

Третяк О.В. Ільченко В.В.

**ФІЗИЧНІ ОСНОВИ
НАПІВПРОВІДНИКОВОЇ
ЕЛЕКТРОНІКИ**

КИЇВ - 2010

АНОТАЦІЯ

"Фізичні основи напівпровідникової електроніки" Третьяк О.В., Ільченко В.В. -

Навчальний посібник написаний українською мовою присвячений фізичним основам області промисловості, яка зараз інтенсивно розвивається, а саме - електронній техніці. Матеріал, що викладений в навчальному посібнику, є фізичною базою для розуміння роботи сучасних приладів напівпровідникової електроніки. Особливу увагу автори звернули на аналіз фізичних процесів, що обумовлюють використання напівпровідникових матеріалів та напівпровідникових структур в приладах. Розглядаються основні фізичні моделі та аналізуються процеси, що визначають експлуатаційні параметри напівпровідникових приладів. Фактичний матеріал посібника може бути використаний, як довідковий, при проведенні наукових досліджень та виконанні лабораторних робіт. Наведена бібліографія, дозволяє поглибити знання в області конкретних застосувань та технологій виготовлення напівпровідникових приладів.

Для студентів радіофізичних, фізичних та електронних спеціальностей вищих навчальних закладів, що займаються проблемами фізики твердого тіла, фізики напівпровідників та напівпровідникової електроніки. Посібник може бути корисним бакалаврам, магістрам, аспірантам, науковим та інженерно-технічним працівникам.

Ілюстрацій 83, літературних джерел 45.

Зміст

Розділ 1. Елементи зонної теорії твердого тіла.

- 1.1. Енергетичний спектр електронів у твердому тілі. Рівняння Шредингера для кристала в загальному випадку.
- 1.2. Адіабатичне, одноелектронне наближення, сильно та слабо зв'язані електрони в кристалі.
- 1.3. Модель Кроніга-Пені. Основні висновки моделі.
- 1.4. Поняття ефективної маси електрона в кристалі.
- 1.5. Параметри та зонна структура найбільш поширених напівпровідників.
- 1.6. Запитання для самоконтролю та задачі.

Розділ 2. Зв'язок атомів в кристалах, дефекти та домішки в кристалах.

- 2.1. Хімічний зв'язок атомів в кристалах.
- 2.2. Класифікація дефектів кристалічної ґратки кристалу.
- 2.3. Мілкі, глибокі, донорні, акцепторні та амфотерні домішки.
- 2.4. Енергетичне положення легуючих домішок та глибоких рівнів в найбільш поширених напівпровідниках.
- 2.5. Акустичні та оптичні фонони.
- 2.6. Взаємодія електронів з коливаннями ґратки.
- 2.7. Запитання для самоконтролю та задачі.

Розділ 3. Рівноважна статистика електронів та дірок в напівпровідниках.

- 3.1. Концентрації електронів та дірок в зоні провідності та валентній зоні. Електронний та дірковий напівпровідники.
- 3.2. Залежність концентрації електронів та дірок від положення рівня Фермі в напівпровіднику.
- 3.3. Залежність концентрації вільних носіїв заряду від температури.
- 3.4. Компенсований та сильно легований напівпровідники.
- 3.5. Залежність питомого опору від положення рівня Фермі в забороненій зоні для найбільш поширених напівпровідників.
- 3.6. Запитання для самоконтролю та задачі.

Розділ 4. Статистика електронів та дірок в напівпровідниках при відсутності умов термодинамічної рівноваги. Рекомбінація нерівноважних носіїв заряду.

- 4.1. Нерівноважні стани, засоби їх утворення. Нерівноважна функція розподілу.
- 4.2. Час релаксації.
- 4.3. Механізми розсіювання носіїв заряду.
- 4.4. Розсіювання на фонах, іонізованих та нейтральних домішках.
- 4.5. Механізми рекомбінації в напівпровідниках.
- 4.6. Кінетика рекомбінації носіїв заряду. Переріз захоплення центрів рекомбінації.
- 4.7. Випромінювальна та невимінювальна рекомбінація.
- 4.8. Статистика рекомбінації Шоклі - Ріда.
- 4.9. Залежність часу життя носіїв заряду від положення рівня Фермі. Основні висновки моделі.
- 4.10. Спін-залежна рекомбінація.

4.11. Запитання для самоконтролю та задачі.

Розділ 5. Явища переносу в напівпровідниках.

- 5.1. Кінетичне рівняння Больцмана.
- 5.2. Електропровідність напівпровідників (невироджений та вироджений випадки).
- 5.3. Залежність електропровідності від температури.
- 5.4. Гальваномагнітні та термомагнітні явища. Слабке та сильне магнітне поле.
- 5.5. Теплопровідність. Термоелектричні явища.
- 5.6. Застосування явищ переносу в напівпровідниках.
- 5.7. Інтегральний датчик магнітного поля.
- 5.8. Запитання для самоконтролю та задачі.

Розділ 6. Явища в неоднорідних напівпровідниках.

- 6.1. Дифузія та дрейф нерівноважних основних носіїв заряду.
 - 6.1.1. Співвідношення Ейнштейна.
 - 6.1.2. Радіус екранування. Електрорушійна сила Дембера.
 - 6.1.3. Час релаксації Максвелла.
 - 6.1.4. Довжина дифузії нерівноважних основних носіїв заряду.
- 6.2. Дифузія та дрейф неосновних носіїв заряду.
- 6.3. Запитання для самоконтролю та задачі.

Розділ 7. Елементи фізики поверхні напівпровідників.

- 7.1. Поверхневі стани. Поверхневий потенціал.
- 7.2. Вплив поверхневого потенціалу на електропровідність.
- 7.3. Ефект поля.
- 7.4. Прилади на основі структури метал - діелектрик - напівпровідник (МДН).
 - 7.4.1. Транзистори на основі МДН-структур.
 - 7.4.2. Прилади з зарядовим зв'язком.
 - 7.4.3. Енергонезалежні елементи пам'яті. Прилади з плаваючим затвором та МНОН-транзистори.
 - 7.4.4. Іон селективні транзистори для створення сенсорів.
- 7.5. Поняття про квантування спектру носіїв заряду в каналі.
- 7.6. Запитання для самоконтролю та задачі.

Розділ 8. Контактні явища в напівпровідниках.

- 8.1. Контакт метал - метал, метал - напівпровідник.
- 8.2. Вплив зовнішнього електричного поля на висоту потенційного бар'єру.
- 8.3. Випростування на контакті метал - напівпровідник.
- 8.4. Омічні контакти.
- 8.5. Прилади на основі контактів метал - напівпровідник
 - 8.5.1. Діоди Шоткі в сучасній інтегральній електроніці.
 - 8.5.2. Інші застосування (надвисокочастотні, імпульсні, силові діоди з бар'єром Шоткі).
- 8.6. Електронно-дірковий перехід.
 - 8.6.1. Рівноважний стан p-n переходу. Товщина шару об'ємного заряду.

8.6.2. Залежність шару об'ємного від зовнішньої різниці потенціалів. Інжекція та екстракція. Випростування на р-n переході.

8.7. Прилади на основі р-n переходів.

8.7.1. Силові діоди, імпульсні та надвисокочастотні діоди.

8.7.2. Елементи оптоелектронної техніки: джерела світла, фотодетектори, сонячні елементи.

8.7.3. Тунельний діод.

8.8. Транзистор, фізика роботи.

8.9. Гетероперехід.

8.9.1. Напівпровідникові лазери.

8.9.2. Польові транзистори з високою рухливістю носіїв заряду.

8.9.3. Поняття про квантові ями, квантові точки та структури наноелектроніки.

8.10. Запитання для самоконтролю та задачі.

Література

Розділ 1. Елементи зонної теорії твердого тіла.

1.1. Енергетичний спектр електронів у твердому тілі. Рівняння Шредингера для кристала в загальному випадку.

Відомо, що енергетичний спектр електронів в ізолюваному атомі - дискретний. Типову енергетичну діаграму для цього випадку можна зобразити слідуючим чином Рис.1.1.

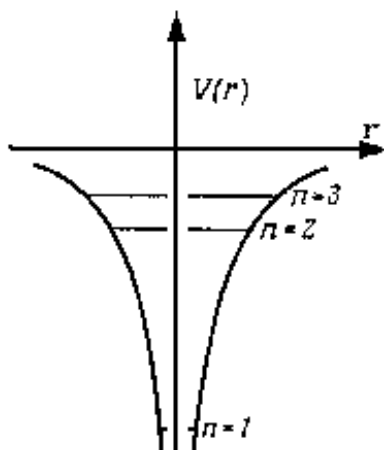


Рис.1.1. Енергетичний спектр електронів в ізолюваному атомі.

Із таких атомів можна побудувати тверде тіло. Для цього будемо зменшувати відстань між окремими атомами аж до відстані, яка дорівнює сталій ґратки. На Рис. 1.2 зображений результуючий хід потенціалу ланцюга N -атомів. Електрони та ядра атомів тепер створюють загальну систему частинок. Відповідно до принципу Паулі, якому підкоряється згадана система частинок, на одному енергетичному рівні може бути лише один електрон, або два з протилежними спінами. Це означає, що кожен енергетичний рівень електрона ізолюваного атома повинен перетворитися в енергетичну зону дозволених значень енергії для електронів у твердому тілі. Експериментальні спектри поглинання та випромінювання твердого тіла підтверджують такий висновок. Спектри поглинання та випромінювання мають неперервний характер у відповідних смугах енергії. Цих смуг стільки, скільки енергетичних рівнів для електронів у ізолюваному атомі, з яких складається тверде тіло. Отже з якісних міркувань ясно, що енергетичний спектр електронів у твердому тілі носить зонний характер, а саме, існують зони дозволених та заборонених значень енергії, як це зображено на Рис. 1.2.

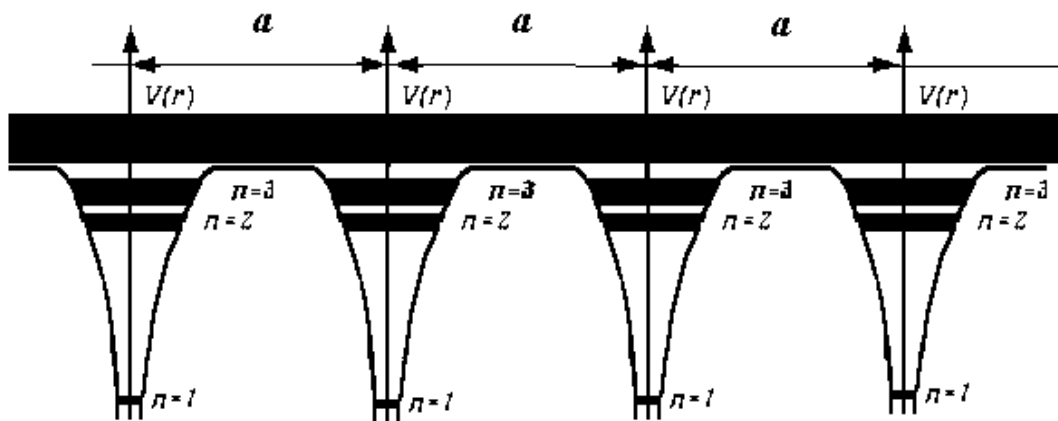


Рис.1.2. Ланцюг атомів, що утворили одновимірну кристалічну ґратку зі сталою ґратки a .

Подібно до того, як в атомній фізиці основною задачею є опис станів електронів в атомі та обчислення дозволених рівнів енергії, яку можуть мати електрони в атомі, однією з головних задач фізики твердого тіла є визначення енергетичного спектру та стаціонарних станів електронів в кристалі. Оскільки тверде тіло є багатеелектронною системою, то в загальному випадку така задача технічно не може бути точно розв'язана, але окремі важливі результати можна отримати при певних наближеннях та низки спрощень.

Дійсно, як відомо з квантової механіки, розв'язок задачі про стаціонарні стани та енергетичний спектр квантової системи може бути отриманий за рахунок розв'язання рівняння Шредінгера.

$$H\Psi = E\Psi \quad (1.1)$$

Де H - гамільтоніан системи, а Ψ - хвильова функція всієї системи частинок. Для кристалу Ψ є функцією від координат всіх електронів r_i та атомних ядер R_α і таким чином $\Psi = \Psi(r_i, R_\alpha)$, а гамільтоніан має вигляд:

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \sum_\alpha \frac{1}{2M_\alpha} p_\alpha^2 + U(r_i, R_\alpha) \quad (1.2)$$

p_i - оператор імпульсу i - електрона; p_α - оператор імпульсу α - ядра атома; $U(r_i, R_\alpha)$ - потенціальна енергія взаємодії всіх електронів з усіма ядрами. Далі будемо вважати, що маси електронів і маси ядер стали та не відрізняються між собою так, що $m_1 = m_2 = \dots m_i = m$, $M_1 = M_2 = \dots M_\alpha = M$.

Враховуючи, що $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $p^2 = -\hbar^2 \Delta$, рівняння Шредінгера для електронів та ядер твердого тіла можна переписати у вигляді:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i \Psi - \frac{\hbar^2}{2M} \sum_\alpha \Delta_\alpha \Psi + U(r_i, R_\alpha) \Psi = E\Psi \quad (1.3)$$

Точний розв'язок цього рівняння дав би повну інформацію щодо енергетичного спектру електронів та ядер в кристалі. Але, як ми зазначали вище, зробити це неможливо бо задача безнадійно складна математично: по-перше, це пов'язано з велетенською кількістю частинок у системі; по-друге, існують принципові складності з записом функції потенціальної енергії взаємодії.

1.2. Адіабатичне, одноелектронне наближення, сильно та слабо зв'язані електрони в кристалі.

Для знаходження розв'язку ми повинні проводити певні спрощення. Фізичний зміст цих спрощень полягає в тому, що ми виключаємо з розгляду ті чи інші взаємодії, або в заміні реальних взаємодій якимись модельними. При такій умові ясно, що розв'язок, який ми отримаємо буде тією, чи іншою мірою, відрізнятися від точного розв'язку задачі. Це в свою чергу означає, що певні результати експериментальних досліджень не будуть вписуватись в ту теоретично розраховану ситуацію, яку ми будемо мати вводячи певні спрощення.

Перший тип спрощення - це розподіл частинок на легкі (електрони) та важкі (ядра), оскільки, як видно, з рівняння (1.3) параметром задачі є маси електронів і ядер. Можна припустити, що в найбільш ймовірних станах, тобто в станах з мінімальною вільною енергією, кінетична енергія всіх частинок (в тому числі і з різними масами) одного порядку величини. Це означає, що швидкість електронів приблизно на два порядки більше, ніж швидкість ядер (в наслідок меншої маси електронів). Таке припущення дозволяє вважати, що електрони рухаються в потенціальному полі ядер, які мають фіксовані координати тобто швидкість ядер $V_\alpha = 0$. Таке припущення означає, що ми не враховуємо обмін енергією між підсистемами. Це наближення називається адіабатичним. При виключенні, так званої електрон-фононої взаємодії, безумовно ми автоматично виключаємо всі ефекти, які пов'язані, або обумовлені такою взаємодією (наприклад, полярони, надпровідність).

В умовах нашого наближення можна вважати, що електрони рухаються в розподіленому (ефективному) полі ядер і рух цих електронів та ядер є взаємонезалежним. Ймовірність визначеної конфігурації електронів та ядер дорівнює добутку відповідних ймовірностей. Математично, як відомо, це означає, що хвильову функцію системи таких частинок можна записати у вигляді добутку електронної та ядерної хвильових функцій.

$$\Psi(r_i, R_\alpha) = \Psi_n(r_i) \cdot \Psi_\alpha(R_\alpha) \quad (1.4)$$

Де $\Psi_n(r_i)$ є електронна хвильова функція: $\Psi_\alpha(R_\alpha)$ - ядерна хвильова функція.

Тоді система рівнянь (1.3) розпадається на дві незалежні системи рівнянь: для електронів та ядер. Система рівнянь для електронів має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i \Psi_n - \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e^2}{r_{ij}} \Psi_n + U^*(r_i, R_\alpha) \Psi_n = E_n \Psi_n \quad (1.5)$$

$U^*(r_i, R_\alpha)$ - ефективний потенціал ядер, в якому знаходяться електрони системи.

Відповідно до нашої мети, далі будемо цікавитися виключно електронною підсистемою. Незважаючи на проведені спрощення рівняння (1.5) не може бути розв'язане в загальному вигляді. Ми, як і раніше, маємо справу з задачею багатьох частинок. Одним з найбільш поширених методів розв'язку багатоелектронної задачі для кристала є метод Хартрі-Фока, який дозволяє звести багатоелектронну задачу до одноелектронної. Суть цього методу полягає в тому, що енергія взаємодії електронів зі всіма іншими електронами та ядрами замінюється на взаємодію окремо взятого електрона з ефективним усередненим полем, яке створюють всі інші електрони та ядра. Тоді рух всіх електронів стає взаємозалежним і, як і в попередньому випадку, хвильову функцію всіх електронів можна представити, як добуток хвильових функцій кожного електрона. При цьому рівняння Шредінгера (1.5) розпадається на N незалежних одноелектронних рівнянь.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_i - U^{**}(r_i) \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (1.6)$$

$U^{**}(r_i)$ - ефективний потенціал ядер і всіх електронів, в якому знаходиться окремий електрон.

Як і раніше, зроблені припущення означають неможливість розгляду певних фізичних явищ. На цей раз ми знехтували особливостями взаємодії в колективі електронів. Це значить, що ми не можемо, наприклад, в одноелектронному наближенні отримати деякі ефекти, що пов'язані насамперед зі спіновими взаємодіями, які мають, перш за все місце у магнітних твердих тілах. Але і після проведених спрощень в загальному випадку задача не може бути розв'язана точно, бо невідомий точний вираз для $U^{**}(r_i)$. Тому потрібні подальші спрощення. Як видно з Рис.1.2 в ланцюгу атомів, що створюють кристалічну ґратку є області де потенціальна енергія змінюється сильно і є області де вона майже постійна. В першому випадку ці області знаходяться поблизу атомних ядер, на їх долю в реальних кристалах припадає порівняно невеликий об'єм (10-15 %). Зовнішнє електричне поле прикладене до твердого тіла і зовнішнє поле сусідніх атомів не може суттєво змінити цю потенціальну енергію тому ці області можна розглядати майже так само, як і в ізолюваному атомі. Області де потенціал змінюється слабо розташовані між ядрами. У відповідності з цими міркуваннями при виборі виду потенціалу $U^{**}(r_i)$ для рівняння Шредінгера зручно кристал поділити на дві частини.

По-перше, область зі слабким полем, де $U(r) = U_0 + \delta U(r)$ при тому, що $U_0 \gg \delta U(r)$ де $U_0 = \text{const}$ і є потенціальна енергія електрона, який ми розглядаємо в полі всіх ядер, які заекрановані полем всіх інших електронів, крім того, що ми розглядаємо. $\delta U(r)$ - доданок, який враховує неповну локальну компенсацію поля ядер електронами. Цей доданок періодичний з періодом сталої ґратки.

Наближення, де потенціальну енергію $U(r)$ в рівнянні Шредінгера можна записати в такому вигляді, називається наближенням слабо зв'язаних електронів.

По-друге, область з сильним полем, де $U(r) = U_a(r) + \delta U(r)$ де $U_a(r) \gg \delta U(r)$. $U_a(r)$ - потенціальна енергія електрона в ізолюваному атомі, періодична з періодом сталої кристалічної ґратки. $\delta U(r)$ - вплив на цю енергію сусідніх вузлів кристалічної ґратки. Таке наближення називається наближенням сильно зв'язаних електронів.

Ясно, що для опису електронів, які знаходяться поблизу ядер, логічно скористатися наближенням сильно зв'язаних електронів. Електронні хмари зовнішніх валентних електронів, навпаки, розмазані по об'єму всього кристалу майже з рівномірною густиною. В більшій частині кристалу електричне поле є слабким у порівнянні з полем біля іонного остову, тому для опису таких електронів розумно скористатися наближенням майже вільних електронів, або слабо зв'язаних електронів.

В обох випадках, як показав Блох, розв'язок рівняння Шредінгера може бути записаний у вигляді:

$$\Psi(r) = u(r) \cdot e^{i \cdot k \cdot r} \quad (1.7)$$

де $u(r)$ - просторово періодична неперервна разом із своєю похідною функція з періодом сталої ґратки. Другий співмножник у виразі (1.7) є плоска електронна хвиля, $\Psi(r)$ - називається функцією Блоха.

1.3. Модель Кроніґа-Пені. Основні висновки моделі.

Проведені спрощення задачі знаходження енергетичного спектра електронів у твердому тілі дозволяють розв'язати її аналітично до кінця в нескладних випадках. Як приклад такого підходу для одноелектронного наближення слабо зв'язаних електронів можна розглянути модель, яку в свій час запропонували Кроніґ і Пені. В цій моделі рух валентних електронів в твердому тілі представляється, як рух електронів в лінійному ланцюгу прямокутних потенціальних бар'єрів однакової висоти U_0 та ширини b , як це зображено на Рис. 1.3. Відповідно до малюнку енергія електрона E менша за висоту бар'єра U_0 , період ґратки $c = a + b$.

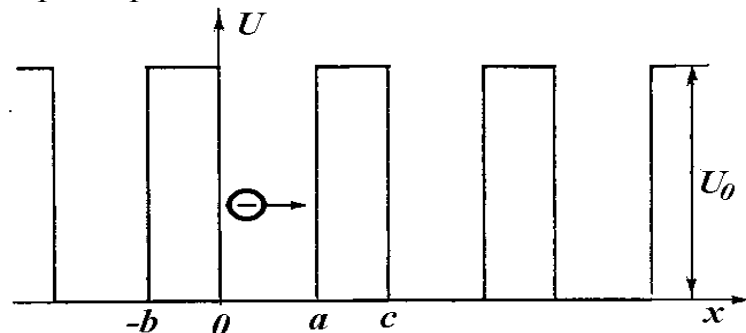


Рис.1.3. Залежність потенціалу від відстані у моделі Кроніґа-Пені.

Стаціонарне рівняння Шредінгера для електрона в цьому випадку матиме вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (1.8)$$

$$\text{або} \quad \Delta\Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\Psi(x) = 0$$

Запишемо розв'язки рівняння (1.8) для двох областей: "1" де $0 < x < a$ та "2", де $-b < x < 0$.

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \quad \text{при } 0 < x < a \\ \Psi_2(x) &= Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \quad \text{при } -b < x < 0 \end{aligned} \quad (1.9)$$

де α та β корені відповідних характеристичних рівнянь при $U(x)=0$ ($0 < x < a$) та $U(x)=U_0$, ($-b < x < 0$): $\alpha = \sqrt{2mE / \hbar^2}$, $\beta = \sqrt{2m(U_0 - E) / \hbar^2}$. A , B , C та D сталі коефіцієнти.

З іншого боку, використовуючи (1.7) маємо:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= u_1(x) \cdot e^{i \cdot k \cdot x} \\ \Psi_2(x) &= u_2(x) \cdot e^{i \cdot k \cdot x} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Порівнюючи (1.9) та (1.10) можна записати:

$$\begin{aligned} u_1(x) &= (Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x}) \\ u_2(x) &= (Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x}) \end{aligned} \quad (1.11)$$

Тепер, використовуючи умови неперервності та періодичності функцій $u_1(x)$ та $u_2(x)$ та їх перших похідних маємо:

$$u_1(0) = u_2(0) \quad A+B=C+D \quad (1.12)$$

$$u_1(a) = u_2(-b) \quad A \cdot e^{i(\alpha-k)a} + B \cdot e^{-i(\alpha+k)a} = Ce^{(\beta-ik)b} + De^{(\beta+ik)b}$$

$$\left. \frac{du_1(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{du_2(x)}{dx} \right|_{x=0} \quad \begin{aligned} i(\alpha-k)A - i(\alpha+k)B &= \\ (\beta-ik)C - (\beta+ik)D \end{aligned}$$

$$\left. \frac{du_1(x)}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{du_2(x)}{dx} \right|_{x=-b} \quad \begin{aligned} i(\alpha-k)Ae^{i(\alpha-k)a} - i(\alpha+k)Be^{-i(\alpha+k)a} &= \\ (\beta-ik)Ce^{(\beta-ik)b} - (\beta+ik)De^{(\beta+ik)b} \end{aligned}$$

Система рівнянь (1.12) має розв'язок відмінний від нуля, коли її детермінант дорівнює нулеві. Розкриваючи цей детермінант треба скористатися відомими формулами Ейлера ($e^{iy} = \cos y + i \sin y$ та $e^{-iy} = \cos y - i \sin y$). В результаті

$$\text{отримуємо: } \frac{e^{\beta \cdot b} + e^{\beta \cdot b}}{2} \cos(\alpha \cdot a) + \frac{(\beta^2 - \alpha^2)(e^{\beta \cdot b} - e^{-\beta \cdot b})}{4\alpha\beta} \sin(\alpha \cdot a) = \cos(ka) \quad (1.13)$$

Використовуючи означення гіперболічного синуса і косинуса маємо:

$$\frac{(\beta^2 - \alpha^2)}{2\alpha\beta} sh(\beta \cdot b) \sin(\alpha \cdot a) + ch(\beta \cdot b) \cos(\alpha \cdot a) = \cos(ka) \quad (1.14)$$

Для якісного аналізу трансцендентного рівняння (1.14) проведемо подальші спрощення. Будемо вважати, що ширина бар'єру між потенціальними ямами прямує до 0 (тобто $b \rightarrow 0$), в той же час будемо збільшувати його висоту таким чином ($U_0 \rightarrow \infty$), щоб добуток (bU_0) залишався сталою величиною, яку позначимо $\frac{ma}{\hbar^2}(b \cdot U_0) = P = \text{const}$. Тепер величина P характеризує прозорість бар'єра між потенціальними ямами. При граничному переході $c \rightarrow a$ будемо мати: $\beta \rightarrow \infty$, $\frac{\alpha}{\beta} \rightarrow 0$, $\beta b \rightarrow 0$ (як $b^{1/2}$), це значить, що $ch(\beta \cdot b) \rightarrow 1$, $sh(\beta \cdot b) \rightarrow \beta \cdot b$ тоді $\frac{(\beta^2 - \alpha^2)}{2\alpha\beta} ch(\beta \cdot b) \rightarrow \frac{\beta}{2\alpha} \beta \cdot b \rightarrow \frac{(\beta \cdot b)^{1/2}}{2\alpha \cdot b} \rightarrow \frac{P}{\alpha \cdot a}$. В такому випадку рівняння (1.14) остаточно набуває вигляду:

$$P \frac{\sin(\alpha \cdot a)}{\alpha \cdot a} + \cos(\alpha \cdot a) = \cos(ka) \quad (1.15)$$

Тепер проаналізуємо розв'язок рівняння (1.15). Це трансцендентне рівняння, розв'язок якого найпростіше отримати у графічному вигляді.

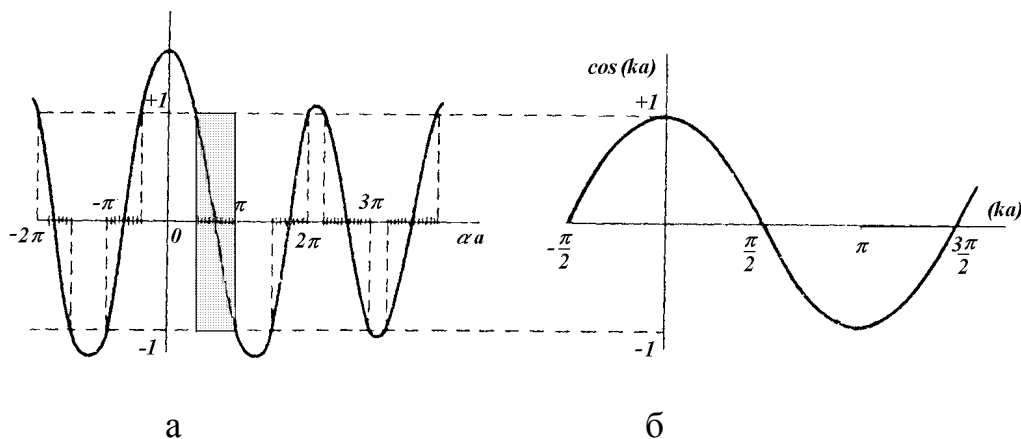


Рис. 1.4(а,б). Графічний розв'язок рівняння (1.15). На графіках представлені окремо побудовані залежності лівої (а) і правої (б) частин цього рівняння.

На лівому графіку Рис.1.4 (а) побудована залежність $P \frac{\sin(\alpha \cdot a)}{\alpha \cdot a} + \cos(\alpha \cdot a)$ від $\alpha \cdot a$. Ясно, що ліва частина рівняння (1.15) не може бути більше від 1 і менше ніж -1, у відповідності до правої частини виразу (1.15), Рис.1.4(б).

З графіку видно, що розв'язок існує тільки при певних значеннях $\alpha \cdot a$, тобто електрон може мати тільки певні значення енергії - це є зони дозволених значень енергії. Між ними лежать зони заборонених значень енергії. Таким чином ми отримали, що енергетичний спектр електронів в кристалі має зонний характер. З малюнку видно, що з ростом E ширина дозволених зон збільшується, а заборонених, навпаки. При $P \rightarrow \infty$ дозволених зон звужуються і перетворюються в дискретні стани, як в ізолюваному атомі. При зменшенні

цього параметру, стан електронів наближається до стану вільного електрону, тобто $E \rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Можна побудувати графік залежності $E=E(k)$ згідно з рівнянням (1.15).

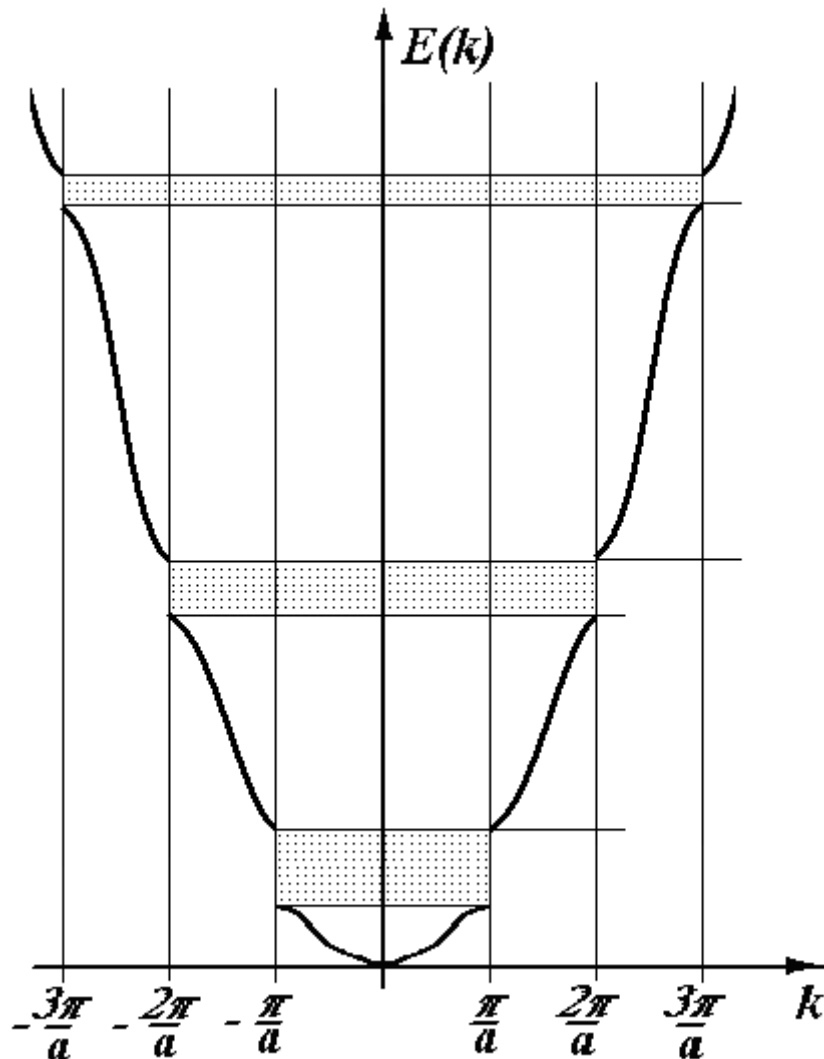


Рис. 1.5. Закон дисперсії $E(k)$ з врахуванням наявності дозволених і заборонених зон у твердому тілі.

Як бачимо $E(k)$ має неперервну залежність на відрізку $2\pi/a$ і в точках $ka = \pi n$ ($n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$) має розрив. Якщо вважати, що $k = \frac{\pi}{a}n$ з одного боку, а з іншого $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, де λ є довжина хвилі електрона, що рухається, то ми маємо відоме співвідношення Вульфа-Брега ($n\lambda = 2a$), яке характеризує умову відбиття хвилі від площини ґратки для випадку коли кут падіння дорівнює $\pi/2$. Тобто, розрив в енергетичному спектрі електронів в кристалі відбувається для електронних хвиль з енергією для яких виконується умова повного внутрішнього відбиття. Можна показати, що на межі зон похідна $\frac{dE}{dk} = 0$, а

енергія $E(k)$ поблизу межі зон квадратично залежить від k ($E = E_0 + Ak^2$), тобто на межі зон має місце екстремум.

Області, де $E(k)$ змінюється неперервно називаються зонами Брилюєна. Згідно з цим перша зона Брилюєна буде в межах $-\frac{\pi}{a}$ до $\frac{\pi}{a}$; друга $-\frac{2\pi}{a}$ до $-\frac{\pi}{a}$ та від $\frac{\pi}{a}$ до $\frac{2\pi}{a}$ і так далі. Оскільки всі зони мають одну і ту ж протяжність та періодичність $\frac{2\pi}{a}$, то їх всі можна зобразити в одному інтервалі ($-\frac{\pi}{a}$ до $\frac{\pi}{a}$), така зона називається зведеною.

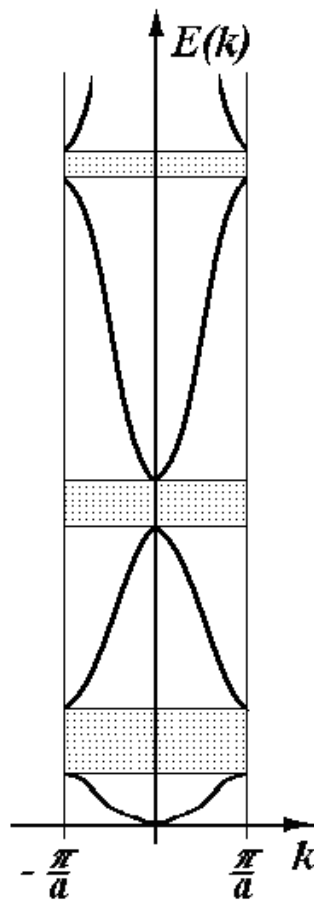


Рис. 1. 6. Зведена зона Брилюєна.

Поняття зон Брилюєна розповсюджується на тривимірний випадок. В кожному напрямку свій період кристалічної ґратки та своя заборонена зона. Оскільки енергія залежить від імпульсу, а імпульс в свою чергу визначається напрямком руху електрона у кристалічній ґратці, то залежність $E(k)$, а отже величина і характерні точки існування заборонених зон будуть різні у різних напрямках імпульсного простору. Тільки у випадку, коли області заборонених енергій накладаються одна на одну при різних значення імпульсу, буде мати місце абсолютна заборонена зона в кристалі.

В напівпровідниковій електроніці розглядають, як правило, поведінку тільки валентних електронів. Із всіх дозволених зон для розгляду залишають

тільки дві найвищих, формування яких здійснюється саме валентними електронами. Якщо при $T=0$, ширина зони (з двох які ми розглядаємо) заповнена електронами повністю, а слідуюча за нею незаповнена, то таке тверде тіло буде або напівпровідником, або діелектриком. Нижня зона називається валентною зоною. Верхня зона - зоною провідності. Зона між валентною зоною та зоною провідності є забороненою зоною.

При $T=0$ і $\sigma=0$, при умові термодинамічної рівноваги, якщо внаслідок будь-якої причини, чи зростання температури і термічного збудження, або за рахунок поглинання кванту світла в зоні провідності з'явиться електрон і при цьому в кристалі існуватиме електричне поле, то ясно, що по кристалу потече струм. У випадку, коли валентна зона і зона провідності перетинаються, або зона провідності заповнена при $T=0$ кристал має властивості металу. Коли ширина забороненої зони велика по відношенню до термічного збудження носіїв заряду із валентної зони в зону провідності, - кристал є діелектриком.

Ми багато уваги приділили моделі Кроніга-Пені тому, що основні висновки моделі є принциповими та залишаються справедливими і при інших припущеннях стосовно форми бар'єру і так далі.

Ось ці висновки:

- 1) Енергетичний спектр електронів в кристалі носить зонний характер.
- 2) Розриви залежності $E = E(k)$ мають місце при $k = \frac{\pi}{a} n$.
- 3) З ростом енергії ширина дозволених зон зростає, а заборонених зменшується.
- 4) Області $E = E(k)$ де $E \sim k^2$ знаходяться на межі зон, де є екстремум.

1.4. Поняття ефективної маси електрона в кристалі.

Будемо розглядати рух електронів в кристалі під дією зовнішнього електричного поля E . Поле діє на електрон з силою $F = -eE$. Якщо електрон вільний, тобто на нього не діють інші сили і сила електричного поля буде єдиною силою. На електрон, що рухається в кристалі, крім цієї сили на нього діє ще періодичне поле кристалічної ґратки. Тому рух електрона стає складним, бо він відбувається під дією сумарних сил зовнішнього сталого поля і поля кристалічної ґратки, що змінюються від точки до точки. Як описати його рух в такому випадку?

Один з способів описання руху електрона в такому полі полягає в наступному. Будемо розглядати рух електрона, як розповсюдження електронної хвилі. Швидкість руху електрона, як хвилі, в кристалі дорівнює груповій швидкості розповсюдження цієї хвилі. Для вільного електрона, або електронної хвилі, це є: $V_{\text{гп}} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$. За час dt зовнішня сила F здійснює роботу

$dE = V_{\text{гп}} \cdot dt \cdot F = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \cdot dt \cdot F$. Видно, що $F = \hbar \cdot \frac{\partial k}{\partial t}$, а прискорення електрона під дією зовнішньої сили в цьому випадку буде дорівнювати:

$$a = \frac{dV_{\text{гп}}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \cdot F.$$

Це означає, що коефіцієнт пропорційності між

силою і прискоренням, що згідно з другим законом Ньютона є маса, дорівнює величині:

$$m^* = \hbar^2 \cdot \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1} \quad (1.16)$$

Електрон, який рухається в кристалі має масу m^* , є вільним і описувати його рух можна, як рух вільного електрона з масою m^* у відповідності з класичними законами. Треба підкреслити важливу рису такого введення поняття ефективної маси m^* . Ми не використовували а ні гравітаційних, а ні інерційних властивостей електрона і введена таким чином ефективна маса є просто зручний засіб опису складної поведінки руху електрона в кристалі. Тому нас не повинен дивувати той факт, що ми можемо отримати m^* будь-якої величини ($m^* > m_0$) та знаку ($m^* < 0$). Ми можемо перевірити наші міркування щодо введення ефективної маси, наприклад, для ситуації вільного електрона.

Тобто для випадку, коли закон дисперсії має вигляд: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$. Підставляючи

наведений вище вираз для $E = E(k)$ у вираз (1.16), ми отримуємо що $m^* = m_0$.

Для електрона в кристалі закон дисперсії значно складніший. При певних значеннях k електронна хвиля розповсюджується по кристалу, а при певних, наприклад $k = \frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}$, руху взагалі немає, тобто має місце повне внутрішнє відбиття. Проаналізуємо цю ситуацію докладніше. Розглянемо Рис. 1.7(а,б,в).

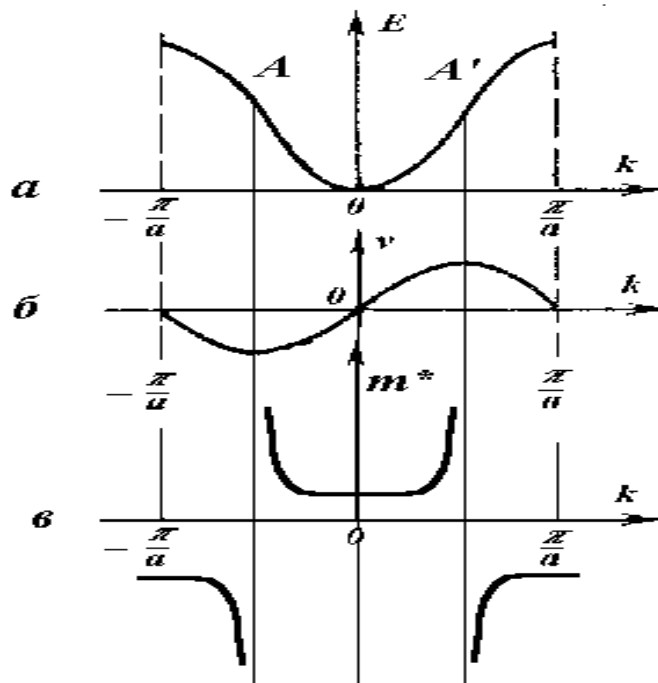


Рис. 1.7(а,б,в). Залежність енергії (а), швидкості електрона (б) та ефективної маси (в) електрона від хвильового вектора в зоні Брилюена.

На ньому зображена зона Брилюена рис.1.7(а), тобто залежність $E(k)$ в межах $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$. В області де $E \sim k^2$, при малих значеннях k , $V \sim k$, і таким чином, $m^* = \text{const}$ і >0 . В точці A (або A') обов'язково буде ситуація, коли $\frac{d^2 E}{dk^2} = 0$, бо в цій точці змінюється похідна. Це значить, що $\frac{dE}{dk}$ має максимум. Це зображено на Рис.1.7(б). При подальшому збільшенні енергії швидкість електрона зменшується при зростанні енергії. Це значить, що ми маємо від'ємне прискорення, тобто $a = -\frac{F}{m^*}$, що відповідає у рамках нашого формалізму тому факту, що $m^* < 0$. (Дивися Рис.1.7(в)). Дійсно, оскільки $F = -eE$, то ситуація, яку ми отримали має подвійний зміст. Або ефективна маса стала від'ємною, або заряд носія, що рухається у зовнішньому полі, став позитивним. Як показують експерименти, про які ми будемо говорити в майбутньому, в цьому випадку знак носія відповідає позитивному. Цей позитивний заряд, що рухається біля верху валентної зони отримав назву “дірка”.

Таким чином, ми бачимо, що є два варіанти руху електрона в зоні Брилюена: або дозволена зона майже порожня (зона провідності) і в ній рухаються звичайні електрони, або майже зовсім заповнена (валентна) зона і є вільні місця тільки біля стелі і в ній рухаються дірки. Так, як і раніше, коли при $T = 0$ у валентній зоні всі місця зайняті, то це є діелектрик, або напівпровідник. При $T > 0$ в наслідок термічної активації у зоні провідності з'являються вільні електрони, а у валентній зоні дірки. Така провідність ($n = p$) називається власною. Якщо ж при $T = 0$, ми маємо не повністю заповнену зону (лише до точки A , Рис.1.7(а)), то ми маємо метал.

Ми розглянули одновимірний випадок. При такому розгляді m^* є скаляр. В тривимірному випадку необхідно рівняння для прискорення у зовнішньому полі розглядати, як векторне і тоді отримаємо компоненти вектора прискорення по x, y, z осям у вигляді:

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \cdot F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} \cdot F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \cdot F_z \right] \\ a_y &= \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} \cdot F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \cdot F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \cdot F_z \right] \\ a_z &= \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} \cdot F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} \cdot F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \cdot F_z \right] \end{aligned} \quad (1.17)$$

Сукупність величин $\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{1}{m_{i,j}}$, які пов'язують вектори \vec{a} та \vec{F} є

тензором другого порядку і по аналогії з виразом для одновимірного випадку називається тензором зворотної ефективної маси. Таким чином в тривимірному випадку зворотна ефективна маса є:

$$\left\| \frac{1}{m_{i,j}} \right\| = \frac{1}{\hbar^2} \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{vmatrix} \quad (1.18)$$

Скорочено цей вираз можна записати у вигляді:

$$\left\| \frac{1}{m_{i,j}} \right\| = \begin{vmatrix} m_{xx}^{-1} & m_{xy}^{-1} & m_{xz}^{-1} \\ m_{yx}^{-1} & m_{yy}^{-1} & m_{yz}^{-1} \\ m_{zx}^{-1} & m_{zy}^{-1} & m_{zz}^{-1} \end{vmatrix} \quad (1.19)$$

Це тензор симетричний відносно головної діагоналі тобто $m_{i,j}^{-1} = m_{j,i}^{-1}$, тому що $\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial k_j \partial k_i}$. За рахунок вибору відповідної системи координат, можна привести симетричний тензор до діагонального вигляду, коли відрізняються від 0 тільки члени на головній діагоналі.

$$\left\| \frac{1}{m_{i,j}} \right\| = \frac{1}{\hbar^2} \begin{vmatrix} m_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_2^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_3^{-1} \end{vmatrix} \quad (1.20)$$

Де $m_1^{-1}, m_2^{-1}, m_3^{-1}$ зворотні ефективні маси у напрямках x, y, z .

Ми знаємо, що коли маса не залежить від напрямку, то поверхні рівної енергії у k - просторі мають форму сфери з радіусом k_0 . Подивимося на ситуацію, яка відповідає випадку, що ми розглянули вище. Розглянемо вираз для енергії електрона в малій області поблизу k_0 . Розкладемо $E = E(k)$ в ряд Тейлора і обмежимося першими членами розкладу:

$$E(k) = E(k_0) + \sum_i \left(\frac{\partial E}{\partial k_i} \right)_{k_0} (k_i - k_{i0}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{k_0} (k_i - k_{i0})(k_j - k_{j0}) \right] \quad (1.21)$$

Тут i, j незалежно пробігають значення x, y, z . Якщо k_0 знаходиться в точці екстремуму, то $\frac{\partial E}{\partial k} = 0$, тоді порівнюючи $\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$ з відповідним виразом для ефективних мас можна записати:

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j} \left[\frac{1}{m_{i,j}} (k_i - k_{i0})(k_j - k_{j0}) \right] \quad (1.22)$$

Враховуючи те, що тензор зворотної ефективної маси можна привести до діагонального виду, маємо:

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_1} (k_x - k_{x0})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2} (k_y - k_{y0})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_3} (k_z - k_{z0})^2 \quad (1.23)$$

З цього рівняння видно, що поверхні рівної енергії в k просторі є $[E(k) - E(k_0)] = const$ і являють собою еліпсоїди. Якщо симетрія кристалу є така,

що дві осі фізично еквівалентні (наприклад x та y), то відповідні компоненти тензора оберненої ефективної маси однакові, тобто

$$m_1^{-1} = m_2^{-1} = m_{\perp}^{-1} \text{ тоді: } E(k) - E(k_0) = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{x0})^2 + (k_y - k_{y0})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{z0})^2 \quad (1.24)$$

Ця поверхня є поверхнею еліпсоїда обертання. Оскільки саме така ситуація найчастіше має місце на практиці, відповідні ефективні маси отримали спеціальну назву m_{\perp} - поперечна ефективна маса; m_{\parallel} - повздовжня ефективна маса. Лише у випадку, коли $m_1^{-1} = m_2^{-1} = m_3^{-1}$ ми матимемо сферу, що характеризує поверхні рівної енергії у k -просторі.

Для прикладу на Рис.1.8.(а,б) наведені форми поверхонь сталих енергій в зонах провідностей германію та кремнію.

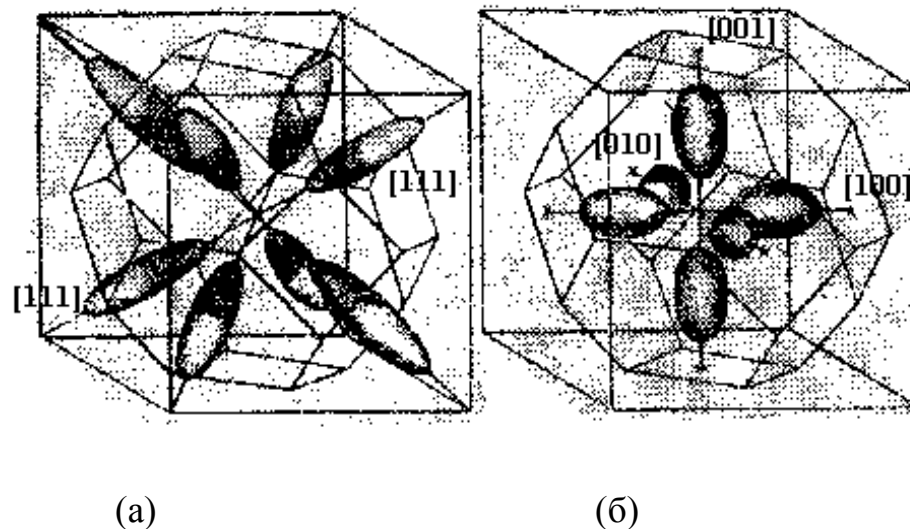


Рис.1.8.(а,б). Форми поверхонь сталих енергій в зонах провідностей германію та кремнію.

Як видно з малюнку, дійсно, ці поверхні мають форму еліпсоїдів.

1.5. Параметри та зонна структура найбільш поширених напівпровідників.

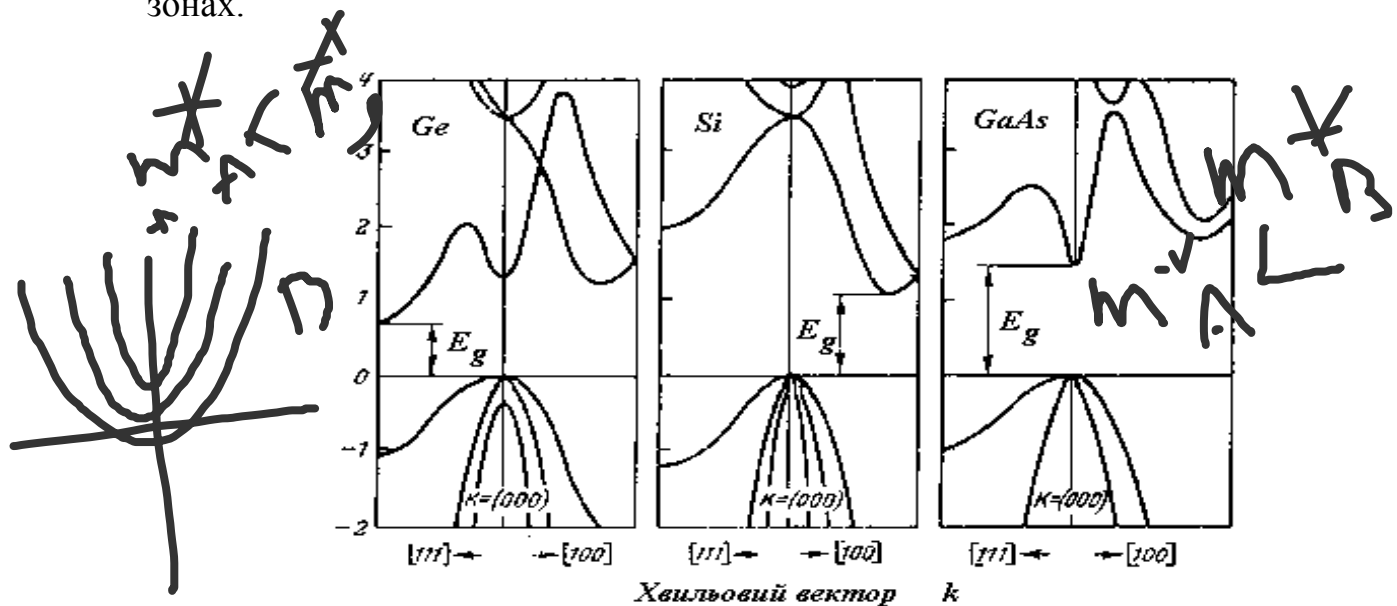
Нижче наведені основні параметри ширин заборонених зон, ефективних мас електронів та дірок та законів дисперсій для напівпровідників, які найбільш широко використовуються в сучасній напівпровідниковій електроніці. З подальшого розгляду буде зрозумілим, чому для напівпровідників ширини заборонених зон, які визначені з оптичних досліджень відрізняються від ширин заборонених зон, що визначені з досліджень температурних залежностей. Зараз будемо сприймати це лише як експериментальний факт.

Таблиця 1.1.

Ширини заборонених зон та ефективні маси носіїв заряду де-яких напівпровідників при 300 К.

Напівпровідник	Ширина забороненої зони. (eV.)	Ефективна маса електронів m_e^* / m_e	Ефективна маса дірок m_h^* / m_h
Si	1,12	$m_{11}=0,98$ $m_{\perp}=0,19$	$m_{hh}=0,53$ $m_{eh}=0,16$
Ge	0,85	$m_{11}=1,6$ $m_{\perp}=0,082$	$m_{hh}=0,35$ $m_{eh}=0,043$
GaAs	1,45	0,067	0,62
AlAs	2,26	0,06	0,5
InP	1,26	0,08	0,85
InSb	0,17	0,023	0,6

В напівпровідниках найбільш важливою характеристикою є закон дисперсії, який мають електрони та дірки, бо саме вони обумовлюють ті властивості, які використовуються в напівпровідникових приладах. На Рис.1.9.(а,б,с) наведені закони дисперсії германію (а), кремнію (б) та арсеніду галію (с) для електронів та дірок відповідно у зонах провідності та валентних зонах.



(а)

(б)

(с)

Рис.1,9(а,б,с). Енергетична зонна структура, яку утворюють валентні електрони германію (а), кремнію (б) та арсеніду галію (с).

Звертає на себе увагу, що екстремуми валентної зони германію (а) та кремнію (б) не співпадають з екстремумами зони провідності. Тобто максимуми валентної зони германію та кремнію лежать при $k=0$ і не співпадають з мінімумами зони провідності, які розташовані при $k = k_m$. Такі

напівпровідники називаються непрямоzonними. Для арсеніду галію має місце зворотна ситуація. І максимум валетної зони, і мінімум зони провідності співпадають між собою і лежать в точці $k=0$. Такі напівпровідники називаються прямоzonними. Ці особливості зонної структури є визначальними при конструюванні оптичних напівпровідникових приладів.

1.6. Запитання для самоконтролю та задачі.

1. Які наближення та припущення використовуються для розв'язання рівняння Шредінгера і до чого вони призводять ?
2. Що таке ширина забороненої зони ?
3. У чому полягає причина виникнення зон Брілюена ?
4. Що являють собою валентна зона та зона провідності напівпровідника ?
5. Що таке дірка у напівпровідникові ?
6. Чим обумовлене існування ефективної маси електронів та дірок в напівпровіднику ?
7. В чому полягає різниця фізичних властивосте електронного та діркового напівпровідника ?
8. Як співвідносяться ефективні і реальні маси електронів і дірок ?
9. Що таке прямоzonний напівпровідник ?
10. Чим прямоzonний напівпровідник відрізняється від непрямо- зонного ?

Розділ 2. Зв'язок атомів в кристалах, дефекти та домішки в кристалах.

2.1. Хімічний зв'язок атомів в кристалах.

Розглянемо детальніше питання про природу хімічного зв'язку в кристалі. Відомо, що атоми утримуються в кристалі завдяки хімічному зв'язку. Хімічний зв'язок виникає при зближенні атомів і обумовлений взаємодією їх зовнішніх тобто валентних електронних оболонок. Із загальних міркувань ясно, що коли такий зв'язок утворюється, то повна енергія кристалу знижується і в рівноважному стані буде мінімальна. Оскільки хімічний зв'язок може бути різним за енергією, яка виділяється при його утворенні, то можна для якісного його опису, ввести деякі типи, що характеризували б загальні риси утворення хімічного зв'язку між атомами. Іонний зв'язок або гетерополярний, ковалентний або гомеополярний, металевий та зв'язок силами Ван-дер Ваальса. Перші три типи прийнято називати сильним зв'язком, бо їх енергії на 1-2 порядки величин більше ніж енергії зв'язку, що обумовлені силами Ван-дер Ваальса, які в свою чергу мають величини 0,01-0,2 еВ. Всі типи сильного (міцного) зв'язку є наслідком взаємодії зовнішніх валентних електронів і призводить до утворення загальних електронних станів нової системи. В результаті цього має місце новий розподіл електронів в системі. При підвищенні електронної густини біля одного атому і її зменшення біля сусіднього (внаслідок хімічного зв'язку), виникає кулонівська взаємодія між іонами. Такий зв'язок називається іонним. Якщо об'єднання зовнішніх електронів відбувається на просторово-фіксованих орбіталях біля атомів, що утворюють спільну систему твердого тіла, то має місце ковалентний зв'язок. Коли концентрація електронів, що беруть участь у створенні зв'язку, зростає до певної межі, яка характеризується температурою виродження газу електронів, що утворилися за рахунок колективної взаємодії, то має місце металевий зв'язок. Як правило в природі не існує чистого зв'язку одного типу. В першу чергу це стосується іонного та ковалентного зв'язків. Змішаний зв'язок в цьому випадку відповідає такій ситуації, коли частину часу електрон знаходиться біля атому В, забезпечуючи іонну взаємодію між атомами А і В. В цьому випадку говорять про ступінь іонності хімічного зв'язку. Ван-дер Ваальсівський зв'язок слабкий за енергією, бо пов'язаний зі взаємодією дипольних моментів атомів або молекул, що утворюють елементарну комірку кристалічної ґратки. Поляризація атомів і дипольна взаємодія не призводить до утворення спільної електронної системи твердого тіла.

Розглядаючи зонну теорію твердого тіла з ідеальним розташуванням атомів у кристалічній ґратці, ми розглядали ідеальний кристал. В такому кристалі, як ми показали утворюються зони дозволених та заборонених значень енергії. Причому в зоні заборонених значень енергії не може існувати жодного дозволеного стану електронів. Реальні ж кристали відрізняються від ідеальних наявністю дефектів кристалічної ґратки та домішок. Зрозуміло, що їх існування повинно впливати на властивості того ідеального кристалу, який ми розглядали раніше. Постає питання. Яку роль відіграють дефекти і домішки в твердому

тілі? Фактично відповіді на це питання і присвячена ця книга, бо завдяки вмінню керувати властивостями домішок та дефектів і виникла сучасна напівпровідникова електроніка.

2.2. Класифікація дефектів кристалічної ґратки кристалу.

За термодинамічними ознаками дефекти кристалічної ґратки можуть бути класифіковані наступним чином.

В умовах термодинамічної рівноваги навіть в ідеальному кристалі існують різного роду відхилення від точного розташування атомів у вузлах кристалічної ґратки. Такі відхилення називаються дефектами кристалічної ґратки. Рівноважні дефекти - це дефекти кристала, які є елементарними збудженнями основного стану кристалу так само, як існують збуджені стани в електронній підсистемі. До цього типу дефектів перш за все відносяться фонони - колективні коливання атомів кристалічної ґратки кристалу. Вплив їх на електрони провідності ми розглянемо в параграфі 2.5 цієї глави.

В реальних кристалах окрім рівноважних дефектів ґратки існують нерівноважні дефекти. Вони викликані неідеальними умовами росту та існування кристалу. Ці дефекти, так би мовити, “заморожені” в кристалі. Часто нерівноважні дефекти кристалічної ґратки стабілізуються електричними, магнітними або пружними полями, які виникають в кристалі при його рості, фазових перетворюваннях, або зовнішніх діях, наприклад, радіаційним опроміненням. Густина нерівноважних дефектів кристалічної ґратки може бути суттєво зменшена за рахунок вдосконалення методів одержання та обробки кристалів.

Завдяки малій рухливості та великому часу життя дефекти кристалічної ґратки за геометричними ознаками можуть бути класифіковані так. Будемо називати вузлами ґратки *i* положення, які атоми повинні займати в кристалі з ідеальною атомною структурою. Тоді можна говорити про:

нуль вимірні (точкові) дефекти - вакантні вузли ґратки, атоми в міжвузлях, атоми у вузлах “чужої” підґратки для багатокomпонентних кристалів, атоми домішок в різних положеннях і так далі;

одновимірні (лінійні) дефекти - ланцюги точкових дефектів, дислокації;

двовимірні (поверхневі) дефекти - поверхня кристалу, межі поділу різних фаз (матеріалів), межі блоків, зерен, доменів тощо;

тривимірні (об’ємні) дефекти - пори, включення, інші макроскопічні утворення.

В сучасній напівпровідниковій електроніці найбільшу роль відіграють точкові дефекти. Це, насамперед, вакансії, тобто пусті (незайняті) вузли ґратки, атоми в міжвузлях та їх комплекси (наприклад, дивакансії з атомами домішок). Ці два типа дефектів є антиподами. Анігіляція вакансії та атома в міжвузлі відновлює ідеальність кристалічної ґратки. Енергія утворення вакансії визначається роботою, яку треба витратити для переносу атома із вузла кристалічної ґратки (як правило це величина порядку одиниць електрон-вольт). Енергія утворення атома в міжвузлі - це робота, яку треба витратити для

переносу атома з поверхні кристалу в міжвузлове положення (по порядку величини це енергія, що дорівнює декільком електрон-вольтам).

Можливість існування дефектів з великою енергією утворення в умовах термодинамічної рівноваги при температурі T , можна пояснити тим, що утворення точкових дефектів призводить до збільшення ентропії кристалу в цілому по відношенню до повністю впорядкованої системи.

З кристала, який має N однакових атомів, можна позбутися n атомів таким числом способів: $C_N^n = \frac{N!}{n!(N-n)!}$ - число перестановок. Тоді відповідне збільшення ентропії згідно з формулою Больцмана буде:

$$\Delta S = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} \quad (2.1)$$

Якщо енергія утворення одного дефекту є E , то утворення n - дефектів при температурі T змінює вільну енергію кристала на:

$$\Delta F = nE - T\Delta S \quad (2.2)$$

Мінімізація (2.1) з урахуванням (2.2) та використанням формули Стірлінга для великих чисел ($\ln m! = m \ln m$) дає для рівноважного числа точкових дефектів:

$$n = Ne^{-E/kT} \quad (2.3)$$

Аналогічно можна розглянути більш складну ситуацію, коли дефекти мають природу, наприклад, атом в міжвузлі і вакансія (такий дефект має спеціальну назву і називається дефектом Френкеля). Якщо вважати, що N_1 та N_2 число вузлів, в яких можуть знаходитись перший і другий партнер, то:

$$n = \sqrt{N_1 \cdot N_2} \cdot \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (2.4)$$

Взаємодія більш складних точкових дефектів, як вже зазначалось, призводить до більш складних комплексів дефектів. Наприклад: $V_1 + V_1 \Leftrightarrow V_2$ - бівакансія, або дивакансія. Найбільш актуальні для напівпровідникової електроніки є точкові дефекти - домішки. Вони грають, як позитивну (легуєчі, або мілкі домішки), так і негативну роль (рекомбінаційні центри). Особливе значення мають легуєчі домішки. Найбільш простий випадок, це домішки 5 групи елементів (фосфор P, миш'як As, сурьма Sb) та 3 (бор B, алюміній Al, галій Ga) періодичної системи елементів Менделєєва в напівпровідниках 4 групи (кремній Si та германій Ge). Так в кремнії чотири валентні електрони утворюють кристал кремнію з ковалентним зв'язком. Якщо замість кремнію в одному з вузлів розмістити п'ятивалентний атом фосфору, то чотири його валентні електрони підуть на утворення ковалентних зв'язків з чотирма сусідами (атомами кремнію), а п'ятий електрон обертається навкруги свого атома, з певною енергією. Ця ситуація з п'ятим електроном нагадує ситуацію з електроном у атомі водню.

2.3. Мілкі, глибокі, донорні, акцепторні та амфотерні домішки.

Розглянемо, що зміниться, якщо ми будемо так як і для атома водню, шукати розв'язок задачі для електрона у твердому тілі. Перш за все ми повинні врахувати, що електрон має не просто масу, а ефективну масу у твердому тілі.

По-друге, його взаємодія з ядром буде послаблена внаслідок екрануючих властивостей кристалічної ґратки в першу чергу. Формально цей факт відображає наявність кінцевої діелектричної проникності кремнію (для Si $\varepsilon = 12$). Якщо вважати, що іонізація цього утворення відповідає переходу електрона у зону провідності, то 0 енергії відповідає положення E_c . Тоді рівняння Шредінгера буде мати вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi - \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0 r} \Psi = E \Psi \quad (2.5)$$

Розв'язок такого рівняння відомий і його можна записати у вигляді:

$$E_d = E_c - 13,5 \frac{m^*}{m_0 \varepsilon^2 \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{n^2} = E_c - A \cdot m^* \frac{1}{n^2} \quad (2.6)$$

Підставляючи у (2.6) параметри, які характеризують кремній будемо мати $E_d \approx (E_c - 0,01)$ еВ. Проводячи далі схему цього розгляду, можна знайти, що радіус обертання електрона навколо свого атома (аналог Борівського радіусу для атома водню) становить $a \approx 60a_0$, де a_0 - стала ґратки. Це значить, що електрон майже вільний. Такий же висновок можна отримати і з енергетичних міркувань. Якщо енергетичне положення мілкої домішки в забороненій зоні кремнію становить величину порядку 0,01 еВ., а величина $kT \approx 0,025$ еВ. при кімнатній температурі ($T=300$ К), то ясно, що в цьому випадку завдяки термічній іонізації рівень буде іонізованим, а електрон, який знаходився на ньому при більш низькій температурі (наприклад, $T=30$ К), буде викинутий з нього у зону провідності при кімнатній температурі. Такі рівні називаються мілкими або водневоподібними і для них виконується умова $E_i \ll kT$. В результаті такого процесу виникає електронна провідність, або n - тип провідності напівпровідника. Аналогічно можна розглянути енергетичний спектр носіїв заряду при легуванні напівпровідника елементами 3 групи. В цьому випадку ми отримаємо: $E_a \approx (E_v + 0,01)$ еВ. Такий тип домішок називається акцепторними домішками; відповідно напівпровідник - p - типу провідності, або дірковий.

Коли ж Ψ - функція (рівняння 2.5) буде сильно локалізована (наприклад для випадку домішок Ag, Cu, Au, Ni та інших) ситуація з розв'язком (2.6) значно ускладнюється і виникають рівні в забороненій зоні напівпровідника, які мають енергетичне положення $E_i \gg kT$. В такому випадку скористатися водневоподібним наближенням неможливо, неможна для електрона на сильно локалізованому стані використовувати поняття ефективної маси. Ці рівні називаються глибокими. Як правило на такі центри можуть захоплюватись електрони і дірки. Процеси захоплення носіїв на глибокі рівні у забороненій зоні обумовлюють рекомбінаційні властивості напівпровідників і впливають на час життя носіїв у зоні провідності та валентній зоні. Про ці ефекти ми будемо говорити окремо.

Таким чином, підводячи підсумок того, про що ми говорили в цьому параграфі, можна сказати, що напівпровідникова електроніка ґрунтується на процесах керування дефектною, у широкому сенсі, системою напівпровідникового матеріалу. Дефекти можуть бути як окремо донорними,

так і акцепторними центрами, а при певних умовах трансформуватися з одного типу (наприклад, донорного типу) в інший (аакцепторний). В останньому випадку говорять про амфотерну домішку.

2.4. Енергетичне положення легуючих домішок та глибоких рівнів в найбільш поширених напівпровідників.

Експериментальні та теоретичні дослідження домішок в напівпровідниках дозволяють зараз мати досить конкретне уявлення про значення енергетичного положення глибоких центрів, що утворюються в напівпровіднику при його легуванні тими чи іншими домішками.

На Рис.1, Рис.2 та Рис3. наведені значення енергетичних положень глибоких рівнів в кремнії, германії та арсеніді галію, що обумовлені введенням у кристал різних елементів таблиці Менделєєва.

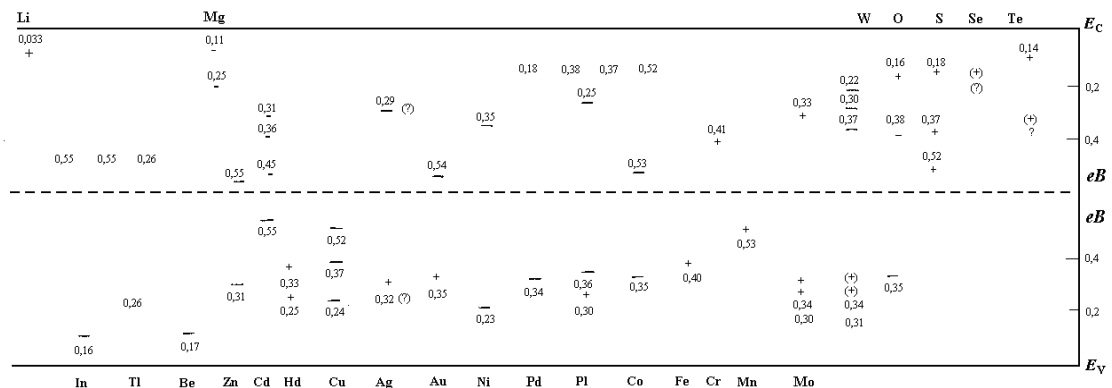


Рис.1. Значення енергетичних положень глибоких рівнів в кремнії, що обумовлені домішками різних елементів таблиці Менделєєва.

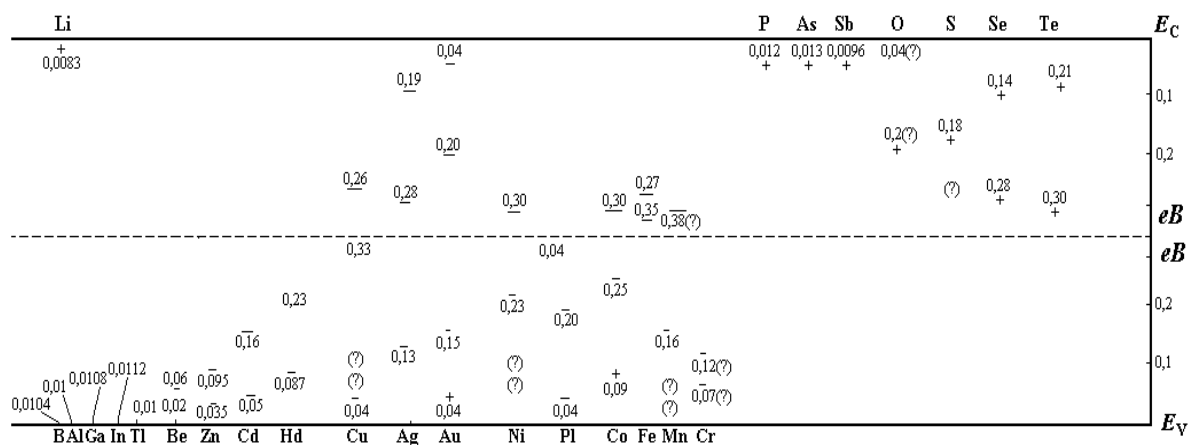


Рис.2. Значення енергетичних положень глибоких рівнів в германії, що обумовлені домішками різних елементів таблиці Менделєєва.

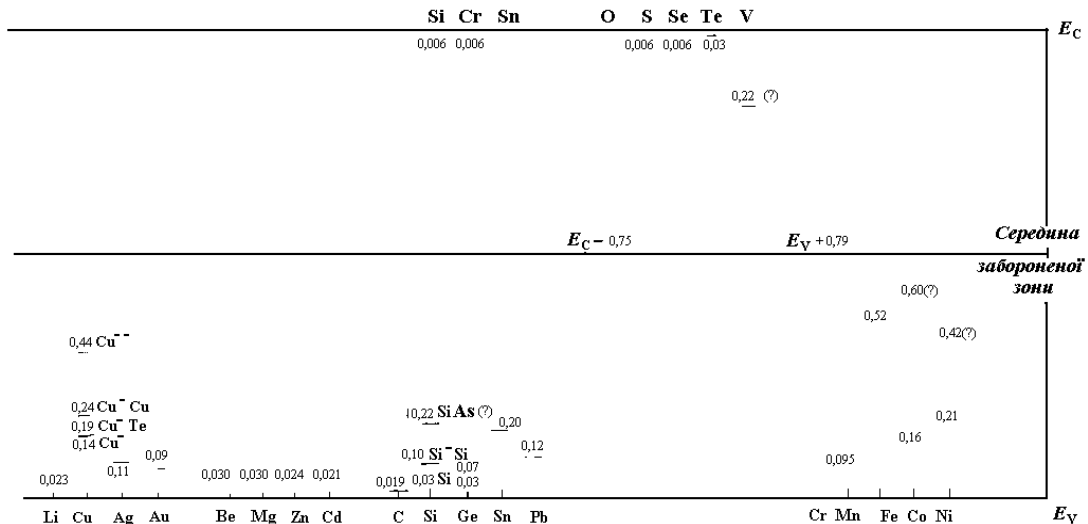


Рис.3. Значення енергетичних положень глибоких рівнів в арсеніді галію, що обумовлені домішками різних елементів таблиці Менделєєва.

2.5. Акустичні та оптичні фонони.

Всі вузли кристалічної ґратки знаходяться в безперервному коливальному русі, навіть при абсолютній нульовій температурі за рахунок нульових коливань гармонічного осцилятора. Такі коливання можна вважати термодинамічно рівноважним збуренням кристалічної ґратки кристалу і, таким чином, як ми говорили в параграфі 2.2, термодинамічно рівноважним дефектом кристалу.

При температурі $T > 0$ K, збудження від одного вузла передається іншим. Цей процес можна описати, як процес розповсюдження пружних хвиль зі своєю частотою ω_q та хвильовим вектором \vec{q} . Закон дисперсії пов'язує ці величини і $\omega_\phi = \omega_\phi(q)$. Розглянемо чим обумовлюється цей закон дисперсії.

Нехай ми маємо одномірний ланцюг з N атомів масою m . Тоді відхилення n атому в ланцюзі призведе до збурення сусідів так, як це показано на Рис.2.4. (а,б).

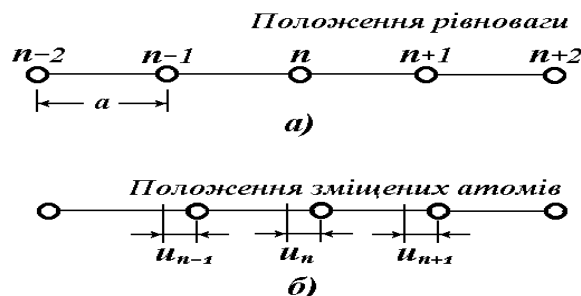


Рис.2.4.(а.б). Схематичне зображення одновимірної кристалічної ґратки кристалу з одного типу атомів: до збурення (а); після збурення (б).

Якщо сили збурення невеликі, то коливання можна вважати гармонійними і сила, що діє на n атом з боку $n+1$ і $n-1$ атомів може бути записана наступним чином:

$$F_n = -\gamma(x_n - x_{n+1}) - \gamma(x_n - x_{n-1}) = \gamma(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) \quad (2.7)$$

Тоді рівняння руху атому буде:

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = \gamma(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) \quad (2.8)$$

Розв'язок цього рівняння будемо шукати у вигляді:

$$x_n = A \cdot \exp[i(qan - \omega_\phi t)] \quad (2.9)$$

Підставляючи (2.9) у (2.8) отримаємо:

$$\omega_\phi = \pm 2 \left(\frac{\gamma}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \sin \frac{aq}{2} = \omega_m \sin \frac{aq}{2} \quad (2.10)$$

де: $\omega_m \pm 2 \left(\frac{\gamma}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$. Оскільки $\sin \frac{aq}{2}$ періодична, то межі зміни q будуть:

$-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$, такі ж самі, як і межі зони Брилюєна для хвильового вектора електрона k , про яку йшлося в Розділі 1. Тому значення q можна розглядати в тому ж самому просторі, що і k для електрона.

Закон дисперсії розповсюдження такого коливання в кристалі, яке називається акустичним коливанням, наведений на Рис. 2.5.

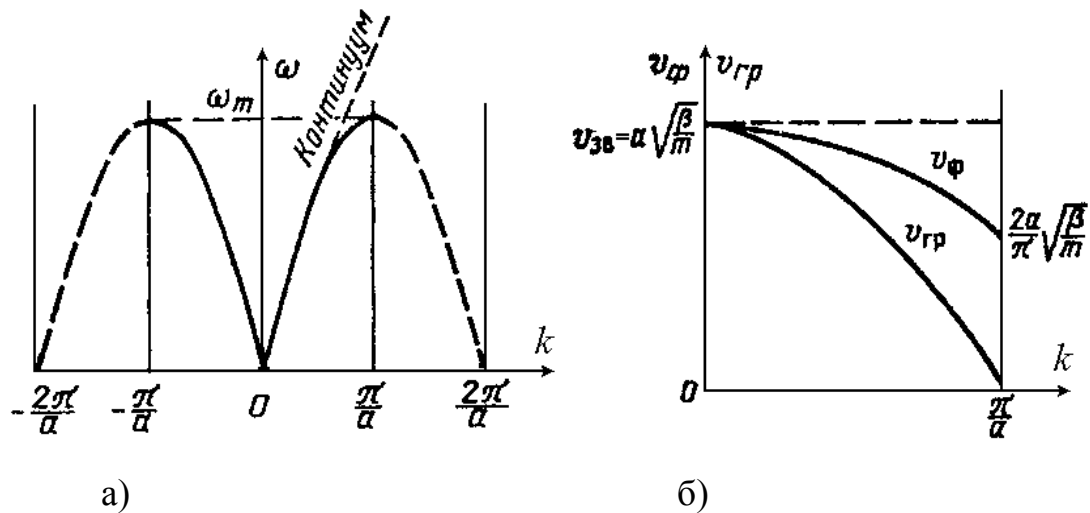


Рис. 2.5. Залежність частоти акустичного коливання а) та фазової і групової швидкості б) від хвильового вектора.

З малюнку бачимо, що малим значенням хвильового вектора, відповідають малі значення частоти (або енергії) акустичного фону. Ясно, оскільки кристалічна ґратка складається з великої кількості атомів N , то

хвильовий вектор q в діапазоні $-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$ буде неперервний з точністю $\frac{n}{N}$, тому фонон, так як і електрон характеризується квазіімпульсом.

Розглянемо коливання, які існують в кристалічній ґратці, що складається з двох типів атомів. Будемо, як і раніше вважати її одномірною. Тоді рівняння руху кожного з типів атомів по аналогії з (2.8) можуть бути записані як система рівнянь наступним чином:

$$\begin{cases} m_1 \frac{d^2 x'_n}{dt^2} = \gamma(x'_{n+1} + x'_{n-1} - 2x'_n) \\ m_2 \frac{d^2 x''_n}{dt^2} = \gamma(x''_{n+1} + x''_{n-1} - 2x''_n) \end{cases} \quad (2.11)$$

індекс “ / ” стосується коливання атомів першого сорту з масою m_1 , а індекс “ // ” стосується коливань атомів другого сорту з масою m_2 . Розв'язок системи рівнянь будемо шукати у вигляді аналогічному (2.9) то б то:

$$\begin{cases} x'_n = A' \cdot \exp[i(qan - \omega_\phi t)] \\ x''_n = A'' \cdot \exp[i(qan - \omega_\phi t)] \end{cases} \quad (2.12)$$

Підставляючи (2.12) у (2.11) отримаємо систему рівнянь, яка має розв'язок відносно A' та A'' лише в тому випадку коли детермінант цієї системи дорівнює нулеві.

$$\begin{vmatrix} 2\gamma - m_1\omega^2 & \gamma(1 + e^{iqa}) \\ \gamma(1 + e^{iqa}) & 2\gamma - m_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.13)$$

Використавши відомі співвідношення $e^{iqa} + e^{-iqa} = 2 \cos(aq)$ та $1 - \cos(aq) = 2 \sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$ отримаємо біквadratне рівняння відносно ω .

$$\omega^4 - 2\gamma \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \omega^2 + \frac{4\gamma^2}{m_1 m_2} \sin^2\left(\frac{aq}{2}\right) = 0 \quad (2.14)$$

Розв'язком рівняння (2.14) є:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{\omega_0^2}{2} \left\{ 1 + \left[1 - \beta^2 \sin^2\left(\frac{aq}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \\ \omega_2^2 &= \frac{\omega_0^2}{2} \left\{ 1 - \left[1 - \beta^2 \sin^2\left(\frac{aq}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \end{aligned} \quad (2.15)$$

де: $\omega_0^2 = \gamma \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}$ та $\beta^2 = 4 \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2}$.

Розв'язок системи рівнянь (2.11) у вигляді (2.15) показує, що у кристалічній ґратці твердого діла де є два атоми в елементарній комірці існує два типи коливань, яким відповідають два закони дисперсії. Перший тип $\omega_1 = \omega_\phi(q)$ називається оптичними коливаннями, другий тип $\omega_2 = \omega_\phi(q)$ - акустичними. На Рис. 2.6 наведений закон дисперсії в першій зоні Брилюена для оптичної та для акустичної гілки фононів.



Рис. 2.6. Оптичні (а) та акустичні (б) гілки коливань системи, що має два атоми в елементарній комірни́й ґратці твердого тіла.

Як видно з Рис. 2.6 на відміну від акустичних фононів оптичні мають максимальне значення частоти, а значить і енергії, при мінімальному значенні хвильового вектора. При цьому найбільша відмінність між цими двома гілками має місце при близьких до 0 значеннях хвильового вектора.

Ясно, що коливання в трьохвимірному кристалі будуть залежати від напрямку розповсюдження коливання в кристалічній ґратці. Ми матимемо тривимірну (значно складнішу) картину закону дисперсії. При цьому, однак, загальні риси процесу залишаться такими, як ми їх описали вище.

2.6. Взаємодія електронів з коливаннями ґратки.

Розглянемо, як взаємодіє електрон з такими незатухаючими плоскими хвилями коливань кристалічної ґратки.

Хай в кристалі існує одна з таких хвиль:

$$\varphi = A \cdot \exp[i(q \cdot r - \omega_\phi \cdot t)] \quad (2.16)$$

Будемо пам'ятати, що у виразі (2.16) q та r є векторами, ω_ϕ і t - скаляри. Обмежимося випадком малих q (тобто великих довжин хвиль λ коливань нашої ґратки). Це обмеження значить, що в наших коливаннях беруть участь багато атомів кристалічної ґратки. Виділена хвиля являє собою систему областей стиснення та розрідження, які чергуються між собою і рухаються в напрямку q зі швидкістю розповсюдження звуку в кристалі, порядку $V_{\text{зв}} \approx 10^5 \text{ см / сек.}$

Рух електрона будемо розглядати, як рух плоскої хвилі з відповідною хвильовою функцією, що має вигляд:

$$\Psi = U(r) \exp[i(k \cdot r - \omega \cdot t)] \quad (2.17)$$

Де k є хвильовий вектор електрона r - просторовий вектор. Як і раніше ω і t є скаляри. Середня швидкість електрона може бути оцінена у відповідності до його теплової енергії. $(m^*V/2) = 3kT/2$. Оцінки показують, що в реальних умовах швидкість руху електрона у кристалі є $V \approx 10^7 \text{ см/сек}$. Таким чином зразу видно, що $V > V_{\text{зв}}$. Тому взаємодію електрона з пружною хвилею можна розглядати, як брегівське відбиття від нерухомої системи площин кристалічної ґратки. Внаслідок того, що маса атомів, які утворюють кристалічну ґратку, значно більше маси електронів, ми можемо вважати, що взаємодія електрона з атомом є пружна взаємодія.

Хай відбиття дзеркальне. Тобто $\vec{k}' - \vec{k} = c \cdot \vec{q}$. Знайдемо c з умови Вульфа-Брега. Як відомо ця умова полягає в тому, що $2 \cdot d \cdot \sin \vartheta = n \cdot \lambda$. Оскільки ми розглядаємо взаємодію електрона з періодичною структурою, що утворилась в наслідок існування коливання атомів кристалічної ґратки, то $d = \lambda_\phi = \frac{2\pi}{q}$. Хай електрон падає на періодичну атомну структуру під кутом $\vartheta = \pi/2$. Тоді $\lambda_\phi = 2\pi/k$ Тоді $2 \frac{2\pi}{q} = \frac{2\pi}{k}$. Або $k = \pm \frac{q}{2}$. Оскільки при нормальному падінні $\vec{k}' - \vec{k} = \pm 2\vec{k}$, то $\vec{k}' - \vec{k} = \pm q$, або $\hbar \cdot \vec{k}' - \hbar \cdot \vec{k} = \pm \hbar \cdot q = \pm P_{\text{фон}}$. Таким чином отримали наступний висновок. При взаємодії електрона з коливаннями кристалічної ґратки можливе збільшення, або зменшення його квазіімпульсу на величину квазіімпульсу фонона.

Розглянемо, як змінюється енергія електрона при такій взаємодії. Площина зміни густини в кристалі, на якій відбувається розсіювання хоч порівняно повільно, але рухається. Це дозволяє розглянути зміну енергії електронної хвилі, що падає на площину, виходячи із зміни її частоти за рахунок ефекту Доплера. Враховуючи те, що швидкість руху густини мала, фаза падаючої та відбитої хвилі постійна (незмінна). Це значить, що:

$\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega \cdot t = \vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega' \cdot t$ де r - положення площини відбиття. Тоді $\vec{r} = \frac{\vec{q}}{q} V_{\text{зв}} \cdot t$ в той же

час $V_{\text{зв}} = \frac{\omega_\phi}{q}$, тоді $(\vec{k} \cdot \frac{\vec{q}}{q} V_{\text{зв}} - \omega) \cdot t = (\vec{k}' \cdot \frac{\vec{q}}{q} V_{\text{зв}} - \omega') \cdot t$. Це означає, що у випадку, який ми розглянули вище, для максимальної передачі імпульсу, матимемо для максимальної зміни частоти електронної хвилі при її взаємодії з фононом:

$\omega - \omega' = \vec{k} \cdot \frac{\vec{q}}{q} V_{\text{зв}} - \vec{k}' \cdot \frac{\vec{q}}{q} V_{\text{зв}} = (\vec{k} - \vec{k}') \cdot \frac{\vec{q}}{q} V_{\text{зв}} = \pm \frac{q^2}{q} V_{\text{зв}} = \pm q V_{\text{зв}} = \pm \omega_\phi$. Відповідно для енергії буде: $\hbar \cdot \omega - \hbar \cdot \omega' = \pm \hbar \cdot \omega_\phi$.

Таким чином, при взаємодії електрона з коливаннями кристалічної ґратки електрон або збільшує, або зменшує свою енергію на величину енергії фонона. Іншими словами - взаємодія електрона з кристалічною ґраткою призводить до або породження, або поглинання фонона.

Оцінімо кількісно, яка максимальна енергія передається при такій взаємодії. У випадку лобового удару, коли передається максимальний імпульс,

ми вже отримали, що: $\vec{k} - \vec{k}' = 2 \cdot \vec{k} = \pm \vec{q}$, тоді $\delta E_{\max} = \hbar \cdot \omega_{\phi} = \hbar \cdot q \cdot V_{36} = \hbar \cdot 2 \cdot k \cdot V_{36}$, враховуючи, $\hbar k = m^* V$ маємо: $\delta E_{\max} = 2 m^* V \cdot V_{36}$. Можемо знайти відносну зміну енергії електрона при зіткненні. Вона становить: $\frac{\delta E_{\max}}{\delta E} = \frac{2 m^* V V_{36}}{m^* V^2 / 2} = 4 \frac{V_{36}}{V} \approx 4 \cdot 10^{-2}$.

Якщо врахувати, що $kT = 0,025$ еВ при кімнатній температурі, то видно, що енергія змінюється на дуже невелику величину у порівнянні з тією енергією, яку електрон має при кімнатній температурі. Лише при дуже низьких температурах (порядку 0,1 К) зміни енергії електрона при взаємодії з фононами будуть помітні. Зазначимо ще той факт, що умові збереження енергії та імпульсу, виходячи з наведених вище міркувань, відповідають лише фонони акустичної гілки закону дисперсії фононів і лише поблизу центра зони Брилюена, тобто найбільш довгохвильові фонони, або так, як ми і розглядали вище, з малими значеннями q .

2.7. Запитання для самоконтролю та задачі.

1. З якою метою застосовують легування напівпровідників ?
2. Що буде з власним напівпровідником якщо в нього ввести трьох/п'яти валентний елемент (наприклад, бор/фосфор) ?
3. Що таке електрично активний стан домішки ? Наведіть приклади.
4. Що таке мілкі та глибокі домішки в напівпровіднику ?
5. Як розсіюються носії заряду домішками ?
6. Які типи дефектів кристалічної ґратки існують у кристалі ?
7. В чому полягає взаємодія носіїв заряду з дефектами кристалічної ґратки ?
8. Що таке оптичні та акустичні фонони в кристалі ? Чим вони відрізняються ?
9. Як взаємодіють електрони та дірки напівпровідника з фононами ?
10. Задача. Користуючись водневоподібною моделлю визначити енергію іонізації донорних домішок у кремнії та германії.

Розділ 3. Рівноважна статистика електронів та дірок в напівпровідниках.

3.1. Концентрації електронів та дірок в зоні провідності та валентній зоні. Електронний та дірковий напівпровідники.

Як відомо електрон має спин, що дорівнює $1/2$ і, таким чином, для сукупності таких частинок виконуються закони статистики Фермі - Дірака і ми можемо записати функцію їх розподілу за енергією у вигляді:

$$f_e(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} \quad (3.1)$$

де E_F - електрохімічний потенціал, який визначається, як зміна вільної енергії ($F = E - TS$) електронної системи при зміні числа електронів на одиницю, при постійних значеннях об'єму та температури: $E_F = \left. \frac{\partial F}{\partial N} \right|_{V,T}$. Якщо вважати у виразі

(3.1) $E = E_F$, то ми можемо отримати більш звичайне визначення E_F . Воно буде полягати в тому, що E_F є енергія, при якій ступінь заповнення електронами рівня з енергією E_F дорівнює 0,5. Оскільки, як буде показано нижче, рівень E_F в напівпровідниках в найбільш важливих для практичного застосування випадках лежить в забороненій зоні напівпровідника, де не існують вільні електрони, то друге не має ясного фізичного змісту і тому краще користуватися першим з наведених означень положення рівня Фермі.

З статистичної фізики відомо, що співвідношення (3.1) справедливе при припущеннях, що: і) система знаходиться в умовах термодинамічної рівноваги; ii) набір енергетичних станів не залежить від ступені їх заповнення. При умові, що $E - E_F \gg kT$, тобто відсутності виродження електронного газу (або що теж саме, за умови, що число станів значно більше ніж число електронів, які їх заповнюють) функція розподілу Фермі-Дірака переходить у функцію розподілу Больцмана. Це означає, що $f_e(E)$ може бути представлена у вигляді:

$$f_e(E) = \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right) \quad (3.2)$$

Якщо розглядати дірку, як квазічастинку, що відповідає відсутності електрона з цією енергією, то можна вважати, що:

$$f_h(E) = 1 - f_e = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) + 1} \quad (3.3)$$

Тоді для дірок в неvirодженому випадку ми матимемо:

$$f_h(E) = \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) \quad (3.4)$$

Тепер, коли ми знаємо, як розподіляються електрони та дірки між станами, які вони можуть займати (густина цих станів хай буде $N(E)$), ми можемо проаналізувати залежність концентрації електронів та дірок в зонах провідності та валентній зоні від положення рівня Фермі в системі.

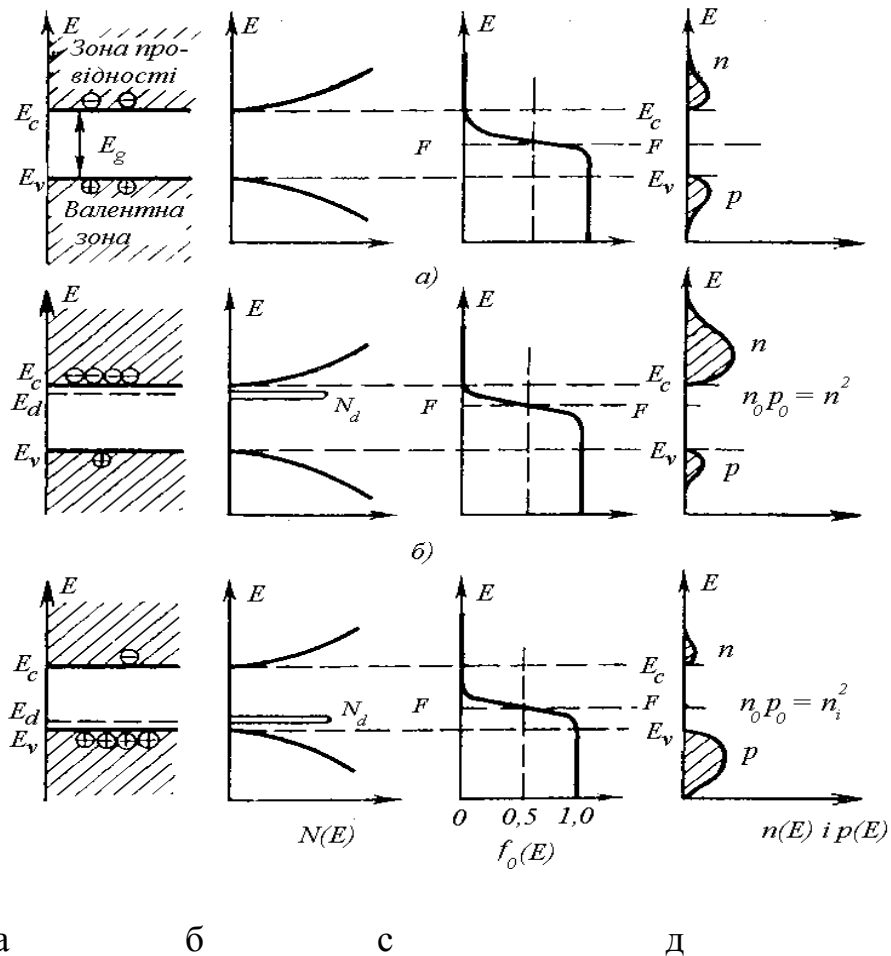


Рис 3.1. Схематичне зображення зонної діаграми власного, електронного і діркового напівпровідників (а); залежність густини станів від енергії в дозволених і забороненій зоні напівпровідника (б); функція розподілу Фермі-Дірака в залежності від енергії (с) і залежність концентрації носіїв заряду в зонах від енергії.

Для невинродженого випадку, коли $E_F < 0$, концентрація електронів $n(E)$ в інтервалі dE дорівнює:

$$n(E)dE = 2N(E) \cdot f_e(E)dE \quad (3.5)$$

Розглянемо докладніше, що собою являє густина станів $N(E)$ і від чого вона залежить. Розрахуємо число квантових станів, в яких можуть знаходитись електрони у зоні провідності. Нехай в нашому напівпровіднику в одиничному об'ємі в інтервалі енергій від E до $E + dE$ знаходиться dZ квантових станів. Ясно, що тоді густина станів для енергії E може бути записана у вигляді:

$$N(E) = \frac{dZ}{dE} \quad (3.6)$$

Об'єм елементарної комірки зони Брилюена в кристалі в k - просторі дорівнює h^3 . Об'єм шару dk навколо сфери радіусом k буде дорівнювати $4\pi k^2 dk$. Тоді, якщо врахувати, що при малих k в зоні Брилюена залежність енергії від квазіімпульсу (Див. Гл.1, параграф 1.3.) має вигляд $k^2 = 2m_e^*(E - E_c)$,

ми можемо записати, що $k = [2m_e^*(E - E_c)]^{1/2}$ і, відповідно,
 $dk = \frac{1}{2}(m_e^*)^{1/2}(E - E_c)^{-1/2} dE$. Тоді $N(E)$ матиме вигляд:

$$N(E)dE = \frac{dZ}{dE} \cdot dE = \frac{8\pi k^2 dk}{h^3} \cdot dE = 2\pi \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{h^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} dE \quad (3.7)$$

Слід підкреслити, що коли ми отримували з (3.6) вираз (3.7) ми врахували, що закон дисперсії є параболічним, але, як зазначалося в Див. Гл.1, параграф 1.3. це має місце лише поблизу від точок екстремуму залежності $E(k)$. Тому і густина станів, що ми отримали (вираз (3.7)) є справедливим лише в цих областях закону дисперсії.

Тоді (3.5) можна переписати у наступному вигляді:

$$n = \int_0^\infty 2\pi \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{h^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E-E_F}{kT}} dE = 2\pi \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{h^3} e^{\frac{E_F}{kT}} \int_0^\infty E^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E}{kT}} dE \quad (3.8)$$

Проведемо заміну змінних, позначивши $x = \frac{E}{kT}$, тоді інтеграл матиме вигляд як і відомий інтеграл Пуасона, що дорівнює: $\int_0^\infty x^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$. Тепер вираз для концентрації електронів (3.8) може бути записаний у вигляді:

$$n = N_c e^{\frac{E_F}{kT}} \quad \text{де:} \quad N_c = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_e^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.9)$$

N_c - має назву ефективна густина станів у зоні провідності. Фізично ця величина дорівнює кількості місць для електронів, які можуть знаходитись у зоні провідності і у повній відповідності до свого фізичного змісту має розмірність концентрації, тобто см^{-3} . Враховуючи те, що, як видно з малюнку Рис.3.1, ми вважали 0 енергії відповідає краю зони провідності ($E_c = 0$), то в нашому розгляді E_F від'ємне. Отже концентрація електронів у зоні провідності менша за ефективну густину станів. Коли $E_F = E_c = 0$, з (3.9) видно, $n = N_c$, і концентрація електронів у зоні дорівнює концентрації тих місць, які можуть бути ними зайняті. Це і є початок виродження електронного газу у системі.

Аналогічно для дірок можна записати:

$$N(E)dE = 2\pi \frac{(2m_h^*)^{3/2}}{h^3} (E_v - E)^{\frac{1}{2}} dE \quad (3.10)$$

В результаті проведення такого самого розгляду, як і викладений вище, ми отримаємо:

$$p = N_v e^{-\frac{(E_F + E_g)}{kT}} \quad N_v = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_h^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.11)$$

де $N_v = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_h^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ є ефективна густина станів для дірок у валентній зоні.

Для розрахунків зручно користуватися виразами, що відображають характерну залежність ефективної густини станів у зоні провідності та валентній зоні від температури та ефективної маси носіїв заряду, бо як видно з (3.9) та (3.11) лише від цих параметрів матеріалу та оточуючого середовища вона залежить:

$$N_{c,v} = 2,5 \cdot 10^{19} \left(\frac{m_{e,h}^*}{m_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T}{300} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.12)$$

Аналізуючи вирази (3.9) та (3.11) можна бачити, що добуток

$$n \cdot p = N_c N_v \cdot e^{-\frac{E_g}{kT}} = \text{const} \quad (3.13)$$

і не залежить від положення рівня Фермі в напівпровіднику, а лише визначається шириною забороненої зони E_g та температурою T . Це значить, що чим більше концентрація електронів в напівпровіднику, тим менша концентрація дірок в ньому, при цьому добуток концентрацій, як уже наголошувалось вище залишається сталим. Звідси коли $n > p$ основними носіями в ньому є електрони (напівпровідник n -типу), а неосновними є дірки. Зворотна ситуація має місце коли $p > n$. Основними носіями є дірки, а неосновними є електрони (напівпровідник p -типу). Таким чином, добуток основних та неосновних носіїв заряду не залежить від положення рівня Фермі і є константою для даного напівпровідника, яка залежить від температури.

Як ми бачили з попереднього розгляду, температура є тим параметром, від якого значною мірою залежать властивості напівпровідника. Розглянемо докладніше зміну концентрації вільних носіїв заряду при зміні температури напівпровідника.

Розглянемо власний напівпровідник. Таким напівпровідником називається напівпровідник, в якому число електронів та дірок однакове. При нулі температури в зоні провідності немає електронів, а у валентній зоні немає дірок. При збільшенні температури у зоні провідності з'являються електрони, а у валентній - дірки і народження їх відбувається попарно. Тому:

$$n = p = n_i = \sqrt{N_c \cdot N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (3.14)$$

Рівняння (3.14) широко використовується в фізиці напівпровідників бо відображає електронейтральність матеріалу, або, іншими словами, є законом збереження заряду.

Як видно з (3.14) будуючи залежність $\ln n$ від $\frac{1}{T}$ ми повинні отримати пряму лінію, $\text{tg} \theta$ кута нахилу якої становить $\frac{E_g}{2k}$.

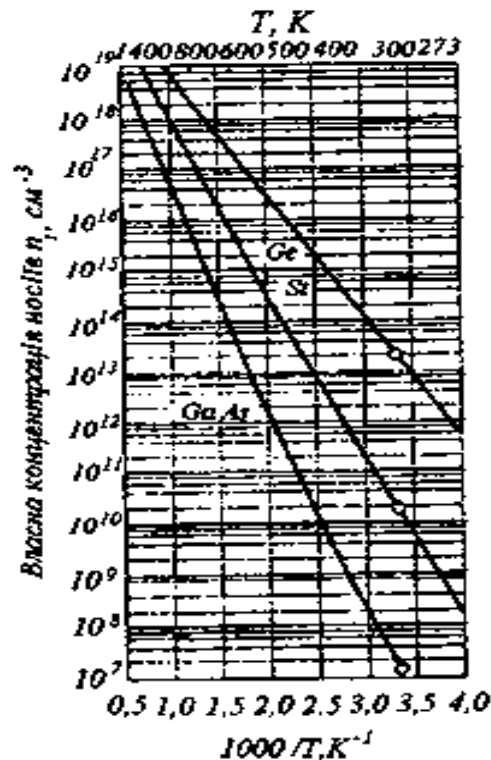


Рис.3.2. $\lg \theta$ кута нахилу залежності власної концентрації носіїв заряду від оберненої температури становить $\frac{E_g}{2k}$.

Таким чином, досліджуючи властивості власного напівпровідника, може бути визначений один з основних параметрів напівпровідника - ширина його забороненої зони.

3.2. Залежність концентрації електронів та дірок від положення рівня Фермі в напівпровіднику.

Знайдемо положення рівня Фермі у власному напівпровіднику і його залежність від температури. Рівняння (3.14) з використанням (3.9) та (3.11) може бути записане у вигляді:

$$n = N_c e^{\frac{E_F}{kT}} = p = N_v e^{-\frac{(E_F + E_g)}{kT}} \quad (3.15)$$

Тоді:

$$\ln N_c + \frac{E_F}{kT} = \ln N_v - \frac{E_F}{kT} - \frac{E_g}{kT} \quad (3.16)$$

Звідки:

$$E_F = -\frac{E_g}{2} + kT \ln \frac{N_v}{N_c} = -\frac{E_g}{2} + kT \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.17)$$

З (3.17) ми бачимо, що з точністю до величини $kT \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right)^{\frac{3}{2}}$ рівень Фермі у власному напівпровіднику лежить посередині забороненої зони. Якщо

ефективна маса електрона та дірки відрізняються одна від одної, то рівень Фермі при певній температурі більший від $T=0$ змінює своє положення відносно середини забороненої зони, як функція логарифма відношення цих мас і наближається до тієї зони де ефективна маса менша.

Розглянемо домішковий напівпровідник. На Рис.3.3 наведена зонна діаграма напівпровідника n - типу з енергетичним положенням домішкового рівня E_d , концентрацією N_d та кількістю електронів на цьому рівні n_d .

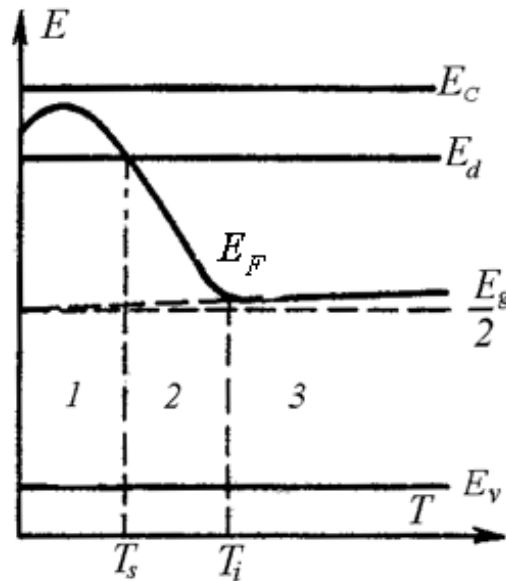


Рис.3.3. Зонна діаграма напівпровідника n - типу з енергетичним положенням домішкового рівня E_d , концентрацією N_d та кількістю електронів на цьому рівні n_d і залежністю рівня Фермі E_F від температури.

З міркувань, наведених вище, здавалося б, що $n_d = N_d \cdot f(E)$, але в звичайних умовах, хоча на рівні і є два місця, складається така ситуація, що коли на рівні знаходиться один електрон, то другий, щоб потрапити на цей же рівень, повинен подолати силу кулонівського відштовхування. Може скластися така ситуація, що ця енергія більша ніж відстань до E_c , або, відповідно до E_v у випадку діркового напівпровідника. Це означає, що на рівні може знаходитися електрон зі спіном чи вгору, чи вниз, а знаходиться лише один. Тобто вільних місць два, а електронів, які їх можуть зайняти лише один. У фізиці напівпровідників є випадок багатозарядних центрів, але це окремий випадок і ми його зараз розглядати не будемо. Спробуємо описати зараз цю ситуацію, яка склалася. Відношення кількості електронів, що є на рівні до кількості місць є функція розподілу. Це значить, що: $\frac{n_d}{N_d} = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$, або $\frac{N_d}{n_d} - 1 = e^{\frac{E-E_F}{kT}}$, або

$\frac{n_d}{N_d - n_d} = \beta \cdot e^{\frac{-E + E_F}{kT}}$. В останньому виразі ми ввели деякий параметр β .

Розглянемо, що це означає. $N_d - n_d$ є число вільних місць згідно з загальною статистикою, але з міркувань, що наведені вище на ці вільні місця внаслідок існування зонної будови енергетичного спектру не може сісти стільки електронів, скільки відповідає статистиці їх заповнення, а може лише вдвічі менше. Тому наш множник $\beta = 1/2$, відображає ступінь виродження електронного рівня. Знайдемо тепер величину $\frac{n_d}{N_d}$. З врахуванням ступеня

виродженості маємо: $\frac{n_d}{N_d} = \frac{1}{\beta e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1}$. Тепер ми можемо йти далі і записати

умову електронейтральності еквівалентну умові (3.14). Сформулюємо її. Заряд, що існує в зоні провідності складається з електронів, що утворилися за рахунок зона-зонного збудження та за рахунок збудження з домішкових центрів і цей заряд дорівнює додатньому заряду, що залишився на іонізованих донорах та вільних дірок у валентній зоні. Оскільки ми розглядаємо матеріал n -типу, то концентрацією вільних дірок, у відповідності з (3.13) можна знехтувати. Тоді рівняння електронейтральності в нашому випадку набуде вигляду:

$$n + n_d = N_d \quad (3.18)$$

Або з врахуванням (3.15) та міркувань, які наведені вище, що до ступені виродженості рівня, маємо:

$$N_c e^{\frac{E_F}{kT}} + N_d \frac{1}{\beta e^{\frac{E - E_F}{kT}}} = N_d \quad (3.19)$$

У виразі (3.19) $E \equiv -E_d$, а $E_F = -E_F$, що означає, що енергія відраховується від E_c . Проводячи в (3.19) алгебраїчні перетворення і домножуючи праву і ліву частину на $e^{\frac{E_F}{kT}}$ отримаємо:

$$e^{\frac{2E_F}{kT}} + \beta \cdot e^{\frac{-E_d}{kT}} e^{\frac{E_F}{kT}} - \beta \frac{N_d}{N_c} e^{\frac{-E_d}{kT}} = 0 \quad (3.20)$$

Розв'язуючи квадратне рівняння відносно $e^{\frac{E_F}{kT}}$ маємо:

$$e^{\frac{E_F}{kT}} = -\frac{\beta}{2} e^{\frac{-E_d}{kT}} + \sqrt{\frac{\beta^2}{4} e^{\frac{-2E_d}{kT}} + \beta \frac{N_d}{N_c} e^{\frac{-E_d}{kT}}} = \frac{\beta}{2} e^{\frac{-E_d}{kT}} \left(\sqrt{1 + \frac{4N_d}{\beta N_c} e^{\frac{E_d}{kT}}} - 1 \right)$$

Проводячи потенціювання отримуємо:

$$E_F = -E_d + kT \ln \left[\left(\frac{\beta}{2} \right) \left(\sqrt{1 + \frac{4N_d}{\beta N_c} e^{\frac{E_d}{kT}}} - 1 \right) \right] \quad (3.21)$$

3.3. Залежність концентрації вільних носіїв заряду від температури.

Для аналізу виразу (3.21) розглянемо два випадки, а саме: низькі та високі температури.

Перший випадок - випадок низьких температур. В цьому випадку можна знехтувати одиницею під знаком кореня і в круглих дужках виразу (3.21) і тоді проводячи відповідні спрощення отримуємо:

$$E_F = \frac{-E_d}{2} + kT \ln \sqrt{\frac{\beta N_d}{N_c}} \quad (3.22)$$

Проаналізуємо цю ситуацію. При зниженні температури рівень Фермі прямує до положення $E_F = -\frac{E_d}{2}$. При збільшенні температури, поки $N_c < \beta N_d$ рівень Фермі піднімається до E_c , а при $N_c > \beta N_d$ він починає рухатись вниз. Вираз, що знайдений для залежності положення рівня Фермі в напівпровіднику дозволяє отримати ще один цікавий висновок. Підставимо вираз для E_F у (3.15), що визначає концентрацію електронів n . Тоді матимемо:

$$n = \sqrt{\beta N_d N_c} \cdot e^{-\frac{E_d}{2kT}} \quad (3.23)$$

З (3.23) видно, що низькотемпературна залежність $n(T)$ дає можливість знайти E_d . Дійсно, $\ln n = F(1/T)$ є пряма лінія із $\text{tg} \theta = \frac{E_d}{2k}$. Ця залежність відповідає області 1 Рис. 3.4.

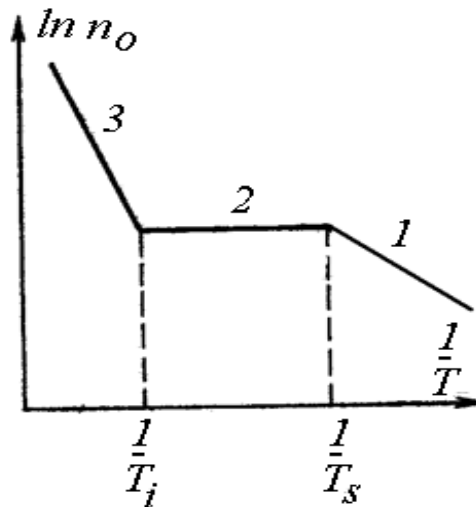


Рис.3.4. Залежність концентрації носіїв заряду від температури в широкому діапазоні температур.

Розглянемо тепер випадок високих температур. Тепер у формулі (3.21) вираз під коренем розкладемо по малому параметру згідно з співвідношенням $\sqrt{1+x} \approx 1+x/2$. Ясно, що це можна зробити лише коли $x \ll 1$. Тобто $e^{\frac{E_d}{kT}} \ll 1$. Тоді:

$$E_F = -E_d + kT \ln \left(\frac{N_d}{N_c} e^{\frac{E_d}{kT}} \right) = kT \ln \frac{N_d}{N_c} \quad (3.24)$$

Тоді концентрація електронів з врахуванням виразу (3.24) буде дорівнювати:

$$n = N_c e^{\frac{E_F}{kT}} = \frac{N_c N_d}{N_c} = N_d \quad (3.25)$$

Фізично результат, який ми отримали означає, що при таких температурах концентрація електронів у зоні провідності не залежить від температури і визначається рівнем легування напівпровідника, тобто $n = N_d$. Фактично рівень Фермі E_F перетнув рівень E_d і всі рівні N_d віддали свої електрони у зону провідності. При цьому, як ми вже говорили записуючи рівняння електронейтральності (3.18), переходи зона - зона ми не розглядаємо, бо температури ще не такі високі. Перехід від області низьких температур до області високих температур, у нашому розумінні відбувається, коли $\frac{4N_d}{\beta N_c} e^{\frac{E_d}{kT_0}} \approx 1$.

Ясно, що концентрація домішок N_d буде визначати T_0 . Чим більше рівень легування N_d , тим більше буде температура T_0 . Температура T_0 отримала спеціальну назву - температура виснаження мілкої домішки.

Оцінімо величину цієї температури. Нехай $N_d = 1.10^{16} \text{ см}^{-3}$, $E_d = 0,01 \text{ еВ.}$, тоді $T_0 \approx 30^\circ \text{К}$. Таким чином при $T_0 > 30^\circ \text{К}$ домішка буде виснажена. Коли температура досягне такої величини, що зона-зонні переходи будуть суттєвими, ясно, що рівняння (3.18) порушиться і залежність концентрації від температури буде визначатись рівнянням електронейтральності (3.15) і матиме вигляд, який відповідатиме області 3 нашого малюнку Рис.3.4.

Аналогічно можна розглянути напівпровідник p - типу легований акцепторами N_a з енергетичним положенням E_a і ми отримаємо для випадку низьких температур

$$p = \sqrt{\beta N_v N_a} e^{-\frac{E_a}{2kT}}. \quad (3.25)$$

3.4. Компенсований та сильно легований напівпровідники.

Компенсовані напівпровідники. В реальній ситуації чисто n , або чисто p - типу напівпровідників не існує. Як правило в напівпровіднику є домішки і n , і p - типу. Розглянемо напівпровідник де є два типи домішок і їх концентрації рівні. $N_d = N_a$ з енергетичним положенням відповідно E_d і E_a . Тоді при $T = 0$ електрони займуть найнижчі за енергією місця і всі рівні з енергією E_a будуть зайняті, всі рівні з енергією E_d будуть порожні. При цьому, враховуючи, $N_d = N_a$ в зоні провідності не буде вільних електронів, а в валентній зоні не буде вільних дірок. Такий напівпровідник називається скомпенсованим. Бо в ньому має місце взаємна компенсація домішок. З ростом температури такий напівпровідник буде вести себе, як власний напівпровідник, бо $E_g \gg E_d, E_a$. Припустимо тепер, що $N_d \neq N_a$, тобто компенсація часткова і така, що $N_d > N_a$. Такий напівпровідник називається частково компенсованим. Тоді умова електронейтральності на відміну від (3.18) матиме вигляд:

$$n + n_d = N_d - N_a \quad (3.26)$$

Враховуючи, N_d та N_a константи матеріалу і не змінюються, в першому наближенні, при зміні температури, ми можемо використовуючи підхід, що описаний вище, зразу записати вираз для концентрації носіїв для: низьких температур - $n = \beta \frac{N_d - N_a}{N_a} \cdot N_c e^{\frac{-E_d}{kT}}$ (підкреслимо, що у випадку компенсованого напівпровідника в показник експоненти входить величина E_d , а не $E_d / 2$, як у випадку домішкового напівпровідника); високих температур - $n = N_d - N_a$. Реально це велика область температур (вона може лежати в межах від температури виснаження ($T \sim 50$ K) до температури, при якій починає відбуватися зона - зонна теплова генерація ($T \sim 400$ K)), в якій концентрація дуже слабо залежить від температури. На Рис. 3.4. ця область температур відповідає ділянці 2. Саме вона використовується в більшості напівпровідникових приладів, для котрих залежність параметрів матеріалу від температури повинна бути слабою. Це напівпровідникові діоди, транзистори, тощо.

Положення рівня Фермі для компенсованого напівпровідника може бути визначене слідуючи чином, враховуючи міркування, які викладені в попередньому параграфі:

$$E_F = -E_d + kT \ln \left(\beta \frac{N_d - N_a}{N_a} \right) \quad (3.27)$$

Таким чином, при $T = 0$ E_F не може лежати вище E_d , бо він ніколи не може бути заповнений повністю.

Уявимо собі, що концентрація домішок така, що стає суттєвою взаємодія між ними, тоді електронний рівень, що характеризує цю домішку повинен розщепитися і перетворитися в зону. Так утворюється домішкова зона провідності. При $T = 0$, коли $N_d = N_a$, ясно, що провідність дорівнює 0. Коли ж $N_d \neq N_a$, то провідність буде кінцева. Ця провідність буде визначатись особливостями енергетичної структури домішкової зони, наприклад, вона може мати стрибкову природу.

3.5. Залежність питомого опору від положення рівня Фермі в забороненій зоні для найбільш поширених напівпровідників.

В багатьох випадках аналізу експериментальних результатів та при конструюванні напівпровідникових приладів необхідно знати положення рівня Фермі в напівпровіднику та його залежність від концентрації легуючої домішки, або температури. Ці залежності можуть бути розраховані згідно з тим підходом, який ми розглядали в цій главі. Однак на практиці користуються діаграмами, згідно з якими можна з достатньою точністю визначити необхідні параметри. На Рис. 3.5 наведена температурна залежність положення рівня Фермі в кремнії при різному рівні легування кремнію n - типу (КЕФ - кремній легований фосфором) та p - типу (КДБ - кремній легований бором). При цьому

врахована залежність ширини забороненої зони напівпровідника від температури.

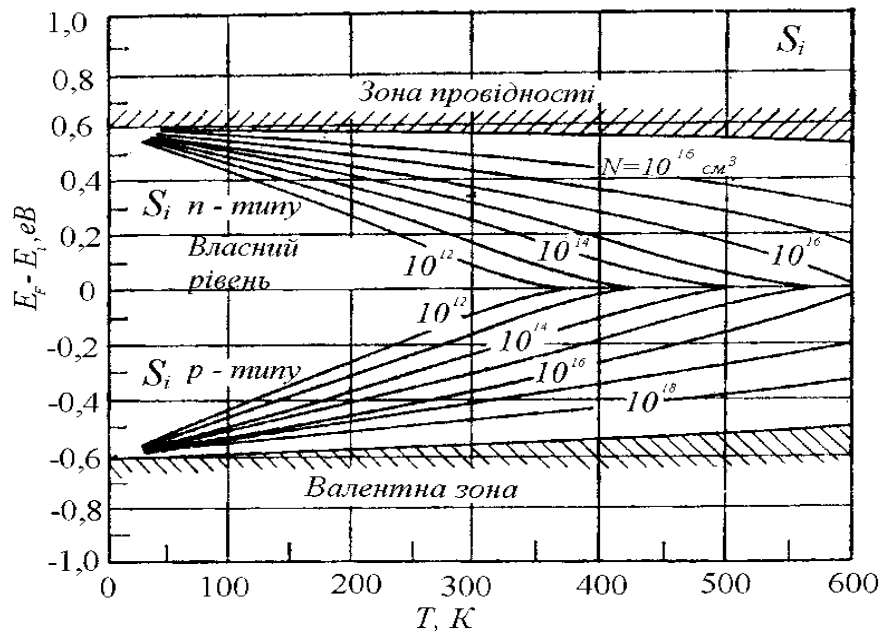


Рис. 3.5 Температурна залежність положення рівня Фермі в кремнії при різному рівні легування n -типу (КЕФ - кремній електронний легований фосфором) та p -типу (КДБ - кремній дірковий легований бором).

Як видно з Рис.3.5, знаючи температуру, при якій буде працювати прилад, чи проводитись експеримент та концентрацію мілкої домішки, можна визначити положення рівня Фермі у забороненій зоні напівпровідника.

Паспортними даними напівпровідникового матеріалу є питомий опір. Однак перехід від питомого опору до концентрації пов'язаний ще з одним параметром (рухливістю носіїв заряду), про який ми будемо говорити у наступній главі, але зараз доцільно було б сказати про існування діаграм, якими користуються на практиці для визначення залежності концентрації носіїв заряду від питомого опору. Ці діаграми також є характеристиками матеріалу.

На Рис.3.6 наведена залежність питомого опору при $T=300$ К від концентрації домішок для кремнію легovanого фосфором (КЕФ) та бором (КДБ).

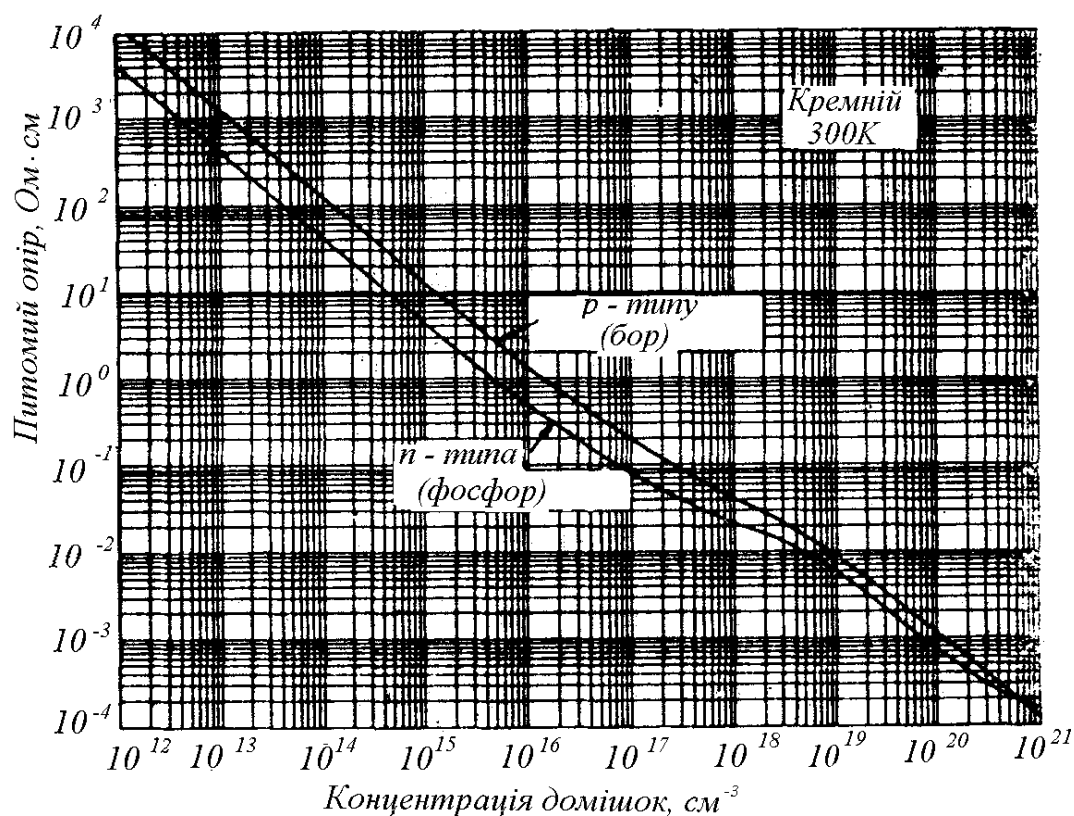


Рис.3.6 Залежність питомого опору при $T=300$ К від концентрації домішок для кремнію легованого фосфором (КЕФ) та бором (КДБ).

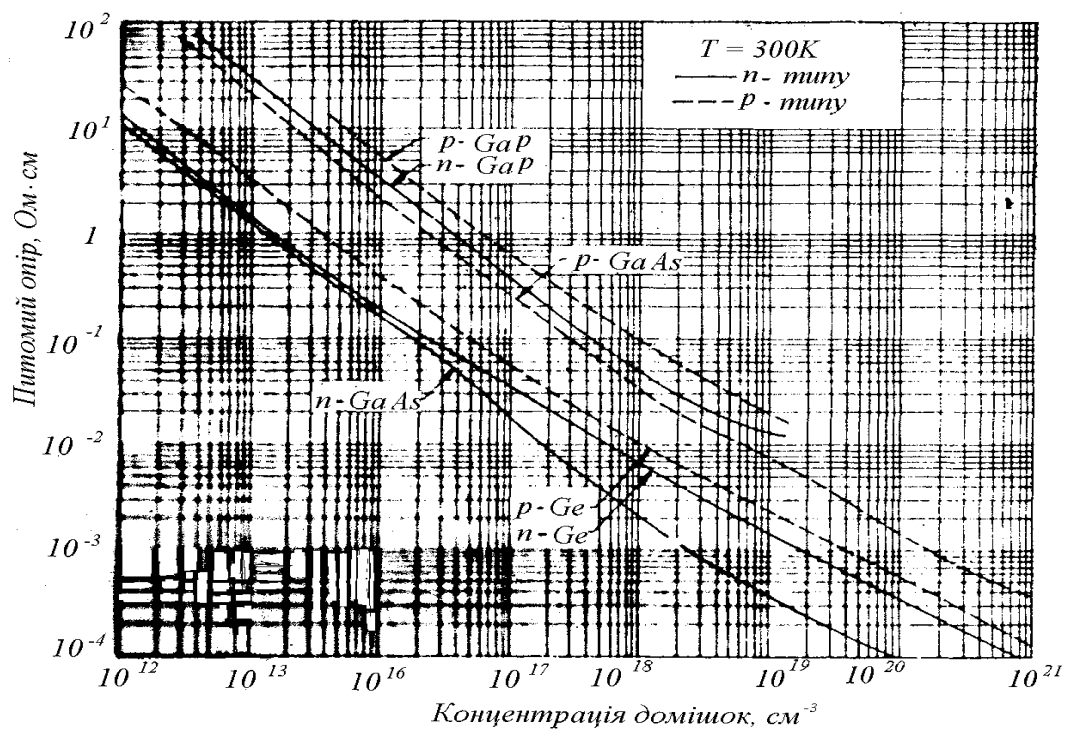


Рис.3.7 Залежність питомого опору при $T=300$ К від концентрації домішок для германію, арсеніду галію та фосфіду галію.

Таким чином, вимірюючи питомий опір (або знаючи, як паспортні дані матеріалу) використовуючи матеріал викладений у цій главі, або діаграми, що наведені на Рис.3.5 - Рис.3.7, можна зразу визначити положення рівня Фермі у забороненій зоні напівпровідника.

3.6. Запитання для самоконтролю та задачі.

1. Який вигляд має умова електронейтральності n/p напівпровідника?
2. Яке рівняння є основою для визначення положення рівня Фермі в напівпровіднику ?
3. Задача. Зразок кремнію легований миш'яком з концентрацією $N_d = 10^{17}$ ат./см³. Визначити рівноважну концентрацію дірок p_0 при 300 К. Знайти положення рівня Фермі E_F відносно середини забороненої зони $E_{1/2}$ та накреслити зонну діаграму.
4. Задача. Визначити власний питомий опір германію при температурі 300 К.
5. Задача. Знайти положення рівня Фермі та температурну залежність концентрації у власному напівпровіднику. Як зміниться концентрація електронів при зміні температури від 200 К до 300 К для германію?
6. Задача. Дослідити температурну залежність рівня Фермі в області домішкової провідності для кремнію легovanого сурмою з концентрацією $N_d = 10^{16}$ см⁻³, $E_d = E_c - 0.039$ еВ.
7. Задача. Розрахувати і накреслити залежність n_i від $1/T$ для германію, кремнію та арсеніду галію. Звернути увагу на значення n_i при кімнатній температурі. Порівняти ці величини для різних матеріалів. Показати, що в розрахунках можна знехтувати температурною залежністю ширини забороненої зони E_g та ефективної густини станів.
8. Задача. Показати, що ймовірність заповнення електронами енергетичного рівня, розташованого на величину ΔE вище рівня Фермі, дорівнює ймовірності заповнення дірками рівня, розташованого на ΔE нижче рівня Фермі.
9. Задача. Показати, що у власному напівпровіднику рівень Фермі розташований нижче середини забороненої зони на $3/4kT \ln(m_n/m_p)$. Довести, що для кремнію це зміщення є значно меншим, ніж для арсеніду галію.
10. Задача. Показати, що рівноважні концентрації носіїв у невідродженому напівпровіднику можна описати співвідношеннями:

$$n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{kT}\right);$$

$$p_0 = p_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right),$$

де E_i - відповідає середині забороненої зони. Визначити положення рівня Фермі відносно E_i для кремнію при $T = 300$, якщо $n_0 = 10^{17}$ см⁻³.

Розділ 4. Статистика електронів та дірок в напівпровідниках при відсутності умов термодинамічної рівноваги. Рекомбінація нерівноважних носіїв заряду.

4.1. Нерівноважні стани, засоби їх утворення. Нерівноважна функція розподілу.

В попередньому розділі ми досліджували систему електронів та дірок в напівпровіднику, які знаходилися в умовах термодинамічної рівноваги. Зараз нас буде цікавити питання про те, що буде, коли на електрони та дірки буде діяти зовнішня сила, яка обумовлена або електричним полем, або зовнішнім опромінюванням, або магнітним полем, або іншим зовнішнім втручанням. Очевидно рівноважна функція розподілу f_0 буде змінюватися під дією цього зовнішнього збурення. Дійсно, наприклад, в умовах термодинамічної рівноваги f_0 симетрична відносно напрямку швидкостей (у відсутності зовнішнього електричного поля ($E = 0$) - струм відсутній). Але коли $E \neq 0$, це вже не так. Аналогічна ситуація має місце, коли на напівпровідник діє випромінювання. Без нього концентрація носіїв в напівпровіднику визначається температурою та природою напівпровідника та його легуванням, а при освітленні ще й залежить від координати, бо освітлена і неосвітлена частини його ясно, що будуть вести себе по різному. Рівноважна функція розподілу f_0 буде змінюватись по різному в залежності від дії зовнішніх сил.

Важливим припущенням при розгляді статистики у нерівноважному стані є те, що ми будемо вважати, що зовнішні сили не змінюють сам спектр електронних станів у кристалі.

При нашому підході можна виділити два характерних випадки нерівноважних систем, в залежності від способу їх утворення.

Перший. В системі діє механізм підвищеної (у порівнянні з тепловою) генерації носіїв заряду, що призводить до утворення нерівноважних носіїв заряду (електронів та дірок).

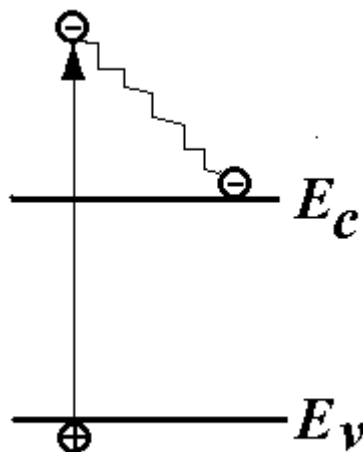


Рис. 4.1. Схематичне зображення утворення нерівноважних носіїв заряду. Електронів у зоні провідності та дірок у валентній зоні.

Хай в наслідок такої генерації утворюється електрон з підвищеною енергією, як це зображено на Рис.4.1. Довжина вільного пробігу електрону дорівнює $l = 10^{-6}$ см., швидкість, як ми вже говорили, $V \approx 10^7$ см./сек., час між двома зіткненнями, таким чином буде $\tau_p \approx 10^{-13}$ сек. Хай за 10^{3-5} зіткнень наш електрон загубить надлишкову енергію і, таким чином, за 10^{-8-10} сек. він опуститься на дно зони провідності і його вже не можна буде відрізнити від інших термодинамічно рівноважних електронів. Однак він ще залишається надлишковим по відношенню до кількості термодинамічно рівноважних електронів. Час його життя, як правило у такому стані не менше ніж 10^{-6} сек. Іншими словами більшу частину свого життя він не відрізняється від теплових електронів. При цьому можна думати, що такі електрони не можна відокремити від інших, які з'явилися у зоні за рахунок теплової генерації, і тому електрони, які ми розглядаємо будуть розподілятися по станам в зоні провідності так само, як і рівноважні, тобто за статистикою Фермі - Дірака. Єдина різниця, яка не зникла при так званій термалізації - це концентрація. Тепер електронів у зоні провідності вже більше ніж у рівноважному стані. Цей момент можна врахувати, якщо у функцію розподілу ввести новий квазірівень Фермі, який забезпечує існування в зоні більшої концентрації. Тоді ця функція розподілу буде відрізнятися від попередньої лише існуванням спеціального рівня Фермі E_{Fe} .

$$f_e = \left(e^{\frac{E-E_{Fe}}{kT}} + 1 \right)^{-1} \quad (4.1)$$

Введений таким чином E_{Fe} буде характеризувати ступінь заповнення станів електронами тільки в зоні провідності. Для дірок треба вводити свій квазірівень Фермі для дірок E_{Fh} . Для окремих рівнів в забороненій зоні концентрації не будуть відповідати введеним нами квазірівням, а матимуть своє інше заповнення. Тобто введені квазірівні Фермі для електронів і дірок не мають вже такого фізичного змісту, як рівноважний рівень Фермі, а вводяться в розгляд лише для зручності опису явищ в нерівноважній системі.

Другий. Хай концентрація в напівпровіднику залишається такою самою, як і в рівноважних умовах ($n = const$), а змінюється лише характер функції розподілу і вона відрізняється від рівноважної. Така ситуація може скластися при прикладанні зовнішнього електричного поля, наприклад. Розглянемо цю ситуацію докладніше. Як відомо, функція розподілу визначає ймовірність заповнення стану в \vec{k}, \vec{r}, t просторі таким чином, що $f = f(\vec{k}, \vec{r}, t)$. В цьому випадку функцію розподілу визначають із рівняння Больцмана (Дивися наступну главу) таким чином:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{поле}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{зіткнення}} \quad (4.2)$$

Перший член відображає зміну функції розподілу за рахунок зовнішнього поля; другий відображає повернення системи до рівноважного стану за рахунок

зіткнень і таким чином протидіє зовнішньому полю. Ясно, що рівноважний стан утворюється за рахунок великої кількості зіткнень носіїв між собою, з недоскональностями кристалічної ґратки, з різними квазічастинками, які існують у кристалі (наприклад, з фононами). Процеси розсіювання можна характеризувати середнім часом вільного пробігу - t_0 - тобто середнім часом між двома актами зіткнення.

4.2. Час релаксації.

Визначимо t_0 більш строго. Нехай маємо в момент часу $t=0$ n_0 електронів, які рухаються зі швидкістю V_0 (їх якимсь чином вприснули в зразок і далі вони рухаються самі собою). Розглянемо, що буде з цією групою електронів з часом. З загальних міркувань ясно, що n_0 буде зменшуватись, за рахунок процесів розсіювання. За час dt це зменшення буде dn . Математично наші міркування виглядають слідуючим чином:

$$dn = -\alpha \cdot n \cdot dt \quad (4.3)$$

якщо вважати, що α є константа, яка не залежить від n і t . Розв'язуючи рівняння (4.3) при умові, що при $t=0, n=n_0$ маємо:

$$n = n_0 \cdot e^{-\alpha t} \quad (4.4)$$

З (4.4) видно, що з часом $n \rightarrow 0$. Тобто, група електронів, які мали швидкість V_0 в наслідок розсіювання зникає. Тоді ймовірність того, що електрон на протязі часу t не буде мати зіткнень і залишиться в групі n_0 є: $\frac{n}{n_0} = e^{-\alpha t}$, а ймовірність того, що в наступний момент буде зіткнення, або це

ймовірність зіткнення за час dt є: $\frac{dn}{n} = -\alpha \cdot dt$. Добуток цих двох ймовірностей є ймовірність того, що електрон має час вільного пробігу t , а потім розсіюється:

$$\omega(t) = \alpha \cdot e^{-\alpha t} dt \quad (4.5)$$

За визначенням середньої величини, середнє значення t_0 , якщо врахувати міркування, що наведені вище, є:

$$t_0 = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot \omega(t) dt}{\int_0^{\infty} \omega(t) dt} = \alpha^{-1} \quad (4.6)$$

Тоді (4.4) набуде вигляду: $n = n_0 \cdot e^{t/t_0}$, таким чином, t_0 це час, на протязі якого n зменшиться в e раз.

4.3. Загальна характеристика механізмів розсіювання носіїв заряду.

Розсіювання може бути ізотропним та анізотропним.

Якщо всі напрямки руху носіїв заряду після акту розсіювання рівно ймовірні, то таке розсіювання називається ізотропним. В цьому випадку $t_0 = \tau_p$, де τ_p - час релаксації імпульсу.

При анізотропному розсіюванні, носії заряду після акту розсіювання зберігають значну частину свого імпульсу, а це значить і початкового напрямку руху. В цьому випадку $t_0 < \tau_p$. Часу τ_p відповідає своя довжина пробігу $l_p = V \cdot \tau_p$. Так само можна говорити про час релаксації за енергією. Можна ввести τ_E, l_E і $l_E = V \cdot \tau_E$. Як правило $\tau_E > \tau_p$. Це має місце тому, що розсіювання відбувається за рахунок пружних зіткнень, при яких передача енергії мала.

В класичній мікроелектроніці всі лінійні розміри напівпровідникових областей l значно більше ніж l_p і l_E . Але можна собі уявити, що виконуються співвідношення $l < l_p$ і $l < l_E$, тоді мають місце так звані розмірні ефекти. Тоді треба проводити більш глибокий аналіз процесів, що відбуваються. Ми зараз розглядати їх не будемо.

Для кількісної характеристики розсіювання вводять величину, яка називається перерізом розсіювання - σ . Тоді час релаксації можна записати у вигляді:

$$t_0 = \frac{1}{N \cdot V \cdot \sigma} \quad (4.7.)$$

де: N - концентрація тих частинок, що розсіюються; V - швидкість, з якою вони рухаються; σ - переріз розсіювання.

В загальному випадку час релаксації імпульсу залежить від енергії, а характер цієї залежності визначається механізмом розсіювання. Фактично визначення механізму розсіювання є відповідь на питання, яким чином губить свою енергію носій, яка взаємодія визначає ці втрати енергії. Розглянемо деякі з процесів, що обумовлюють ці механізми.

4.4. Розсіювання на фононах, іонізованих та нейтральних домішках.

Розсіювання на акустичних коливаннях кристалічної ґратки. Раніше ми показали, що закон збереження імпульсу при розсіюванні електрона на фононі є: $\hbar \vec{k} - \hbar \vec{k}' = \pm \hbar q$. Ймовірність зустрітися з фононами різного напрямку однакова для всіх напрямків руху електронів, а це означає, що і після взаємодії напрямки руху може бути будь яким. Тобто в цьому випадку ми маємо справу з ізотропним розсіюванням, або $t_0 = \tau_p$. Згідно з (4.7) $t_0 \sim N^{-1} \sim$ кількості фононів, яка згідно з статистикою Бозе -Ейнштейна пропорційна $\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$. Цю функцію

можна розкласти по малому параметру $\frac{\hbar\omega}{kT}$ і тоді $\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \sim \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega}{kT} - 1} \sim \frac{kT}{\hbar\omega}$.

Далі, оскільки $V \sim E^{1/2}$ та в невиродженому напівпровіднику $T \sim E$ то маємо:

$$t_0 = \frac{1}{N \cdot V \cdot \sigma} \sim T^{-3/2}.$$

Розсіювання на іонізованих домішках. В цьому випадку розсіювання анізотропне. Розв'язок цієї задачі може бути отриманий на основі відомої формули Резерфорда. Треба однак врахувати, що носій рухається в середовищі з діелектричною проникністю ε і можуть бути різні випадки взаємодії з зарядженим центром, в залежності від радіусу екранування точкового заряду в напівпровіднику. Цей розв'язок приводить до залежності $\tau_p \sim T^{3/2} \sim E^{3/2}$.

Фізично і перший, і другий випадок зрозумілі. В першому - час релаксації зменшується з ростом температури, бо збільшується кількість центрів розсіювання, а в другому - зменшується час взаємодії, тому час релаксації збільшується.

Розсіювання на нейтральних домішках. Цей процес характеризується безпосереднім, лобовим зіткненням. Така задача розв'язана в квантовій механіці і це є розсіювання електронів на атомах водню. Розв'язок її дає наступний результат: $\tau_p \sim T^0 \sim E^0$.

Як правило в реальній ситуації мають місце всі механізми одночасно. Використовуючи міркування, які наведені вище, не важко показати, що в такому випадку загальний час релаксації можна визначити наступним чином:

$$\frac{1}{\tau_p} = \sum_i \frac{1}{\tau_{pi}} \quad (4.8)$$

4.5. Механізми рекомбінації в напівпровідниках.

Розглянемо нерівноважний стан системи у випадку, коли існують додаткові джерела генерації нерівноважних носіїв заряду. Якщо діє додаткове джерело генерації носіїв заряду (наприклад напівпровідник опромінюється світлом, яке поглинається), то збільшується концентрація носіїв у зоні провідності та валентній зоні, але в той же час збільшується й ймовірність зворотного процесу, який полягає в їх зустрічі і рекомбінації. Таким чином рекомбінація є процес, в результаті якого, зникають одночасно вільний електрон і дірка. Процеси генерації та рекомбінації утворюють новий стаціонарний стан, який характеризується більшою концентрацією носіїв.

Можна виділити декілька основних механізмів рекомбінації:

i) міжзонна рекомбінація; ii) рекомбінація за участю дефектних станів - локальних центрів; iii) поверхневу рекомбінацію, підкреслюючи те, що рекомбінація відбувається на поверхні, або межі поділу гетерофазної системи.

При всіх механізмах рекомбінації повинні виконуватися закони збереження енергії та імпульсу для всіх учасників цього процесу. Тобто $E^1 = E + \Delta E$, та $\vec{p}^1 = \vec{p} + \vec{q}$. В цих виразах ΔE - енергія, яка виділяється при рекомбінації; \vec{q} - імпульс, який передається в системі, при виділенні енергії ΔE .

Розглянемо, як виконуються ці закони при міжзонній та домішковій рекомбінації.

Міжзонна рекомбінація.

Як відомо зонна структура може бути двох типів. Її можна зобразити так, як зображено на Рис 4.2. (а,б) .

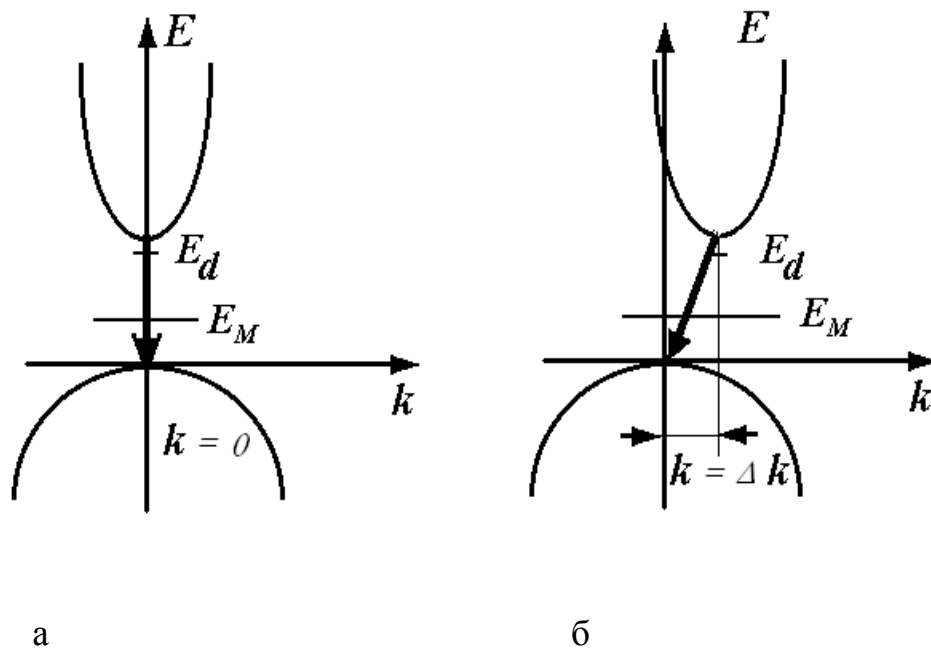


Рис 4.2.(а,б). Зонна структура прямозонного (а), та непрямоzonного (б) напівпровідника.

Якщо міжзонна рекомбінація випромінювальна - то закон збереження енергії виконується за рахунок випромінювання кванта світла - фотона з енергією, яка дорівнює ширині забороненої зони. Для прямозонного напівпровідника процес зонної рекомбінації дуже ефективний, бо проблем з законом збереження імпульсу немає і він виконується завжди, тому що імпульс фотона $\hbar \vec{p}_{\text{фот}} \ll \hbar \vec{p}_{\text{елек}}$. В цьому процесі рекомбінують вільна дірка з вільним електроном. Ці частинки мають протилежні імпульсами. Імпульси майже однакові, можна сказати, що рівні, тому що різниця між ними згідно з законом збереження імпульсу повинна бути дуже мала. У випадку непрямоzonного напівпровідника для виконання закону збереження необхідний третій учасник події рекомбінації, бо, як видно з Рис.4.2 (б), закон збереження імпульсу вимагає його великої зміни. Цей третій учасник є фонон. Ймовірність процесу з трьома частинками значно менша від ймовірності двохчасткового процесу. Тому міжзонна рекомбінація значна в прямозонних напівпровідниках і незначна в непрямоzonних. В непрямоzonних напівпровідниках більш важливою є рекомбінація через домішкові рівні.

Рекомбінація через домішкові рівні.

Перше, що треба зробити для розуміння цього процесу це зобразити на Рис. 4.2. (а,б) залежності $E(k)$, положення глибоко і мілкового рівнів. Для мілких і глибоких рівнів це будуть відрізки різної довжини. Дійсно, для воднеподібних (мілких) домішок має місце сильна делокалізація. Тому із закону невизначеності імпульс такого електрону визначений досить точно (відрізок в

імпульсному просторі по координаті \vec{k} буде коротким). Для глибоких рівнів - навпаки. Центр сильно локалізований (тобто має точну геометричну координату), тому імпульс має широкі межі невизначеності, в тому числі і такий, який необхідний для виконання закону збереження імпульсу. Цьому випадку відповідатиме довгий відрізок по координаті \vec{k} у імпульсному просторі. В зв'язку з цим процеси рекомбінації за участю глибоких рівнів будуть більш ймовірними. Крім того в такий ситуації більше можливостей для виконання закону збереження енергії при рекомбінації, якщо ця енергія не йде на випромінювання.

4.6. Кінетика рекомбінації носіїв заряду. Переріз захоплення центрів рекомбінації.

Щоб розглянути цю ситуацію кількісно необхідно ввести час життя електронів τ_e та час життя дірок τ_h .

Хай G - швидкість генерації електронів в одиниці об'єму за 1 секунду. Тоді зміна концентрації електронів може бути описана рівнянням:

$$\frac{d\Delta n}{dt} = G - \frac{\Delta n}{\tau_e} \quad (4.9)$$

Якщо в момент часу $t = 0$ увімкнути світло, то при таких граничних умовах зміна додаткової (що викликана освітленням) концентрації електронів буде відбуватися по закону:

$$\Delta n = G \cdot \tau_e (1 - e^{-\frac{t}{\tau_e}}) \quad (4.10)$$

В стаціонарному випадку: $\Delta n = G\tau_e$, тому що:

$$\Delta n = \Delta n_{cm} (1 - e^{-\frac{t}{\tau_e}}) \quad (4.11)$$

Якщо вимкнути світло, то закон зміни концентрації буде таким:

$$\Delta n = \Delta n_{cm} e^{-\frac{t}{\tau_e}} \quad (4.12)$$

Таким чином, зміна концентрації носіїв заряду у часі матиме вигляд наведений на Рис. 4.3.

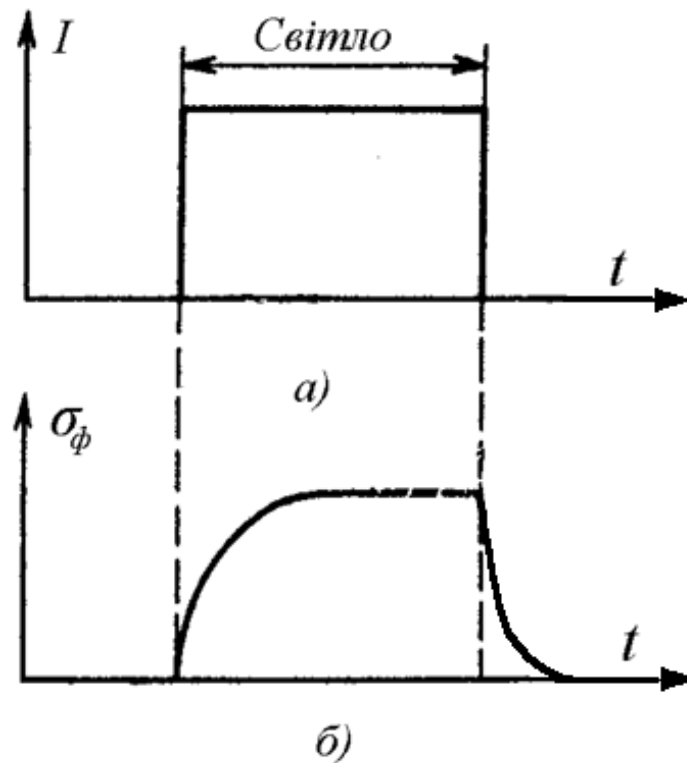


Рис.4.3. Зміна концентрації носіїв заряду у часі.

З Рис.4.3 можна бачити, що вимірюючи зміну концентрації носіїв заряду у часі можна визначити час їх життя.

Аналогічний підхід може бути застосований і до дірок, тоді стаціонарні концентрації будуть визначатись $\Delta n = G\tau_e$, $\Delta p = G\tau_h$. Ясно, що коли $\tau_e \neq \tau_h$, то і $\Delta n_{cm} \neq \Delta p_{cm}$. Тобто в напівпровідниках, де носії заряду виникають одночасно може бути нерівноважна монополярна провідність. І тільки у випадку $\tau_e = \tau_h$ - провідність біполярна.

4.7. Випромінювальна та невимпрінювальна рекомбінація.

Тепер постає питання. Від чого залежить час життя? Як ми неодноразово показували, для характерного часу життя можна записати:

$\tau = \frac{1}{N \cdot v \cdot S}$ де N - концентрація центрів рекомбінації; v - теплова швидкість; S - перетин захоплення. Якщо концентрацію центрів рекомбінації та теплову швидкість носіїв заряду вважати константами, то основна залежність часу життя буде зосереджена в залежності від перетину захоплення. Від чого ж залежить перетин захоплення? Перш за все центр, на який захоплюється носій заряду при рекомбінації має певний заряд. Отже є кулонівська взаємодія або притягування, або відштовхування. Якщо відбувається захоплення електрона на іонізований донор, то $S_e > S_h$, якщо на акцептор - $S_e < S_h$. Але не тільки

кулонівська взаємодія впливає на перетин захоплення. Дуже важливим є процес виділення енергії при захопленні носія заряду. При цьому важливим є яким шляхом випромінювальним чи не випромінювальним розсіюється надлишкова енергія. Випромінювальна рекомбінація закінчується випромінюванням фотона - кванта світла. Невипромінювальна рекомбінація може відбуватися декількома механізмами.

Наприклад. Перший випадок. Оже-рекомбінація. Цей процес полягає в тому, що енергія, яка виділяється при рекомбінації передається третій частинці, наприклад електрону зони провідності (або дірці валентної зони). Можлива міжзонна і домішкова Оже - рекомбінація. На Рис. 4.4 схематично зображений домішко вий Оже- процес.

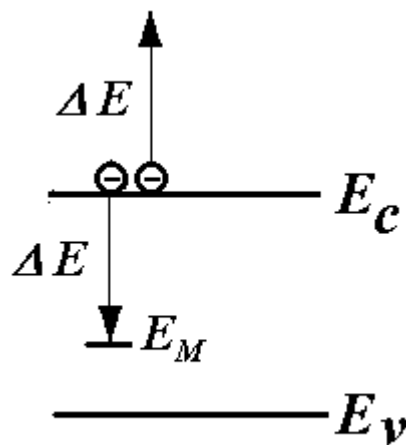


Рис.4.4. Схематичне зображення процесу Оже - рекомбінації.

Енергія, яка поглинулася третьою частинкою у цьому процесі може призвести або до подолання зовнішнього потенційного бар'єру, або виникнення так званого "гарячого електрону" (або дірки). Другий випадок. Енергія, що виділилася в процесі рекомбінації розмінюється фононами. Дуже мало ймовірний випадок (треба порядку 10 фононів в одному місці кристалічної ґратки і в один і той же час (їх породження так само мало ймовірно, як їх зустріч)). Однак рекомбінація "гарячого електрона" в певних випадках може бути цілком ймовірним процесом, а енергія, що виділилася може розсіюватися за рахунок створення нового дефекту. Третій випадок. Каскадний механізм Лекса (Рис.4.5.).

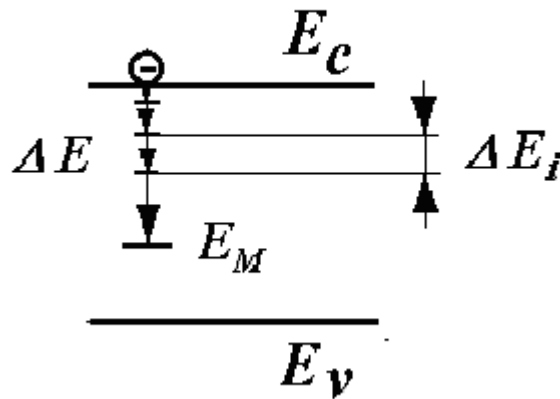


Рис.4.5. Схематичне зображення процесу, який відображає каскадний механізм Лекса.

В цьому процесі енергія рекомбінації послідовно розмінюється фононами при переході носіїв по каскаду збуджених станів глибокого рівня. Такий механізм можливий при захваті носія на центр притягування електрона на донорний рівень, дірки - на акцепторний).

Враховуючи механізм виділення енергії при рекомбінації можна записати, перетин захоплення $S = \alpha S_1$ де S_1 - геометричний перетин центру, що дорівнює по порядку величини 10^{-14-15} см^2 . В залежності від механізму α може бути >1 і <1 . Наприклад. Для випромінювального переходу при розмірі центру $r \approx 10^{-7} \text{ см.}$, S_1 має порядок величини 10^{-14} см^2 , швидкість руху носія $\sim 10^7 \text{ см/сек}$; тоді час взаємодії з центром становить $\Delta t \approx 10^{-14} \text{ сек.}$, а час випромінювального переходу $\sim 10^{-8} \text{ сек.}$. Якби $\Delta t \approx 10^{-8} \text{ сек.}$, тоді $\alpha = 1$, а в нашому випадку ймовірність того, що випромінювання відбудеться становить величину 10^{-6} ($\sim 10^{-14}/10^{-8} = 10^{-6}$). При такому підході перетин захвату можна оцінити, як $S = 10^{-6} \cdot 10^{-14} \sim 10^{-20} \text{ см}^2$. Це є типові значення перетину захвату при випромінювальному переході, в тому числі для міжзонних переходів. Для невивромінювального переходу перетин захоплення носія можна оцінити слідуєчим чином. Якщо захоплення носія сталося на рівень, який лежить на декілька kT нижче від E_c , то він з великою ймовірністю не повернеться в зону провідності. Хай енергетичне положення рівня буде $\Delta E \approx 2kT$. Тобто можна вважати, що при $2kT = \frac{e^2}{\epsilon r}$ електрон в зону провідності не повернеться. Тоді

радіус притягання буде дорівнювати $r = \frac{e^2}{2kT\epsilon}$. Порядок величини перетину захоплення буде $S = \pi r^2$. Підставимо реальні значення $T=300$, $\epsilon = 10$ і матимемо $S = 10^{-13} \text{ см}^2$. Тобто $\alpha > 1$. В цьому випадку виявляється $S \sim r^2 \sim T^{-2}$. Фізично це означає, що з ростом температури ефективний перетин захоплення зменшується. Роблячи висновок, можна сказати, що рекомбінація відбувається, коли на основний стан центру захоплення буде захоплений електрон і дірка, при цьому, як і раніше захват дірки може бути як випромінювальним, так і невивромінювальним. Підхід, який наведений вище, важко застосувати, коли

ми маємо справу з відштовхуючим центром. В такому випадку $\alpha \ll 1$ і типове значення S лежить в межах 10^{-19-22} см^2 . Коли в матеріалі існує декілька процесів, що характеризуються кожний своїм часом релаксації, кінцевий результат визначається як $\frac{1}{\tau} = \sum_i^n \frac{1}{\tau_i}$, або виходячи з (4.7) $\sigma = \sum_i^n \sigma_i$ (якщо електронні переходи взаємонезалежні).

Залишається лише додати, що центри в забороненій зоні можуть бути центрами рекомбінації, або центрами прилипання, або можуть бути пастками для носіїв заряду. Нехай за рахунок поглинання фотона (процес 1 на Рис.4.6.) виникає електрон у зоні провідності. Тоді всі процеси, захоплення носіїв на центр, можна зобразити так, як це зроблено на Рис.4.6.

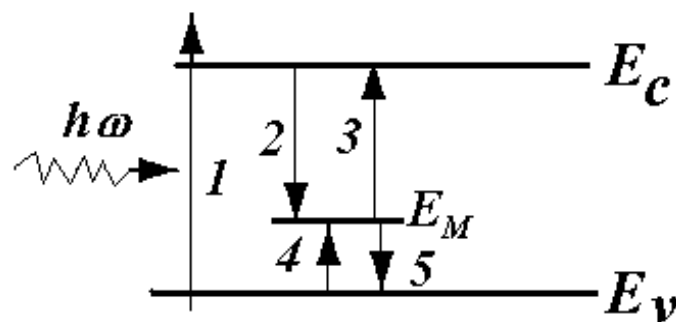


Рис.4.6. Типи переходів при захопленні носіїв на глибокий рівень, що знаходиться у забороненій зоні напівпровідника.

1 - збудження електрона з валентної зони у зону провідності; 2 - захоплення електрона на глибокий рівень E_m ; 3 - термічна (теплова генерація електрона з рівня E_m в зону провідності E_c ; 4 - генерація дірки з рівня E_m в валентну зону E_v ; 5 - захоплення дірки з валентної зони E_v на рівень E_m . Якщо ймовірність захоплення дірки на рівень E_m після захоплення на нього електрона більша ніж ймовірність теплового виходу електрона в зону провідності E_c , то такий центр буде центром рекомбінації. При звороньому співвідношенні ймовірностей центр буде центром прилипання, або пасткою для носіїв заряду. Один і той же центр може бути центром рекомбінації при одних умовах і стає пасткою, або центром прилипання при інших. Таке перетворення може відбуватися, наприклад, при зміні температури.

4.8. Статистика рекомбінації Шоклі-Ріда.

Розглянемо всі можливі переходи носіїв заряду при наявності глибокого рівня в забороненій зоні напівпровідника. Будемо розглядати напівпровідник з

одним типом рекомбінаційних центрів. Будемо вважати, що M повна концентрація центрів; E_M - глибина залягання центру в забороненій зоні напівпровідника; m - концентрація електронів на рівні E_M . На Рис. 4.6 зображені п'ять типів переходів, які можливі в такій ситуації, яку ми описали.

Запишемо інтенсивності всіх цих переходів.

1. Перехід першого типу пропорційний величині опромінювання і в загальному вигляді може бути описаний, як:

$$G = \beta \cdot k \cdot L \quad (4.13)$$

де k - коефіцієнт поглинання; β - квантовий вихід.

2. Інтенсивність захоплення носія на центр пропорційна концентрації електронів у зоні провідності та ймовірності захоплення:

$$-\omega \cdot \Delta n = \frac{\Delta n}{\tau} = nNvS = n(M - m)vS = \gamma_e n(M - m) \quad (4.14)$$

У виразі (4.14) $\Delta n = n - n_0$ де n_0 - рівноважна концентрація. Якщо позначити кількість вільних місць на центрі через $N = M - m$, а величину $vS = \gamma_e$.

3. Інтенсивність теплового викиду в зону запишемо як:

$$\alpha_e m \quad (4.15)$$

де α_e - коефіцієнт теплового збудження електрона з центру.

Аналогічно можна записати для захоплення дірки на рівень E_M .

4. Інтенсивність захоплення дірки на рівень E_M .

$$\gamma_h m p \quad (4.16)$$

де p - концентрація дірок у валентній зоні, γ_h - введено аналогічно з γ_e .

5. Інтенсивність теплової генерації дірки, або викиду дірки з центру E_M у валентну зону E_V :

$$\alpha_h (M - m) \quad (4.17)$$

де α_h - коефіцієнт теплового збудження дірки з центру.

Як і раніше ми розглядаємо дірку, як місце не зайняте електроном.

Як знайти α_e і α_h ? Будемо вважати, як і раніше, що рівноважний і нерівноважний носії не відрізняються. Це значить, що α_e і α_h для них не відрізняються. Тому знайдемо α_e для рівноважних умов, а далі будемо їх застосовувати для нерівноважних умов.

Запишемо рівняння для стаціонарного стану концентрації носіїв у зоні провідності $\frac{dn_0}{dt}$ без зовнішнього збудження, то б то без освітлення:

$$\frac{dn_0}{dt} = \alpha_e m_0 - \gamma_e n_0 (M - m_0) = 0 \quad (4.18)$$

Як видно з рівняння, ми врахували два процеси, що обумовлюють стаціонарний стан: і) збудження носіїв з центру за рахунок теплового викиду (перший член рівняння); ii) захват носіїв заряду з зони провідності на вільні місця глибокого рівня (другий член рівняння). В рівноважному стані ясно, що ці процеси повинні бути однакові. Розв'язок рівняння (4.18) відносно рівноважного заповнення рівня m_0 є:

$$m_0 = \frac{M}{\frac{\alpha_e}{\gamma_e n_0} + 1} \quad (4.19)$$

З іншого боку $m_0 = f \cdot M$ де f - функція розподілу Фермі -Дірака і

$$m_0 = \frac{M}{e^{\frac{-E_M - E_F}{kT}} + 1} \quad (4.20)$$

Порівнюючи (4.19) і (4.20) знаходимо:

$$\alpha_e = \gamma_e n_0 e^{\frac{-E_M - E_F}{kT}} \quad (4.21)$$

Враховуючи, що :

$$n_0 = N_c e^{\frac{-E_F}{kT}}, \text{ то } \alpha_e = \gamma_e N_c e^{\frac{-E_M}{kT}} \quad (4.22)$$

Тоді відповідний потік 3 (інтенсивність теплового викиду в зону) можна записати у рівноважному випадку як :

$$\alpha_e m_0 = \gamma_e m_0 N_c e^{\frac{-E_M}{kT}} \quad (4.23)$$

В нерівноважному випадку форму закону зберігаємо і маємо :

$$\alpha_e m = \gamma_e m N_c e^{\frac{-E_M}{kT}} \quad (4.24)$$

Аналогічно для дірок можна отримати :

$$\alpha_h (M - m) = \gamma_h (M - m) N_v e^{\frac{-E_g + E_M}{kT}} \quad (4.25)$$

Тепер ми можемо порівняти потоки захоплення носія з зони провідності на рівень $\gamma_e \Delta n (M - m)$ та потік з рівня в зону провідності $\gamma_e m N_c e^{\frac{-E_M}{kT}}$. З цього порівняння видно, що “рекомбінація” m електронів із вільними місцями в зоні провідності потребує витрати енергії, тобто подолання потенційного бар’єру E_M . Величину $N_c e^{\frac{-E_M}{kT}}$ можна назвати ефективною густиною станів у зоні провідності, зведеної до рівня M та ввести позначення :

$$N_{CM} = N_c e^{\frac{-E_M}{kT}} \text{ та } N_{VM} = N_v e^{\frac{-E_g + E_M}{kT}} \quad (4.26)$$

Це є концентрація електронів та дірок, коли б E_F та E_M співпадали б

Таким чином, використовуючи наведені вище міркування можемо записати рівняння рекомбінації у вигляді :

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta n}{dt} &= \frac{dn}{dt} = \beta kL + \gamma_e m N_{CM} - \gamma_e n (M - m) \\ \frac{d\Delta m}{dt} &= \frac{dm}{dt} = \gamma_e n (M - m) - \gamma_e m N_{CM} + \gamma_h (M - m) N_{VM} - \gamma_h p m \\ \frac{d\Delta p}{dt} &= \frac{dp}{dt} = \beta kL + \gamma_h (M - m) N_{VM} - \gamma_h p m \\ \Delta n + \Delta m &= \Delta p \end{aligned} \quad (4.27)$$

Наша задача знайти рівноважний час життя носія τ з умови $\frac{d\Delta n}{dt} = 0 = \beta kL - \frac{\Delta n}{\tau}$. $\tau = \frac{\Delta n}{\beta kL}$ В загальному випадку розв’язати систему рівнянь (4.27) складно бо ми маємо систему нелінійних рівнянь відносно n, m та p .

Будемо спрощувати задачу. Розглянемо стаціонарний випадок, коли $\frac{d}{dt} = 0$.

Тоді з рівняння 2 системи рівнянь (4.27) матимемо :

$$\frac{dm}{dt} = 0 = \gamma_e n(M - m) - \gamma_e m N_{CM} = \gamma_h m p - \gamma_h (M - m) N_{VM} = \beta k L \quad (4.28)$$

Перший член цього рівняння відображає абсолютну швидкість захоплення електронів, другий - абсолютну швидкість захоплення дірок. В стаціонарному випадку абсолютна швидкість захоплення електронів та дірок однакова (немає накопичення заряду на глибокому рівні і дорівнює швидкості їх генерації $\beta k L$. З рівняння (4.28) знайдемо концентрацію електронів на глибокому рівні m та кількість вільних місць $(M - m)$:

$$m = M \frac{\gamma_h N_{VM} + \gamma_e n}{\gamma_h (N_{VM} + p) + \gamma_e (N_{CM} + n)} \quad (4.29)$$

$$M - m = M \frac{\gamma_e N_{CM} + \gamma_h p}{\gamma_h (N_{VM} + p) + \gamma_e (N_{CM} + n)} \quad (4.30)$$

Підставляючи в праву частину рівняння (4.28) відповідні вирази для m та $M - m$ маємо для $\beta k L$.

$$\beta k L = \frac{\gamma_e \gamma_h (np - N_{CM} N_{VM})}{\gamma_h (p + N_{VM}) + \gamma_e (n + N_{CM})} \quad (4.31)$$

Наступне спрощення полягає в тому, що будемо вважати, що концентрація центрів M мала в тому сенсі, що їх заселеність (точніше зміна їх заселеності) не впливає на зміну концентрації в зонах, тобто рівняння електронейтральності можна переписати у вигляді $\Delta n = \Delta p$. Як і раніше повні концентрації електронів та дірок можна записати у вигляді :

$$\begin{aligned} n &= n_0 + \Delta n \\ p &= p_0 + \Delta p \end{aligned} \quad (4.32)$$

n_0, p_0 - термодинамічно рівноважні значення концентрацій носіїв. Відповідний час життя може бути записаний у вигляді :

$$\tau_e = \frac{\Delta n}{G}, \tau_h = \frac{\Delta p}{G}, \tau_e + \tau_h = \tau \quad (4.33)$$

Підставляючи значення n та p в рівняння (4.28) та враховуючи

$$\frac{d\Delta n}{dt} = 0 = \beta k L - \frac{\Delta n}{\tau}, \text{ або } \tau = \frac{\Delta n}{\beta k L}, \text{ а також враховуючи, що } \Delta n = \Delta p, \text{ одержуємо}$$

вираз для часу життя τ :

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{n_0 + N_{CM} + \Delta n}{\gamma_h M(n_0 + p_0 + \Delta n)} + \frac{p_0 + N_{VM} + \Delta n}{\gamma_e M(n_0 + p_0 + \Delta n)} = \\ \tau_{h0} \frac{n_0 + N_{CM} + \Delta n}{n_0 + p_0 + \Delta n} + \tau_{e0} \frac{p_0 + N_{VM} + \Delta n}{n_0 + p_0 + \Delta n} \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\text{де } \tau_{h0} = \frac{1}{\gamma_h M}, \tau_{e0} = \frac{1}{\gamma_e M}$$

Останнє спрощення полягає в тому, що вважаємо $\Delta n, \Delta p \ll n_0, p_0$. Фізично це означає, що ми маємо справу з малим збудженням. Тоді :

$$\tau = \tau_{h0} \frac{n_0 + N_{CM}}{n_0 + p_0} + \tau_{e0} \frac{p_0 + N_{VM}}{n_0 + p_0} \quad (4.35)$$

В такому наближенні τ залежить виключно від термодинамічно рівноважних величин n_0 та p_0 і визначається параметрами глибокого рівня E_M .

4.9. Залежність часу життя носіїв заряду від положення рівня Фермі. Основні висновки моделі.

Ми вже знаємо, що n_0 та p_0 визначаються положенням рівня Фермі в системі. Тому розглянемо залежність τ від положення рівня Фермі при фіксованій енергії глибокого рівня E_M в забороненій зоні напівпровідника (наприклад у верхній половині забороненої зони).

В такому наближенні $N_{CM} \gg n_i \gg N_{VM}$ бо ці вирази відрізняються експоненційними множниками з відповідними показниками експонент. Враховуючи те, що викладено вище будемо мати для чотирьох областей положення рівня Фермі E_F в системі слідує ситуацію для $\tau(E_F)$. Коли E_F розташований між E_C та $-E_M$, тоді $n_0 \gg N_{CM}, n_0 \gg p_0, n_0 \gg N_{VM}$ і з виразу (4.35) матимемо, що $\tau = \tau_{h0}$. Це відповідає області 1 Рис. 4.7, на якому зображена залежність логарифму часу життя від положення рівня Фермі в системі.

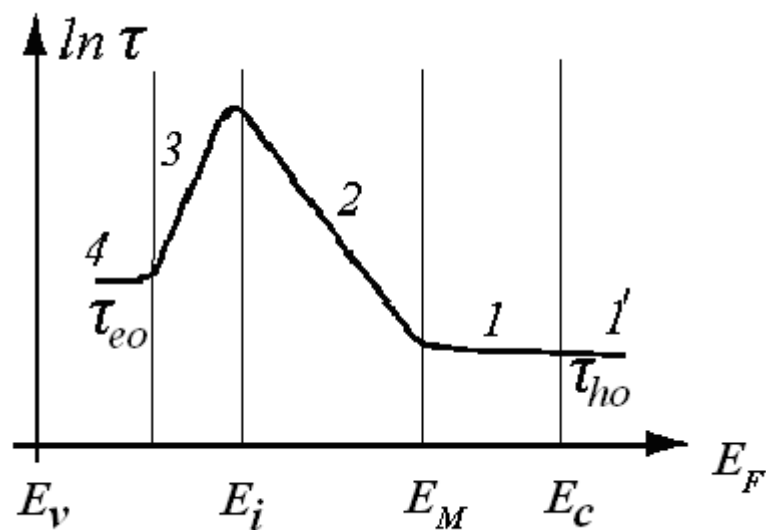


Рис. 4.7. Залежність логарифму часу життя від положення рівня Фермі в напівпровіднику.

В цьому випадку час життя τ визначається виключно числом та властивостями глибоких центрів E_M , які повністю заповнені електронами. Дійсно, в умовах рівноваги всі центри заповнені електронами і як тільки на них захоплюється дірка, зразу ж після цього захоплюється електрон, яких багато в зоні

провідності (бо рівень Фермі знаходиться ближче до зони провідності). Тому час життя визначається часом життя дірки.

Розглянемо тепер випадок, коли рівень Фермі E_F знаходиться між E_M та E_i . Це відповідає області 2 Рис. 4.7. Тепер співвідношення між основними параметрами рівняння (4.35) буде іншим, а саме $N_{CM} \gg n_0, n_0 \gg p_0, n_0 \gg N_{VM}$. Це призводить, після відповідних спрощень в (4.35), до наступного вигляду для τ :

$$\tau = \tau_{h0} \frac{N_{CM}}{n_0} = \tau_{h0} e^{\frac{-E_M - E_F}{kT}}.$$

З цього виразу видно, що час життя росте при наближенні рівня Фермі до положення E_i . Такий ріст τ відображає фізично наступний процес. В умовах рівноваги ступінь заповнення рівня E_M електронами незначна (бо E_F знаходиться нижче E_M), але кожна захоплена дірка відразу ж “забивається” електроном (напівпровідник залишається ще напівпровідником n типу, E_F лежить вище в забороненій зоні ніж E_i). Однак зі зміщенням E_F ближче до E_i заповнення рівня E_M зменшується і дірка “повинна більше шукати” необхідний для рекомбінації її центр, заповнений електроном. Тому $\ln \tau \sim \frac{-E_M - E_F}{kT}$.

В області 3 (Рис. 4.7) напівпровідник стає напівпровідником p - типу (рівень Фермі перетинає E_i). Співвідношення між основними параметрами рівняння (4.35) набуває вигляду: $p_0 \gg n_0, p_0 \gg N_{VM}, N_{CM} > n_0, N_{CM} > p_0$. Тоді

$$\tau = \tau_{h0} \frac{N_{CM}}{p_0} = \tau_{h0} \frac{N_C}{N_V} e^{\frac{-E_M + E_F + E_g}{kT}}.$$

Бачимо, що τ зменшується на цій ділянці із зниженням положення рівня Фермі E_F . В цьому випадку майже всі рівні E_M порожні і тому з великою ймовірністю захоплюють електрони, але при цьому дірок ще недостатньо, щоб кожний захоплений електрон рекомбінував з діркою, тому через деякий час електрон може генеруватись в зону провідності.

При переході до області 4 (Рис. 4.7) E_F зміщується до E_g , число дірок збільшується і процес рекомбінації зростає, а τ зменшується до величини τ_{e0} , коли співвідношення між параметрами рівняння (4.35) стає наступним: $p_0 \gg n_0, p_0 \gg N_{VM}, p_0 \gg N_{CM}$. При цьому захоплений електрон зразу ж “забивається” захопленням дірки, тому час життя визначається часом життя електрона.

4.10. Спін залежна рекомбінація в напівпровідниках.

В напівпровідниках, які мають в забороненій зоні декілька рівнів можлива рекомбінація, в якій беруть участь декілька центрів одночасно. Експериментальні дослідження, які вказують на можливість існування такого процесу є дослідження спін-залежної рекомбінації в напівпровідниках.

Як відомо електрони характеризуються спіновим станом, який може дорівнювати або $+1/2$, або $-1/2$. Спін електронів визначає магнітні властивості магнітних матеріалів, для яких ефективна маса та концентрація вільних електронів не є особливо важливими параметрами. В напівпровідниках -

навпаки. Основними є ефективна маса, рухливість, на відміну від магнітних властивостей носіїв заряду. Очевидно можна собі уявити клас явищ в напівпровідниках, для яких магнітні властивості носіїв заряду будуть мати суттєве значення.

Нагадаємо коротко, як спин електрона веде себе у магнітному полі. Розглянемо добре відомий з атомної фізики ефект Зеемана. На Рис. 4.8 зображена енергетична схема розщеплення основного стану виродженого електронного рівня атома, який знаходиться в магнітному полі.

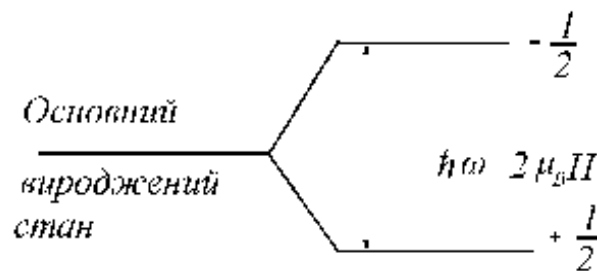


Рис. 4.8. Енергетична схема розщеплення основного стану виродженого електронного рівня атома, який знаходиться в магнітному полі.

Позначимо число електронів зі спіном $+1/2$ як n_+ , а зі спіном $-1/2$ - n_- , тоді в умовах термодинамічної рівноваги ймовірність того, що стан з даною енергією зайнятий пропорційний больцманівському фактору $e^{-\frac{E}{kT}}$ і ми можемо записати:

$$\frac{n_+}{n_+ + n_-} = \frac{e^{-\frac{\mu H}{kT}}}{e^{-\frac{\mu H}{kT}} + e^{\frac{\mu H}{kT}}} \quad \text{і} \quad \frac{n_-}{n_+ + n_-} = \frac{e^{\frac{\mu H}{kT}}}{e^{-\frac{\mu H}{kT}} + e^{\frac{\mu H}{kT}}} \quad (4.36)$$

$n = n_+ + n_-$, а μ є магнітний момент.

Загальна намагніченість зразка M може бути визначена виразом, якщо позначити $x = \frac{\mu H}{kT}$:

$$M = (n_+ - n_-)\mu = n\mu \cdot \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = n\mu \cdot \text{th}(x) \quad (4.37)$$

При температурах $T > 1$ К величина $x = \frac{\mu H}{kT} \ll 1$ і вираз (4.37) спрощений при розкладанні гіперболічного тангенсу по малому параметру, тоді:

$$M = \frac{n\mu^2 H}{kT} = n\mu \frac{\mu H}{kT} \equiv n\mu P \quad (4.38)$$

$$\text{де } P = \frac{n_+ - n_-}{n_+ + n_-} \quad (4.39)$$

P - це загальне визначення поляризації, а для нашого випадку поляризацію можна записати, як: $P \approx \frac{\mu H}{kT}$

Якщо електрони знаходяться на центрах, то їх поляризація може бути записана, як:

$$P = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-} \approx \frac{\mu H}{kT} \quad (4.40)$$

Тепер розглянемо процес рекомбінації через рівень у забороненій зоні напівпровідника, на якому до захвату електрона із зони провідності вже знаходився один електрон. Згідно з принципом Паулі на центрі можуть знаходитись два електрона. Не для всіх центрів це можливо, бо існує кулонівська взаємодія між електронами. Однак можна уявити собі ситуацію, коли два електрона можуть знаходитись на одному рівні, долаючи силу кулонівського відштовхування. В такому випадку електрон із зони провідності може захопитись на глибокий рівень лише в тому випадку, коли спіни їх протилежні, тобто синглетна конфігурація спінів. У звичайній ситуації завжди знайдеться у зоні провідності електрон з відповідним спіном. Таким чином, ніяких обмежень що до рекомбінації з врахуванням спінів не існує. Уявимо собі, що до системи прикладене велике магнітне поле, тоді всі спіни вільних електронів та на глибоких центрах мають одне і те ж значення, яке відповідає напрямку зовнішнього магнітного поля. При цьому вже з'являється обмеження що до рекомбінації, бо захват електрона на глибокий рівень, на якому вже знаходиться один електрон стає неможливим, а можливий тільки для електронів з протилежними спінами. Це значить, що час життя відповідних процесів рекомбінації прямує до нескінченності для $H \rightarrow \infty$. Реально нескінченності не буває і це означає, що час життя просто значно збільшується, і при певних умовах рекомбінація буде йти через інший, менш ефективний канал, наприклад, міжзонна рекомбінація. На основі статистики Шоклі -Ріда можна розрахувати час життя в такій моделі, потім знайти $\delta \Delta n = \Delta n(H) - \Delta n(0)$ та $\delta \Delta n / \Delta n$. Розрахунки показують, що:

$$\frac{\delta \Delta n}{\Delta n} = \frac{\delta \tau}{\tau} \approx \left(\frac{\mu H}{kT} \right)^2 \quad (4.41)$$

При температурі $T=300$ К і $H=10^3$ Е $\frac{\delta \Delta n}{\Delta n} = \frac{\delta \tau}{\tau} = \left(\frac{\mu H}{kT} \right)^2 = 10^{-6}$. Таким чином виникає інша проблема, яким чином можна виміряти ефект такої величини ? Щоб повністю зрозуміти проблему, нагадаємо, що в цей же час має місце ефект зміни опору у магнітному полі (магнетоопір), ефект іншої природи, ніяким чином не пов'язаний з спін-залежною рекомбінацією. Треба створити такі експериментальні умови, щоб вимірювалась тільки різниця в провідності за рахунок спінової орієнтації. Виявляється, що це можна зробити використовуючи умови спінового резонансу. Як відомо спіновий резонанс настає, коли частота електромагнітного поля дорівнює енергії Зеєманівського розщеплення рівня. Проведені експериментальні дослідження показали існування спін-залежної релаксації і показали, що величина $(\delta \Delta \sigma / \Delta \sigma) = 10^{-5}$, тобто на порядок перевищує теоретичні розрахунки.

Англійський вчений, лауреат Нобелівської премії Н. Мот, звернув увагу на те, що об'єкти в яких спостерігаються ефекти спин-залежної рекомбінації є суттєво неупорядковані системи. Це насамперед поверхня кремнію, аморфний кремній, пластично-деформований і полікристалічний кремній. Для пояснення процесів провідності в таких системах застосовувались моделі міжцентрових переходів. Він запропонував аналізувати спин-залежну рекомбінацію при переході носіїв заряду між близькими парами локалізованих станів. Всього таких пар з різною спіновою орієнтацією може бути чотири типи: три триплетні стани, коли спин дорівнює 1, а напрямки різні і один синглетний, так, як зображено на Рис. 4.9.

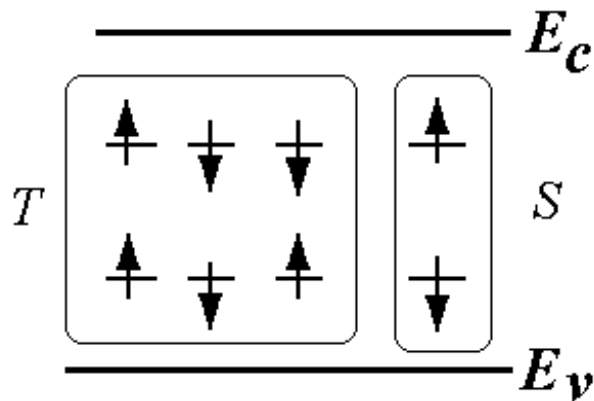


Рис. 4.9. Чотири типи станів з різною спіновою орієнтацією: три триплетні стани, коли спин дорівнює 1, а напрямки різні і один синглетний.

В умовах термодинамічної рівноваги всі парні центри будуть існувати в такій пропорції: $1/4$ - синглетних станів (S); $3/4$ - триплетних станів (T). Хай рекомбінація нерівноважних носіїв відбувається виключно в синглетних парах. В наслідок рекомбінаційних переходів кількість S станів зменшується, а T - станів збільшується. Тому в стаціонарному стані в рекомбінації будуть брати участь S пари в кількості меншій ніж $1/4$ всіх пар (наприклад $S=1/5$; $T=4/5$ і так далі). В умовах спінового резонансу ми повертаємо систему до початкового розподілу, а саме $S=1/4$; $T=3/4$, збільшуючи кількість рекомбінаційних рівнів, а тим самим й швидкість рекомбінації. В наслідок цього процесу час життя (τ) повинен зменшитися. Ясно, що від співвідношення між часом життя і часом спінової релаксації, величина ефекту може значно змінюватись. Послідовна теорія (яку розвинули Каплан-Соломон-Мот) показала, що можлива ситуація, коли $(\delta\Delta\sigma / \Delta\sigma) \rightarrow 1$. Суттєвим в цій теорії є той факт, що за моделлю Шоклі-Ріда величина ефекту пропорційна $(\delta\Delta\sigma / \Delta\sigma) \sim H^2$, а за моделлю Каплана-Соломона-Мота $(\delta\Delta\sigma / \Delta\sigma) \sim H^0$. Тобто $(\delta\Delta\sigma / \Delta\sigma)$ взагалі не залежить від магнітного поля. По моделі Каплана-Соломона-Мота магнітне поле необхідне тільки для того, щоб створити умови спінового резонансу в насиченні). Поляризація спіну при цьому не має значення. Експериментальні дослідження показали справедливості моделі Каплана-Соломона-Мота у неупорядкованому кремнії.

Спін-залежні ефекти в напівпровідниках дозволяють вивчати і інші складні процеси в напівпровідниках такі, як спін-залежна генерація, рух електронів в однорідних та неоднорідних матеріалах. Як і всякий резонансний метод спін-залежна рекомбінація та генерація можуть бути використані для точного вимірювання магнітного поля, або як елемент для приладів спінтроники.

4.11. Запитання для самоконтролю та задачі.

1. Що таке нерівноважна функція розподілу носіїв заряду і якими методами вона може бути створена в напівпровідниках ?
2. Який фізичний зміст має час релаксації ?
3. Які існують механізми рекомбінації в напівпровідниках ?
4. В яких напівпровідниках має місце випромінювальна рекомбінація ? Чому ?
5. Чому глибокі рівні є ефективними центрами рекомбінації ?
6. Від чого залежить ефективний переріз захоплення носіїв заряду ?
7. Як залежить час життя носіїв заряду від положення рівня Фермі в напівпровідниках ?
8. Що таке спін-залежна рекомбінація в напівпровідниках ?
9. Задача. Зразок кремнію n -типу з концентрацією $n_0 = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ освітлюється світлом із області власного поглинання з інтенсивністю, що забезпечує темп генерації пар $10^{19} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$. Час життя $\tau_n = \tau_p = 2 \text{ мкс}$, $T = 300 \text{ К}$. Показати на конкретному прикладі, що для нерівноважних умов $np \neq n_i^2$.
10. Задача. Розрахувати положення квазірівнів Фермі для електронів і дірок для умов попереднього прикладу.