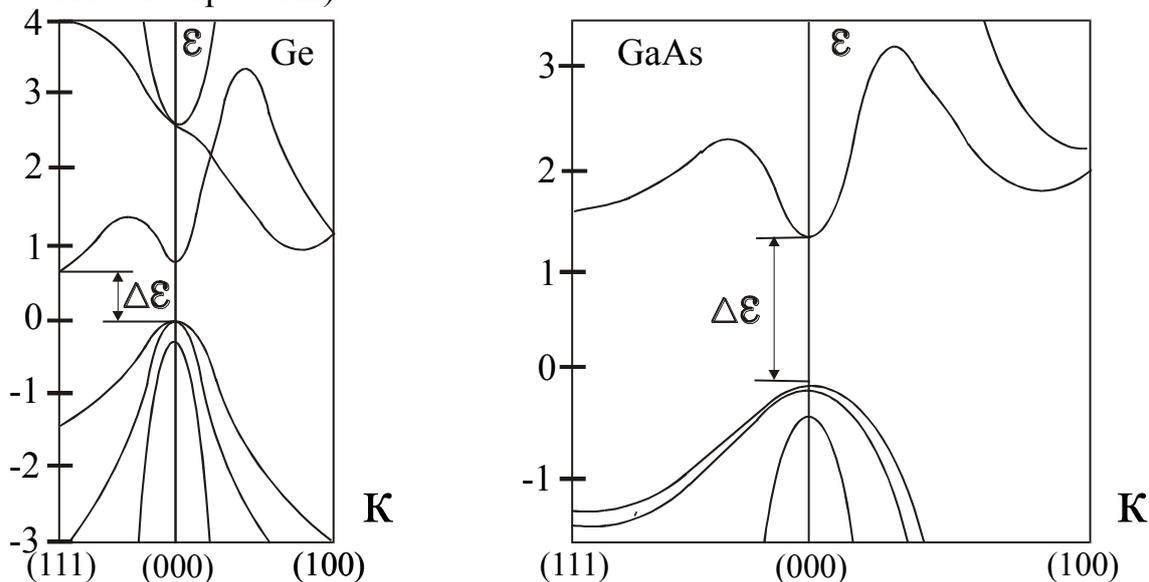


Рис.11

Наибольшие трудности в приближении сильной связи представляет расчет закона дисперсии электронов в зонах для реальных кристаллов. Однако необходимо отметить, что состояния электронов соответствующим границе зоны Бриллюэна, как и в приближении слабой связи, испытывают брегговское отражение. Таким образом, в экстремальных точках, таких как $k=0$, $k=\frac{\pi}{a}$ и др., состояния описываются стоячими волнами, а производная $\frac{d\varepsilon}{dk}=0$. В качестве примера на рис.11 представлены законы дисперсии германия и арсенида галлия. Из закона дисперсии видно, что потолок валентной зоны германия и арсенида галлия находятся в центре зоны Бриллюэна. Однако зоны проводимости имеют существенное различие. Дно зоны проводимости арсенида галлия находится в центре зоны Бриллюэна, а у германия дно зоны проводимости находится на границе зоны Бриллюэна.

4. Концентрация электронов и дырок в полупроводниках

Для анализа поведения полупроводников обычно пользуются двухзонной моделью (рис.12). В литературе часто вместо закона дисперсии приводят

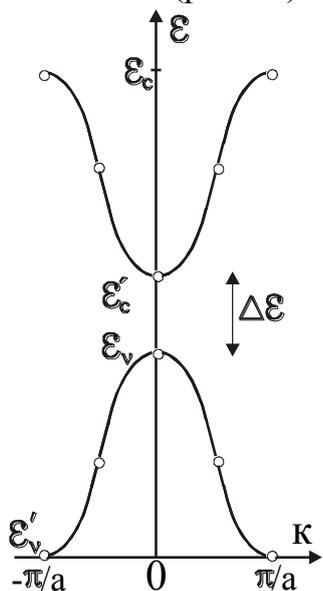


Рис.12

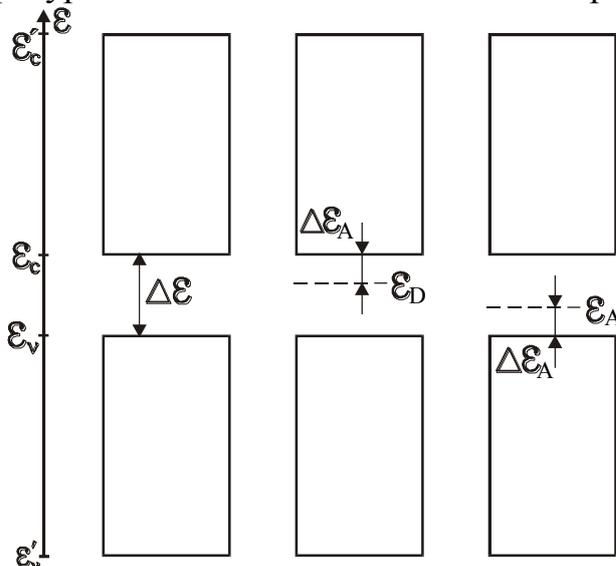


Рис.13

соответствующие ему энергетические диаграммы (рис.13) собственного полупроводника (а), примесного n-типа (б), примесного p-типа (в), где $\Delta\epsilon$ – энергия активации примеси.

Заполненная зона от ϵ_v до ϵ_v' называется валентной. Зона от ϵ_c до ϵ_c' называется зоной проводимости. Обычно различают собственные и примесные полупроводники. Собственным полупроводником называют абсолютно чистый полупроводник, зонная структура которого показана на рис.12 и на энергетической диаграмме рис.13а. Наличие примесей приводит к появлению дополнительных уровней энергии для электронов. Полупроводники, у которых примесный уровень лежит в запрещенной зоне вблизи дна зоны проводимости (рис.13б), называют донорным. Те, у которых примесный уровень лежит вблизи потолка валентной зоны (рис.13в), называют акцепторными. Например, для четырехвалентного германия донорной примесью будут атомы пятивалентных элементов (мышьяк, фосфор), а акцепторной примесью – атомы трехвалентных элементов (индий, бор).

В силу того, что примесь в кристалле распределяется случайно, примесные состояния не образуют зону, т.е. электроны этих состояний не могут двигаться в кристалле, оставаясь связанными с примесными атомами. Однако если электроны донорных уровней перейдут в зону проводимости, например, при фотоэффекте или при термической возбуждении, они будут участвовать в переносе заряда так, как это описано в п. 2.

Переход электронов на акцепторный уровень из валентной зоны приводит к появлению в валентной зоне дырок, которые также могут участвовать в переносе заряда.

Для таких полупроводников, как германий и кремний, с достаточно хорошей точностью выполняются условия: $\Delta\epsilon \gg k_b T$, $\epsilon_c - \epsilon_c \gg k_b T$, $\epsilon_v - \epsilon_v' \gg k_b T$

для широкого интервала температур (заметим, что $k_b T = 1 \text{ эВ}$ соответствует $T \cong 11000 \text{ К}$). Благодаря этому количество термически возбужденных электронов и дырок будет мало по сравнению с числом состояний в соответствующей зоне, т.е. электроны и дырки будут находиться вблизи экстремальных точек ε_v и ε_c (см. рис.12). Вблизи этих точек закон дисперсии можно представить квадратичными парабололами $\varepsilon = \varepsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ - для зоны

проводимости, $\varepsilon = \varepsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p}$ - для валентной зоны, где m_e и m_p - эффективные

массы электронов и дырок соответственно. Это обстоятельство позволяет считать электроны и дырки свободными частицами в соответствующих зонах и определить плотности состояний в зонах как для свободных частиц:

$$\rho_c(\varepsilon) = \frac{\pi}{4} \left(\frac{2m_e}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} \quad \text{- плотность состояний электронов;}$$

$$\rho_p(\varepsilon) = \frac{\pi}{4} \left(\frac{2m_p}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon_v - \varepsilon} \quad \text{- плотность состояний дырок (для единичного}$$

объема полупроводника).

Среднее число электронов в квантовом состоянии описывается распределением Ферми:

$$f(\varepsilon) = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_b T}\right) + 1 \right)^{-1}, \quad (9)$$

где ε_F - химический потенциал, или энергия Ферми электронов. Очевидно, что среднее число дырок определится как

$$1 - f(\varepsilon) = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon}{k_b T}\right) + 1 \right)^{-1}. \quad (10)$$

Тогда концентрация электронов и дырок определяется следующими выражениями:

$$n = 2 \int_{\varepsilon_c}^{\varepsilon_v} \rho_c(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad n = 2 \int_{\varepsilon_v}^{\varepsilon_c} \rho_p(\varepsilon) (1 - f(\varepsilon)) d\varepsilon, \quad (11)$$

где цифра 2 учитывает краткость вырождения состояний за счет спина электрона. Заметим, что для электронов и дырок среднее число частиц в квантовом состоянии совпадает с вероятностью заполнения этих состояний.

При условии, что $\varepsilon_c - \varepsilon_c \gg k_b T$ и $\varepsilon_v - \varepsilon_v \gg k_b T$, $\varepsilon_c - \varepsilon_F \gg k_b T$ и $\varepsilon_F - \varepsilon_v \gg k_b T$ в распределениях (9), (10) можно пренебречь единицей. Это означает, что электроны и дырки при этих условиях описываются квазиклассическим

распределением. Подставляя $f(\varepsilon) = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_b T}\right) \right)^{-1}$ и $1 - f(\varepsilon) = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon}{k_b T}\right) \right)^{-1}$ в

интегралы (11) и после введения новых переменных $\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{k_b T} = x$ и

$\frac{\varepsilon_v - \varepsilon}{k_b T} = y$ интегралы (11) вычисляются довольно просто. В результате получаем

$$n = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_e k_b T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_c}{k_b T}\right), \quad p = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_p k_b T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\varepsilon_v - \varepsilon_F}{k_b T}\right). \quad (12)$$

Для вычисления концентраций в последних выражениях не достаёт зависимости энергии Ферми от температуры.

Для собственных полупроводников $n=p$ (условие электронейтральности) и тогда

$$\varepsilon_F = \frac{\varepsilon_c - \varepsilon_v}{2} + \frac{3}{4} k_b T \ln\left(\frac{m_p}{m_e}\right); \quad (13)$$

$$n^2 = p^2 = np \text{ и тогда } n=p = \frac{1}{4} \left(\frac{2\sqrt{m_e m_p} k_b T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\Delta\varepsilon}{2k_b T}\right). \quad (14)$$

Как видно из последних формул, в собственных полупроводниках уровень Ферми лежит в середине запрещенной зоны при $T=0$ и с ростом температуры движется в сторону зоны с меньшей эффективной массой. Например, если $m_e < m_p$, плотность состояний в зоне проводимости меньше, чем в валентной зоне, так как $\rho \sim \sqrt{m}$. Для выполнения условия $m_e = p$ необходимо увеличить вероятность заполнения уровней электронами в зоне проводимости и уменьшить вероятность заполнения состояний дырками в валентной зоне. Эта ситуация реализуется при смещении уровня Ферми в сторону зоны проводимости, т.е. в сторону меньшей эффективной массы.

Более сложная ситуация в примесных полупроводниках. Однако и в них положение уровня Ферми находится из условия электронейтральности: $n + N_a^- = p + N_d^+$, где N_d^+ - концентрация ионизированной донорной примеси; $N_a^- = N_a - N_a^+$; N_a^+ - концентрация акцепторной примеси.

Рассмотрим, например, донорный полупроводник (n - типа). Для него $N_a = 0$. При абсолютном нуле уровень Ферми лежит между примесным уровнем и дном зоны проводимости. В этой области температур $p \ll n$ и $n \approx N_d^+ \approx N_d \exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon_A}{k_b T}\right)$. При дальнейшем росте температуры достигается такое состояние, когда $N_d^+ \approx N_d$ и увеличение концентрации электронов в зоне проводимости происходит за счет переходов электронов из валентной зоны. Естественно, что можно повысить температуру до такой величины, что будет выполняться условие $n \approx p$, т.е. полупроводник станет собственным.

5. Электропроводность полупроводников

Рассмотренные зависимости концентрации от температуры в первую очередь проявляет себя при исследовании электропроводности полупроводников. Электропроводность полупроводника определяется в общем случае двумя типами носителей заряда: $\sigma = e(n\mu_e + p\mu_p)$, где e - заряд электрона,

μ_e и μ_p – подвижности электронов и дырок, соответственно. (Заметим, что подвижность определяет дрейфовую скорость \vec{V} носителей заряда: $\vec{V}_e = \mu_e \vec{E}$, $\vec{V}_p = \mu_p \vec{E}$.) Таким образом, от температуры могут зависеть только концентрация

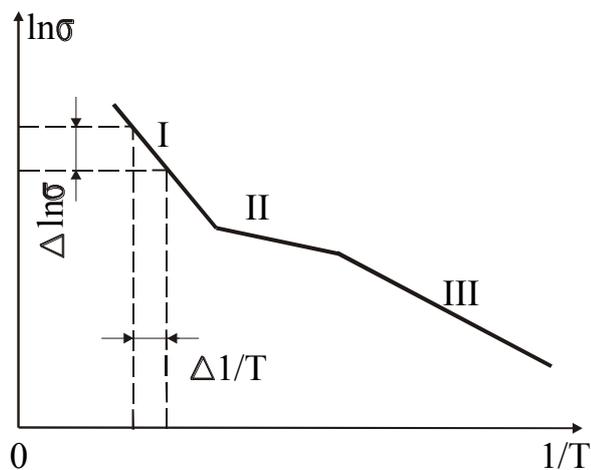


Рис.14

и подвижность. Очевидно, что подвижность тем выше, чем реже сталкиваются частицы, чем менее интенсивное рассеяние. В полупроводниках возможны следующие механизмы рассеяния: рассеяние на ионах и нейтральных атомах примеси; на дефектах кристаллической структуры и в основном на колебания решетки (фононы). Как показывают расчеты, зависимость подвижности от температуры можно представить себе как степенную функцию: $\mu \sim T^\alpha$, где α определяется видом рассеяния. Например, при рассеянии на акустических колебаниях решетки $\alpha = -3/2$. Естественно, что более сильная зависимость концентрации от температуры $\exp(\Delta\varepsilon/2k_b T)$ по сравнению с температурной зависимостью подвижности и определяет, прежде всего, зависимость проводимости от температуры. На рис.14 показана типичная зависимость логарифма электропроводности от обратной температуры. Линейные области соответствуют собственной проводимости I и примесной III. Область II – переходная область.

Для полупроводника в области I рис.14 наиболее эффективно рассеяние на фононах. Учитывая (14) $n=p \sim T^{3/2} \exp(-\Delta\varepsilon/2k_b T)$, получаем

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta\varepsilon/2k_b T), \quad (15)$$

где σ_0 не зависит от температуры.

Работа № 40

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ПОЛУПРОВОДНИКА

1. Цель работы

Исследовать зависимость электропроводности полупроводника от температуры и по ней определить ширину запрещенной зоны.

2. Методика эксперимента

В лабораторной работе для исследования берется примесный полупроводник с примесью одного сорта атомов. Нагреванием полупроводник

переводится в область собственной проводимости. Во введении было показано, что при относительно высоких температурах электропроводность полупроводника в области собственной проводимости $\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta\varepsilon/2k_b T)$.

Обычно экспериментально измеряются ток через образец, падение напряжения и температура. Поэтому удобнее пользоваться величиной сопротивления образца: $R = R_0 \exp(\Delta\varepsilon/2k_b T)$. Из последней формулы

$\ln R = \ln R_0 + \Delta\varepsilon/2k_b T$, и вычисляя производную по $\frac{1}{T}$, получаем

$$\frac{d \ln R}{d \left[\frac{1}{T} \right]} = \Delta\varepsilon/2k_b T,$$

откуда для ширины запрещенной зоны получим формулу

$$\Delta\varepsilon = 2k_b \frac{d \ln R}{d \left[\frac{1}{T} \right]}. \quad (1)$$

Формула (1) позволяет рассчитать ширину запрещенной зоны полупроводника из графика рис.14, вычисляя численное значение производной:

$$\frac{d \ln R}{d \left[\frac{1}{T} \right]} = \frac{\Delta \ln R}{\Delta \left[\frac{1}{T} \right]}.$$

4. Задание к работе

1. Собрать схему, приведенную в инструкции к установке.
2. Пользуясь инструкцией, включить установку.
3. Измерить падение напряжения на образце в зависимости от температуры.
4. Построить график.
5. На линейном участке графика определить величину производной $\frac{\Delta \ln R}{\Delta \left[\frac{1}{T} \right]}$ и, пользуясь формулой (1), рассчитать ширину запрещенной зоны.

5. Контрольные вопросы

1. Объяснить особенности закона дисперсии для электронов в кристалле.
2. Почему электроны полностью заполненной зоны не дают вклада в электрический ток?
3. Что такое электрический ток в зонной теории?
4. Что такое дырка в полупроводниках?
5. Что такое металлы, диэлектрики и полупроводники с точки зрения зонной теории?

6. Почему в полупроводниках электроны и дырки описываются “квазиклассическим распределением”, а не распределением Ферми?
7. Объяснить температурную зависимость энергии Ферми в собственных полупроводниках?
8. Какими факторами определяется электропроводность полупроводника?
9. Объяснить температурную зависимость электропроводности.
10. Вывести расчетную формулу (1) для определения ширины запрещенной зоны.

Рекомендуемая литература

1. Епифанов Г.И. Физика твердого тела. – М.: Высшая школа, 1977. – с. 67-88, 113-164.
2. Савельев И.В. Курс общей физики. – М.: Наука, 1979. – Т.3. – с. 173-204.

