

ΣΧΟΛΗ ΕΜΦΕ – ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ
Ημιαγωγοί και Ημιαγώγιμες Δομές (7^ο Εξάμηνο Σπουδών)

2^η Σειρά Ασκήσεων
 Ι. Σ. Ράπτης

30/11/07
Επιστροφή μέχρι 14/12/07

1. Δίδονται τα παρακάτω δύο ημιαγώγιμα υλικά, (αντιπροσωπευτικά των κυβικών ημιαγωγών τύπου V και II-VI, αντίστοιχα), καθώς και οι αντίστοιχες παράμετροι, (τιμή και τύπος ενεργειακού χάσματος, πλεγματική σταθερά, σχετική διηλεκτρική σταθερά, και ενεργές μάζες ηλεκτρονίων-οπών).

Υλικό	Ενεργειακό Χάσμα Άμεσο(A)/Έμμεσο(E) [eV]	Πλεγματική Σταθερά [A°]	Σχετική Διηλ/κή Σταθερά	Ενεργός Μάζα οπών (m_{lh}/m_{hh}) [m_0]	Ενεργός Μάζα ηλεκτρονίων ($m_{\perp} / m_{\parallel}$) [m_0]
Ge	0,74 / (E)	5,66	16	0,04 / 0,30	0,08 / 1,60
ZnSe	2,82 (A)	6,67	7	0,50 / 0,75	0,15 / 0,15

α) Σχολιάστε το γεγονός ότι η εγκάρσια (m_{\perp}) και η διαμήκης (m_{\parallel}) ενεργός μάζα ηλεκτρονίων, του ZnSe, είναι ίσες, αντίθετα από το Ge. Τι μορφή έχουν και πού βρίσκονται (ως προς το κέντρο της ζώνης Brillouin) οι ισοενεργειακές επιφάνειες των ηλεκτρονίων που καταλαμβάνουν τον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας στα δύο αυτά υλικά; Σχεδιάστε τα ενεργειακά διαγράμματα στον αντίστροφο χώρο, κατ' εκτίμηση.

β) Να υπολογιστεί η «μέση ενεργός μάζα» για τα ηλεκτρόνια των δύο υλικών, καθώς και η απόσταση πλησιεστέρων γειτόνων, (Ge-Ge), και (Zn-Se), αντίστοιχα.

γ) Να υπολογιστούν οι ενεργειακές στάθμες δοτών E_D σε καθένα από αυτά τα υλικά, καθώς και οι αντίστοιχες ακτίνες Bohr. Σχεδιάστε τα ενεργειακά διαγράμματα στον ευθύ χώρο, κατ' εκτίμηση.

δ) Συγκρίνοντας: τις αποστάσεις πλησιεστέρων γειτόνων του ερωτήματος (β) και τις ακτίνες Bohr του ερωτήματος (γ), σχολιάστε το βαθμό αξιοπιστίας για τις ενεργές στάθμες δοτών που υπολογίστηκαν στο ερώτημα (γ).

ε) Εκτιμήστε, για ένα από τα δύο υλικά, (κατά προτίμηση εκείνο για το οποίο το ημικλασικό μοντέλο του Bohr ισχύει καλύτερα, σύμφωνα με το ερώτημα (δ)), την κρίσιμη συγκέντρωση δοτών (\approx τάξη μεγέθους) πάνω από την οποία η διακριτή στάθμη των προσμείξεων μετατρέπεται σε ζώνη, λόγω αλληλεπικάλυψης των κυματοσυναρτήσεων των ηλεκτρονίων γειτονικών δοτών.

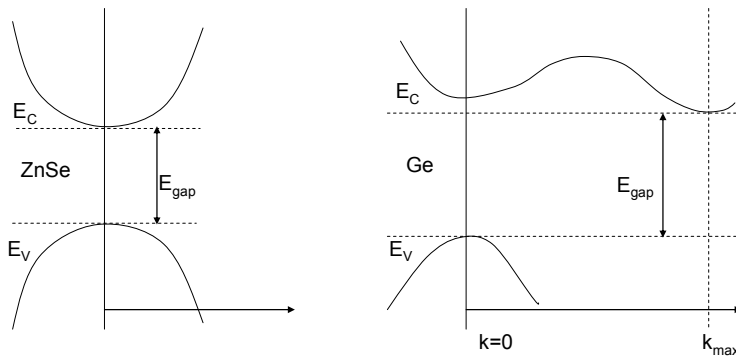
[Υπόδειξη για το (γ): Θεωρείστε το κάθε υλικό ως συνεχές διηλεκτρικό μέσο και χρησιμοποιείτε: τα δεδομένα του Πίνακα, την ενεργό μάζα του ερωτήματος (β), και το ημικλασικό μοντέλο του Bohr, σύμφωνα με το οποίο, για ένα μονοηλεκτρονιακό άτομο στο κενό, $E_n = -(m_e e^4) / (8\epsilon_0^2 h^2 n^2) = -(13.6 \text{ eV}) / n^2$, $r_n = (\epsilon_0 h^2) n^2 / (\pi m_e e^2) = (0.5 \text{ \AA}) n^2$]

Λύση

(α) ZnSe : $m_{\perp} = m_{\parallel}$ επειδή το ZnSe είναι άμεσου (A) ενεργειακού χάσματος, επομένως το E_{\min} βρίσκεται στο κέντρο της ζώνης Brillouin, όπου οι ισοενεργειακές επιφάνειες έχουν μορφή σφαίρας ($k \approx 0 \Rightarrow \lambda \rightarrow \infty$, επομένως το κυβικό κρυσταλλικό περιβάλλον αντιμετωπίζεται από τα ηλεκτρόνια, με $k \approx 0$, ως ισότροπο, εξού και η σφαιρική ισοτροπία των ισοενεργειακών επιφανειών).

Ge : $m_{\perp} \neq m_{\parallel}$ επειδή το Ge είναι έμμεσου (E) ενεργειακού χάσματος, επομένως το $E_{C.\max}$ βρίσκεται εκτός κέντρου της ζώνης Brillouin, οπότε οι ισοενεργειακές επιφάνειες έχουν μορφή ελλειψοειδούς.

Τα, κατ' εκτίμηση ενεργειακά διαγράμματα, για τα δύο υλικά είναι ως εξής:



(β) Τα ηλεκτρόνια της ζώνης αγωγιμότητας των δύο υλικών χαρακτηρίζονται από ενεργές μάζες που έχουν σχέση με την καμπυλότητα των σχέσεων διασποράς κοντά στο ελάχιστο της σχέσης διασποράς.

Η ενεργός μάζα «πυκνότητας καταστάσεων» δίνεται από την σχέση

$$m_{e,DoS} = [M^2(m_{\parallel}m_{\perp}^2)]^{1/3},$$

ενώ η «μέση» ενεργός μάζα δίνεται από τη σχέση $m_e^* = \frac{2m_{\perp} + m_{\parallel}}{3}$

Υλικό	E_g (A) / (E) [eV]	a [A°]	ϵ_r	(m_{lh}/m_{hh}) [m_0]	$(m_{\perp} / m_{\parallel})$ [m_0]	$m_{e,DoS}^*$ [m_0]	m_e^* [m_0]
Ge (M=4)	0,74 / (E)	5,66	16	0,04 / 0,30	0,08 / 1,60	0.547	0.587
ZnSe	2,82 (A)	6,67	7	0,50 / 0,75	0,15 / 0,15		

Η ενεργός μάζα (μέση, ή, Πυκνότητας καταστάσεων) για τον υπολογισμό της ακτίνας Bohr θα χρησιμοποιηθεί στο επόμενο ερώτημα. Όπως φαίνεται από τις 2 τελευταίες στήλες του παραπάνω Πίνακα, η διαφορά ανάμεσα στις $m_{e,DoS}^*$ και m_e^* είναι λιγότερη από 10%. Παρ' όλα αυτά, το ερώτημα «ποια ενεργός μάζα χρησιμοποιείται στους κβαντομηχανικούς υπολογισμούς» εξακολουθεί να υφίσταται. Αν θεωρήσουμε ότι οι τρεις βαθμοί ελευθερίας (κίνηση κατά μήκος των αξόνων x, y, και z) είναι ισοπίθανοι, τότε θα πρέπει, (σύμφωνα και με την εκφώνηση του προβλήματος), να χρησιμοποιηθεί η «μέση» ενεργός μάζα.

Η απόσταση πλησιεστέρων γειτόνων υπολογίζεται από τη σχέση $r_{min} = a\sqrt{3}/4$, οπότε:

$$r_{min}(Ge) = 2.54 A^{\circ}, \quad r_{min}(ZnSe) = 2.89 A^{\circ}$$

(γ) Οι ενεργειακές στάθμες δοτών (απόσταση στάθμης δοτών από το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας) δίδονται (στην προσέγγιση του υδρογονοειδούς ατόμου του μοντέλου του Bohr) από τη σχέση

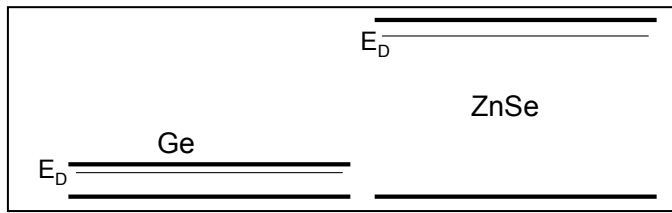
$$E_C - E_{D_n} = \frac{m_e^* e^4}{8\epsilon^2 h^2 n^2} = \left[\frac{m_0 e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \right] \frac{1}{\epsilon_r^2} \frac{m_e^*}{m_0} = \frac{13.6 eV}{\epsilon_r^2} \frac{m_e^*}{m_0}, \quad (\text{για } n=1),$$

ΟΠΟΤΕ:

$$Ge: E_C - E_{D_n} = 31.2 \text{ meV}$$

$$ZnSe: E_C - E_{D_n} = 41.6 \text{ meV}$$

Τα (κατ' εκτίμηση) ενεργειακά διαγράμματα για τα δύο συστήματα είναι



Η «ακτίνα» της θεμελιώδους (άρα, μη-ιονισμένης) κατάστασης του «διαθέσιμου» ηλεκτρονίου του δότη δίνεται (στην προσέγγιση του υδρογονοειδούς ατόμου του μοντέλου του Bohr) από τη σχέση

$$r_{D_n} = \frac{(\epsilon \hbar^2) n^2}{\pi m_e^* e^2} = \epsilon_r \frac{m_0}{m_e^*} \left[\frac{(\epsilon \hbar^2) n^2}{\pi m_0 e^2} \right] = \epsilon_r \frac{m_0}{m_e^*} \left[0.5 \text{ \AA} \right], \quad (\text{για } n=1), \text{ οπότε}$$

$$\text{Ge: } r_D = 13.6 \text{ \AA}$$

$$\text{ZnSe: } r_D = 46.7 \text{ \AA}$$

(δ) Από τα προηγούμενα ερωτήματα

$$\left(\frac{r_{Bohr}}{r_{min}} \right)_{ZnSe} = 16.7 > 5.6 = \left(\frac{r_{Bohr}}{r_{min}} \right)_{Ge}$$

Οπότε, το μοντέλο του Bohr, που υποθέτει ότι το μέσο που φιλοξενεί την πρόσμειξη είναι ένα συνεχές διηλεκτρικό μέσο, αναμένεται να είναι πιο αξιόπιστο για το ZnSe, εφόσον, στο ZnSe, η ακτίνα του Bohr (που είναι ένα μέτρο της έκτασης της κυματοσυναρτήσεως του ηλεκτρονίου του δότη) είναι πολύ μεγαλύτερη από την μέση απόσταση δύο διαδοχικών ατόμων του ZnSe, σε σχέση με τον αντίστοιχο λόγο του Ge, (για το οποίο, επομένως, το κρυσταλλικό υλικό διατηρεί περισσότερο τα χαρακτηριστικά διακριτού, μάλλον, παρά συνεχούς συστήματος).

(ε) Θα ασχοληθούμε με το ZnSe, για το οποίο, σύμφωνα με το προηγούμενο ερώτημα, είναι πιο αξιόπιστη η προσέγγιση του συνεχούς μέσου και, επομένως, και η θωράκιση της αλληλεπίδρασης Coulomb στο υδρογονοειδές άτομο του Bohr, με την σχετική διηλεκτρική σταθερά ϵ_r του υλικού.

Το ερώτημα είναι να υπολογιστεί η κρίσιμη συγκέντρωση δοτών (\approx τάξη μεγέθους) πάνω από την οποία η διακριτή στάθμη των προσμείξεων μετατρέπεται σε ζώνη, λόγω αλληλεπικάλυψης των κυματοσυναρτήσεων των ηλεκτρονίων γειτονικών δοτών. Η αλληλεπικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων των ηλεκτρονίων γειτονικών δοτών αρχίζει όταν έχουμε τόσους δότες ώστε να υπάρχει ένας τουλάχιστον σε κάθε σφαίρα ακτίνας ίσης με την ακτίνα του Bohr, οπότε

$$\rho_{critical} = \frac{1}{\frac{4}{3} \pi r_{Bohr}^3} = \frac{3}{4 \pi r_{Bohr}^3} \Rightarrow \rho_{critical} = 2.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

2. Κρύσταλλος πυριτίου ($E_g = 1.17 \text{ eV} = 1170 \text{ meV}$) νοθεύεται με προσμίξεις αρσενικού, ($E_C - E_D = 50 \text{ meV}$), σε συγκέντρωση 10^{17} (άτομα As)/cm³. Να υπολογιστεί η στάθμη Fermi σε θερμοκρασίες, α) δωματίου (300K), β) υγρού αζώτου (77K), γ) υγρού ηλίου (4K), με βάση τη συνθήκη ουδετερότητας, στη μη-προσεγγιστική της έκφραση. (Υπόδειξη: Σχεδιάστε, με τη βοήθεια υπολογιστή, συναρτήσεις της μεταβλητής E_F , την συνάρτηση συνολικού φορτίου $Q = p + N_D^+ - n - N_A^-$, και προσδιορίστε την τιμή της μεταβλητής για την οποία η συνάρτηση φορτίου Q μηδενίζεται). δ) Να υπολογιστούν τα ποσοστά ιονισμού των προσμείξεων, σε κάθε περίπτωση. ε) Να σχολιασθεί η συνέπεια των απαντήσεων στα ερωτήματα α-δ, αν αυτά προέκυπταν με βάση την σχέση που προϋποθέτει τον ολικό ιονισμό.

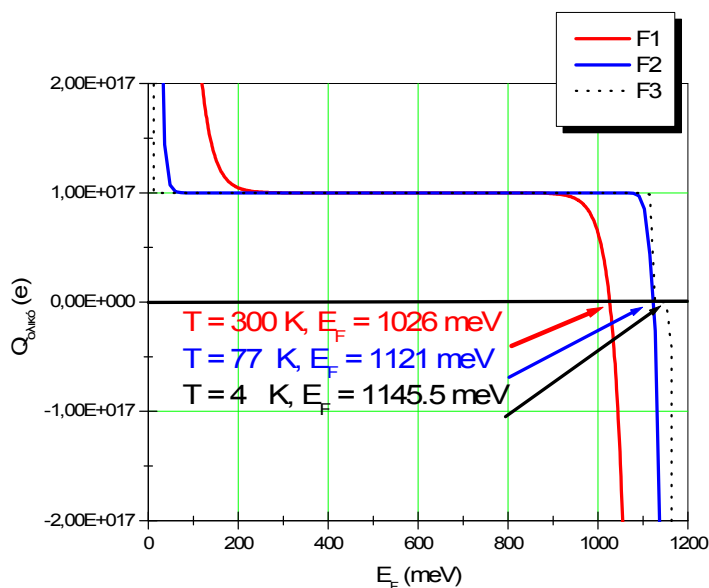
Λύση

(α-β-γ) Η απαίτηση ουδετερότητας του συστήματος «Ημιαγωγός-προσμείξεις-φορείς» ισοδυναμεί με την σχέση $Q(E_F) = |e|(p(E_F) + N_D^+(E_F) - n(E_F) - N_A^-(E_F)) = 0$, της οποίας ρίζα είναι η ζητούμενη στάθμη Fermi. Στην παράσταση αυτή τα p, N_D^+, n, N_A^- είναι μη-γραμμικές συναρτήσεις του E_F και του kT , Στη συγκεκριμένη περίπτωση, μάλιστα λείπει εντελώς ο όρος των αποδεκτών ($N_A = 0 \Rightarrow N_A^- = 0$)

Η ρίζα της παράστασης μπορεί να προσδιοριστεί γραφικά, όπως φαίνεται στο επόμενο σχήμα, όπου έχει χαραχθεί, ως συνάρτηση του $x \equiv E_F$, η παράσταση

$$Q = 1 \cdot 10^{17} / (1 + 2 \cdot \exp(-(1170 - 50 - x)/kT)) + 1 \cdot 10^{19} \cdot \exp(-x/kT) - 2.4 \cdot 10^{19} \cdot \exp(-(1170 - x)/kT).$$

Στον προηγούμενο τρόπο γραφής έχει ληφθεί ως επίπεδο μηδενικής ενέργειας το μέγιστο της στάθμης σθένους ($E_V \equiv 0$), ενώ ο όρος kT παίρνει τις τιμές 26 meV, (77/300)26=6.7 meV, και (4/300)26=0.35 meV, για τις θερμοκρασίες 300K, 77K, και 4K, αντίστοιχα.



Τα σημεία μηδενισμού του ολικού φορτίου (ρίζες της παράστασης) δίνουν τις τιμές των αντιστοίχων επιπέδων Fermi.

$$T = 300 \text{ K} \Rightarrow E_F = 1026 \text{ meV}$$

$$T = 77 \text{ K} \Rightarrow E_F = 1121 \text{ meV}$$

$$T = 4 \text{ K} \Rightarrow E_F = 1145.5 \text{ meV}$$

ενώ η οριακή τιμή είναι

$$E_F = 1145 \text{ meV}$$

$$\left(E_F [T \rightarrow 0] = \frac{E_C + E_D}{2} \right)$$

(Βλ. Άσκηση 6, Σειρά 3)

(δ) Στην προσέγγιση του ολικού ιονισμού και του εξωγενούς χαρακτήρα του συστήματος ($n \approx N_D^+ \approx N_D$), η στάθμη Fermi υπολογίζεται από τη σχέση

$$E_F = E_C - kT \ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right), \text{ σύμφωνα με την οποία παίρνουμε, αντίστοιχα}$$

$$T=300\text{K} \Rightarrow E_F \approx 1027.5 \text{ meV} \text{ (έναντι του ακριβούς: } 1026 \text{ meV) (διαφορά: } 0.1\%)$$

$$T=77\text{K} \Rightarrow E_F \approx 1133.3 \text{ meV} \text{ (έναντι του ακριβούς: } 1121 \text{ meV) (διαφορά: } 1.1\%)$$

$$T=4\text{K} \Rightarrow E_F \approx 1168 \text{ meV} \text{ (έναντι του ακριβούς: } 1145.5 \text{ meV) (διαφορά: } 1.9\%)$$

(ε) Παρ' ότι οι διαφορές, από τις ακριβείς τιμές της στάθμης Fermi, δεν φαίνεται να ξεπερνούν το 2%, εντούτοις, υπάρχει αυξανόμενη ασυνέπεια (στις χαμηλές θερμοκρασίες) ανάμεσα στην προσέγγιση του ολικού ιονισμού και στο αντίστοιχα υπολογιζόμενο ποσοστό ιονισμού

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{kT}\right)}, \text{ με βάση την}$$

προσεγγιστική τιμή της E_F , το οποίο παίρνει τις τιμές 94.6%, 6%, και $10^{-60}\%$ (!!!). Άρα η προσέγγιση του ολικού ιονισμού δίνει αυτοσυνεπή αποτελέσματα μόνο για την θερμοκρασία δωματίου και όχι για τις χαμηλότερες θερμοκρασίες

Τα αντίστοιχα ποσοστά ιονισμού, με βάση τις ακριβείς τιμές της στάθμης Fermi είναι: 94.9%, 30%, και $10^{-32}\%$ (!)

Παρατηρούμε ότι, παρά τις μικρές διαφορές τιμών «ακριβούς» και «προσεγγιστικής» επίλυσης για το επίπεδο Fermi, (και πέραν του κριτηρίου αυτοσυνέπειας), οι διαφορές ανάμεσα στο «ακριβές» και στο «προσεγγιστικό» ποσοστό ιονισμού είναι επίσης μεγάλες, στις χαμηλές θερμοκρασίες.

3. α) Υπολογίστε το επίπεδο Fermi, σε θερμοκρασία δωματίου, για τρία δείγματα πυριτίου (Si) εμπλουτισμένα με προσμίξεις φωσφόρου (P) με συγκεντρώσεις 10^{15} άτομα/cm³, 10^{17} άτομα/cm³, 10^{19} άτομα/cm³, αντίστοιχα, υποθέτοντας πλήρη ιονισμό των προσμείξεων. **β)** Χρησιμοποιείστε τις τιμές που υπολογίσατε στο προηγούμενο ερώτημα για το επίπεδο Fermi του καθενός δείγματος και ελέγξτε κατά πόσο η υπόθεση του ολικού ιονισμού ευσταθεί, κατά περίπτωση.

Λύση

Η στάθμη Fermi, για την περίπτωση ημιαγωγού τύπου-n, υπολογίζεται από την

$$E_F = E_C - kT \ln\left[\frac{N_C}{n_n}\right]$$

Υποθέτοντας πλήρη ιονισμό, έχουμε : $n_n \approx N_D^+ \approx N_D^0$

Σε θερμοκρασία $T=300 \text{ K} \Rightarrow kT \approx 25 \text{ meV}$, το Si έχει $n_i = 1.45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ και $N_C = 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, οπότε, στην ίδια θερμοκρασία, παίρνουμε, για τις τρεις διαφορετικές συγκεντρώσεις προσμείξεων τα εξής επίπεδα Fermi :

$$E_F(10^{15}) = E_C - 25 \text{ meV} \ln\left[\frac{2.8 \times 10^{19}}{10^{15}}\right] \Rightarrow E_F(10^{15}) - E_C \equiv \Delta E(10^{15}) = -256 \text{ meV}$$

$$\text{Παρόμοια υπολογίζουμε : } E_F(10^{17}) - E_C \equiv \Delta E(10^{17}) = -141 \text{ meV}$$

$$\text{και} \quad E_F(10^{19}) - E_C \equiv \Delta E(10^{19}) = -25.7 \text{ meV}$$

Το ποσοστό των ιονισμένων δοτών υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\frac{N_D^+}{N_D} = \frac{1}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{kT}\right)}, \quad \text{όπου: } \left. \begin{array}{l} E_C - E_D = 25 \text{ meV} \\ E_F - E_C = \Delta E \end{array} \right\} \Rightarrow -(E_D - E_F) = \Delta E + 25 \text{ meV}$$

$$\text{οπότε: } -(E_D - E_F) = \begin{cases} -231 \text{ meV} & \left(\frac{N_D^+}{N_D} \right)_{10^{15}} = 0.99 \\ -116 \text{ meV} & \left(\frac{N_D^+}{N_D} \right)_{10^{17}} = 0.98 \\ -0.7 \text{ meV} & \left(\frac{N_D^+}{N_D} \right)_{10^{19}} = 0.34 \end{cases}$$

Επομένως, η προσέγγιση του ολικού ιονισμού δίνει αποτελέσματα για τα ποσοστά ιονισμού τα οποία είναι συνεπή με την αρχική παραδοχή, για τις συγκεντρώσεις προσμείξεων 10^{15} και 10^{17} , (ποσοστά 99% και 98%, αντίστοιχα), ενώ για τη συγκέντρωση προσμείξεων 10^{19} , το αποτέλεσμα (34%) είναι σε προφανή ασυμφωνία με την παραδοχή του ολικού ιονισμού. Άρα, για τη συγκέντρωση προσμείξεων 10^{19} cm^{-3} , το επίπεδο Fermi θα πρέπει να υπολογιστεί μέσω της ακριβούς παραδοχής μηδενικού ολικού φορτίου (ουδετερότητας) του υλικού. (Βλ. Πρόβλημα 3.2)

4. α) Στο πλαίσιο του απλού μοντέλου ενός υδρογονοειδούς ατόμου του Bohr, για μία πρόσμειξη από την στήλη V του περιοδικού Πίνακα, (όπως το αρσενικό), σε ένα μονοστοιχειακό ημιαγωγίμο υλικό από την στήλη IV του περιοδικού συστήματος, (όπως το πυρίτιο), το ημιαγωγίμο υλικό αντιμετωπίζεται ως ένα συνεχές διηλεκτρικό μέσο. Να αναφέρετε αν η ενέργεια της ενδοχασματικής κατάστασης της πρόσμειξης εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά της πρόσμειξης, από τα χαρακτηριστικά του ημιαγωγίμου υλικού που την φιλοξενεί, ή και από τα δύο, και να γράψετε τη σχέση που υποστηρίζει τον ισχυρισμό σας. **β)** Στον παρακάτω πίνακα, θεωρήστε ότι κάθε κενό τετράγωνο αντιστοιχεί στο σύστημα «ημιαγωγός-πρόσμειξη», που ορίζουν οι συντεταγμένες του, και συνδέστε με ευθείες γραμμές (οριζόντιες, κατακόρυφες ή διαγώνιες, κατά περίπτωση) τα κενά τετράγωνα που χαρακτηρίζονται από την ίδια ενδοχασματική ενέργεια δοτών.

	Ημιαγωγός	
Πρόσμειξη	Ge	Si
As		
P		

γ) Αν υποθέσουμε ότι δύο ημιαγωγίμα υλικά, όπως τα Si και Ge, έχουν περίπου ίδιες τιμές πλεγματικής σταθεράς και περίπου ίδιες τιμές για την ενεργό μάζα των ηλεκτρονίων, αλλά διαφορετικές τιμές σχετικής διηλεκτρικής σταθεράς, ($\epsilon_r(\text{Si})=12$, $\epsilon_r(\text{Ge})=16$), να αναφέρετε για ποιο υλικό περιμένετε να ισχύει καλύτερα το παραπάνω μοντέλο (βλ. Ερώτημα (α))

δ) Ένας στοιχειακός ημιαγωγός, όπως οι παραπάνω, έχει πυκνότητα ενδογενών ηλεκτρονίων, σε θερμοκρασία δωματίου, $n_i=10^{11} \text{ cm}^{-3}$. Στον ημιαγωγό αυτόν προσθέτουμε ομοιόμορφα κατανεμημένες προσμείξεις, τύπου «δότες», με συγκέντρωση, $N_D=3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, και τύπου «αποδέκτες», με συγκέντρωση $N_A=8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Να υπολογισθούν, σε θερμοκρασία δωματίου, οι συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων (n) και οπών (p), καθώς και η διαφορά E_F-E_V , του επιπέδου Fermi από την κορυφή της ζώνης σθένους, αν το ενεργειακό χάσμα του υλικού είναι 0.8 eV, και οι ενεργές μάζες πυκνότητας καταστάσεων είναι $m_n^*=m_0$ και $m_p^*=0.5m_0$,

Λύση

(α) Η (ενδοχασματική) ενεργειακή στάθμη, στην προσέγγιση του υδρογονοειδούς ατόμου σε συνεχές διηλεκτρικό μέσο, υπολογίζεται από τη σχέση :

$$E_C - E_D = \frac{13.6 \text{ eV}}{\epsilon_r} \frac{m_e^*}{m_0}$$

Επομένως η τιμή της, εκτός από παγκόσμιες σταθερές (ενέργεια ιονισμού του υδρογόνου=13.6 eV, και m_0), εξαρτάται και από τις παραμέτρους ϵ_r και m_e^* .

Η σχετική διηλεκτρική σταθερά ϵ_r , εξαρτάται από το (ημιαγωγίμο) υλικό υποδοχής της πρόσμειξης. Η ενεργός μάζα m_e^* του ηλεκτρονίου, (παρ' ότι αφορά το ηλεκτρόνιο που «ανήκει» στο άτομο της πρόσμειξης), περιγράφει τις αδρανειακές ιδιότητες του ηλεκτρονίου στο κρυσταλλικό περιβάλλον στο οποίο «φιλοξενείται», (άλλωστε, υπολογίζεται αναλυτικά μέσω της δεύτερης παραγωγού των σχέσεων διασποράς του ημιαγωγού, ως προς την μεταβλητή της κρυσταλλικής ορμής), επομένως χαρακτηρίζεται, και αυτή, από το υλικό που φιλοξενεί την πρόσμειξη.

Άρα η ενέργεια της ενδοχασματικής κατάστασης των «δοτών» εξαρτάται, στο πλαίσιο της παραπάνω προσέγγισης, αποκλειστικά από τον ημιαγωγό που υποδέχεται την πρόσμειξη και όχι από τα χαρακτηριστικά της πρόσμειξης.

(β) Σε σχέση με τον Πίνακα του ερωτήματος (β) και με βάση τα επιχειρήματα που αναγράφονται στο προηγούμενο ερώτημα (α), έχουμε :

Πρόσμειξη	Ημιαγωγός	
	Ge	Si
As	■	■
P	■	■

(γ) Όταν δύο ημιαγωγικά υλικά έχουν περίπου ίδια πλεγματική σταθερά και ενεργό μάζα ηλεκτρονίου, το μοντέλο «του υδρογονοειδούς ατόμου σε συνεχές διηλεκτρικό μέσο» ισχύει καλύτερα για το υλικό με τη μεγαλύτερη διηλεκτρική σταθερά, αφού η ακτίνα του Bohr είναι ανάλογη της ϵ_r . Όσο μεγαλύτερη είναι η ακτίνα του Bohr τόσο καλύτερα προσεγγίζεται το υλικό φιλοξενίας της πρόσμειξης ως ένα συνεχές διηλεκτρικό μέσο.

(δ) Οι συγκεντρώσεις προσμείξεων τύπου Δότες και Αποδέκτες είναι τέτοιας τάξης μεγέθους που η υπόθεση του ολικού ιονισμού αποτελεί καλή προσέγγιση (βλ. και άσκηση 2.3(β)). Επομένως μπορούμε να υποθέσουμε ότι :

$$N_A^- \approx N_A = 8 \times 10^{16} > 3 \times 10^{16} = N_D \approx N_D^+$$

Συνθήκη ουδετερότητας: $N_D + p = N_A + n$

Νόμος δράσης των μαζών: $np = n_i^2 \Rightarrow n = \frac{n_i^2}{p}$

Επομένως: $N_D + p = N_A + \frac{n_i^2}{p} \Rightarrow p^2 + (N_D - N_A)p - n_i^2 = 0$, με ρίζες :

$$p = \frac{N_A - N_D}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{N_A - N_D}{2}\right)^2 + n_i^2}$$
, από τις οποίες είναι φυσικά αποδεκτή μόνο η θετική

(πρόσημο:+) αφού πρόκειται για πυκνότητα φορέων. Δηλαδή

$$p = \frac{N_A - N_D}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A - N_D}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

και, επειδή $\left(\frac{N_A - N_D}{2}\right) \gg n_i$, τελικά έχουμε

$$p = N_A - N_D \quad \text{και} \quad n = \frac{n_i^2}{(N_A - N_D)}$$

Η απόσταση της στάθμης Fermi από το μέγιστο της ζώνης σθένους προκύπτει από

$$\text{την } p = N_V e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}} \Rightarrow E_F - E_V = kT \ln\left(\frac{N_V}{p}\right)$$

Χρειαζόμαστε την N_V , από τα δεδομένα του προβλήματος :

$$n_i^2 = N_V N_C e^{-\frac{E_g}{kT}}, \quad \text{ενώ} \quad \frac{N_V}{N_C} = \left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)^{3/2}, \quad \text{επομένως: } N_V = n_i \left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)^{3/4} e^{\frac{E_g}{2kT}}$$

Αντικαθιστώντας: $N_V = 5.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ και $E_F - E_V = 59 \text{ meV}$

5. Θεωρήστε γνωστό ότι η συγκέντρωση ατόμων πυριτίου, σε έναν καθαρό κρύσταλλο πυριτίου είναι $5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, η πυκνότητα ενδογενών φορέων σε θερμοκρασία δωματίου $n_i = 1.45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, ενώ οι κινητικότητες ηλεκτρονίων και οπών είναι $\mu_e = 1350 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ και $\mu_h = 450 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, αντίστοιχα.

α) Δείξτε ότι, τόσο στην περίπτωση προσμίξεων τύπου n, (με συγκέντρωση N_D), όσο και (ανεξάρτητα) στην περίπτωση προσμίξεων τύπου p, (με συγκέντρωση N_A), μπορεί να προσδιορισθεί κατάλληλη συγκέντρωση προσμίξεων, ($N_{D, \text{κρίσιμη}} = ;$, ή $N_{A, \text{κρίσιμη}} = ;$, αντίστοιχα), για την οποία το υλικό παρουσιάζει ελάχιστη αγωγιμότητα. Ποια είναι η τιμή της ελάχιστης αγωγιμότητας στις δύο περιπτώσεις;

β) Να υπολογιστεί η αντίσταση ενός κύβου $1 \times 1 \times 1 \text{ cm}^3$ πυριτίου σε θερμοκρασία δωματίου όταν είναι: β_1) απολύτως καθαρός, β_2) όταν έχει προσμίξεις αρσενικού (As: της στήλης V του περιοδικού συστήματος) σε αναλογία ατόμων $1/10^9$, β_3) όταν έχει προσμίξεις βορίου (B: της στήλης III του περιοδικού συστήματος) στην ίδια αναλογία ατόμων $1/10^9$, ως προς το πυρίτιο.

γ) Η προσθήκη προσμίξεων αυξάνει πάντοτε την αγωγιμότητα ενός ημιαγωγού, ή όχι, και γιατί;

[Σε όλους τους υπολογισμούς να θεωρηθεί ότι οι προσμίξεις έχουν υποστεί ολικό ιονισμό]

Λύση

(α₁) Από την υπόθεση του ολικού ιονισμού $n \approx N_D$

και από τον νόμο δράσης των μαζών $p = \frac{n_i^2}{N_D}$

οπότε, η αγωγιμότητα $\sigma = |e|(n\mu_e + p\mu_h) = |e|\left(n\mu_e + \frac{n_i^2}{N_D}\mu_h\right)$.

Ακρότατο της σ ως προς N_D : $\left. \frac{d\sigma}{dN_D} \right|_{N_{D, \text{crit}}} = 0 \Rightarrow \mu_e - \frac{n_i^2}{N_{D, \text{crit}}^2} \mu_h = 0 \Rightarrow N_{D, \text{crit}} n_i \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}}$

Είδος ακρότατου: $\left. \frac{d^2\sigma}{dN_D^2} \right|_{N_{D, \text{crit}}} = |e|\left(2 \frac{n_i^2}{N_D^3} \mu_h\right) > 0$, άρα: ελάχιστο.

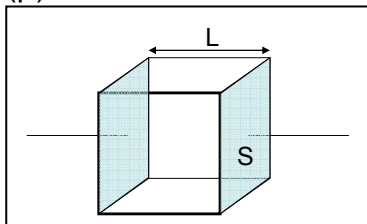
Η ελάχιστη τιμή της αγωγιμότητας:

$\sigma_{\min} = |e|(n\mu_e + p\mu_h) = |e|\left(N_{D, \text{crit}}\mu_e + \frac{n_i^2}{N_{D, \text{crit}}}\mu_h\right) \Rightarrow \sigma_{\min} = 2|e|n_i\sqrt{\mu_e\mu_h}$

(α₂) Με παρόμοιο τρόπο, βρίσκουμε :

$$N_{A, \text{crit}} = n_i \sqrt{\frac{\mu_e}{\mu_h}}, \text{ και } \sigma_{\min} = 2|e|n_i\sqrt{\mu_e\mu_h}$$

(β)



$$R = \rho \frac{L}{S} = \frac{1}{\sigma} \frac{L}{S} = \frac{1}{\sigma} \frac{1 \text{ cm}}{1 \text{ cm}^2} \Rightarrow R = \frac{1}{\sigma} \cdot \frac{1}{\text{cm}}$$

Η αγωγιμότητα σ θα υπολογιστεί, κατά περίπτωση, για το καθαρό και το νοθευμένο πυρίτιο

(β₁) Στο καθαρό πυρίτιο οι συγκεντρώσεις φορέων είναι ίσες, $n = p = n_i$, οπότε :

$$\sigma = |e|n_i(\mu_e + \mu_h) = 1.6 \times 10^{-19} C \times 1.45 \times 10^{10} cm^{-3} \times 1800 \frac{cm^2}{V \cdot s}$$

$$\Rightarrow \sigma = 4.18 \times 10^{-6} \frac{C^2}{J \cdot s \cdot cm} = 4.18 \times 10^{-6} \frac{1}{\Omega \cdot cm}, \text{ και } R = 0.239 M\Omega$$

(β₂) Στην περίπτωση των προσμείξεων αρσενικού έχουμε

$$\frac{As}{Si} = \frac{1}{10^9} \Rightarrow N_D = \frac{N_{Si}}{10^9} = \frac{5 \times 10^{22} cm^{-3}}{10^9} \Rightarrow N_D = 5 \times 10^{13} As/cm^3$$

$$\text{Άρα, } n \approx N_D^+ \approx N_D = 5 \times 10^{13} cm^{-3}, \text{ και } p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{(1.45 \times 10^{10} cm^{-3})^2}{5 \times 10^{13} cm^{-3}} \Rightarrow p = 4.2 \times 10^6 cm^{-3},$$

Επομένως, η αγωγιμότητα προσδιορίζεται κυρίως από τους φορείς πλειονότητας n ,

$$\text{οπότε, αντικαθιστώντας, } \sigma = 0.011 \frac{1}{\Omega \cdot cm} \Rightarrow R = 92 \Omega$$

$$(β_3) \text{ Με ανάλογο τρόπο } p \approx N_A = 5 \times 10^{13} cm^{-3}, \text{ και } n = \frac{n_i^2}{p} = 4.2 \times 10^6 cm^{-3},$$

$$\text{οπότε : } \sigma = 3.6 \times 10^{-3} \frac{1}{\Omega \cdot cm} \Rightarrow R = 0.28 k\Omega$$

(γ) Η προσθήκη προσμείξεων ενός είδους δεν αυξάνει πάντοτε την αγωγιμότητα ενός ημιαγωγού, αφού λόγω του νόμου δράσης των μαζών και της διαφορετικής ευκινησίας ηλεκτρονίων και οπών μπορεί να προσδιοριστεί ακρότατο, όπως αποδεικνύεται στο ερώτημα (α).

6. α) Υποθέστε ότι οι ενεργές μάζες πυκνότητας καταστάσεων ηλεκτρονίων και οπών του πυριτίου (Si) και του γερμανίου (Ge) είναι της ίδιας τάξης μεγέθους, τα ενεργειακά τους χάσματα είναι 1.17eV και 0.66eV, αντίστοιχα, και η ενδογενής συγκέντρωση φορέων του πυριτίου σε θερμοκρασία δωματίου είναι $n_i = 1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. Εξηγήστε γιατί προσμείξεις Sb, σε συγκέντρωση 10^{12} cm^{-3} , καθιστούν, σε θερμοκρασία 300K, ημιαγωγό τύπου n το πυρίτιο αλλά όχι το γερμάνιο. β) Υποθέστε ότι έχετε επαφή p-n πυριτίου με συγκεντρώσεις ολικά ιονισμένων προσμείξεων N_A και N_D , αντίστοιχα σε κάθε πλευρά. Εκφράστε την τάση επαφής συναρτήσει του ενεργειακού χάσματος E_g , των συγκεντρώσεων N_A και N_D , των ενεργών μαζών m_n^* και m_p^* , των παγκοσμίων σταθερών e (φορτίο ηλεκτρονίου), k (σταθερά του Boltzmann) και h (σταθερά του Planck), και της θερμοκρασίας T .

Λύση

(α) Σύμφωνα με τις παραδοχές του προβλήματος

$$m_{e,DoS}^*(Si) = m_{e,DoS}^*(Ge) \Rightarrow N_C(Si) = N_C(Ge), \quad \text{και}$$

$$m_{h,DoS}^*(Si) = m_{h,DoS}^*(Ge) \Rightarrow N_V(Si) = N_V(Ge),$$

$$\text{αλλά } n_i = \sqrt{N_V N_C} e^{-\frac{E_g}{2kT}}, \text{ οπότε } \frac{n_i(Ge)}{n_i(Si)} = e^{\frac{E_g(Si) - E_g(Ge)}{2kT}} \Rightarrow n_i(Ge) = n_i(Si) \times 2.7 \times 10^4$$

$$\text{Άρα, } \underset{\text{ενώ}}{n_i(Si) = 1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}}, \quad \text{και} \quad n_i(Ge) = 4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_D(Sb) = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$$

Δηλαδή, $n_i(Si) < N_D(Sb) < n_i(Ge)$ και, επομένως, στο Ge κυριαρχούν οι ενδογενείς φορείς (400 φορές περισσότεροι από τους Δότες), ενώ στο Si κυριαρχούν οι εξωγενείς φορείς (περίπου 70 φορές περισσότεροι από τους ενδογενείς φορείς).

(β) Δυναμικό επαφής

$$V_0 = \frac{kT}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2}, \quad \text{όπου } n_i = \sqrt{N_V N_C} e^{-\frac{E_g}{2kT}}, \quad \text{επομένως}$$

$$V_0 = \frac{kT}{q} \ln \left[\frac{N_A N_D}{N_C N_V} e^{\frac{E_g}{kT}} \right] = \frac{kT}{q} \left[\frac{E_g}{kT} + \ln \frac{N_A N_D}{N_C N_V} \right] = \frac{E_g}{q} + \frac{kT}{q} \ln \left[\frac{N_A N_D}{4(kT)^3 (m_n^* m_p^*)^{3/2}} 8\pi^2 \hbar^6 \right]$$

$$qV_0 = E_g + kT \ln \left[\frac{2\pi^2 \hbar^6 N_A N_D}{(kT)^3 (m_n^* m_p^*)^{3/2}} \right]$$

Επομένως, το δυναμικό επαφής προσδιορίζεται, πρωτίστως, από το ενεργειακό χάσμα του ημιαγωγίμου υλικού, και μεταβάλλεται με τη θερμοκρασία με έναν τρόπο που εξαρτάται και από το υλικό (ενεργές μάζες) και από τη συγκέντρωση των φορέων πλειονότητας, στις δύο πλευρές της επαφής.

7. Ο λεγόμενος νόμος δράσης των μαζών, $np = n_i^2 = N_V N_C \exp(-E_g/kT)$, ισχύει ανεξάρτητα από την προέλευση (ενδογενή ή εξωγενή) των ηλεκτρονίων και των οπών, με συγκεντρώσεις n και p , αντίστοιχα. α) Να υπολογίσετε τις ενδογενείς συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων και οπών στο ομογενές πυρίτιο, σε θερμοκρασία 600K, οπότε το ενεργειακό του χάσμα έχει μειωθεί στο 1eV. β) Να υπολογίσετε τις συγκεντρώσεις φορέων, για πυρίτιο με ομογενείς προσμείξεις δοτών και αποδεκτών, σχεδόν ολικά ιονισμένων, ($N_D \approx N_D^+$, και $N_A \approx N_A^-$, αντίστοιχα) όπου $N_D - N_A = \Delta n = (5 \times 10^{16} - 1 \times 10^{16}) \text{ cm}^{-3}$. γ) Να υπολογίσετε την τιμή της στάθμης Fermi, σε θερμοκρασία 600K, ως προς το μέγιστο της ζώνης αγωγιμότητας, για τις περιπτώσεις (α) και (β), αντίστοιχα.

Δίδονται, για το πυρίτιο σε θερμοκρασία δωματίου ($kT \approx 26 \text{ meV}$):

Ενεργειακό χάσμα = 1.1 eV, Ενεργές πυκνότητες κβαντικών ενεργειακών καταστάσεων: (Ζώνη Σθένους) = $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, (Ζώνη Αγωγιμότητας) = $2.4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,

Λύση

$$(α) \quad n_i(T) = \sqrt{N_C(T)N_V(T)} e^{-\frac{E_g}{2kT}},$$

$$\text{όπου } N_{C,V}(600) = N_{C,V}(300) \left(\frac{600}{300}\right)^{3/2} = 2.83 \times N_{C,V}(300),$$

$$\text{και } kT(600K) \approx 50 \text{ meV}$$

$$\text{Επομένως: αν } n_i(300K) = 4.9 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{τότε } n_i(600K) = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

$$(β) \quad \text{Νόμος δράσης των μαζών} \quad np = n_i^2$$

$$\text{Συνθήκη ουδετερότητας} \quad n + N_A^- = p + N_D^+$$

Η φυσικώς αποδεκτή ρίζα του τριωνύμου που προκύπτει από το συνδυασμό των δύο προηγούμενων σχέσεων είναι η

$$n = \frac{1}{2} \left[(N_D - N_A) + \sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2} \right] \approx (N_D - N_A) = 4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

$$(γ) \quad \text{Η σχέση } E_F = E_C - kT \ln \frac{N_C}{n_n} \text{ δίνει, για τις δύο περιπτώσεις}$$

$$(γ_1) \quad E_F = E_C - 50 \text{ meV} \ln \frac{2.4 \times 10^{19}}{2 \times 10^{15}} = E_C - 470 \text{ meV}$$

$$(γ_2) \quad E_F = E_C - 50 \text{ meV} \ln \frac{2.4 \times 10^{19}}{4 \times 10^{16}} = E_C - 320 \text{ meV}$$