

A decorative graphic on the left side of the slide consists of several overlapping squares in various shades of blue and purple, arranged in a stepped pattern. A solid dark blue horizontal bar is positioned at the top of the slide, partially overlapping the squares.

# ПОВЕДЕНИЕ МАТЕРИАЛОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ

## ЛЕКЦИЯ № 7

# ОСНОВЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ

- Твердое тело как газ квазичастиц (фононы, электроны проводимости, плазмоны, поляроны, экситоны, магноны).
- Основы зонной теории твердых тел.

# ТВЕРДОЕ ТЕЛО КАК ГАЗ КВАЗИЧАСТИЦ

Энергия  $E$  и импульс  $p$  частиц выражаются через частоту волн и волновой вектор с помощью соотношений :

$$E = \eta\omega \quad p = \eta k$$

Частицы, сопоставляемые с коллективными волновыми движениями в кристалле, называют *квазичастицами* (квант коллективного колебания совокупности сильно взаимодействующих частиц).

Коллективные движения в кристалле имеют разную физическую природу, в соответствии с этим различают разные типы квазичастиц.

Их можно разбить на две группы: квазичастицы коллективного происхождения и квазичастицы индивидуального происхождения.

# ФОНОНЫ

**Фонон** (от греч. phone – звук), квант колебательного движения атомов кристалла

Колебания атомов кристалла благодаря взаимодействию между ними распространяются по кристаллу в виде волн, каждую из которых можно охарактеризовать квазиволновым вектором  $k$  и частотой  $\omega$ , зависящей от  $k$ :  $\omega = \omega_n(k)$ , где индекс  $n = 1, 2, \dots, 3r$  ( $r$  – число атомов в элементарной ячейке кристалла) обозначает тип колебания.

Согласно квантовой механике, энергия и импульс, связанные с каждым нормальным колебанием (каждой волной), квантуются, т. е. могут принимать только дискретные значения; они оказываются кратными ( $n = 1, 2, 3 \dots$ ) величинам, имеющим смысл соответственно энергии и импульса «элементарного возбуждения» колебательного движения в кристалле.

Согласно сказанному ранее, каждое такое элементарное возбуждение можно рассматривать как квазичастицу с квазиимпульсом  $p$  и энергией:

$$E(p) = \eta \omega(p / \eta)$$

# ФОНОНЫ

Модель кристалла металла – совокупность гармонически взаимодействующих осцилляторов, причем наибольший вклад в их среднюю энергию дают колебания низких частот, соответствующие упругим волнам, квантами которых и являются **фононы**.

**Акустический фонон** характеризуется при малых волновых векторах линейным законом дисперсии и параллельным смещением всех атомов в элементарной ячейке.

Такой закон дисперсии описывает звуковые колебания решетки (поэтому фонон и называется акустическим).

**Оптические фононы** существуют только в кристаллах, элементарная ячейка которых содержит два и более атомов.

Эти фононы характеризуются при малых волновых векторах такими колебаниями атомов, при которых центр тяжести элементарной ячейки остается неподвижным. Энергия оптических фононов обычно достаточно велика (порядка  $500 \text{ см}^{-1}$ ) и слабо зависит от волнового вектора.

# ЭЛЕКТРОНЫ ПРОВОДИМОСТИ

Электрон проводимости – частица, движущуюся в сопровождении облака других частиц.

**Электрон проводимости в отличие от фононов (а также плазмонов, магнонов) – локализованная квазичастица.**

Ввиду сложности закона дисперсии электронов проводимости удобной его характеристикой является форма поверхности постоянной энергии в пространстве импульсов, т. е. поверхности, определяемой уравнением  $E(p) = \text{const}$ . Для обычных частиц ( $E = p^2/2m_0$ ) подобная поверхность представляет собой сферу с радиусом  $p = \sqrt{2m_0E}$

Для электронов проводимости функция  $E(p)$  оказывается периодической и поверхность постоянной энергии может иметь весьма сложную форму.

# ПЛАЗМОНЫ

Вследствие кулоновского взаимодействия могут возникать коллективные колебания плотности электронов, так называемые **плазменные колебания**.

**Плазмон** — квазичастица, отвечающая квантованию плазменных колебаний, которые представляют собой коллективные колебания свободного электронного газа.

В пределе больших длин волн частота этих колебаний равна плазменной частоте:  $\omega_p = (4\pi n_0 e^2 / m)^{1/2}$  где  $n_0$  — концентрация электронов.

Квант плазменных колебаний  $E = \eta\omega_p$  называют **плазмоном**.

При плотностях электронов, характерных для металлов, плазменная частота соответствует довольно большой энергии (порядка 5–30 эВ), поэтому такие колебания не возбуждаются при тепловых энергиях и, следовательно, плазмоны не оказывают влияния на термодинамические свойства электронной системы.

# ПОЛЯРОН

**Полярон** — квазичастица, состоящая из электрона и сопровождающего поля поляризации.

Поскольку окружающие свободный электрон атомы ионизованы, заряд электрона вызывает поляризацию своего непосредственного окружения, то есть вызывает относительное смещение положительных и отрицательных ионов в решетке, ее локальную деформацию.

Приложим к кристаллу электромагнитное поле. Электрон начнет двигаться, и поле деформации будет перемещаться вместе с ним. Локальную деформацию можно представить как виртуальное испускание и поглощение оптических фононов. Такое представление позволяет говорить, что движущийся электрон сопровождается облаком фононов, которое существенно изменяет его массу. Следовательно, движущийся электрон в ионном кристалле - локализованная квазичастица; ее называют **поляроном**.



# ЭКСИТОН

**Экситон** (лат. *excito* — «возбуждаю») — квазичастица, представляющая собой электронное возбуждение в диэлектрике или полупроводнике, мигрирующее по кристаллу и не связанное с переносом электрического заряда и массы.

Отдельный атом (молекула) может находиться в возбужденном энергетическом состоянии, отделенным от основного (наинизшего) состояния конечной энергией возбуждения. Однако в кристалле, состоящем из большого числа одинаковых, сильно взаимодействующих между собой атомов (молекул), такое локализованное возбуждение является неустойчивым; оно будет передаваться от одного узла решетки к другому.

Элементарное возбуждение в этом случае называют **экситоном**.

По зонной теории **экситон** — связанное состояние двух квазичастиц - электрона и дырки.

# ЭКСИТОН

Различают два основных типа экситонов, соответствующие двум крайним случаям связи электрона и дырки: **экситон Ванье** и **экситон Френкеля**.

**Экситон Ванье** – сравнительно слабо связанное образование, электрон и дырка находятся на различных узлах решетки, причем расстояние между электроном и дыркой считается большим по сравнению с постоянной кристаллической решетки.

**Экситон Френкеля** можно представить как предельный случай экситона Ванье, когда связанные электрон и дырка находятся на одном и том же узле. Экситон реализуется в молекулярных кристаллах, в которых связь внутри молекулы (ковалентная) значительно сильнее, чем связь между молекулами (ван-дер-ваальсова).

# МАГНОН

**Магно́н** — квазичастица, соответствующая элементарному возбуждению системы взаимодействующих спинов.

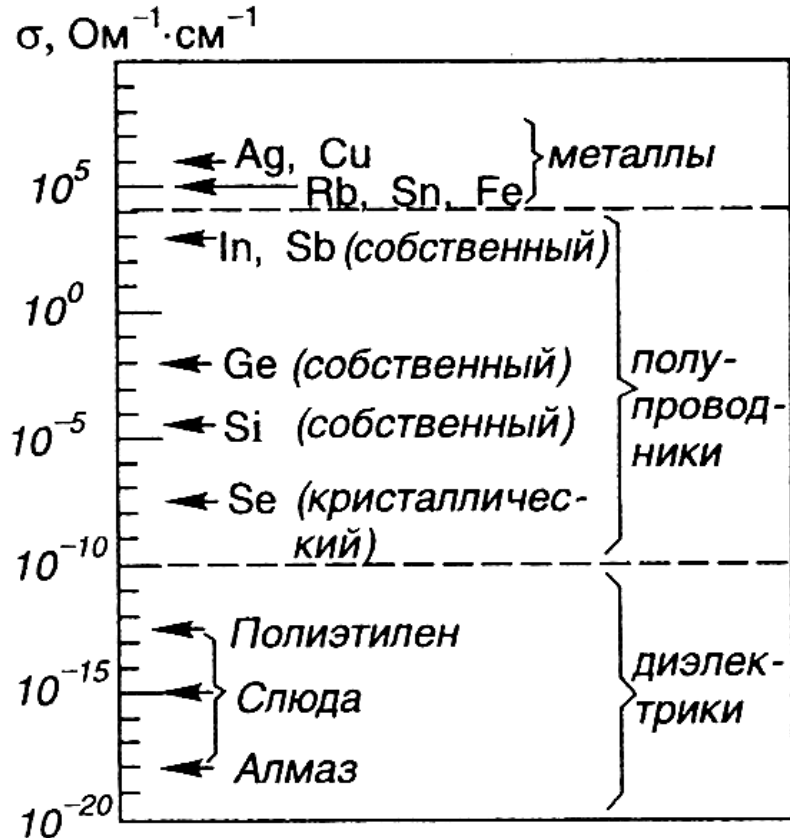
Основное состояние ферромагнетика соответствует тому, что элементарные магнитные моменты (спины) всех атомов решетки одинаково ориентированы и образуют общий магнитный момент участка (домена) ферромагнетика. Состояние магнитного возбуждения связано с полным переворачиванием отдельного момента (спина) относительно всех остальных. Однако, как и в случае экситона, такое локализованное состояние возбуждения в системе одинаковых взаимодействующих атомов является неустойчивым и роль элементарных возбуждений играют волны переворачивания магнитных моментов (спиновые волны), при которых состояние возбуждения как бы переходит последовательно от одного атомного слоя к другому.

**Кванты спиновых волн называются магнонами**

# ОСНОВЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

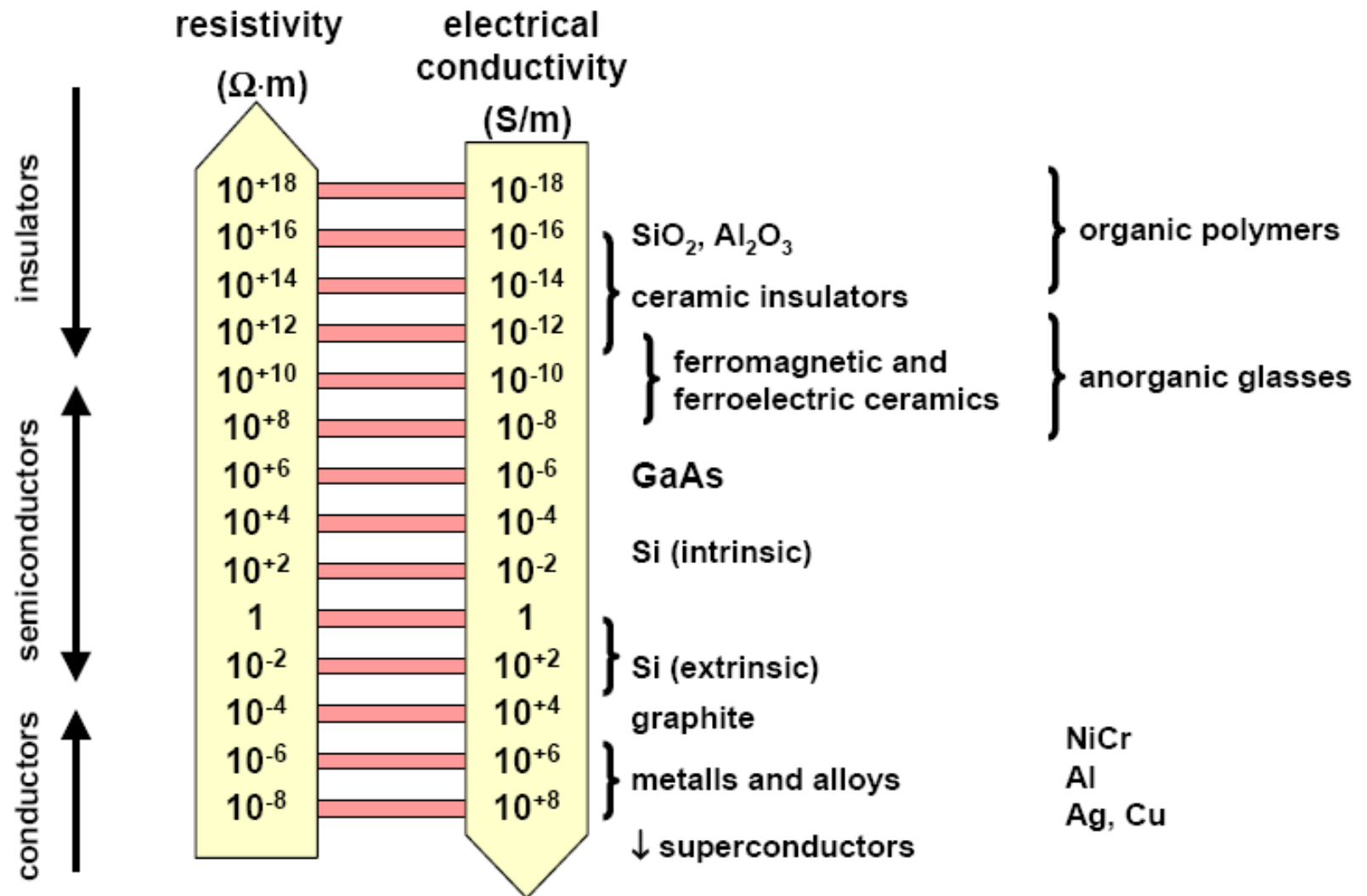
## Классификация твердых тел по величине электропроводности

По величине удельной электропроводности все твердые тела можно разделить на три большие группы: *металлы*, *диэлектрики* и *полупроводники*.

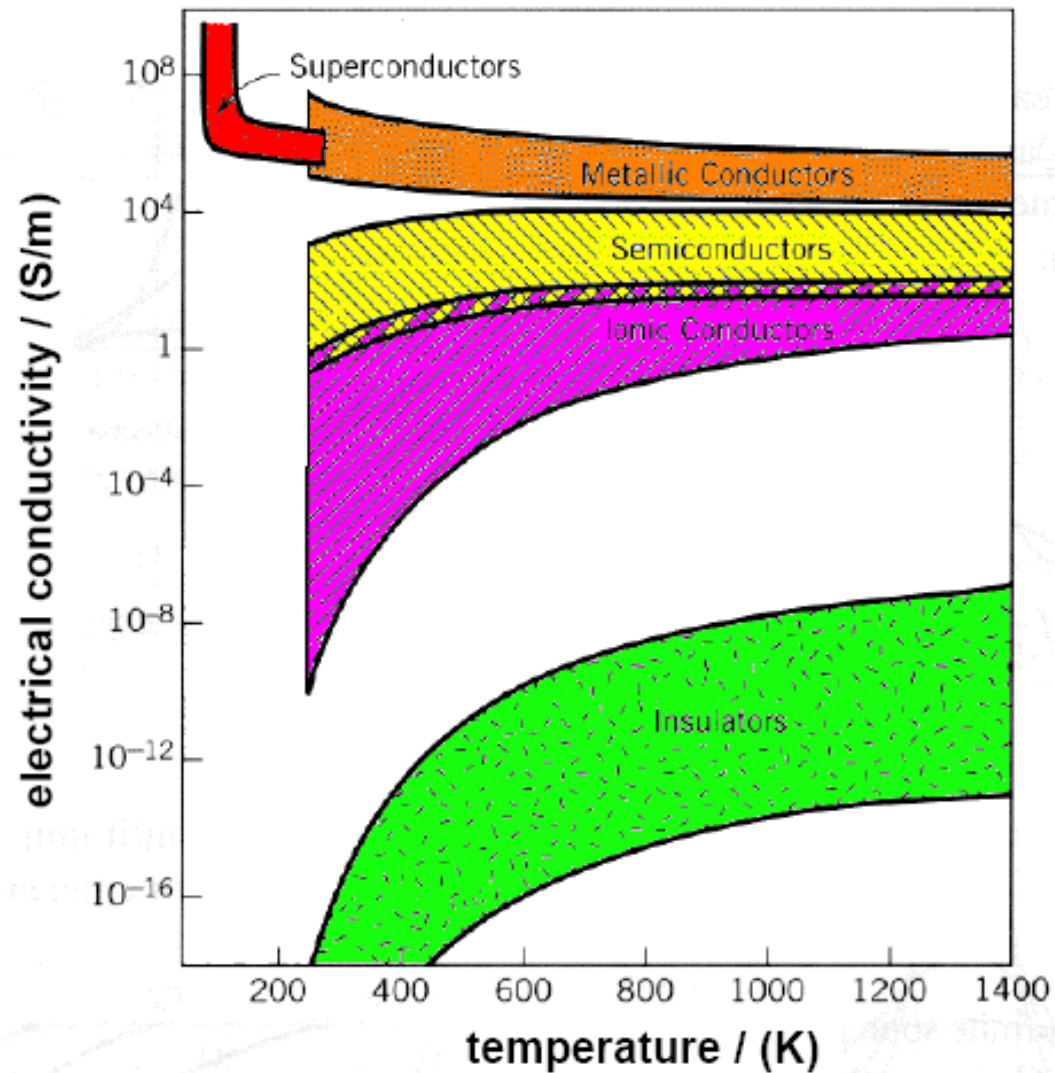


Интервал изменения удельной электропроводности при комнатной температуре для различных твердых тел

# Electrical Properties of Solids: Resistivity and Conductivity



# Electrical Properties of Solids: Electrical Conductivity vs. Temperature



Различие между металлами, с одной стороны, и диэлектриками и полупроводниками – с другой проявляется достаточно четко в ходе температурных зависимостей электропроводности.

Для **полупроводников** и **диэлектриков** эта зависимость (в некотором интервале температур) описывается выражением вида

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$$

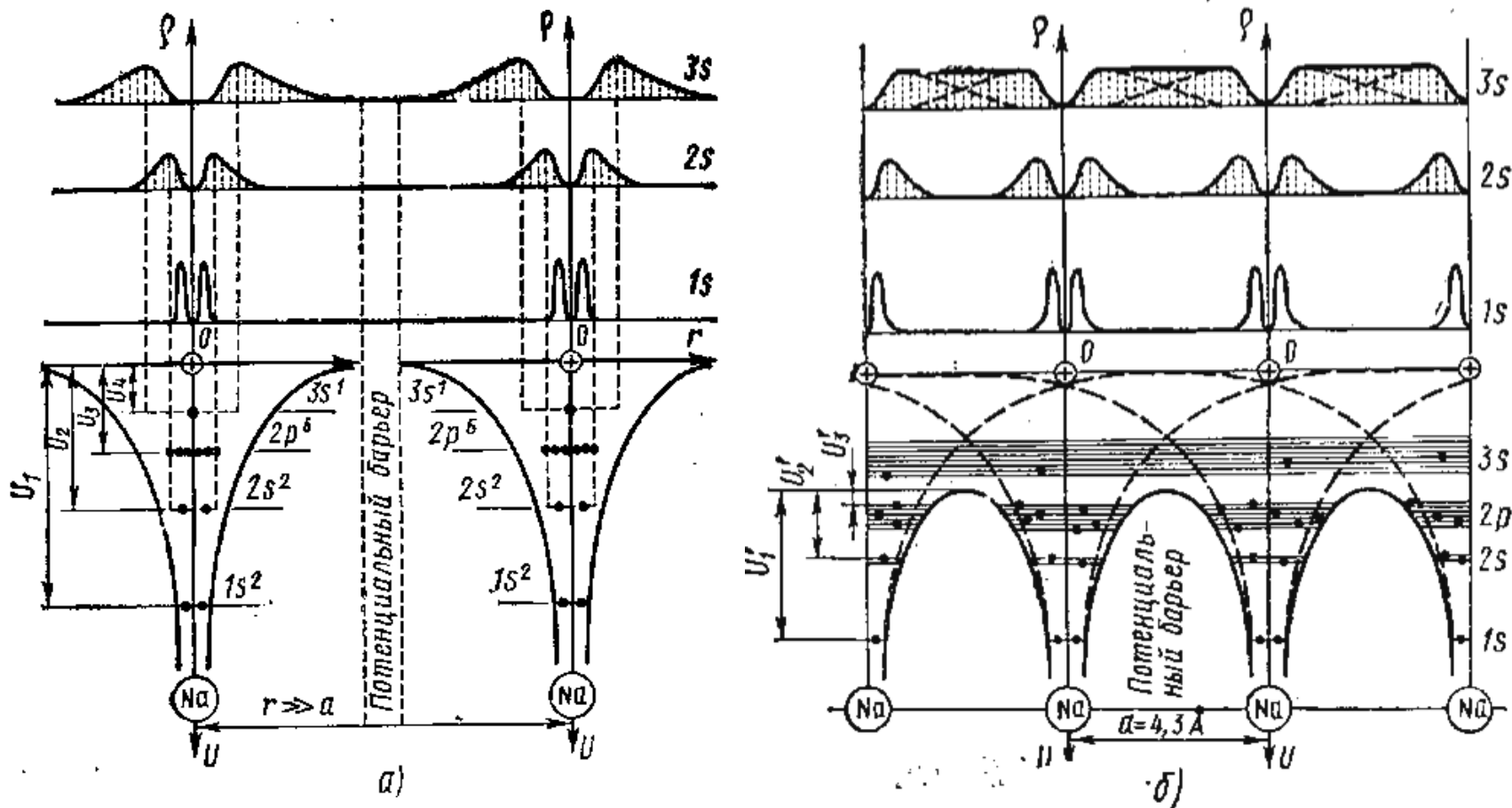
В то же время в металлах электропроводность уменьшается с ростом температуры:

$$\sigma = \sigma_{01} \frac{T_0}{T}$$

$\sigma_0$ ,  $\sigma_{01}$ ,  $T_0$  – некоторые константы.

## Обобществление электронов в кристалле

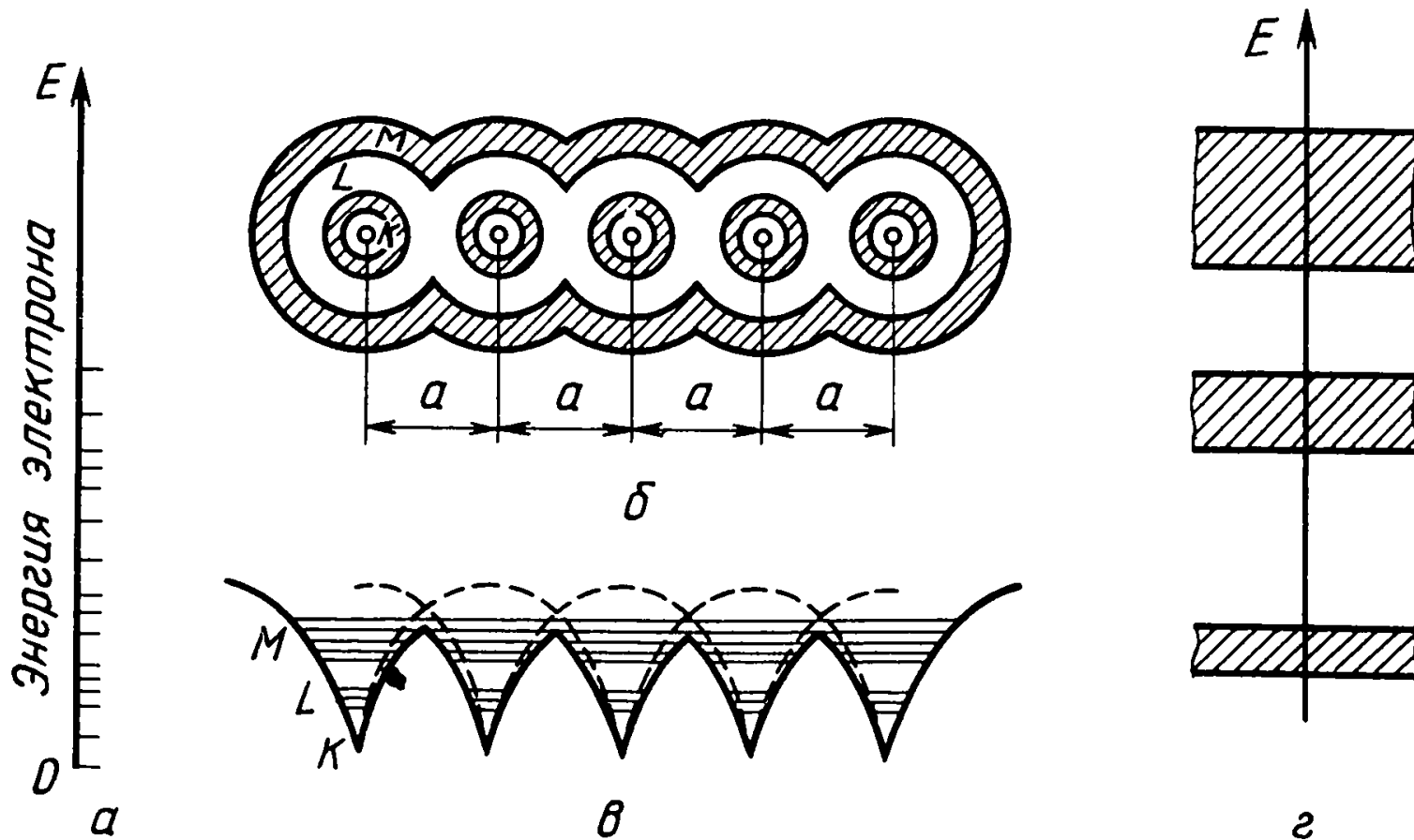
В твердом теле расстояния между атомами настолько малы, что каждый из них оказывается в достаточно сильном поле соседних атомов.



Энергетическая схема двух атомов



## Схема образования энергетических зон в кристаллах



а – энергетические уровни в изолированном атоме

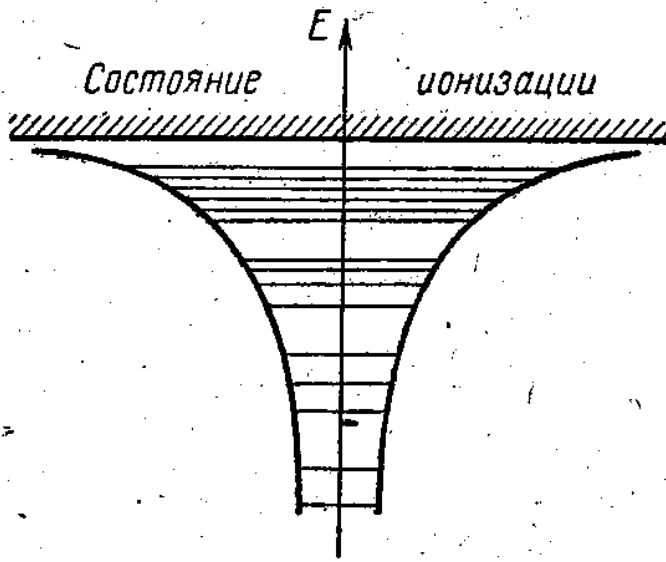
б – атомы в одномерном кристалле

в – внутрискристаллическое потенциальное поле

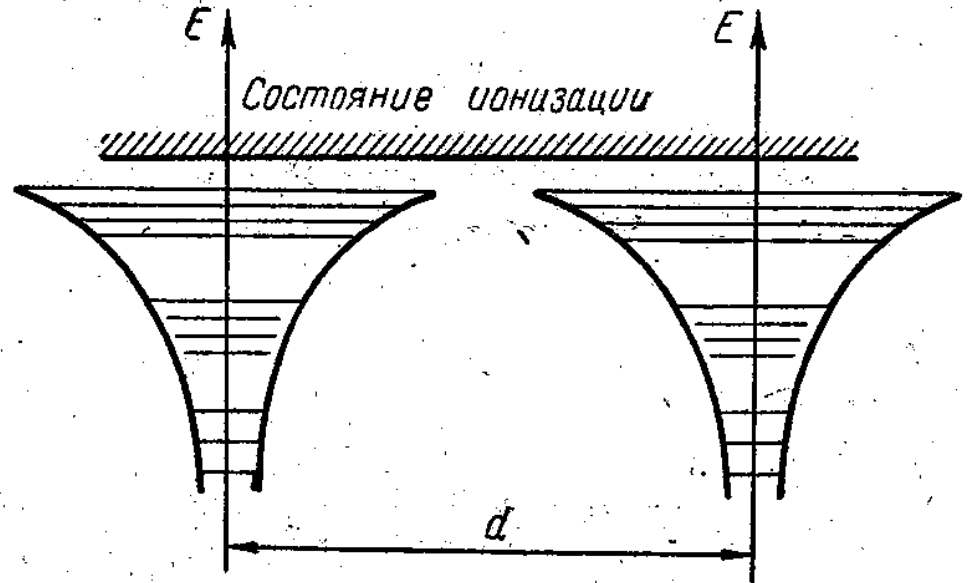
г – расположение энергетических зон

# ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ КРИСТАЛЛА

Изолированный атом является потенциальной ямой, в которой электрон может занимать одно из ряда дискретных энергетических состояний.



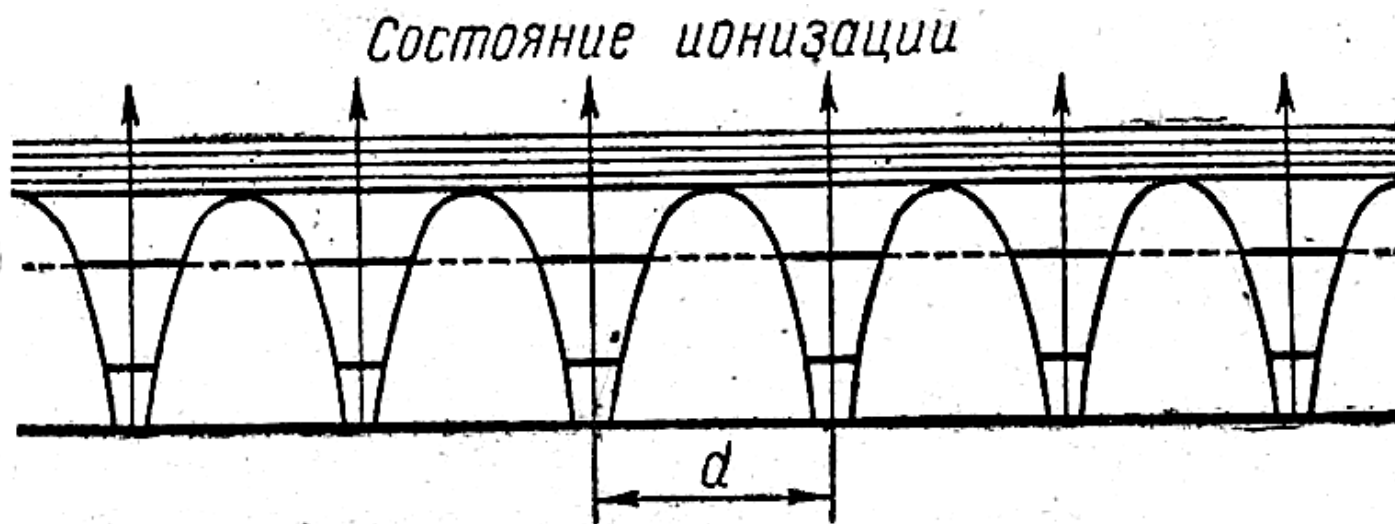
Энергетическая схема  
изолированного атома



Энергетическая схема двух атомов,  
находящихся на расстоянии  $d > 10^{-9}$  м

В кристаллах атомы расположены на расстояниях  $d < 10^{-9}$  м и потому между ними существует сильное взаимодействие. Это взаимодействие и вызывает снижение потенциальных барьеров между атомами.

Расстояния между соседними атомами в кристалле различны в различных направлениях, но для любого из направлений расстояния между соседними атомами строго одинаковы (периодическая структура). Благодаря этому можно изобразить энергетическую схему кристалла (для определенного в нем направления) в виде периодически расположенных потенциальных ям, разделенных потенциальными барьерами.



# ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ КРИСТАЛЛА

Валентные электроны в кристалле не локализованы в конкретном атоме, а переходят от одного атома к другому, т. е. перемещаются от узла к узлу кристаллической решетки.

Скорость этого движения электронов  $v \approx 10^5$  м/сек, и потому валентный электрон находится в данном узле кристаллической решетки в течение  $10^{-15}$  сек (размер атома  $\sim 10^{-10}$  м).

При образовании кристалла происходит не только уменьшение высоты потенциального барьера между атомами, но и качественное изменение энергетических уровней электронов в атомах.

Соотношение неопределенностей для энергии  $\Delta E \cdot \Delta t \geq h$

$\Delta t$  – время нахождения электрона в энергетическом состоянии с энергией от  $E$  до  $E \pm \Delta E$

В возбужденном состоянии электрон в изолированном атоме находится в течение времени  $\Delta t \approx 10^{-8}$  сек, и потому ширина возбужденного энергетического уровня (по порядку величины)  $\Delta E \geq \frac{h}{\Delta t} \approx 10^{-7}$  эВ

# ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ КРИСТАЛЛА

Энергетический уровень электрона при образовании кристалла из отдельных атомов *расщепляется в энергетическую зону.*

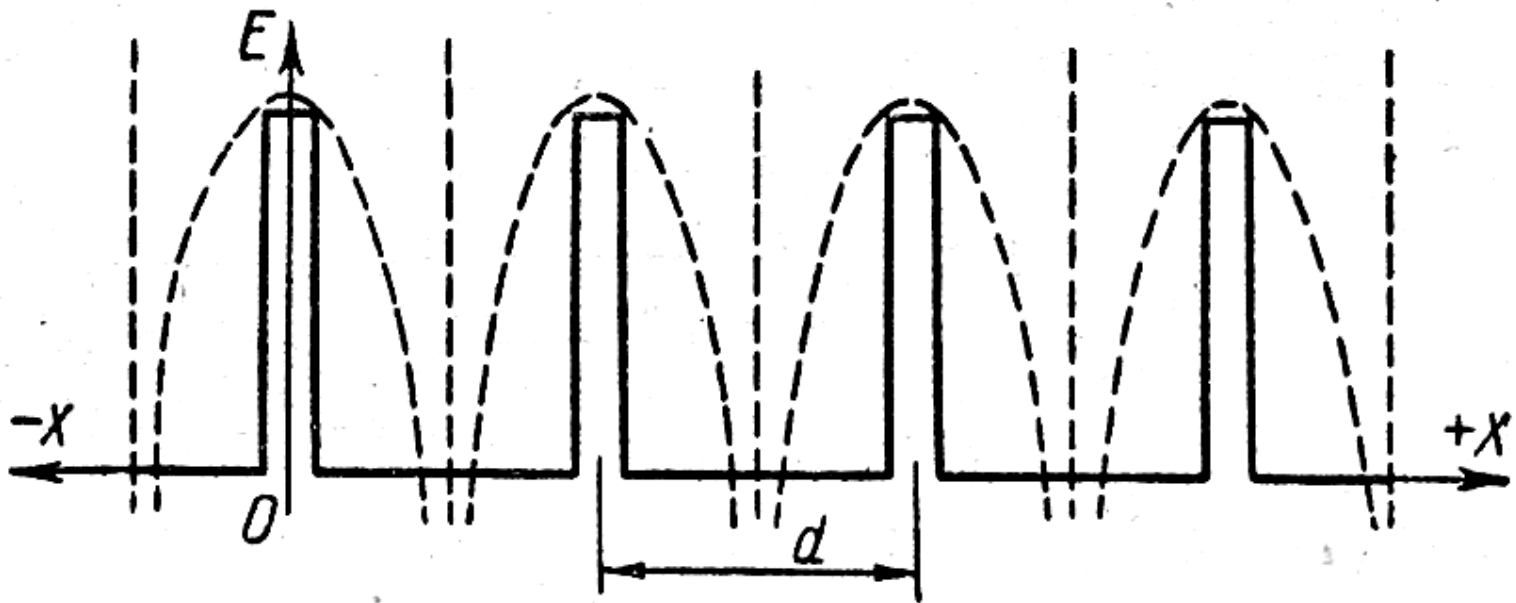
Расщеплению в зону подвержены и нормальные и возбужденные энергетические уровни.

Вместо системы дискретных энергетических уровней энергии, которыми характеризуется отдельный атом, в кристалле появляется система энергетических зон. Ширина энергетической зоны не зависит от размеров кристалла, а определяется природой атомов, образующих кристалл, и строением кристалла (межатомными расстояниями в нем). Ширина энергетической зоны в одном и том же кристалле различна в различных направлениях, поскольку различны межатомные расстояния.

*Энергетическая зона не является непрерывным рядом значений энергии электрона, а представляет собой систему дискретных энергетических уровней.*

# ОБРАЗОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН КРИСТАЛЛА В МОДЕЛИ КРОНИГА-ПЕННИ

В модели реальная периодическая «цепочка» потенциальных ям атомов, расположенных в атоме в определенном направлении, заменяется «цепочкой» прямоугольных потенциальных ям, расположенных друг от друга на таком же расстоянии  $d$ , как и атомы в кристалле.



# ОБРАЗОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН КРИСТАЛЛА В МОДЕЛИ КРОНИГА-ПЕННИ

Групповая скорость волны  $v = \frac{d\omega}{dk}$

$\omega$  – частота волны

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$  – волновой вектор

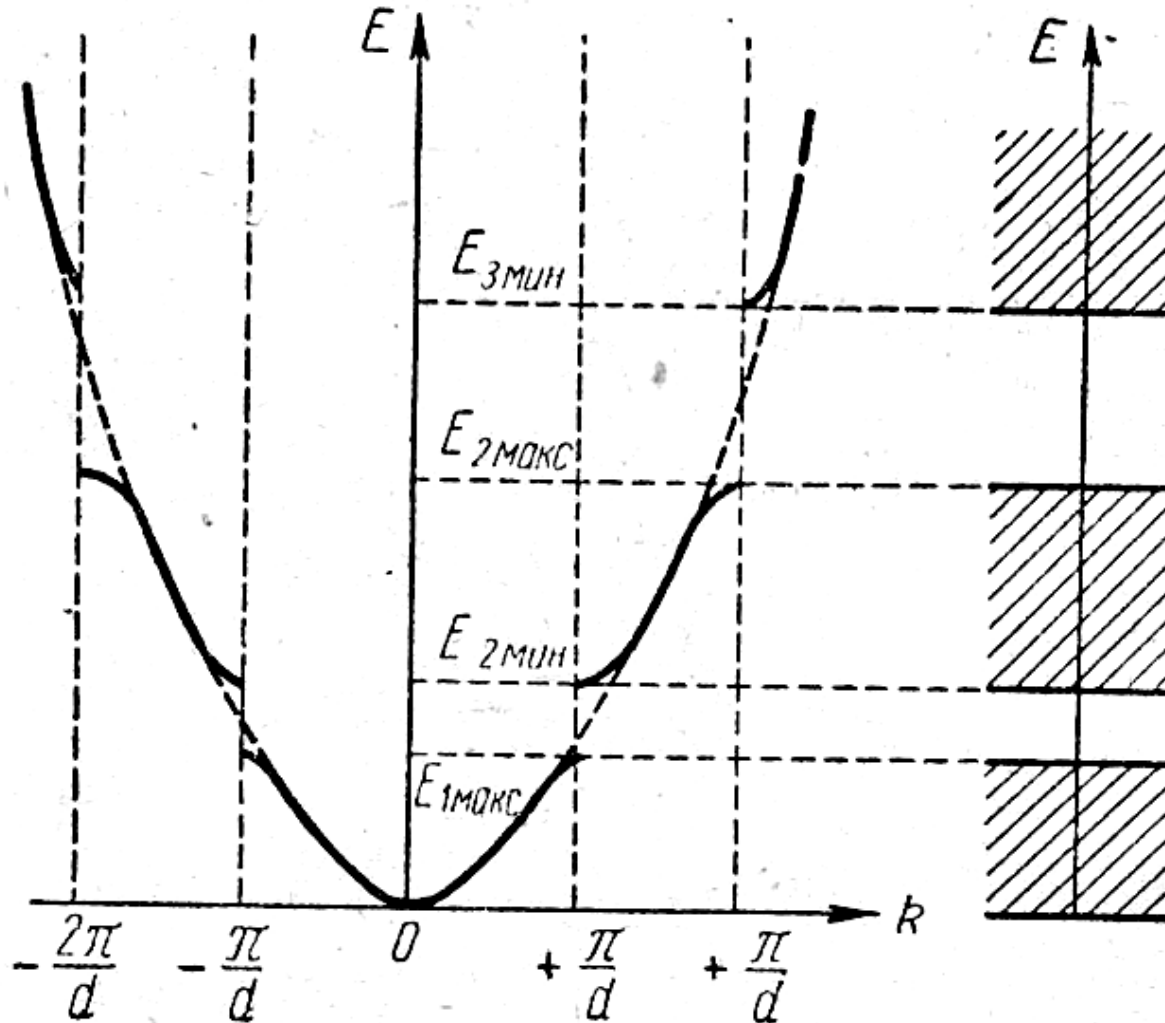
Энергия электронной волны  $E = \frac{h\omega}{2\pi}$

Скорость электрона  $v = \frac{2\pi}{h} \frac{dE}{dk}$

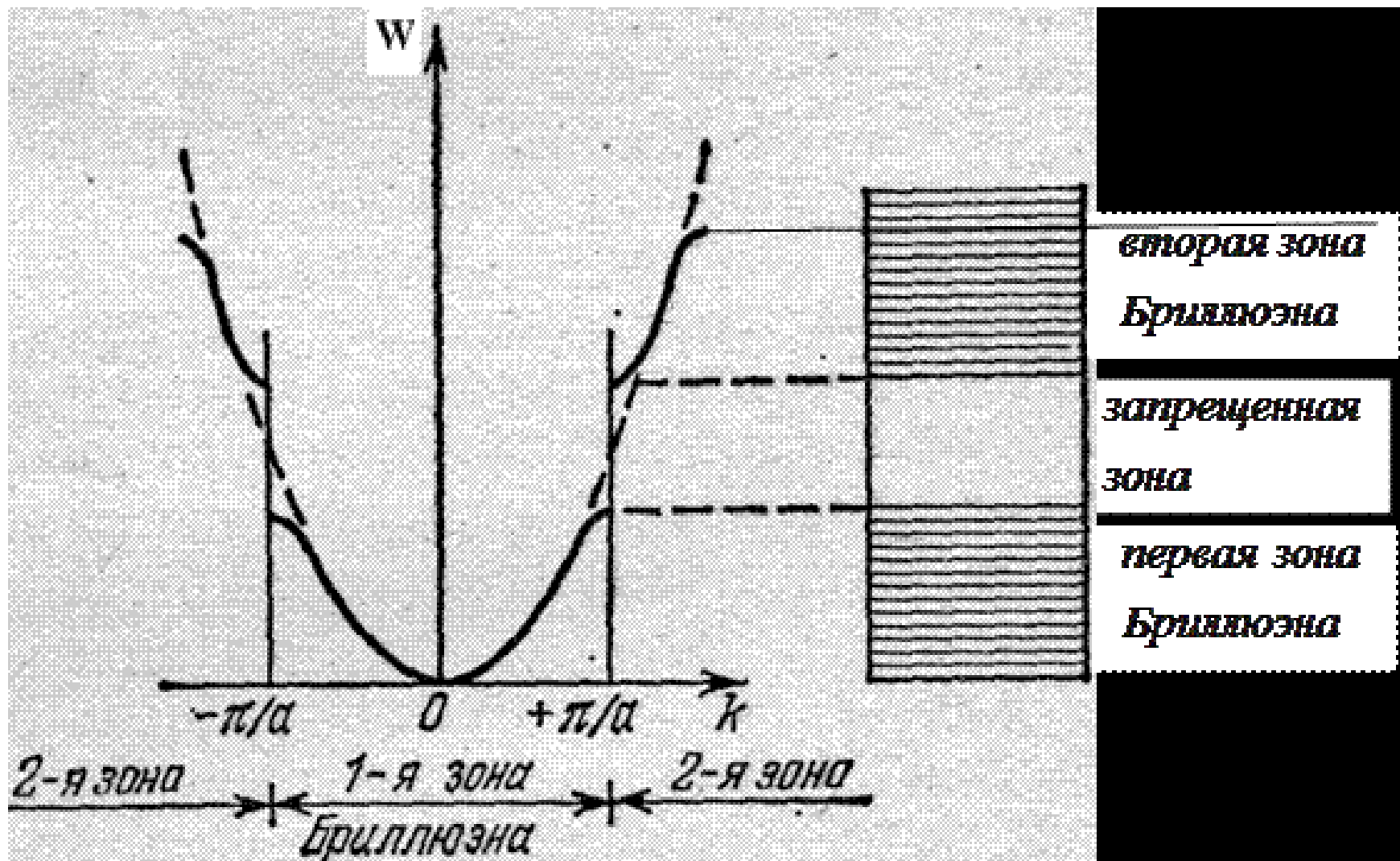
Энергия свободного электрона  $E$  связана с волновым вектором равенством

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} k^2.$$

Зависимость энергии  $E(k)$  электрона от волнового вектора  $k$  в потенциале Кронига – Пенни (сплошная линия). Пунктирной линией показана зависимость  $E(k)$  для свободного электрона







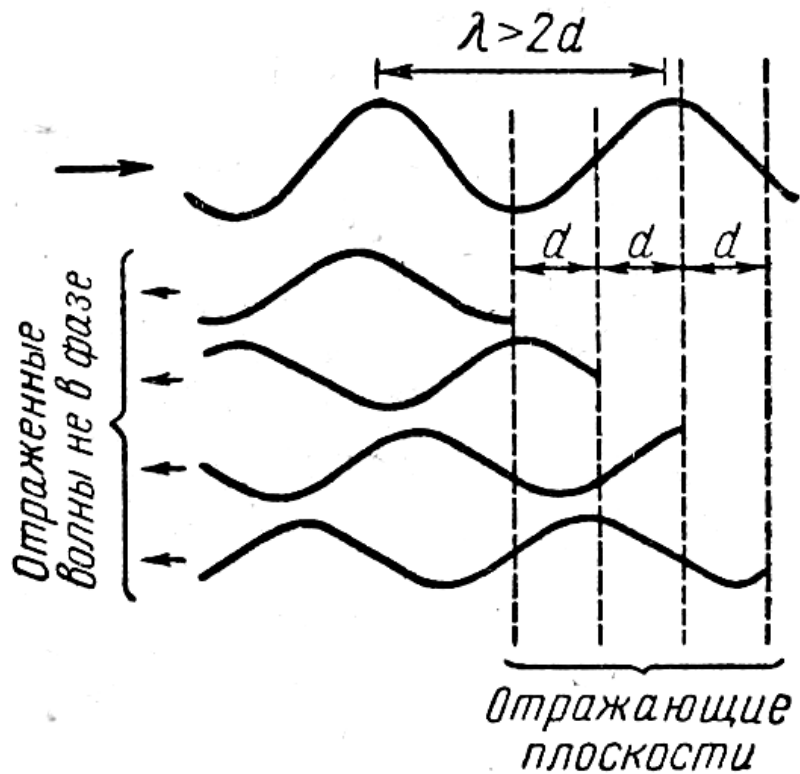
Пусть в кристалле есть только один электрон, способный перемещаться по кристаллу, и пусть этот электрон начинает двигаться под действием сил внешнего электрического поля из состояния с  $k=0$  и  $E=0$  в направлении, перпендикулярном стенкам потенциальных ям.

Электронная волна будет частично отражаться от стенок каждой потенциальной ямы.

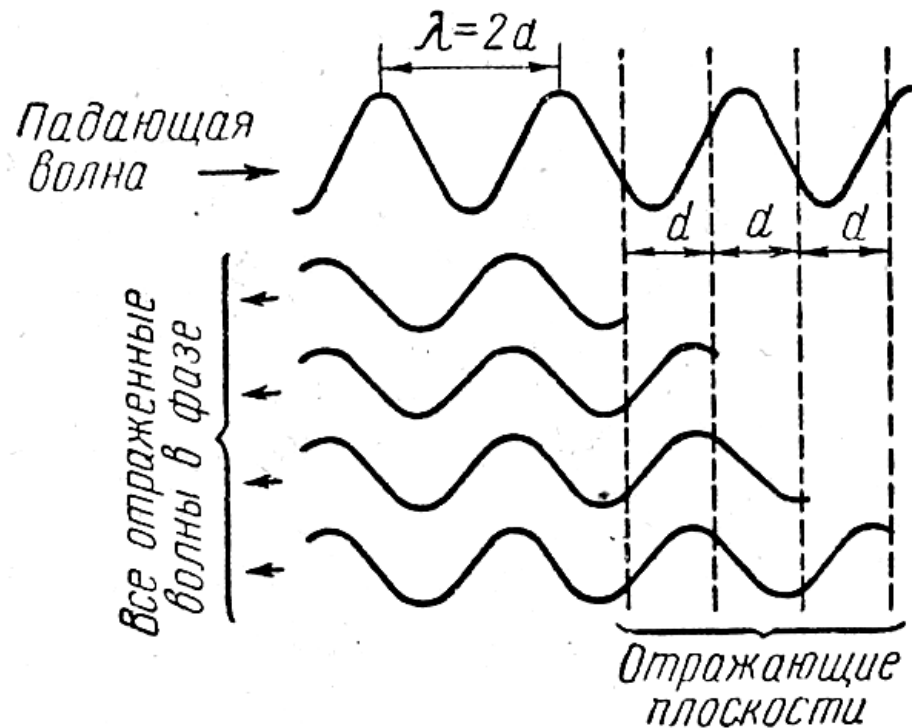
Пока для электронной волны длина ее  $\lambda$  и модуль волнового вектора  $k$  не соответствуют условиям брегговского отражения:

$$\left. \begin{array}{l} n\lambda = 2d \\ k = n \frac{\pi}{d} \end{array} \right\} (n = 1, 2, 3, \dots),$$

отраженные волны будут иметь различные фазы и, налагаясь, ослабляют друг друга.



Не выполняется условие Брэгга,  
отраженные волны имеют  
различные фазы



Волновой вектор равен  $k = \frac{\pi}{d}$   
все отраженные волны оказываются в  
фазе, и интенсивность отраженной  
волны равна интенсивности прямой.

Дальнейшее увеличение волнового вектора электрона  $k$  возможно только при условии, что энергия его изменится скачком на величину

$$\Delta E = E_2^{\min} - E_1^{\max}.$$

Когда волновой вектор станет равным  $k = \frac{2\pi}{d}$

возникает стоячая электронная волна и снова функция  $E=f_1(\mathbf{k})$  терпит разрыв. Далее это повторится при значениях  $k = \frac{3\pi}{d}, \frac{4\pi}{d}, \frac{5\pi}{d}$

Условие брегговского отражения электронных волн (условие образования стоячей волны):

$$k = \pm n \frac{\pi}{d} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Состояниям электрона, характеризуемым значениями волнового вектора

от  $k = 0$  до  $k = \pm n \frac{\pi}{d}$  соответствует некоторый интервал энергий от 0 до  $E^{\max}$  — *первая разрешенная энергетическая зона (ЭЗ)*

Значениям  $k$ , лежащим в интервале от  $\pm \frac{\pi}{d}$  до  $\pm \frac{2\pi}{d}$  соответствует

интервал энергий  $(E_2^{\max} - E_2^{\min})$  образующий *вторую разрешенную ЭЗ*

При распространении электронной волны (движении электрона) в кристалле, она испытывает отражение не только от стенок потенциальных ям атомов, но и от границ кристаллов

Если общая длина «цепочки» атомов  $L$ , то условия образования стоячих электронных волн в результате отражения их от границ кристалла:

$$\left. \begin{array}{l} m\lambda = 2L \\ k = m \frac{\pi}{L} \end{array} \right\} \left( m = 1, 2, 3, \dots \frac{L}{d} \right). \quad \left. \vphantom{\left. \begin{array}{l} m\lambda = 2L \\ k = m \frac{\pi}{L} \end{array} \right\}} \right\} \text{стационарные состояния} \\ \text{электрона}$$

Максимальная длина волны, при которой образуется стоячая электронная волна, равна  $\lambda = 2L$  (в длине «цепочки» укладывается половина длины волны).

Минимальная длина волны ограничена межатомным расстоянием и равна

$$\lambda = 2d$$

Число стационарных состояний электрона в энергетической зоне равно  $\frac{L}{d}$

Число стационарных состояний электрона в разрешенной энергетической зоне равно числу атомов в соответствующей цепочке атомов.

Для любого направления межатомное расстояние  $d_i$  будет другим, а следовательно, границы энергетической зоны будут иными

$$\left( k_1 = \pm \frac{n\pi}{d_1}, k_2 = \pm \frac{n\pi}{d_2}, \dots, k_i = \pm \frac{n\pi}{d_i} \right).$$



Так как многие процессы в кристалле (электрические, магнитные, оптические) объясняются состоянием валентных электронов, то на схеме изображают только две разрешенных энергетических зоны: валентную зону, соответствующую нормальным (невозбужденным) состояниям валентных (электронов, и ближайшую к ней зону возбужденных состояний этих электронов – возбужденную зону, или зону проводимости.

Упрощенная энергетическая схема

# ЗАПОЛНЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН ЭЛЕКТРОНАМИ. ПРОВОДНИКИ, ПОЛУПРОВОДНИКИ И ИЗОЛЯТОРЫ

Внешнее электрическое поле в кристалле может вызвать изменение в движении электронов не полностью заполненной зоны и не изменяет движения электронов в зоне, заполненной полностью.

Изменение движения электрона связано с изменением его энергетического состояния, а последнее возможно тогда, когда электрон находится в зоне, где есть свободные энергетические уровни, т. е. в зоне, заполненной, не полностью.

При образовании энергетических зон в кристалле возможно перекрытие валентной и возбужденной зон.

Условно принято считать полупроводниками вещества, ширина запрещенной зоны в которых менее трех электронвольт.

Изоляторы – вещества с шириной запрещенной зоны более трех электронвольт.

# ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ

Движение электрона в кристалле можно приближенно описать следующим уравнением Шредингера:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0$$

где  $U$  – потенциальная,  $E$  – полная энергия электрона.  $m$  – его масса.

Если обобществленные электроны сохраняют достаточно сильную связь с атомами, то их потенциальная энергия :

$$U = U_a + \delta U$$

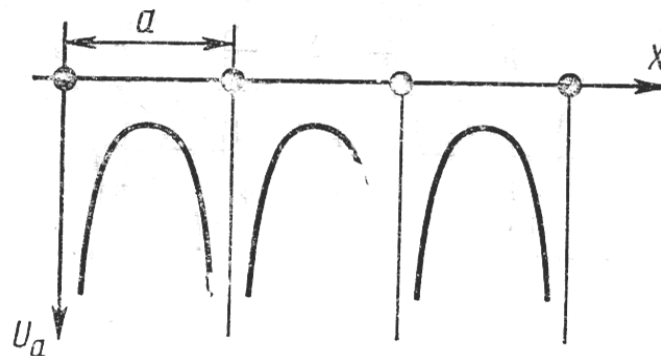
где  $U_a$  – потенциальная энергия электрона в изолированном атоме.

$\delta U$  – поправочный член, учитывающий влияние соседних атомов на энергию.

Волновая функция  $\psi_a$  и энергию  $E_a(n, l)$  электрона в изолированном атоме:

$$\psi = \psi_a; \quad E = E_a(n, l)$$

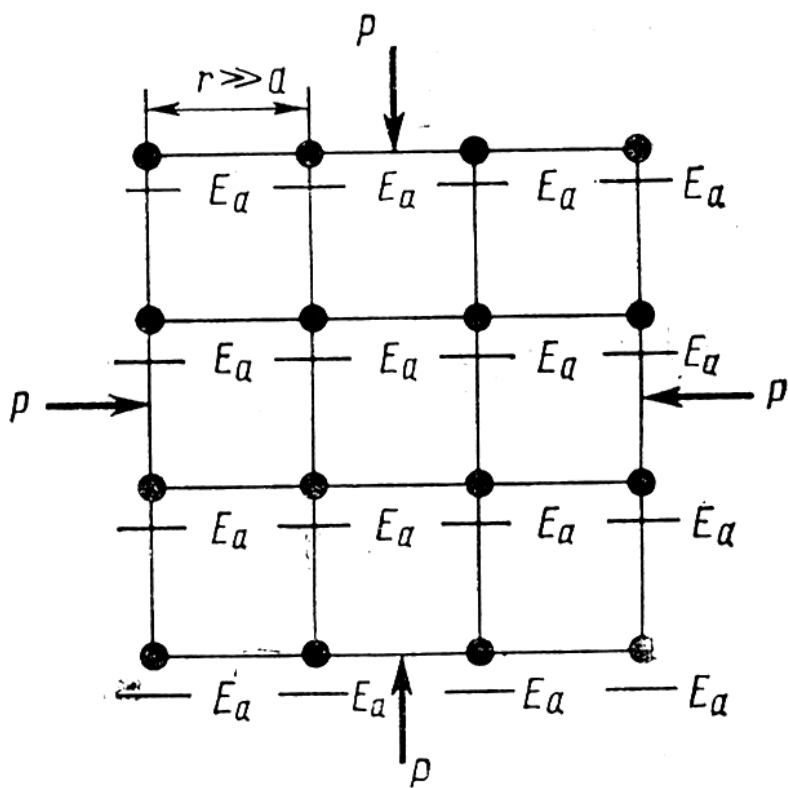
$n, l$  — главное и орбитальное квантовые числа, определяющие энергию электрона в атоме.





В изолированном атоме данный энергетический уровень  $E_a(n, l)$  является единственным, в кристалле, состоящем из  $N$  атомов, он повторяется  $N$  раз

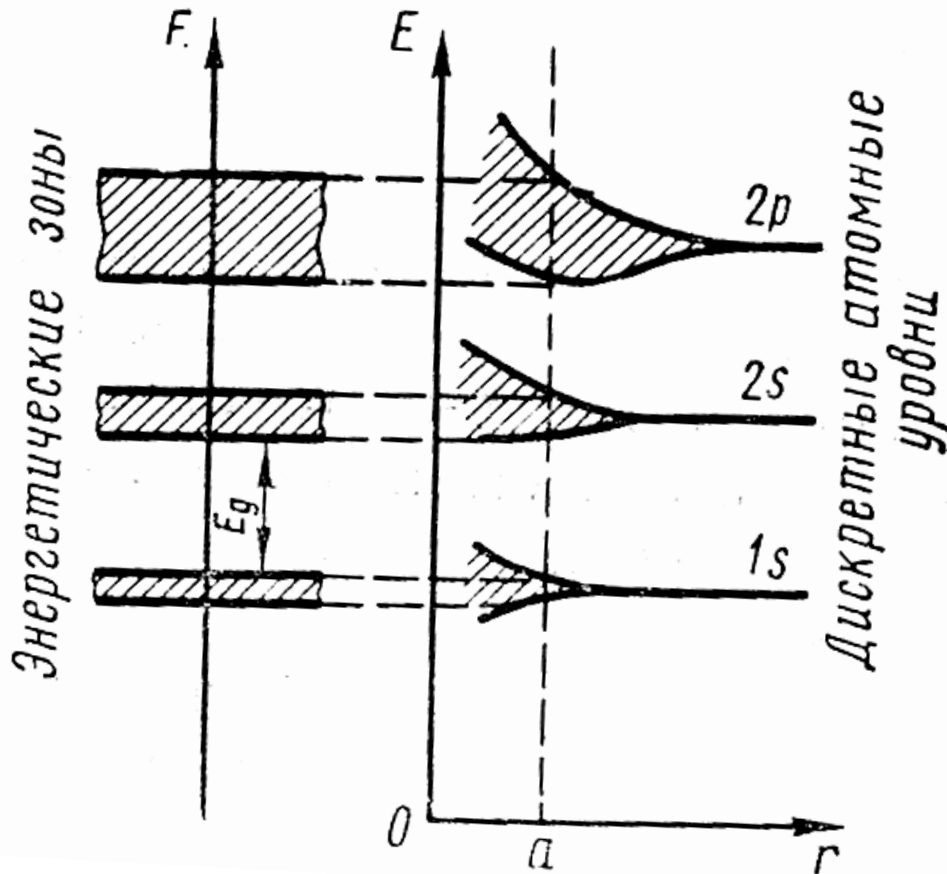
Каждый уровень изолированного атома в кристалле оказывается  $N$ -кратно вырожденным.



По мере сближения изолированных атомов и образования из них решетки каждый атом попадает во все возрастающее поле своих соседей, с которыми он взаимодействует.

Каждый энергетический уровень, не вырожденный в изолированном атоме, расщепляется на  $N$  близко расположенных друг от друга подуровней, образующих энергетическую зону.

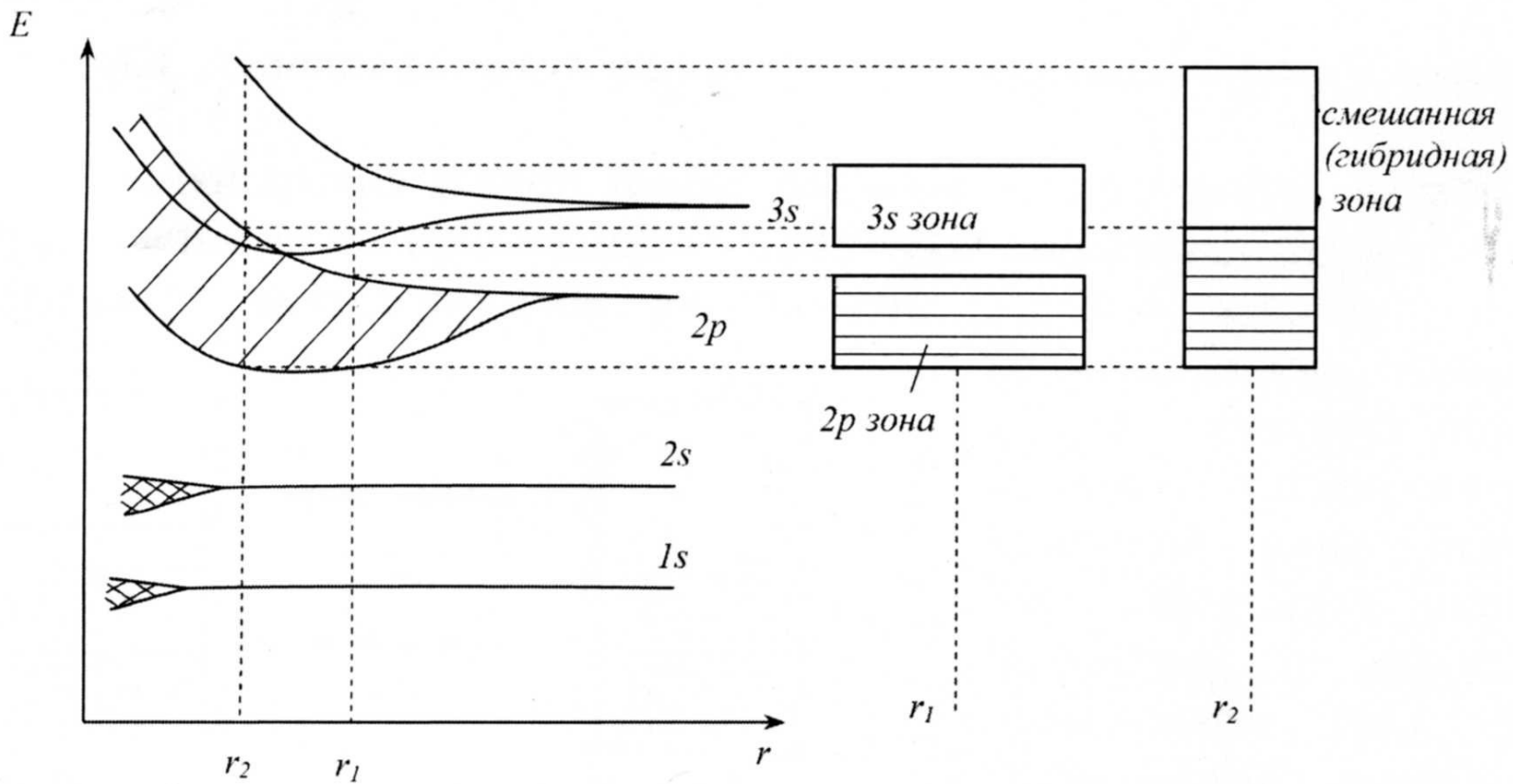
# Расщепление уровней как функция расстояния между атомами



Возникающее в кристалле расщепление уровней, занятых внутренними электронами, очень мало.

Заметно расщепляются лишь уровни, занятые валентными электронами.

Каждому квантовому состоянию изолированного атома, характеризующемуся квантовыми числами  $n$  и  $l$ , в кристалле соответствует зона разрешенных состояний



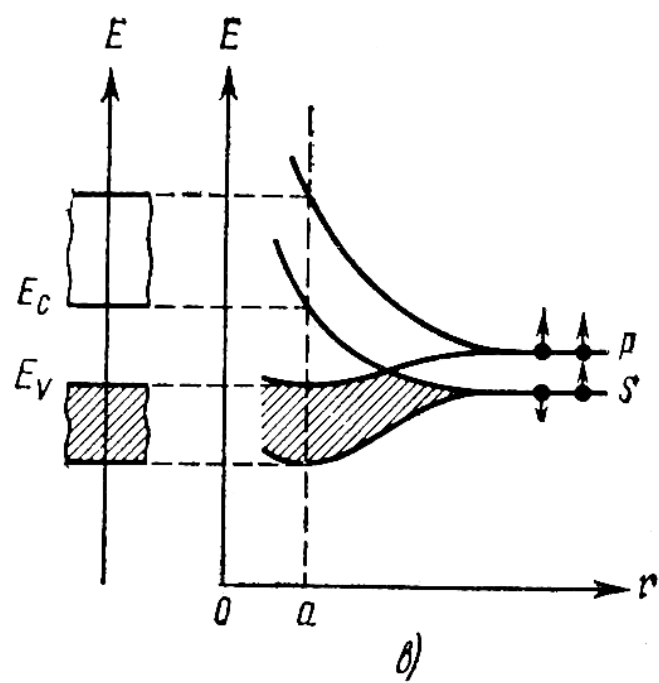
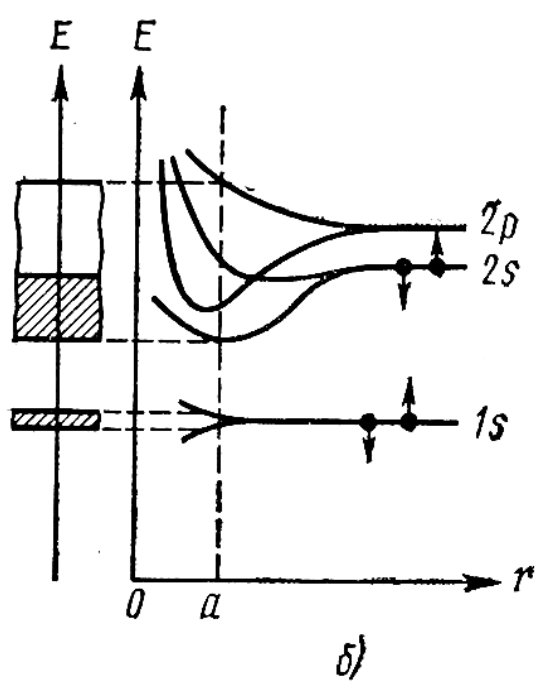
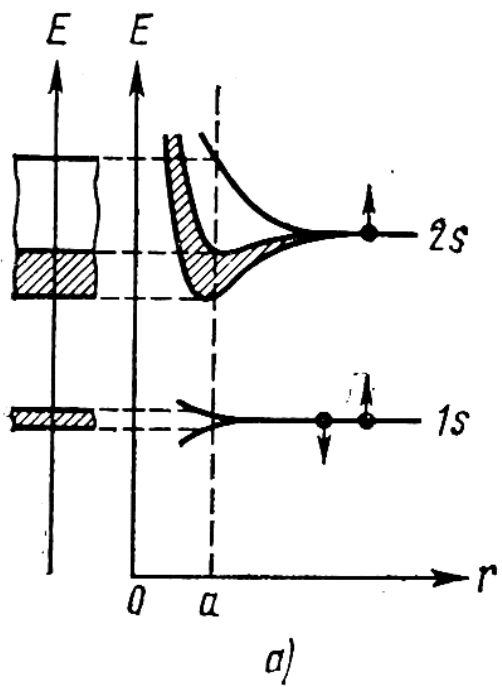
Каждому энергетическому уровню изолированного атома в кристалле соответствует *зона разрешенных энергий*:

Уровень  $s$  дает зону  $s$ , состоящую из  $N$  подуровней и способную вместить  $2N$  электронов

Уровень  $p$  дает зону  $p$ , состоящую из  $3N$  подуровней и способную вместить  $6N$  электронов, и т. д.

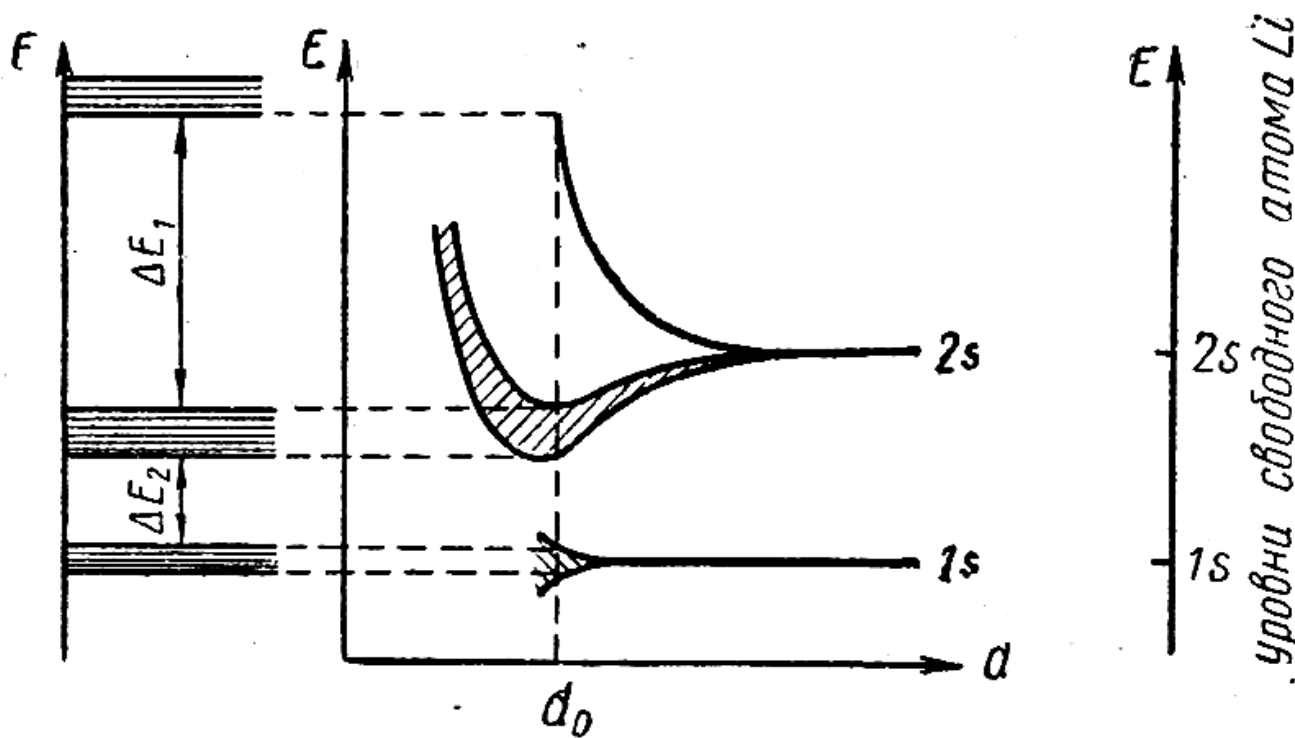
Зоны разрешенных энергий разделены областями запрещенных энергий – *запрещенными зонами*  $E_g$ .

С увеличением энергии электрона в атоме ширина разрешенных зон увеличивается, ширина запрещенных – уменьшается



# ПРИМЕРЫ ОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН В КРИСТАЛЛАХ

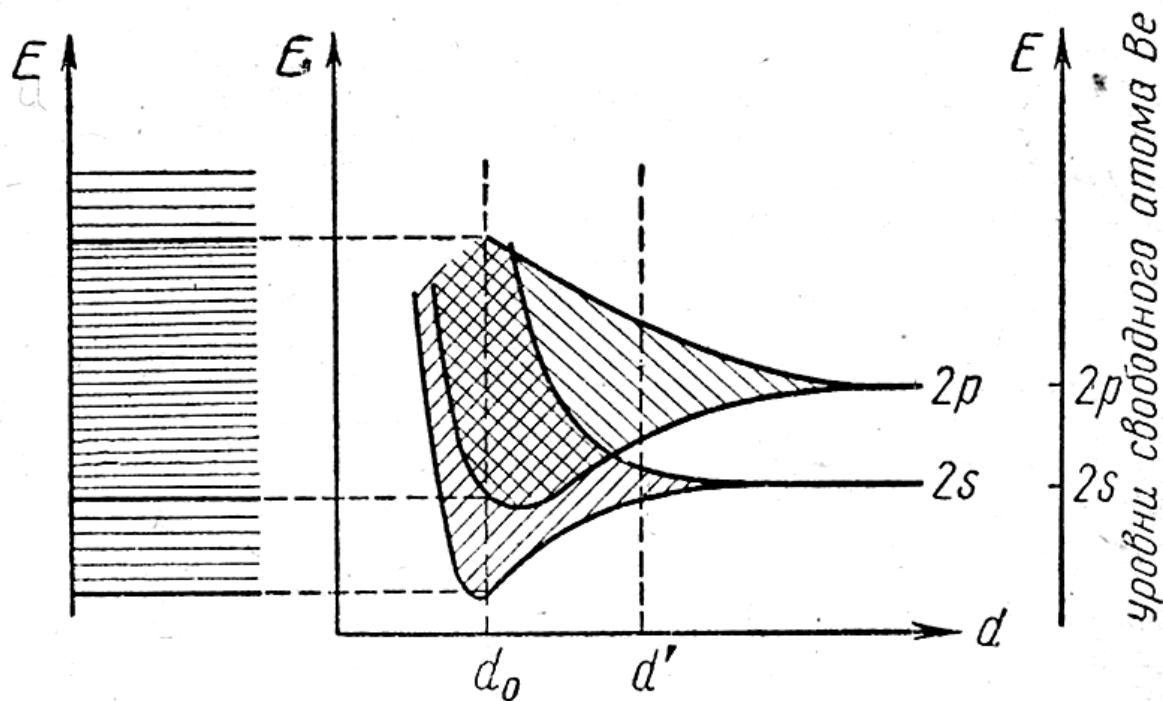
Кристалл лития (элемент I группы периодической системы элементов Д. И. Менделеева).



$d_0$  – постоянная кристаллической решетки лития

## Кристалл Be (элемент II группы периодической системы)

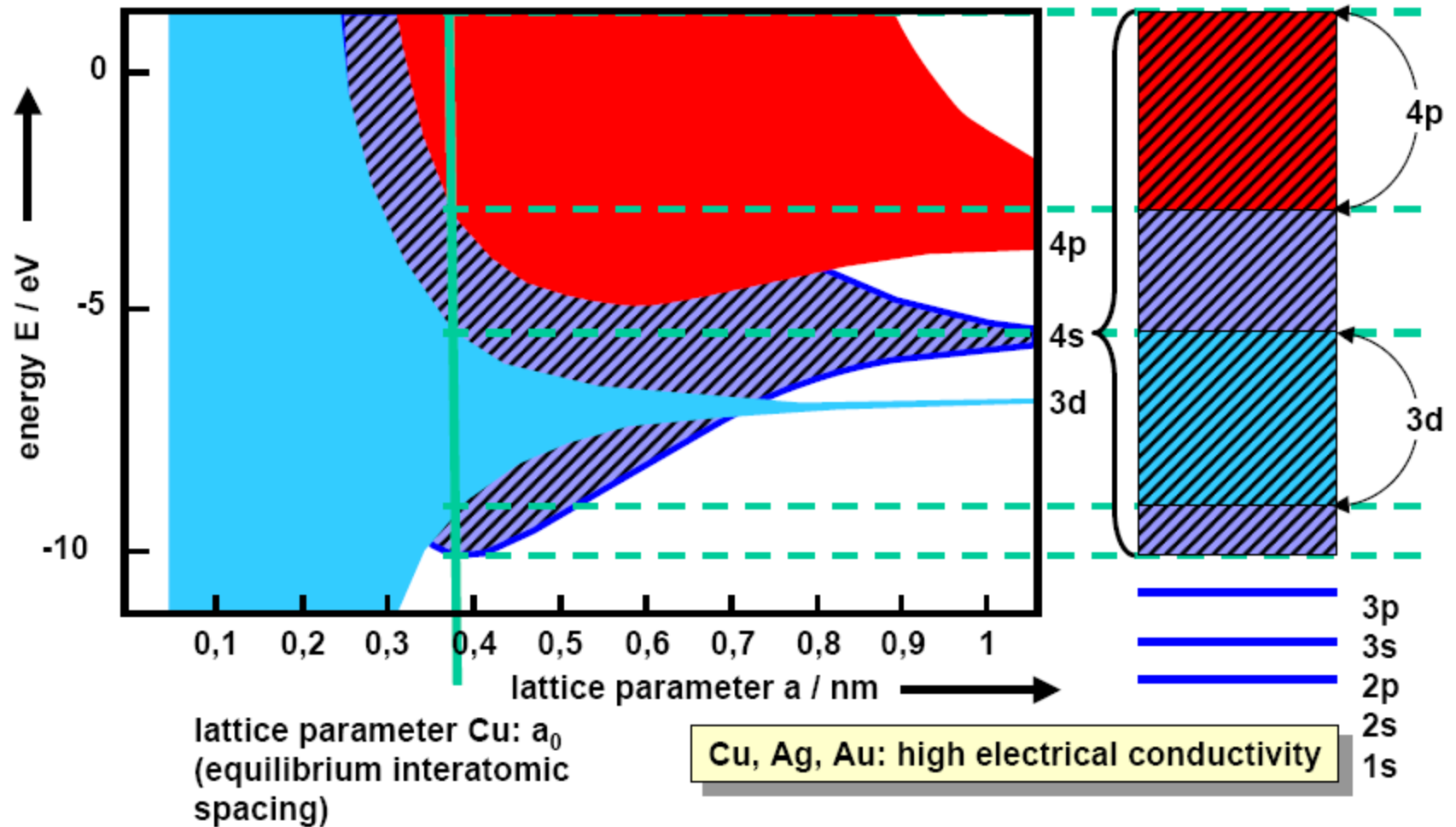
В атоме этого элемента 2s-состояния заняты двумя электронами и потому при образовании из уровня 2s энергетической зоны последняя оказывается целиком заполненной.



Наряду с этим 2p-состояния атомов пусты и поэтому зона 2p свободна

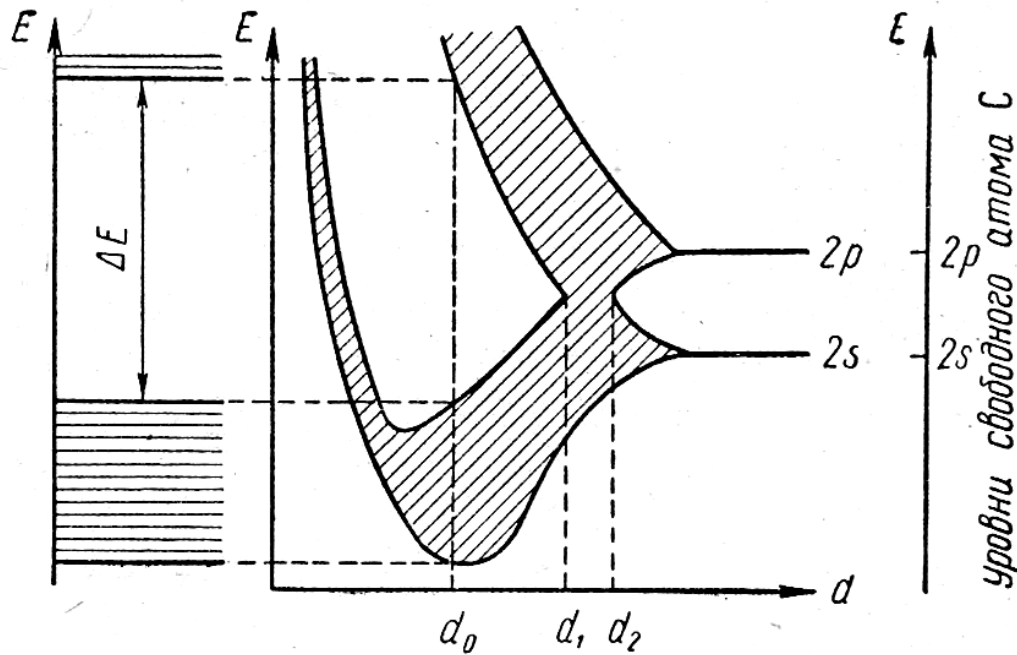
# Electrical Conduction

## Energy Band Structures in Solids: Energy States in Copper





## Кристалл алмаза

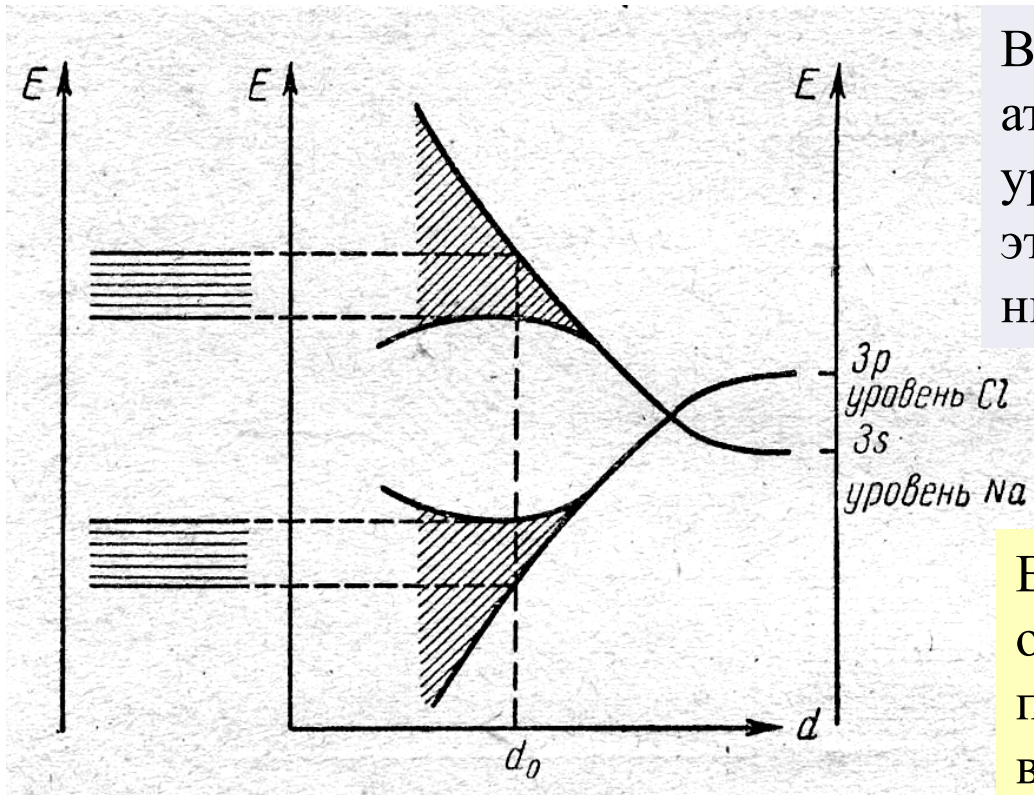


При дальнейшем сближении атомов углерода ( $d < d_1$ ) единая энергетическая зона расщепляется на две зоны, в каждой из которых имеются по  $2N$  уровней.

В атоме углерода четыре валентных электрона распределяются по два на каждом из уровней  $2s$  и  $2p$ .

При сближении атомов углерода уровни  $2s$  и  $2p$  сначала расщепляются на две обособленные зоны ( $N$  энергетических уровней в  $2s$ -зоне и  $3N$  уровней в  $2p$ -зоне), но при расстояниях между атомами  $d$  ( $d_1 < d < d_2$ ) зоны сливаются в единую зону с  $4N$  уровнями, на которых могут разместиться  $8N$  электронов.

## Кристалл поваренной соли NaCl



В разделенных атомах 3s-уровень атома *Na* расположен ниже 3p-уровня атома *Cl*, а при сближении этих атомов зона 3p оказывается ниже зоны 3s.

В кристалле NaCl каждый ион  $\text{Cl}^-$  оказывается в окружении положительных ионов  $\text{Na}^+$ , вследствие чего энергия электрона в этом ионе уменьшается, в то же время энергия электрона, принадлежащего иону Na, из-за взаимодействия с окружающими ионами  $\text{Cl}^-$  увеличивается.

Валентные 3s-электроны натрия переходят в зону 3p хлора и заполняют в ней все вакантные энергетические уровни.

# ЗАПОЛНЕНИЕ ЗОН ЭЛЕКТРОНАМИ

Каждая энергетическая зона содержит ограниченное число энергетических уровней.

В соответствии с принципом Паули на каждом уровне может разместиться не более двух электронов.

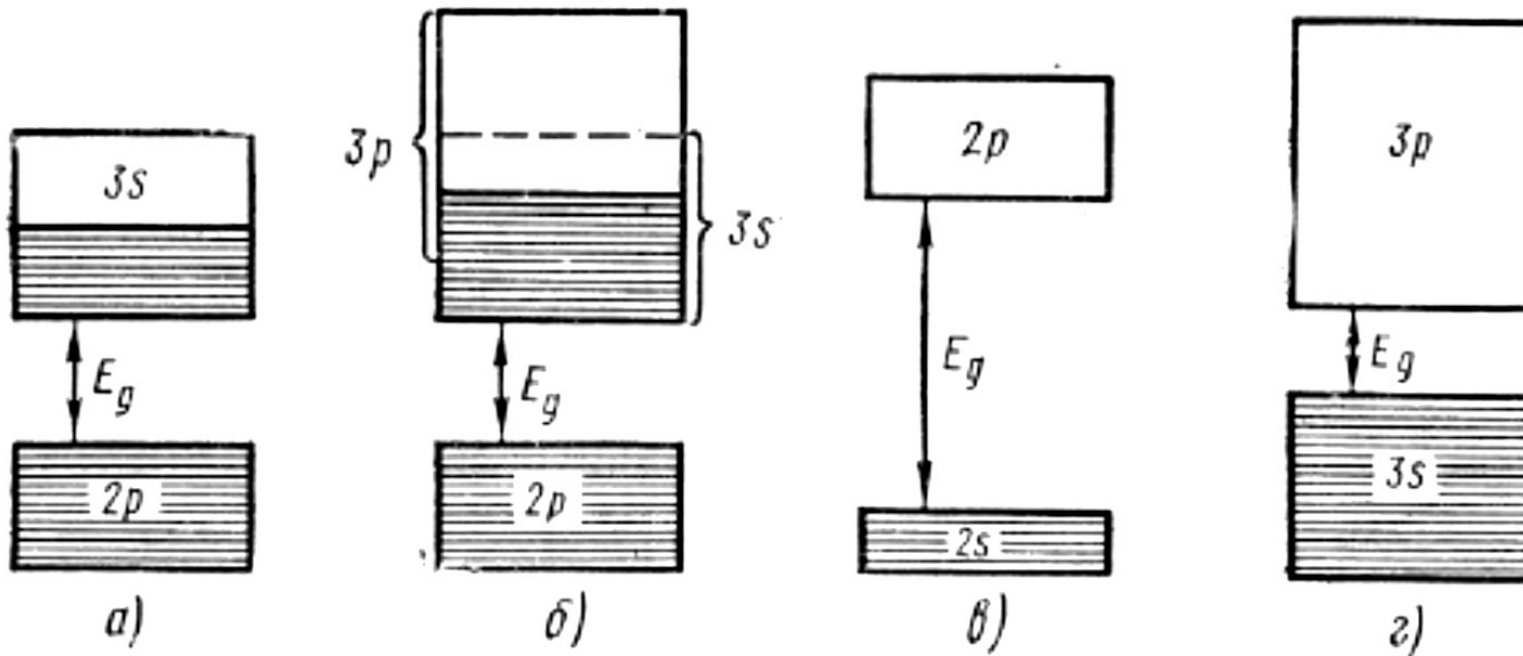
*К первой группе* относятся тела, у которых над целиком заполненными зонами располагается зона, заполненная лишь частично

*Ко второй группе* относятся тела, у которых над целиком заполненными зонами располагаются пустые зоны

Движение электронов внешних энергетических зон осуществляется путем туннельного перехода электронов от атома к атому.

Наличие свободных электронов, способных перемещаться по кристаллу, является лишь необходимым условием появления у тел проводимости, но еще не достаточным.

# ЗАПОЛНЕНИЕ ЗОН ЭЛЕКТРОНАМИ



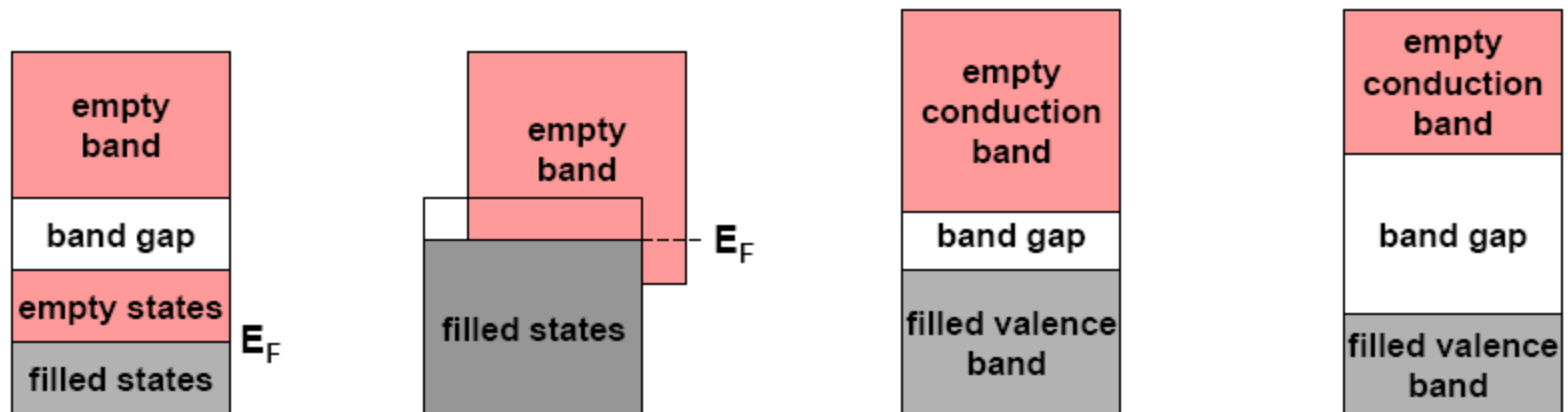
Над полностью  
заполненной зоной  
находится  
частично  
заполненная зона

Над полностью  
заполненной зоной  
находится частично  
заполненная зона (как  
результат наложения  
заполненных зон на  
пустые или частично  
заполненные)

Над полностью заполненной  
зоной находится пустая зона

# Electrical Conduction

## Energy Band Structures in Solids at 0 K



**metals:**  
available and filled states in the same band (Cu, Au, Ag)

**metals:**  
overlap between filled valence band and empty conduction band (Al, Mg)

**semiconductors:**  
filled valence band separated from empty conduction band by a narrow band gap (< 2 eV)

**insulators:**  
filled valence band separated from empty conduction band by a large band gap (> 2 eV)

The electric properties of a solid material are a consequence of its electron band structure: the arrangement of the outermost electron bands and the way in which they are filled with electrons.

Достаточным условием появления у тел высокой проводимости является наличие в их энергетическом спектре энергетических зон, укомплектованных электронами лишь частично, как это имеет место у типичных металлов.

Отсутствие же таких зон в энергетическом спектре твердых тел второй группы делает их *непроводниками*, несмотря на наличие в них свободных электронов, способных двигаться по всему кристаллу.

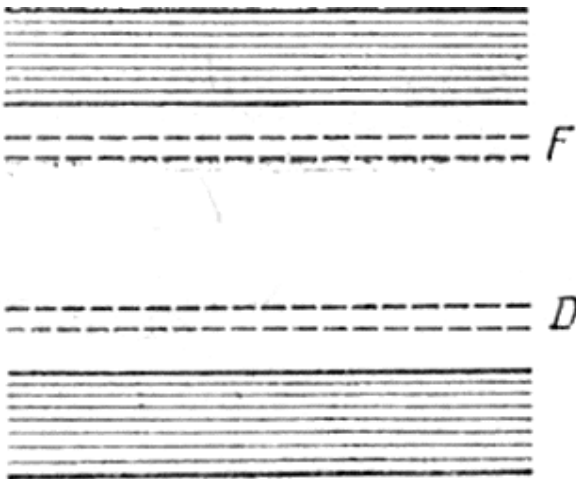
У типичных диэлектриков  $E_g > 3$  эВ. У алмаза  $E_g = 5,2$  эВ; у нитрида бора  $E_g = 4,6$  эВ; у  $Al_2O_3$   $E_g = 7$  эВ и т. д.

У типичных полупроводников  $E_g < 1$  эВ. Так, у германия  $E_g = 0,65$  эВ; у кремния  $E_g = 1,08$  эВ; у антимонида индия  $E_g = 0,17$  эВ; у арсенида галлия  $E_g = 1,43$  эВ и т. д.

# ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛОВ И ВОЗНИКНОВЕНИЕ В НИХ ЛОКАЛЬНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ


При наличии в структуре дефектов в запрещенной зоне возникают энергетические уровни, либо занятые электронами, либо свободные.

Энергетические уровни в запрещенной зоне кристалла могут возникнуть и тогда, когда в нем имеются чужеродные атомы.



Когда концентрация дефектов в кристалле невелика и дефекты расположены друг от друга на расстояниях, значительно превышающих межуатомные, прямой и туннельный переходы электронов между дефектами не происходят, уровни остаются локализованными в участках кристалла с дефектами.





Электроны с занятых локальных энергетических уровней могут перейти в зону проводимости, для чего необходима энергия, меньшая, чем для перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости. Такие уровни называются **донорными**, а соответствующие дефекты – **донорами**.

На свободные локальные уровни могут переходить электроны из валентной зоны кристалла, для чего необходима энергия меньшая, чем для перехода этих же электронов в зону проводимости. Такие уровни называются **акцепторными**, а соответствующие им дефекты – **акцепторами**.

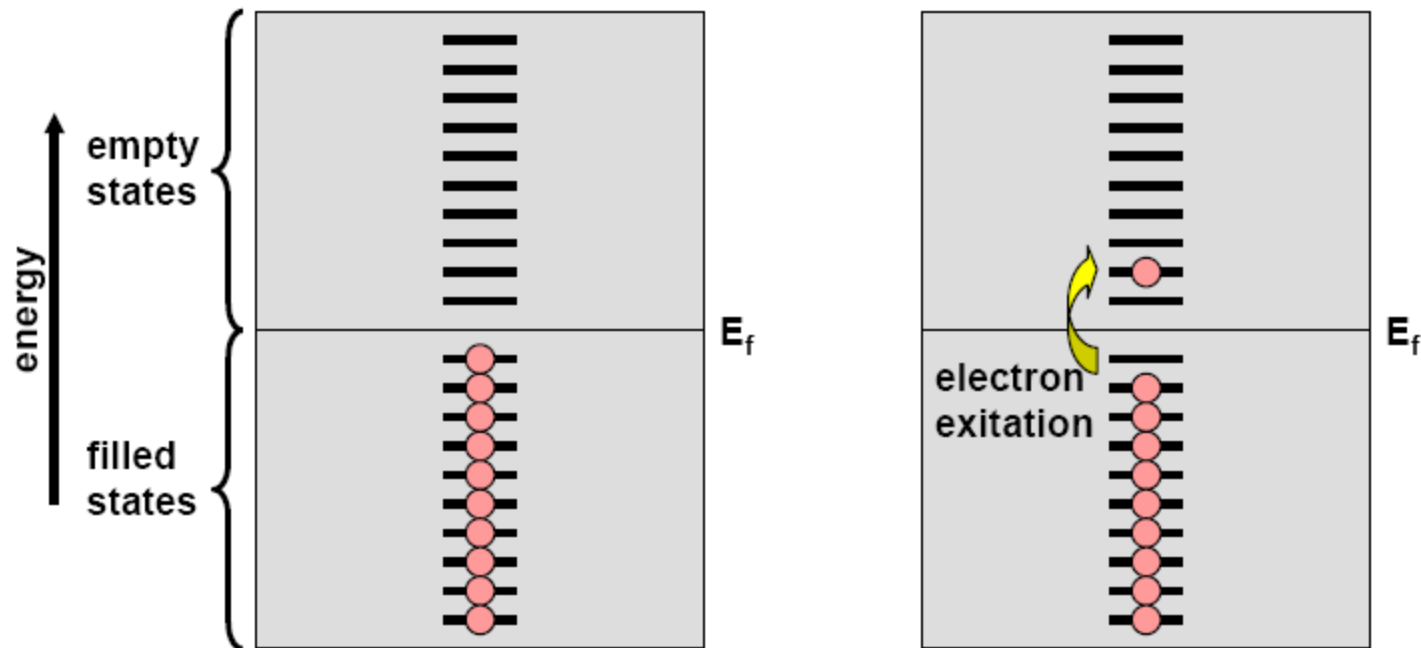
Когда концентрация дефектов в кристалле велика и расстояние между дефектами сравнимо с межуатомным, становится возможным переход электронов между соседними дефектами и локальные энергетические уровни расширяются в энергетические зоны



# Electrical Conduction

## Conduction in Terms of Band and Atomic Bonding Models

**metal**



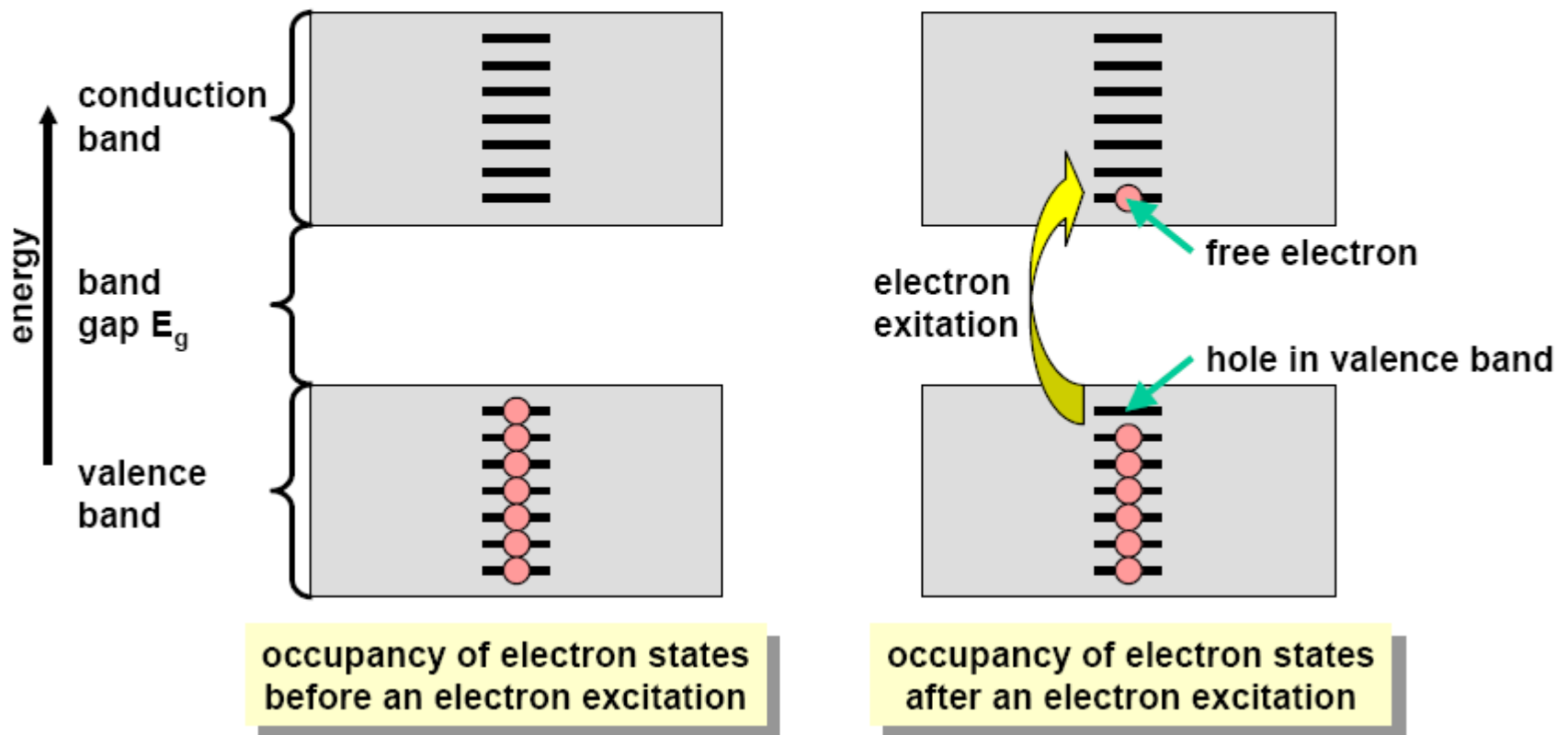
occupancy of electron states  
before an electron excitation

occupancy of electron states  
after an electron excitation

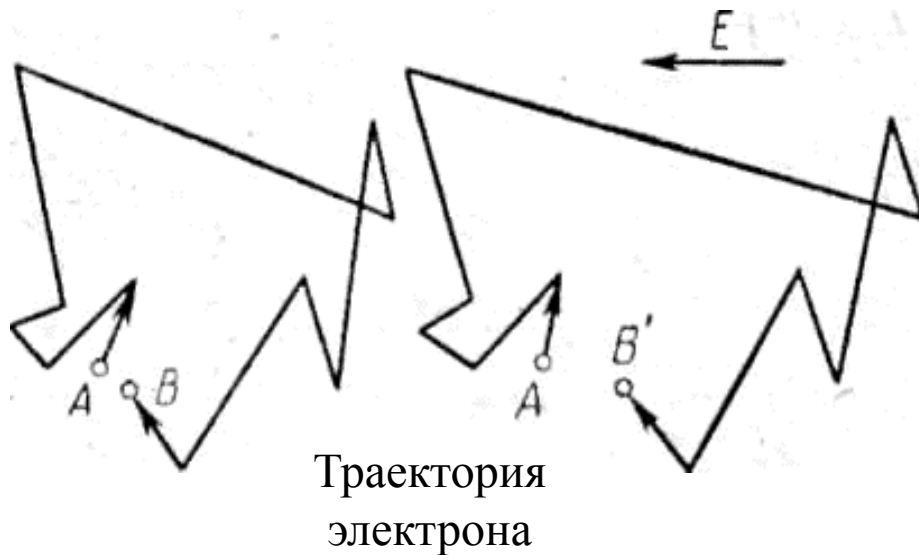
# Electrical Conduction

## Conduction in Terms of Band and Atomic Bonding Models

### insulator or semiconductor



# ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ. ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ЭЛЕКТРОНА



Направленное движение электронов называется дрейфом, а скорость этого движения — дрейфовой скоростью.

Дрейф электронов и создает в кристалле электрический ток.

Плотность электрического тока в кристалле

$$\mathbf{j} = q_e n_e \bar{v}$$

где  $q_e$  — заряд электрона,  $n_e$  — концентрация электронов в кристалле

Закон Ома  $j = \sigma E_{\text{поля}}$

$$\text{Электропроводность } \sigma = q_e n_e \frac{\bar{v}}{E_{\text{поля}}}$$

где  $E_{\text{поля}}$  – напряженность электрического поля

$$\mu = \frac{\bar{v}}{E} \text{ – подвижность электронов}$$

Подвижность электронов численно равна средней дрейфовой скорости, которую приобретают электроны под действием внешнего электрического поля единичной напряженности.

$$\text{Электропроводность } \sigma = q_e n_e \mu$$

)  
Под действием внешнего электрического поля электрон проводимости приобретает среднее ускорение  $\bar{a}$

$$\bar{a} = \frac{d\upsilon}{dt} = \frac{2\pi}{h} \frac{d}{dt} \left( \frac{dE}{dk} \right)$$

(скорость электрона \*  $\upsilon = \frac{2\pi}{h} \frac{dE}{dk}$  )

$$\bar{a} = \frac{2\pi}{h} \frac{d}{dk} (F\bar{\upsilon})$$

Величина внешней силы  $F$  не зависит от волнового вектора и потому ее можно вынести за знак производной:

$$\bar{a} = F \frac{2\pi}{h} \frac{d\bar{\upsilon}}{dk}$$

Продифференцировав \*

$$\frac{d\bar{\upsilon}}{dk} = \frac{2\pi}{h} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

Среднее ускорение электрона в кристалле

$$\bar{a} = F \frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

Среднее ускорение электрона в кристалле пропорционально действующей на него силе внешнего электрического поля.

Коэффициентом пропорциональности при этом является величина

$$\frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E}{dk^2}.$$

Второй закон Ньютона для классической частицы  $a = \frac{F}{m}$

$$m^* = \frac{h^2}{4\pi^2} \frac{1}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad \text{— эффективная масса электрона}$$

Эффективная масса электрона в кристалле — это масса такого свободного электрона, которую он должен был бы иметь для того, чтобы под действием внешней силы приобрести такое же ускорение, как и электрон в кристалле под действием той же силы.

# ВОЛНОВАЯ МЕХАНИКА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Длина волны де Бройля  $\lambda = \frac{h}{p}$

$p$  – импульс частицы,  $h$  – постоянная Планка ( $h=6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с).

$$\eta = \frac{h}{2\pi} \quad \eta = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

Уравнение Шредингера для описания волн де Бройля:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - V(x)] \Psi(x) = 0.$$

$\Psi(x)$  – волновая функция электрона;

$E$  – кинетическая энергия электрона;

$V(x)$  – потенциальная энергия электрона;

$m$  – масса электрона.

Функция плотности  
вероятности

$$|\Psi|^2 dV$$

определяет вероятность существования  
частицы, описываемой волновой  
функцией  $\Psi$  в объеме  $dV$

Плотность заряда

$$-e|\Psi|^2 \quad e - \text{заряд электрона}$$

Между импульсом частицы и волновым вектором существует соотношение:

$$p = \hbar k.$$

Кинетическая энергия свободного электрона

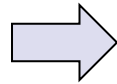
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$m$  – масса электрона в свободном пространстве.



# СТАТИСТИКА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Функция распределения



функция, которая в условиях термодинамического равновесия при заданной температуре  $T$  пропорциональна вероятности того, что некоторая частица занимает определенный энергетический уровень  $E$ .

Функция распределения Максвелла – Больцмана (не квантовые системы):

$$f(E, T) = C e^{-\frac{E}{kT}}$$

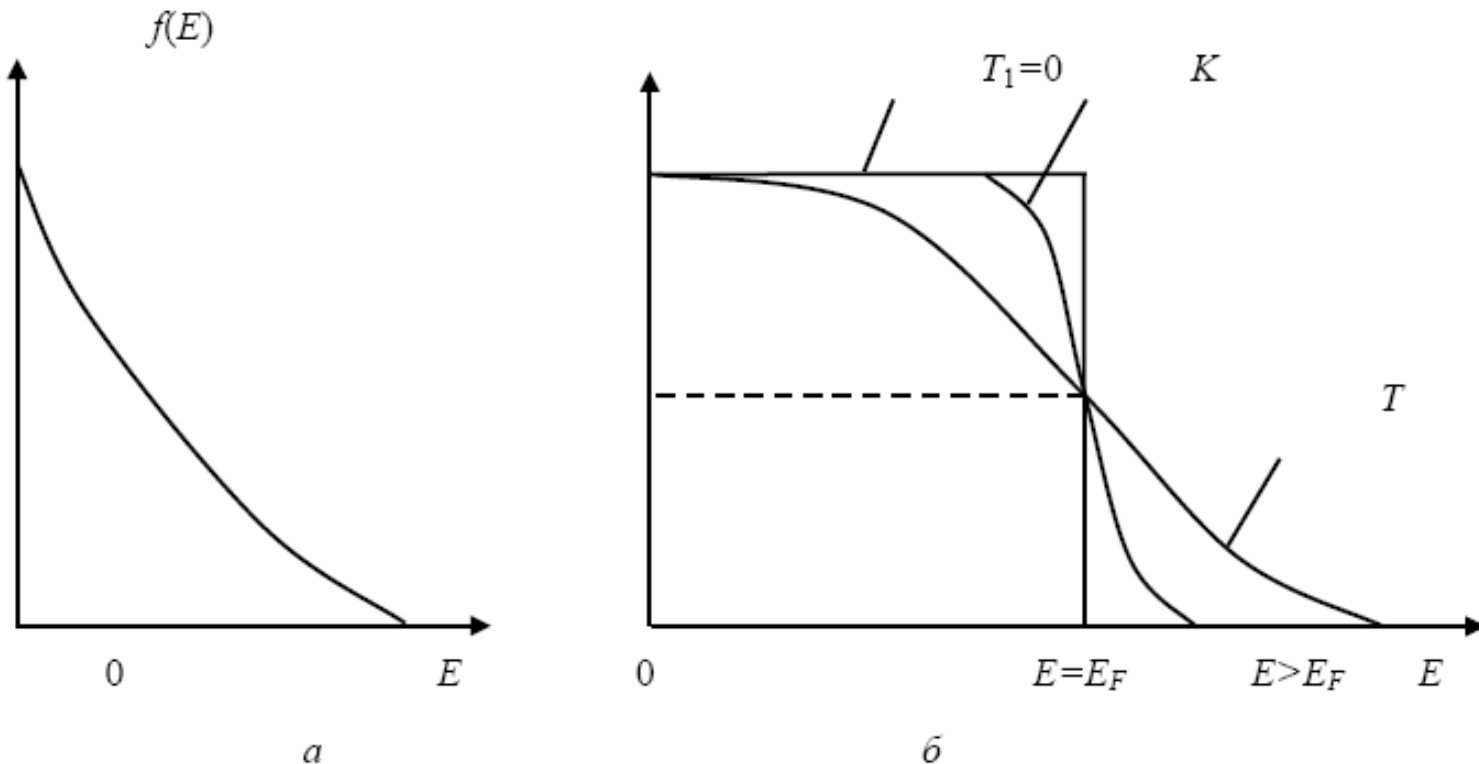
$k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $C$  – некоторая величина, постоянная для определенного полупроводника.

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$$

## Распределение Ферми – Дирака

$$f(E, T) = \left[ 1 + e^{\frac{E - E_F}{kT}} \right]^{-1}$$

Функция распределения Ферми – Дирака определяет вероятность заполнения электроном состояния с энергией  $E$  в условиях термодинамического равновесия.



Функции распределения Максвелла-Больцмана (а) и Ферми-Дирака (б)

Параметр  $E_F$  называется *уровнем Ферми*, который является характеристической величиной систем электронов и дырок, и для каждого полупроводника имеет вполне определенное значение.

При  $E = E_F$  значение  $f = 1/2$

уровень Ферми соответствует энергии такого квантового состояния, вероятность заполнения которого равна 1/2.

Концентрация электронов  $n$ , энергия которых заключена в интервале от  $E_c$  до бесконечности:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N(E) f(E, T) dE$$

Точное решение дает

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}}$$

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

Концентрация дырок  $p = \int_{-\infty}^{E_F} N(E)[1 - f(E, T)]dE,$

$$p = N_V e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}},$$

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

$N_C$  и  $N_V$  – эффективная плотность состояний, которая определяет предел заполнения энергетических уровней вблизи дна зоны проводимости и вблизи потолка валентной зоны соответственно.

Ширина запрещенной зоны  $E_g = E_C - E_V$

$$np = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_g}{2kT}}.$$

при неизменной температуре произведение концентраций – величина постоянная

В собственном полупроводнике число возбужденных электронов в зоне проводимости точно равно числу дырок, оставшихся в валентной зоне.

$$\text{Собственная концентрация : } n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_g}{2kT}}.$$

Переходя от энергии в электрон-вольтах к потенциалу в вольтах и учитывая, что электростатический потенциал полупроводника  $\varphi_E = (\varphi_C + \varphi_V)/2$  отношение концентраций можно записать в виде

$$\frac{n}{p} = e^{-\frac{(\varphi_E - \varphi_F)}{\varphi_T}}.$$

Подставив в левую часть  $p = n_i^2 / n$

и прологарифмировав обе части, уровень Ферми запишем через **концентрацию свободных электронов:**

$$\varphi_F = \varphi_E + \varphi_T \ln(p / n_i).$$

химический  
потенциал

Подставив в левую часть  $n = n_i^2 / p$

уровень Ферми через **концентрацию дырок:**  $\varphi_F = \varphi_E - \varphi_T \ln(p / n_i).$

Уровень Ферми является суммой электрического и химического потенциалов полупроводника.

*Уровень Ферми одинаков во всех частях равновесной системы, какой бы разнородной она не была.*

$$\varphi_F = const,$$
$$grad(\varphi_F) = 0$$

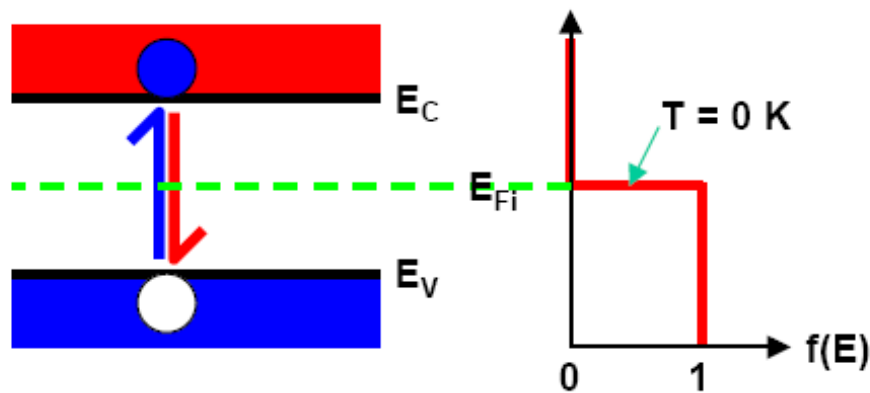
Если концентрация электронов изменяется с координатой, то возникает электрическое поле

$$E = \varphi_T \frac{\partial n / \partial x}{n}.$$

Если полупроводник легирован неоднородно, то возникающее под действием градиента концентраций движение носителей заряда уравнивается внутренним электрическим полем. Такое поле называется встроенным, а возникающее при этом равновесие называют *больцмановским*.

# Semiconductors

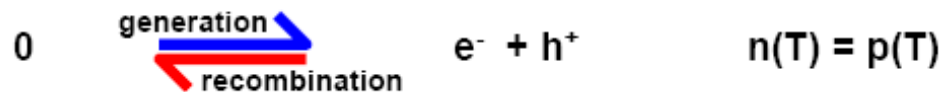
## Charge Carriers in Intrinsic Semiconductors



$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_{Fi}}{kT}}}$$

$E_{Fi}$ : fermi-level for intrinsic semiconductor

- thermal equilibrium



- intrinsic charge carrier concentration  $n_i$

$$n_i = n = p$$

$n$ : (mobile) electrons in the conduction band

$p$ : (mobile) holes in the valence band

# Semiconductors

## Charge Carrier Concentration and Fermi Level

---

- electron concentration  $n$  (conduction band)

$$n = N_C \cdot e^{\frac{-(E_C - E_{Fi})}{kT}}$$

$$N_C = 2 \cdot \left( \frac{2\pi \cdot m_n^* \cdot kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

- hole concentration  $p$  (valence band)

$$p = N_V \cdot e^{\frac{-(E_{Fi} - E_V)}{kT}}$$

$$N_V = 2 \cdot \left( \frac{2\pi \cdot m_p^* \cdot kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

- intrinsic charge carrier concentration  $n_i$

$$n_i = N_{eff} \cdot e^{\frac{-E_g}{2kT}}$$

$$N_{eff} = \sqrt{N_C \cdot N_V}$$

- fermi level in an intrinsic semiconductor

$$E_{Fi} = E_V + \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} kT \cdot \ln \frac{m_p^*}{m_n^*} \quad \text{with } E_g = E_C - E_V \quad \text{for } m_p^* = m_n^*$$

$$E_{Fi} = E_V + \frac{1}{2} E_g$$

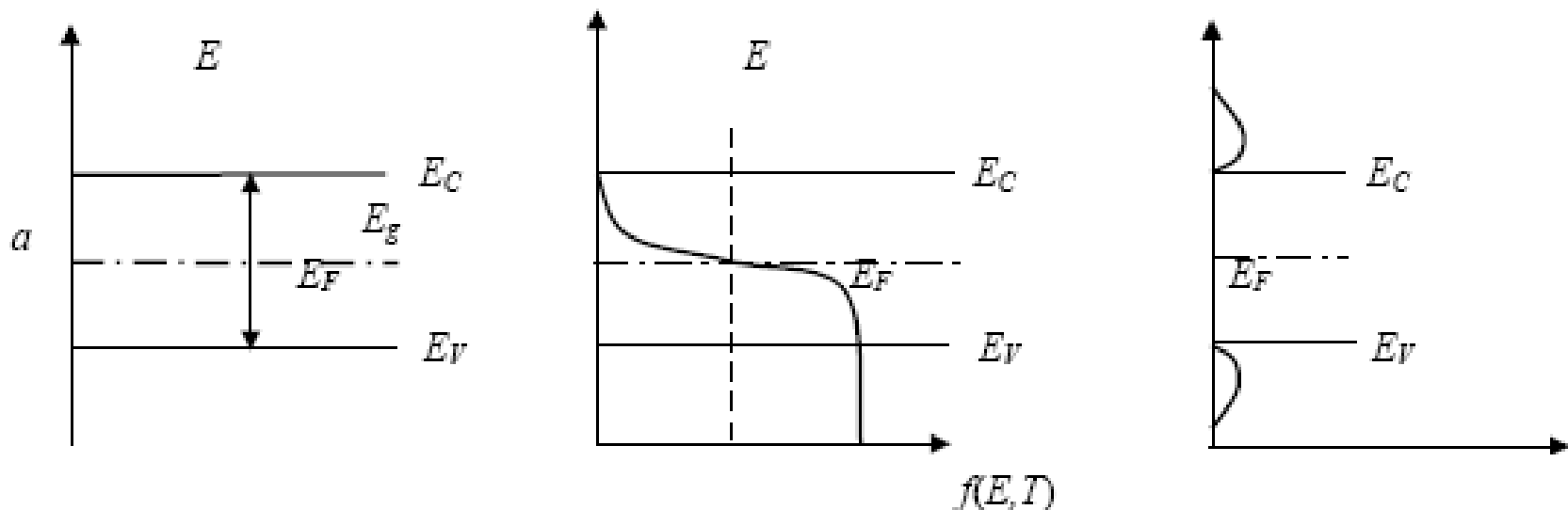


# ЗОННАЯ СТРУКТУРА СОБСТВЕННЫХ И ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В собственном полупроводнике число возбужденных электронов в зоне проводимости точно равно числу дырок, оставшихся в валентной зоне.

$$E_F = E_i = \frac{1}{2}(E_C - E_V) + \frac{1}{2}kT \ln \frac{N_C}{N_V}.$$

В собственном полупроводнике уровень Ферми расположен около середины запрещенной зоны.



Зонная диаграмма, функция распределения Ферми-Дирака и концентрация носителей в собственном полупроводнике

**Электропроводность собственного полупроводника** обеспечивается за счет свободных носителей заряда, электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне.

Полупроводник (кремний, IV группа), легированный *донорной* примесью (фосфор, V группа).

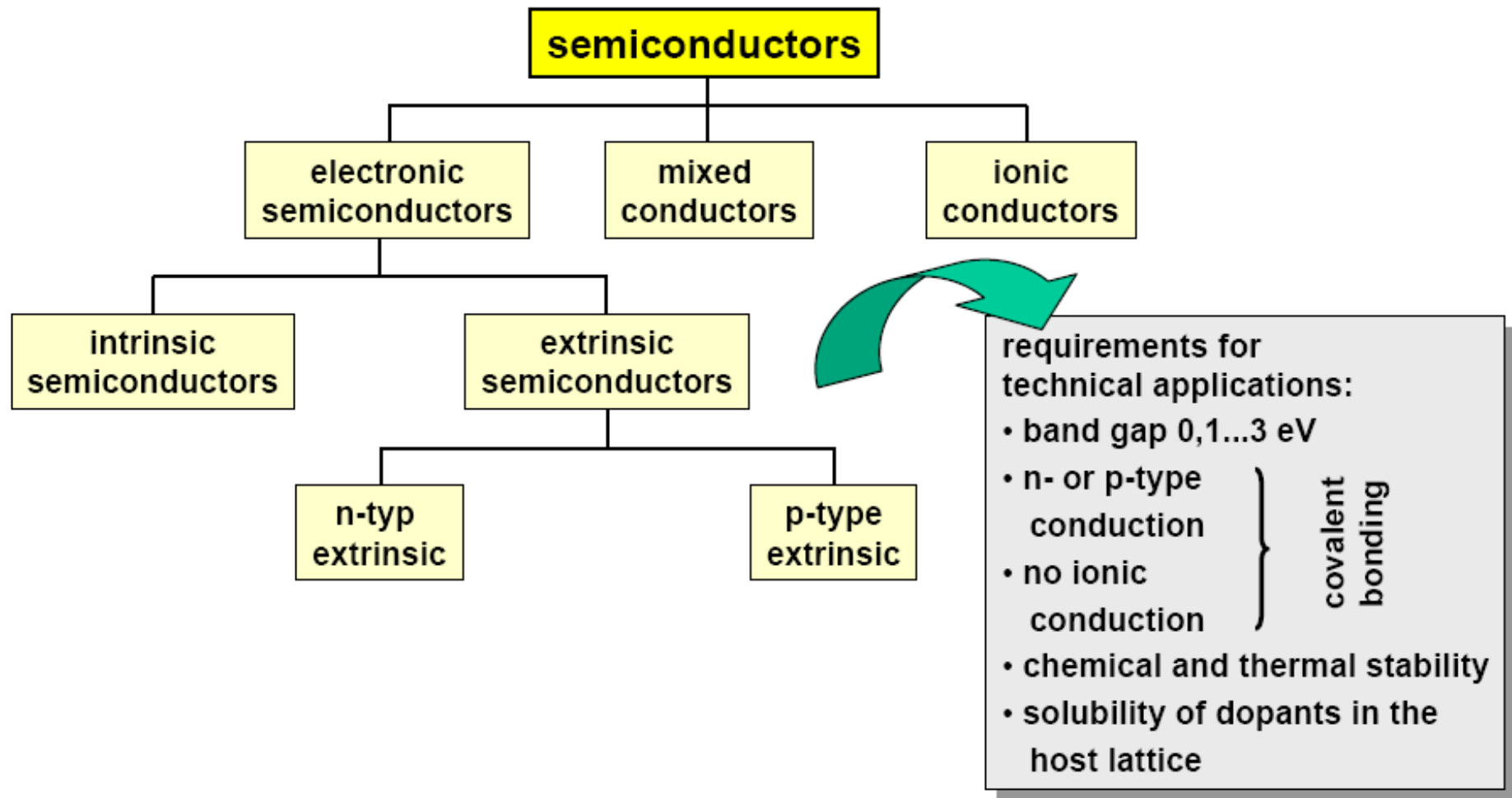
Разрешенные уровни энергии донорной примеси располагаются в запрещенной зоне вблизи дна зоны проводимости.

Четыре внешних валентных электрона атома кремния образуют с четырьмя валентными электронами атома фосфора ковалентные связи, а пятый электрон атома фосфора оказывается не задействован в связи.

Он легко покидает внешнюю валентную оболочку и переходит в зону проводимости, становясь при этом свободным носителем заряда. При этом в запрещенной зоне полупроводника остается положительно заряженный ион донора.

Энергия ионизации атомов донорной примеси составляет сотые доли электрон-вольт, и уже при комнатной температуре все атомы примеси ионизированы.

# Semiconductors Classification



# Semiconductors

## Elemental Semiconductors and Dopants

period	group						band gap $E_g$ / eV of different semiconductors		
	II	III	IV	V	VI	VII	T = 0 K	T = 300 K	
2	Be	B	C	N	O	F	Si	1,17	1,11
3	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ge	0,74	0,68
4	Ca Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	GaAs	1,52	1,38
5	Sr Cd	In	Sn	Sb	Te	I	InAs	0,36	0,35
							InSb	0,23	0,18
							CdS	2,58	2,42
							CdTe	1,61	1,45
							ZnO	3,44	3,20

<p style="text-align: center;">p-type</p> <p style="text-align: center;">n-type</p> <p style="text-align: center;">- dopants for Si and Ge</p>
--

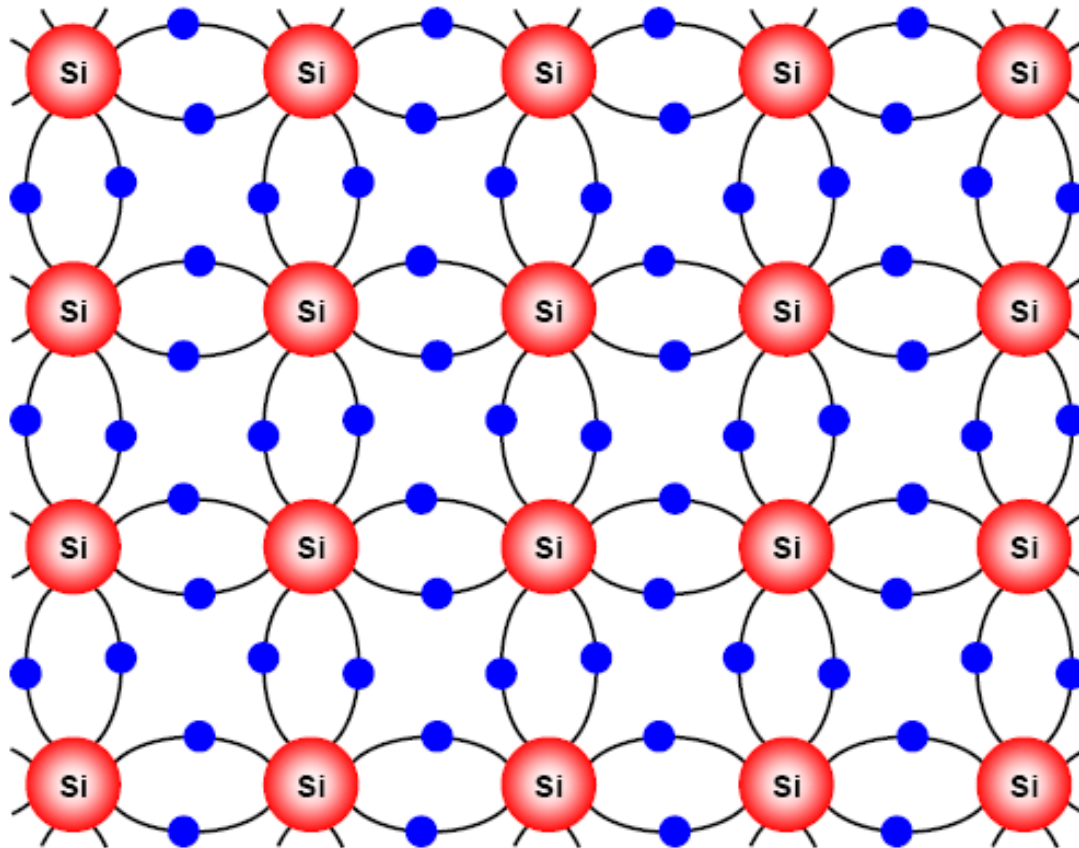
# Semiconductors

## Properties of Elemental and Compound Semiconductors

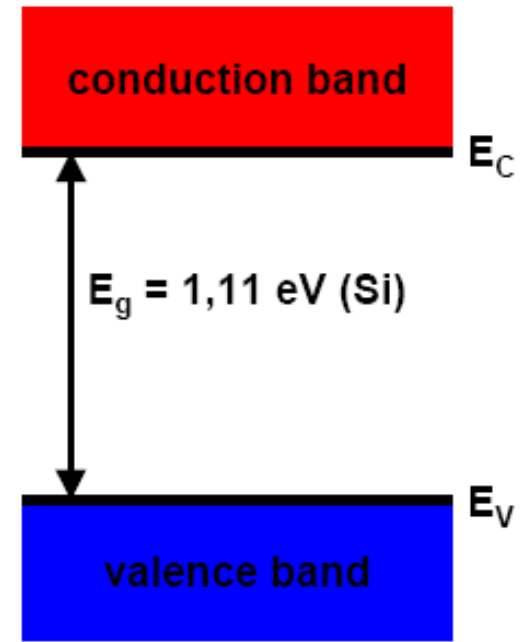
<i>Material</i>	<i>Band Gap</i> (eV)	<i>Electrical</i> <i>Conductivity</i> [[ $\Omega\text{-m}$ ] <sup>-1</sup> ]	<i>Electron Mobility</i> (m <sup>2</sup> /V-s)	<i>Hole Mobility</i> (m <sup>2</sup> /V-s)
<b>Elemental</b>				
Si	1.11	$4 \times 10^{-4}$	0.14	0.05
Ge	0.67	2.2	0.38	0.18
<b>III-V Compounds</b>				
GaP	2.25	—	0.05	0.002
GaAs	1.42	$10^{-6}$	0.85	0.45
InSb	0.17	$2 \times 10^4$	7.7	0.07
<b>II-VI Compounds</b>				
CdS	2.40	—	0.03	—
ZnTe	2.26	—	0.03	0.01

# Semiconductors

## Electrical Conduction in Intrinsic Silicon at $T = 0$ K



band structure

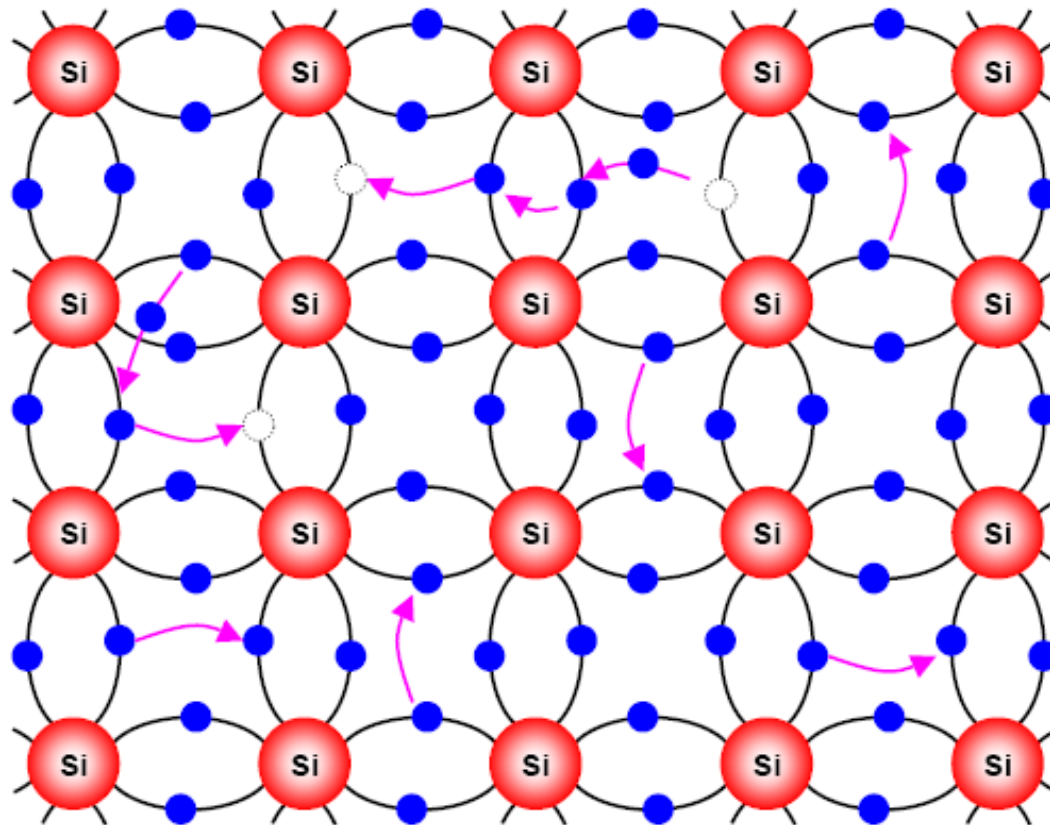


\*  $T = 0$  K

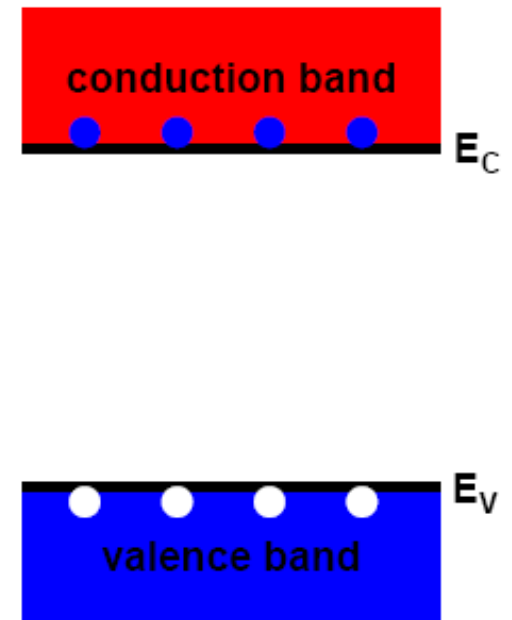
$\text{Si}^{4+}$  ( $\text{Ge}^{4+}$ ): 4 outer electrons ( $sp^3$ -hybride)  $\rightarrow$  no electrons in the conduction band\*

# Semiconductors

## Electrical Conduction in Intrinsic Silicon at $T > 0$ K



band structure



charge carriers at  $T > 0$  K



- (mobile) electrons in the conduction band
- (mobile) holes in the valence band

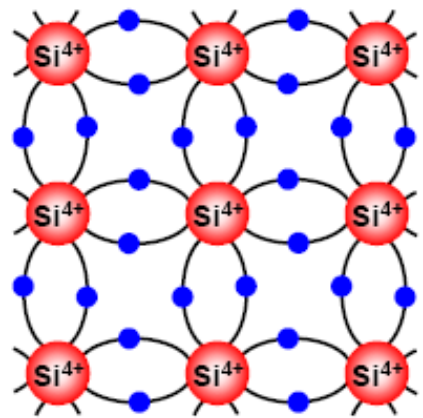
# Semiconductors

## Intrinsic and Extrinsic (n- and p-Type) Semiconductors

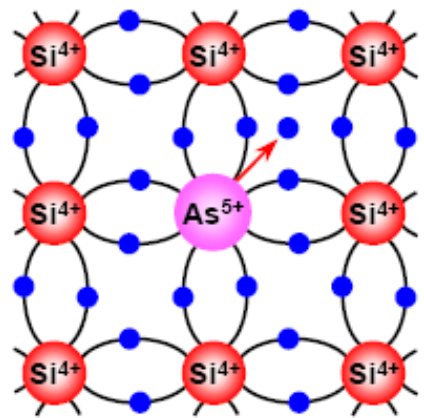
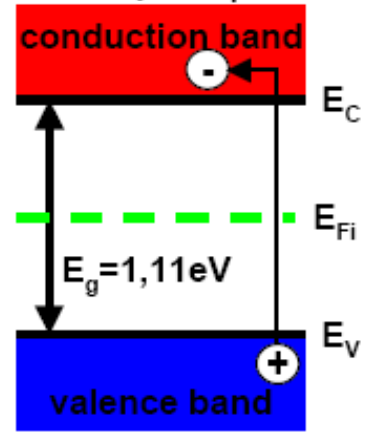
intrinsic semiconductor

extrinsic n-type (donor-doped)

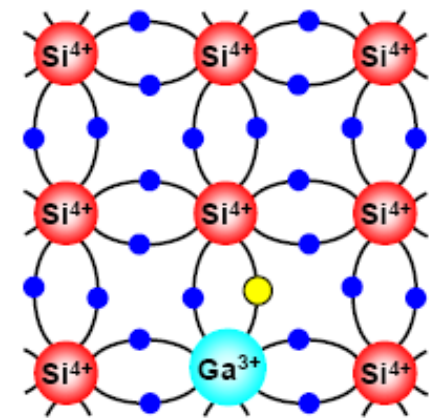
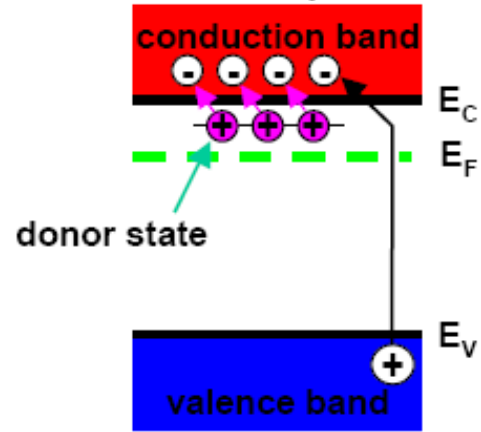
extrinsic p-type (acceptor-doped)



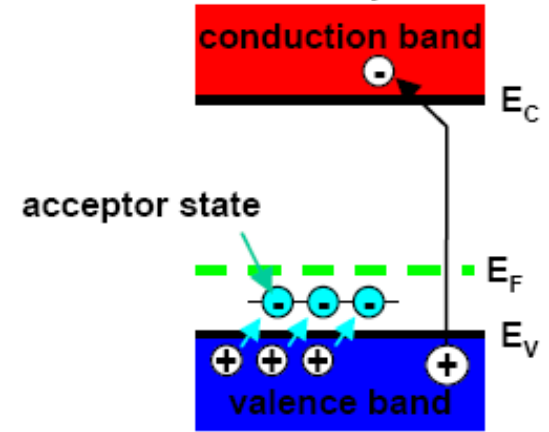
$$n = p = n_i$$



$$n \gg p$$

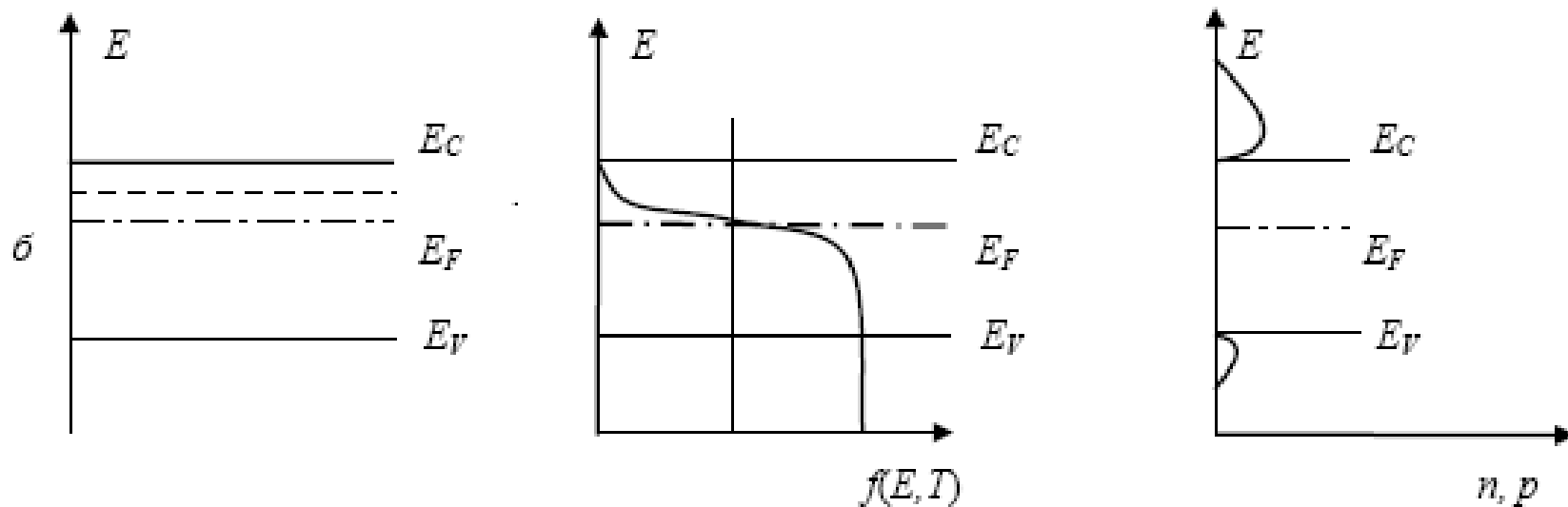


$$n \ll p$$





Полупроводник, где основными носителями заряда являются электроны, называется *полупроводником n-типа*.



Зонная диаграмма, функция распределения Ферми-Дирака и концентрация носителей в полупроводнике n-типа

В  $1 \text{ см}^3$  вещества количество атомов составляет  $N \approx 1 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ . Концентрация собственных носителей в кремнии составляет  $n_i = 1,1 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ . Допустим, что в кремний введена донорная примесь, число атомов которой составляет  $10^{-3}$  от общего числа атомов исходного полупроводника. Получим  $N_D = 1 \cdot 10^{23} \cdot 10^{-3} = 1 \cdot 10^{18}$ . Все эти атомы будут ионизированы, что приведет к образованию свободных электронов  $n_0 = 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .


Введение одной тысячной доли примеси от количества основного вещества может привести к увеличению свободных носителей заряда, участвующих в электропроводности, в  $1 \cdot 10^{18} / 1,1 \cdot 10^{10} \approx 1 \cdot 10^8$  раз.

Для **кремния** в качестве акцепторной примеси используют элементы третьей группы, например **бор**.

Разрешенные уровни энергии **акцепторной примеси** располагаются в запрещенной зоне вблизи потолка валентной зоны.

Для завершения ковалентной связи примесный атом бора к трем внешним валентным электронам присоединяет электрон от атома кремния.

Электрон легко покидает внешнюю валентную оболочку кремния и переходит из валентной зоны в запрещенную зону на внешний валентный уровень акцепторной примеси.

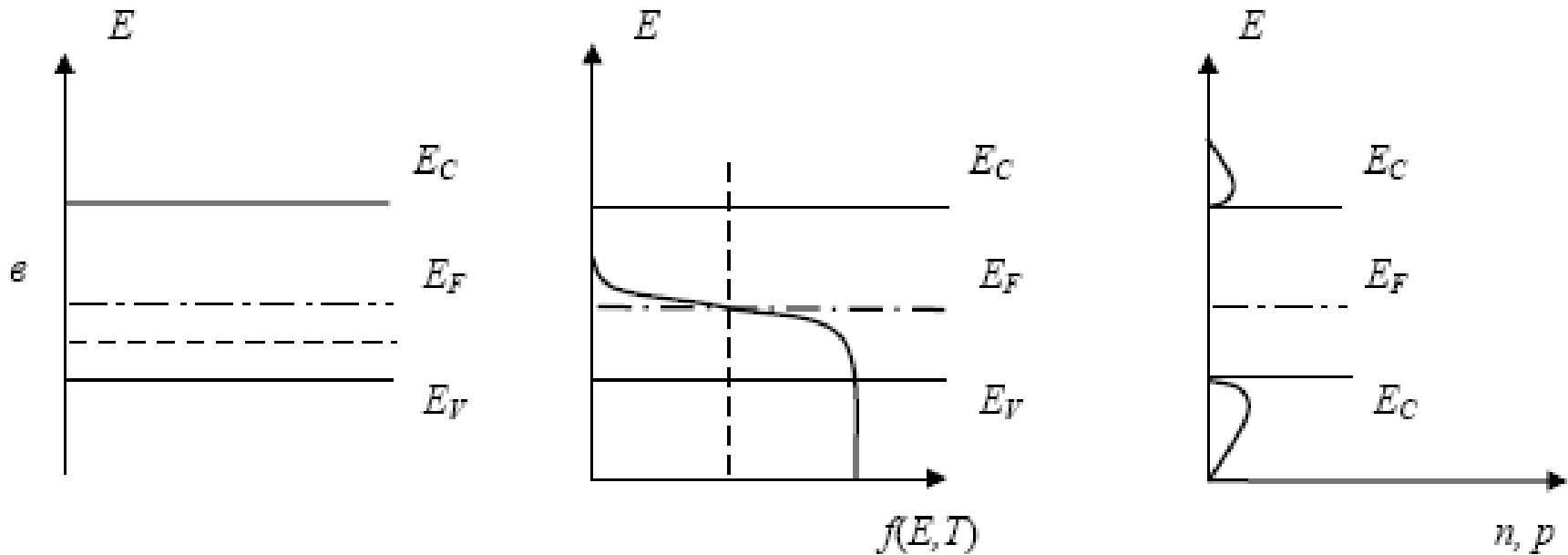


В валентной зоне остается нескомпенсированный положительный заряд – дырка, а в запрещенной зоне образуется отрицательно заряженный ион акцептора.

Дырка – подвижный носитель заряда, перемещение которого является следствием перемещения электронов в валентной зоне.

Полупроводник, где основными носителями заряда являются дырки, называется *полупроводником p-типа*.

Энергия ионизации атомов акцепторов также составляет сотые доли электрон-вольт, и уже при комнатной температуре все атомы примеси ионизированы.



Зонная диаграмма, функция распределения Ферми-Дирака и концентрация носителей в полупроводнике p-типа

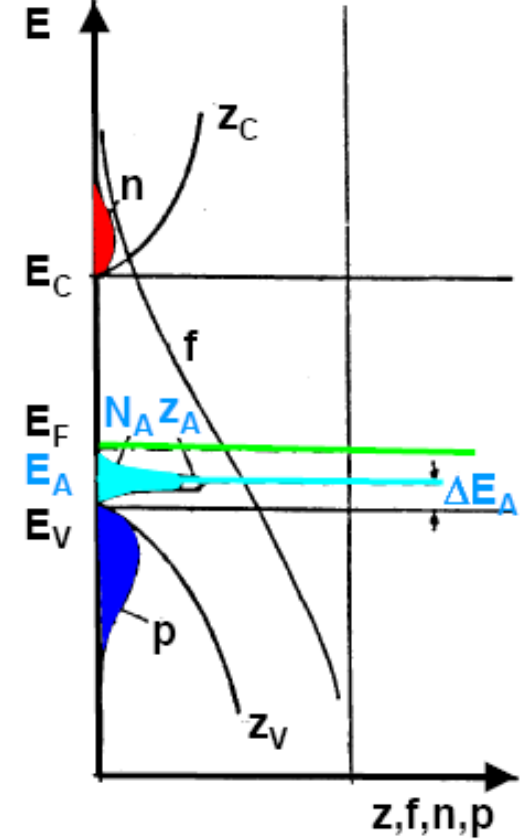
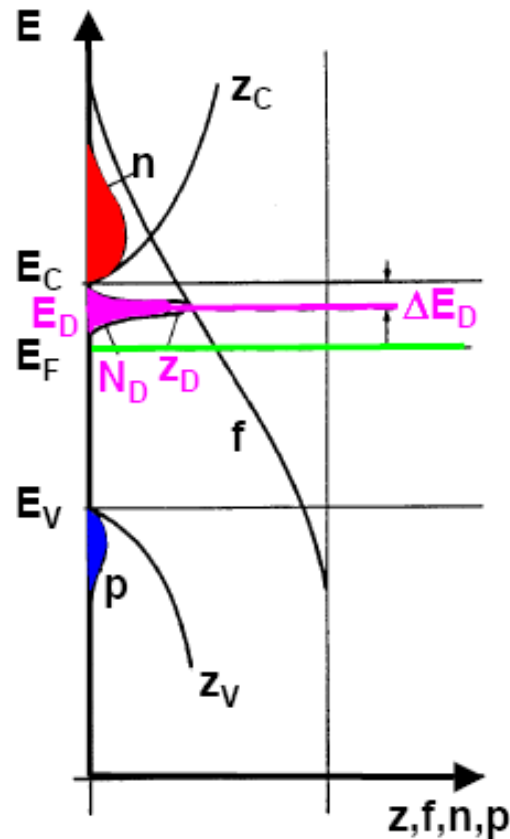
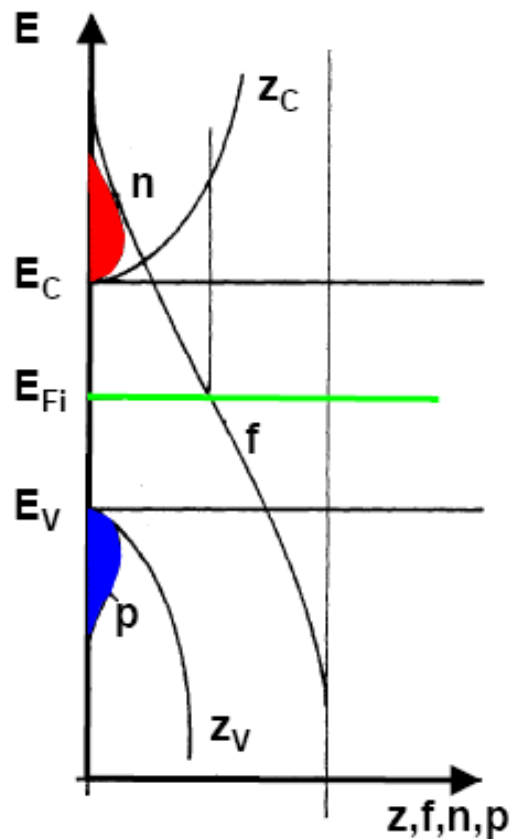
# Semiconductors

## Distribution Function $f(E)$ , Density of States $z(E)$ and filled Electron States

intrinsic  
 $n = p$

n-type (donor-doped)  
 $n \gg p$

p-type (acceptor-doped)  
 $p \gg n$



# Semiconductors

## Donors and Acceptors

---

### donors

excitation from a donor state generates an electron in the conduction band

ionisation energy\*: 
$$\Delta E_D = \frac{m_n^* \cdot e_0^4}{2 \cdot (4\pi \cdot \epsilon_r \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar)^2}$$

in Si: P	$\Delta E_D = 45 \text{ meV}$
Sb	$\Delta E_D = 39 \text{ meV}$
As	$\Delta E_D = 54 \text{ meV}$

### acceptors

excitation from an acceptor state generates a hole in the valence band

ionisation energy\*: 
$$\Delta E_A = \frac{m_p^* \cdot e_0^4}{2 \cdot (4\pi \cdot \epsilon_r \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar)^2}$$

in Si: B	$\Delta E_A = 45 \text{ meV}$
Al	$\Delta E_A = 67 \text{ meV}$
Ga	$\Delta E_A = 72 \text{ meV}$

\* calculation using the hydrogen model  $\text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^- \Rightarrow$

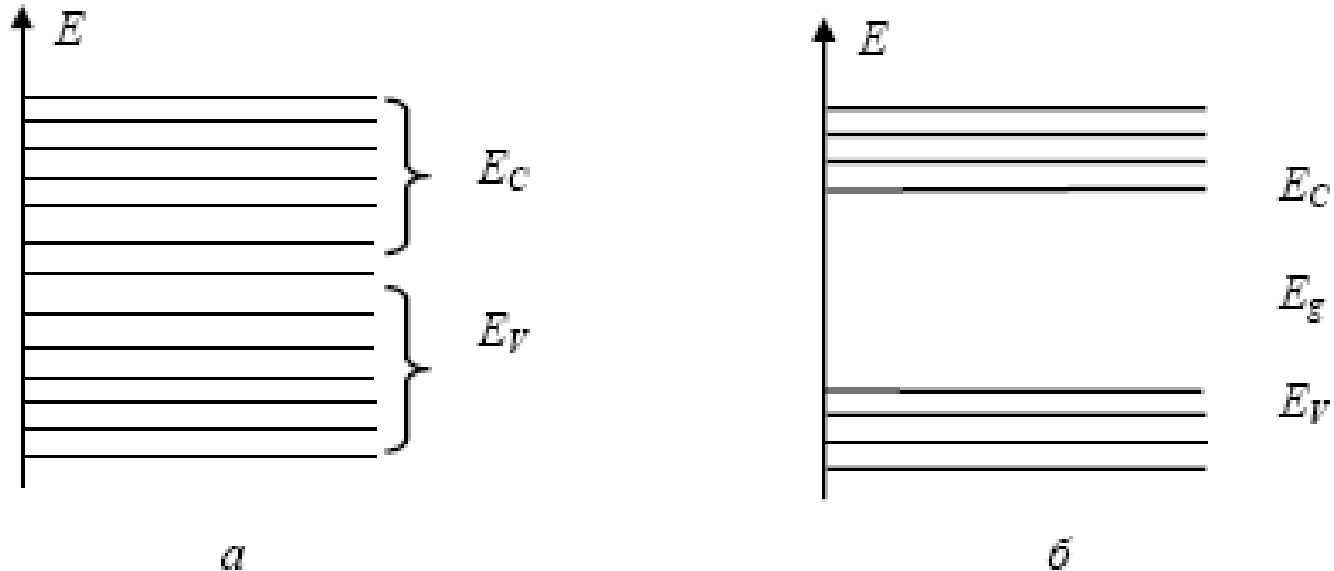
$$\Delta E_{\text{Ion}} = \frac{m_0 \cdot e_0^4}{2 \cdot (4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar)^2} = 13,6 \text{ eV}$$

## Значения собственных концентраций свободных носителей заряда

Параметры	Полупроводник			
	InSb	Ge	Si	GaAs
Ширина запрещенной зоны $E_g$ , эВ	0,17	0,72	1,1	1,4
Собственная концентрация $n_i$ , $\text{см}^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{16}$	$2,4 \cdot 10^{13}$	$1,1 \cdot 10^{10}$	$1,4 \cdot 10^7$
Подвижность электронов $\mu_n$ , $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	8	0,39	0,13	1
Подвижность дырочки $\mu_p$ , $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	0,07	0,19	0,05	0,04

# ЗОННАЯ СТРУКТУРА МЕТАЛЛОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

У металлов зона проводимости непосредственно примыкает к валентной зоне. Это объясняется особенностью строения металлов: они имеют довольно редкое расположение атомов в кристаллической решетке (межъядерные расстояния большие).



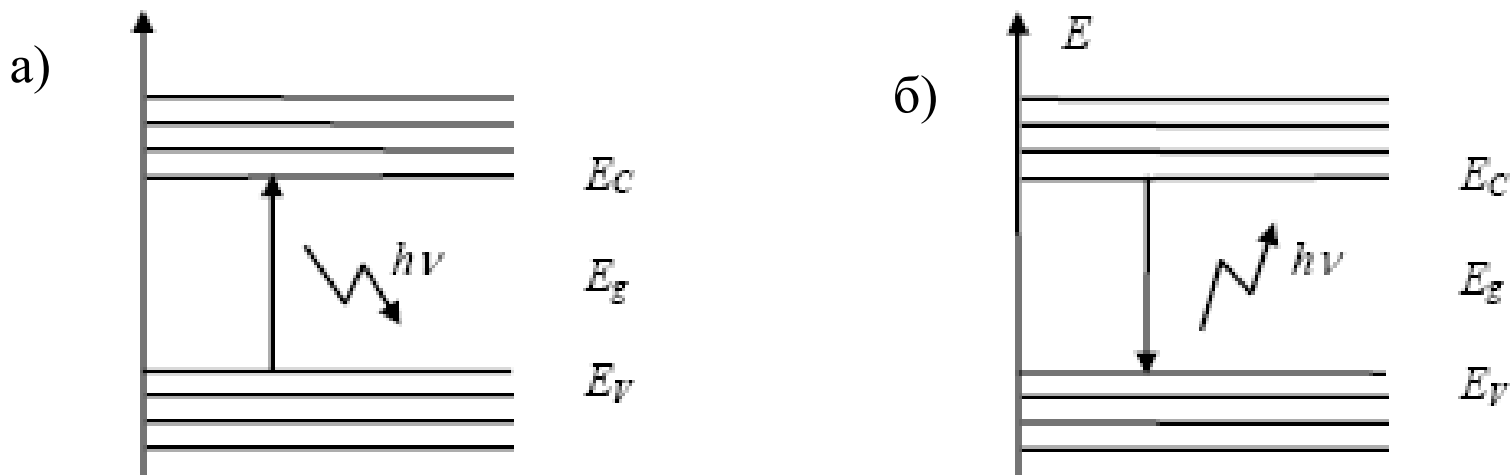
Зонная энергетическая структура металла (а) и диэлектрика (б)



# ГЕНЕРАЦИЯ И РЕКОМБИНАЦИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

**Генерация** – процесс перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости

Процесс генерации сопровождается поглощением энергии.



Генерация и рекомбинация носителей заряда в полупроводнике

**Рекомбинацией** – процесс перехода электронов из зоны проводимости в валентную зону

Процесс рекомбинации сопровождается выделением энергии.

# ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Электропроводность, или удельная проводимость твердых тел  $\sigma$  ( $\text{Ом}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$ ), определяется строением кристаллической решетки и типами межатомных связей.

## Электропроводность металлов и диэлектриков.

Ohm's law

$$V = IR$$

$I$  - current (C/s) or (A)  
(time rate of charge)  
 $V$  - applied voltage (V)  
 $R$  - resistance ( $\Omega$ ) or (V/A)

current density

$$J = \sigma E$$

$J$  - current density ( $\text{A}/\text{m}^2$ )  
 $J = I/A$

resistivity

$$\rho = \frac{RA}{l}$$

$\rho$  - resistivity ( $\Omega\cdot\text{m}$ )  
 $l$  - distance (m)  
 $A$  - cross-section area ( $\text{m}^2$ )

electric field intensity

$$E = \frac{V}{l}$$

$E$  - electric field intensity (V/m)

electrical conductivity

$$\sigma = \frac{1}{\rho}$$

$\sigma$  - conductivity ( $\Omega\cdot\text{m}$ )<sup>-1</sup> or (S/m)

## Электропроводность полупроводников.

При наличии двух типов свободных носителей – электронов и дырок – проводимость полупроводника  $\sigma$  будет определяться суммой электронной  $\sigma_n$  и дырочной  $\sigma_p$  компонент проводимости:

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p$$

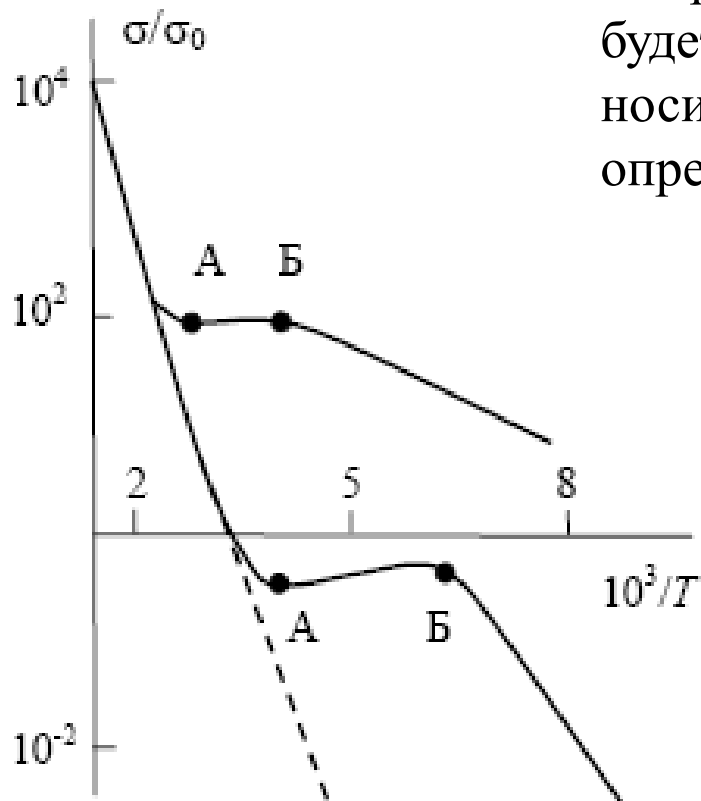
Величина электронной и дырочной компонент в полной проводимости:

$$\sigma_n = \mu_n n_0 q \quad \sigma_p = \mu_p p_0 q$$

где  $\mu_n$  и  $\mu_p$  – подвижности электронов и дырок соответственно.

Для полупроводника  $n$ -типа  $\sigma = \sigma_n + \sigma_p = \sigma_n$

Температурная зависимость собственной проводимости полупроводников определяется температурной зависимостью собственной концентрации носителей.



Зависимость относительной удельной проводимости кремния от температуры,  
 1 – собственный кремний,  
 2, 3 – примесный

У примесных полупроводников проводимость будет определяться концентрацией свободных носителей, которая, в свою очередь, определяется уровнем легирования.

В рабочем диапазоне температур проводимость примесных полупроводников слабо зависит от концентрации носителей и определяется температурной зависимостью подвижности.

Величина, обратная удельной проводимости, называется *удельным сопротивлением* Ом·см :

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\sigma_n + \sigma_p} = \frac{1}{\sigma_n}$$

$$\rho = \frac{1}{\sigma_n} = \frac{1}{\mu_n n_0 q}$$

# Electrical Conduction

## Electron Concentration and Mobility as f(T)

material	concentration of charge carriers	mobility of charge carriers
metals	$n = \text{const}$	$\mu_n \sim T^{-a}$
semiconductors	$n \sim e^{\frac{-E_g^*}{2kT}}$	$\mu_n \sim T^{-a}$
Insulators	$\left\{ \begin{array}{l} n \sim e^{\frac{-E_g}{2kT}} \\ N_{\text{ion}} = \text{const} \end{array} \right.$	$\mu_n \sim T^{-a} \text{ or } \mu_n \sim e^{-\frac{A}{T}}$ $\mu_{\text{ion}} \sim e^{-\frac{B}{T}}$

\* band gap  $E_g \leq 100 kT$  at 25 °C ( $kT = 0,025 \text{ eV}$  at 25 °C)

## Дрейф носителей заряда в полупроводниках.

Движение носителей заряда в полупроводниках обусловлено двумя процессами: дрейфом под действием градиента электрического потенциала и диффузией под действием градиента концентрации.

Направленное движение свободных носителей заряда в полупроводниках под действием электрического поля называется *дрейфом*.

В электрическом поле  $E$  на электрон (или дырку) действует сила

$$F = eE$$

$e$  – заряд электрона,  $E$  – напряженность электрического поля.

Под действием этой силы носитель набирает ускорение

$$a = \frac{F}{m} = \frac{eE}{m}$$

$m$  – масса носителя.

Двигаясь без столкновений, носитель за время  $t$  приобретает скорость в направлении поля

$$v = at = \frac{eE}{m}t$$

Следовательно, средняя скорость  $v$ , приобретаемая носителем, равняется произведению ускорения на среднее время между столкновениями  $\tau_0$  :

$$v = \frac{e\tau_0}{m} E$$

Коэффициент пропорциональности  $\mu = \frac{e\tau_0}{m}$  – подвижность



$$v = \mu E$$

Единица измерения подвижности  $\mu$  – квадратный метр на вольт-секунду,  $\text{м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ .

Плотность дрейфового тока электронов  $j_{dn} = env = en\mu_n E$

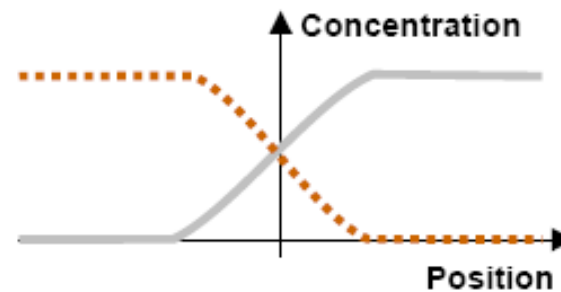
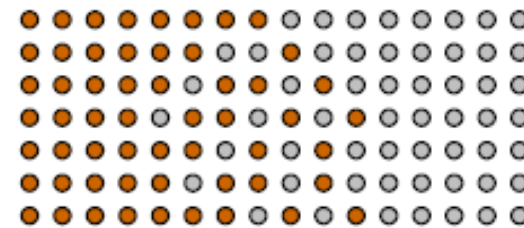
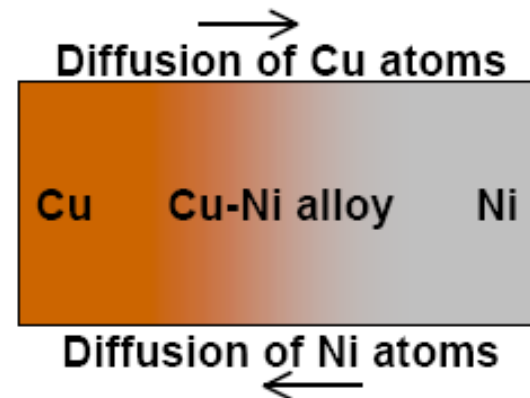
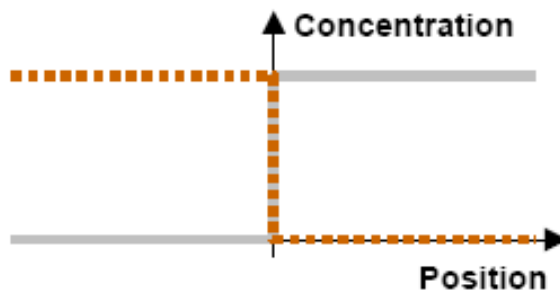
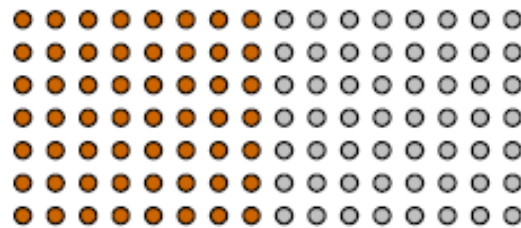
$n$  – концентрация свободных электронов

Поскольку электроны и дырки несут разноименные заряды и дрейфуют под действием поля в разных направлениях, суммарная плотность дрейфового тока

$$j_d = j_{dn} + j_{dp} = en\mu_n E + ep\mu_p E$$

# Diffusion

## Cu-Ni Interdiffusion at high Temperature

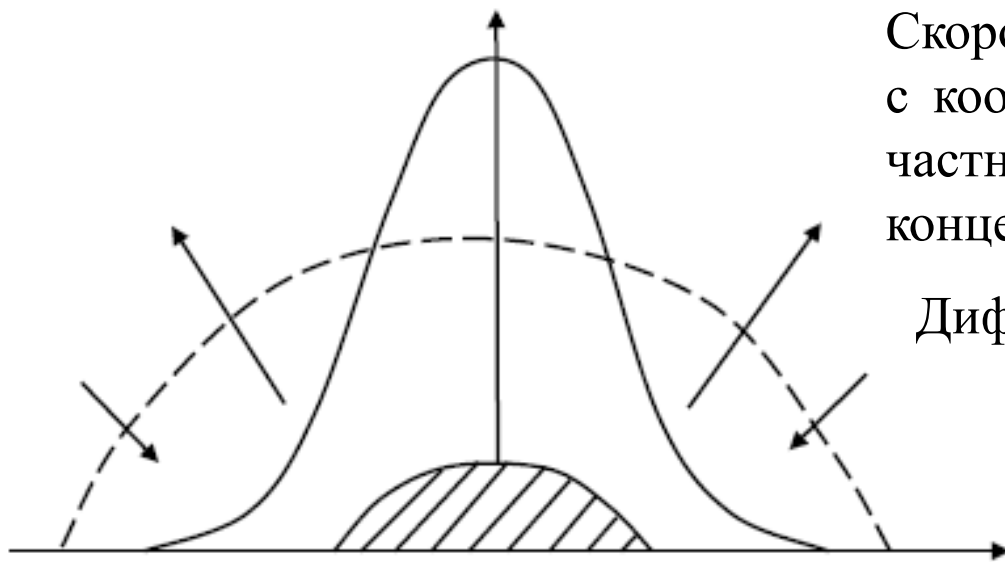




# ДИФФУЗИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Явление диффузии – от латинского *diffusio* (разлитие) – характерно не только для жидкостей и газов, но и для твердых тел.

Процесс диффузии есть прямое следствие хаотического теплового движения частиц.



Распределение молекул одеколона над каплей

Скорость изменения концентрации  $n$  с координатой  $x$  представляет собой частную производную от концентрации по координате  $\partial n / \partial x$ .

Диффузионный поток

$$J = -D \frac{\partial n}{\partial x}$$

$D$  – коэффициент диффузии.

$$|D| = \text{м}^2/\text{с}.$$

Чем меньше длина свободного пробега  $l$ , тем медленнее будут диффундировать молекулы, тем меньше будет коэффициент диффузии  $D$ .

Коэффициент диффузии будет увеличиваться с ростом тепловой скорости движения молекул  $v_T$

$D$  зависит от времени между столкновениями  $\tau_0$  ( $\tau_0 = l / v_T$ )

$$D = \frac{1}{3} l v_T$$

Плотность *диффузионного тока*

$$j_{\text{дифн}} = e\Pi = -eD \frac{\partial n}{\partial x}$$

Если заряд отрицательный (электроны), то, хотя поток электронов будет направлен в сторону убывания концентрации, диффузионный ток будет направлен в противоположную сторону – в сторону возрастания концентрации. Для дырок диффузионный ток направлен в ту же сторону, что и поток дырок.

Чтобы вычислить диффузионный ток, необходимо знать коэффициенты диффузии электронов и дырок  $D_n$  и  $D_p$ .

$$D = \frac{1}{3} v_T^2 \tau_0$$

Вычислим значение тепловой скорости. Оно легко вычисляется из средней энергии теплового движения, равной  $3/2 kT$ , и кинетической энергии частицы, равной  $mv^2/2$ . Приравняв эти величины, получим

$$v_T = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$$

$$D = \frac{1}{3} v_T^2 \tau_0 = \frac{kT}{m} \tau_0$$

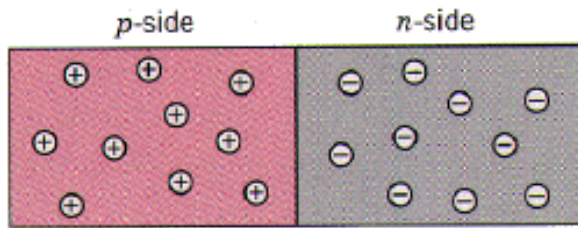
Используя выражение для подвижности носителей заряда, получаем

$$D = \frac{kT}{e} \mu$$

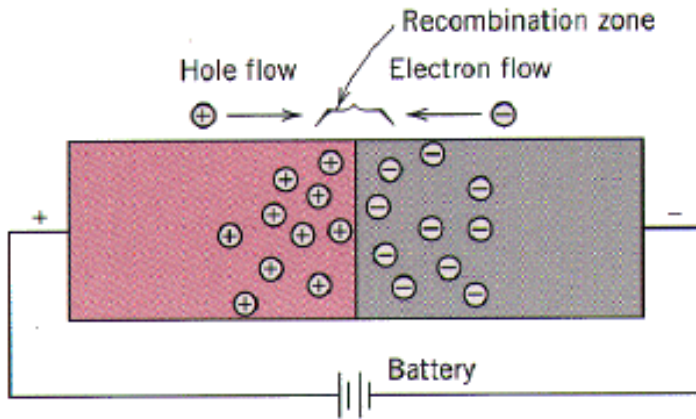
---

процессу диффузии носителей заряда и направленному движению частиц под действием электрического поля мешает одно и то же: столкновения частиц, происходящие через среднее время  $\tau_0$ , при средней тепловой скорости частиц  $v_T$ .

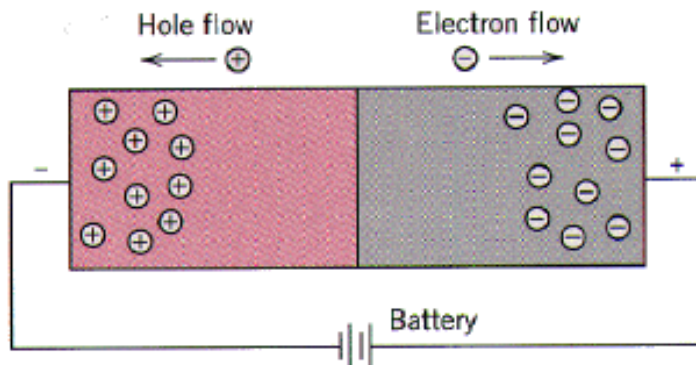
# p-n Rectifying Junction



electron /hole distribution for:  
no electrical potential

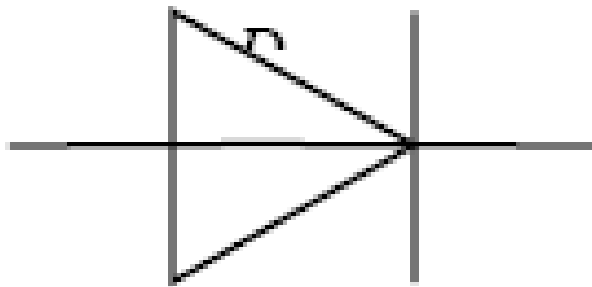


forward bias

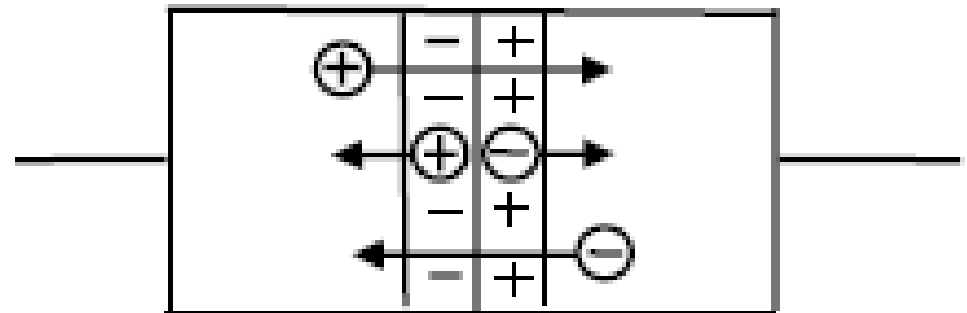


reverse bias

Условное обозначение (а) и структура (б) полупроводникового диода



*a*



*б*