

Ширина запрещенной зоны в полупроводниках и методы её расчета

Выполнил : Тишевский А.В.

Различия

- Полупроводники и диэлектрики различаются величиной E_g . Условно вещества с $E_g > 2-3 \text{ eV}$ ($1 \text{ eV} = 1.6021 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$) относят к классу диэлектриков,
- вещества с $E_g < 2-3 \text{ eV}$ - к классу полупроводников.
 - $1.5 \text{ eV} < E_g < 2-3 \text{ eV}$ - к классу широкозонных полупроводников,
 - $E_g < 0.1-0.2 \text{ eV}$ - к классу узкозонных полупроводников).



По величине E_g можно судить о типе химической связи, доминирующей в соединении, устойчивости соединения в определенном интервале изменений состава и внешних параметров, типе электронной проводимости в образцах, склонности материала к ионной проводимости, а также основных термодинамических характеристиках соединения (энтальпии образования H_F , энтропии ΔS_m и температуры плавления T_m и других).



В полупроводниках валентная зона от зоны проводимости отделена конечным интервалом энергии ΔE . В этом случае, чтобы перевести электрон в зону проводимости, ему необходимо сообщить энергию, равную *ширине запрещенной зоны* ΔE . Эта энергия может быть передана электрону за счет энергии теплового движения или при воздействии излучения.

Экспериментальное определение E_g .

Экспериментально величина E_g определяется из анализа различных физических эффектов, связанных с переходами электронов из зоны проводимости в валентную зону под действием термической активации (E_g^{term}), либо квантов света (E_g^{opt}). Обычно E_g^{term} определяют по температурному ходу электросопротивления или коэффициента Холла в области собственной проводимости, а E_g^{opt} - из края полосы поглощения и длинноволновой границы фотопроводимости (Photo).

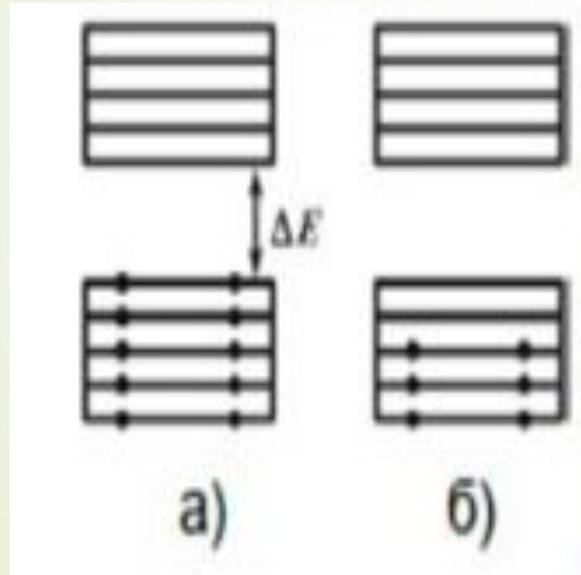
Одной из особенностей полупроводников является их способность увеличивать электропроводимость при воздействии на них излучения.

При воздействии света на полупроводник, возникает дополнительная проводимость (*фотопроводимость*). Фотопроводимость является непосредственным результатом поглощения света полупроводником. Явление поглощения света и возникновения фотопроводности можно объяснить на основе *зонной теории*.

Согласно зонной теории кристаллы, обладают широкими полосами (*зонами*) допустимых значений энергии, отделенных одна от другой запрещенными зонами. Ширина зон определяется величиной энергии связи между атомами, т. е. зависит от расстояния между ними. Количество уровней в зоне равно числу атомов, образующих кристалл (10^{22} см^{-3}).

В соответствии с принципом Паули в одном и том же энергетическом состоянии может находиться не более одного электрона. Поэтому электроны в энергетических зонах располагаются каждый на своем уровне и заполняют почти все разрешенные зоны. В полупроводниках (при низких температурах) на заполнение верхней энергетической зоны электронов не хватает — она пустая (рис. 5.26, а).

Эта верхняя незаполненная зона называется зоной проводимости. Она отделена запрещенной зоной от последней заполненной (или почти заполненной) зоны, которая называется валентной зоной. В металлах валентная зона заполнена на половину (рис. 5.26, б).

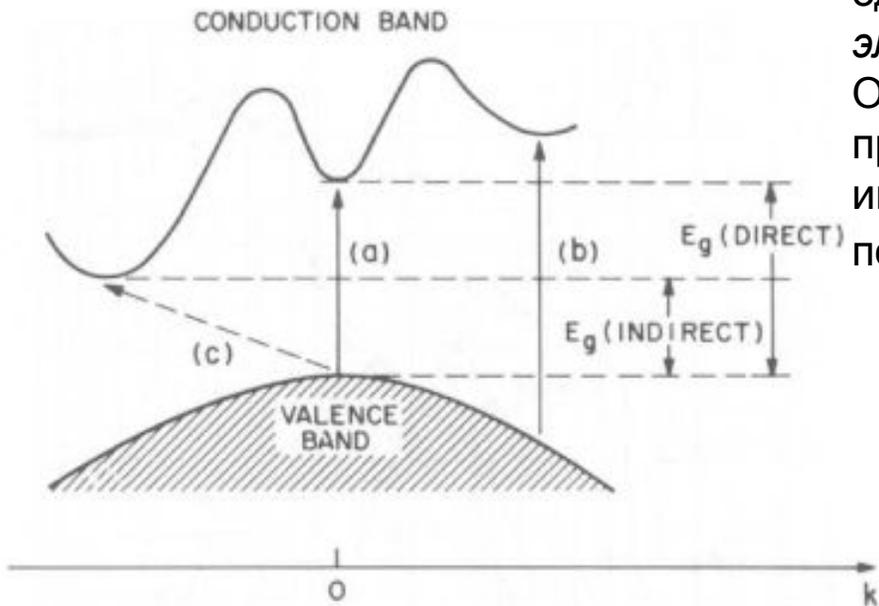


Переходы электронов из одной энергетической зоны в другую называются *межзонными переходами*.

прямые и непрямые электронные переходы

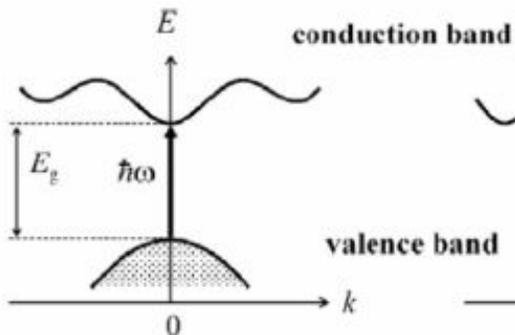
В случаях, когда края валентной зоны и зоны проводимости находятся при одинаковом значении волнового вектора, происходят *прямые электронные переходы*.

Однако зачастую верх валентной зоны и дно зоны проводимости находятся при разных значениях волнового вектора. Более того, форма зон может иметь несколько экстремумов при различных волновых векторах, как показано на приведенном рисунке.

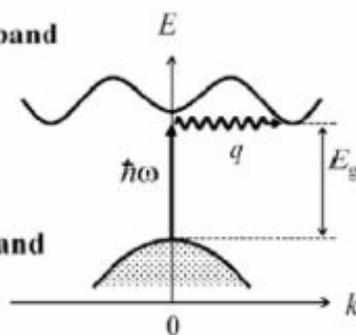


Тогда возможны *непрямые электронные переходы*. При этом квазиимпульс электрона изменяется (в случае прямых переходов квазиимпульс сохраняется) на некоторую величину q (см. рисунок). Для таких межзонных переходов необходимо участие в процессе дополнительных видов возбуждений, изменяющих квазиимпульс электрона(и, соответственно, энергию). Такими дополнительными возбуждениями зачастую выступают *фононы* (кванты тепловых колебаний кристаллической решетки).

(a) Direct band gap:
C.B. minimum at $k = 0$



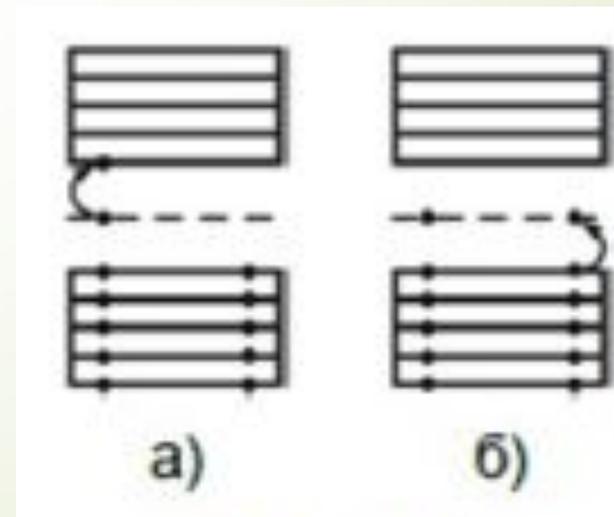
(b) Indirect band gap:
C.B. minimum at $k \neq 0$



При поглощении полупроводником квантов излучения с энергией $h\nu$, которая превышает ширину запрещенной зоны ($h\nu > \Delta E$), электроны валентной зоны переходят в зону проводимости. В валентной зоне образуется *дырка*. Таким образом, при поглощении света с энергией $h\nu > \Delta E$ возникает *собственная проводимость полупроводника*.

Если длина волны света, не настолько мала, чтобы вызвать собственную проводимость, то полупроводник для такого кванта света будет прозрачным. Однако прозрачность, наблюдается только в тех образцах, которые очищены от примесей. При наличии примесей он бывает непрозрачным во всей области спектра почти до радиочастот.

Объясняется это тем, что энергетические уровни атомов примесей располагаются в области запрещенных значений энергии (рис. #) и, чтобы перейти электрону с донорного уровня в зону проводимости (рис. #, а) или с валентной зоны на акцепторный уровень (рис. #, б), необходима значительно меньшая энергия.





У полупроводников, кроме собственного и примесного поглощения, наблюдается еще экситонное поглощение, поглощение свободными носителями заряда и решеткой. При расшифровке спектра поглощения необходимо учитывать, что различные виды поглощения могут накладываться один на другой и усложнять форму спектральной кривой.

Определение ш.з.з по его температурной зависимости электропроводности или сопротивления.

В случае одного типа носителей заряда электропроводность полупроводника определяется соотношением:

(1)

$$\sigma = qn\mu$$

где q – заряд электрона (дырки), n – концентрация носителей заряда; μ – их подвижность.

В полупроводнике концентрация свободных электронов n равна концентрации дырок p . Температурную зависимость n и p можно представить соотношением:

$$n = p = A \cdot \exp(-\Delta E / 2kT) \quad (2)$$

где A - постоянная; в первом приближении не зависящая от температуры, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура.



Обычно в полупроводниках подвижность носителей заряда изменяется с температурой значительно медленнее, чем концентрация носителей заряда. Поэтому температурной зависимостью подвижности можно пренебречь и, считать, что изменение электропроводности с температурой будет определяться только изменением концентрации носителей заряда. В этом случае для удельной электропроводности полупроводника из (1) и (2) получим

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta E / 2kT) \quad (3) \text{ где } \sigma^0 - \text{коэффициент, характерный для данного полупроводника.}$$

Уравнение (3) может быть использовано для экспериментального определения ширины запрещенной зоны изучаемого полупроводника. Задачу можно упростить, перейдя от измерения электропроводности к измерению сопротивления R .

Из уравнения (3) следует, что постоянная σ_0 имеет смысл электропроводности для бесконечно большой температуры. Известна связь между σ и R

$$\sigma = 1/\rho = l/SR \quad \text{и} \quad \sigma_0 = l/SR_0,$$

где ρ – удельное сопротивление, l и S – соответственно длина и площадь сечения материала полупроводника. Уравнение (3) можно преобразовать к виду

$$R = R_0 \exp(\Delta E / 2kT).$$

Прологарифмировав данное выражение, получим

$$\ln \frac{R}{R_0} = \frac{\Delta E}{2kT}. \quad (4)$$

Из уравнения (4) следует, что график зависимости $\ln R = f(1/T)$ представляет собой прямую, тангенс угла α наклона которой, может быть использован для вычисления ΔE :

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\ln(R_1 / R_0) - \ln(R_2 / R_0)}{1/T_1 - 1/T_2} = \frac{\ln(R_1 / R_2) T_1 T_2}{T_2 - T_1},$$

$$\Delta E = 2k \cdot \operatorname{tg} \alpha = 2k \frac{\ln(R_1 / R_2) T_1 T_2}{T_2 - T_1}, \quad (5)$$

где T_1 и T_2 – две произвольные температуры, взятые на графике, а R_1 и R_2 – соответствующие им сопротивления, ΔE (эВ).

