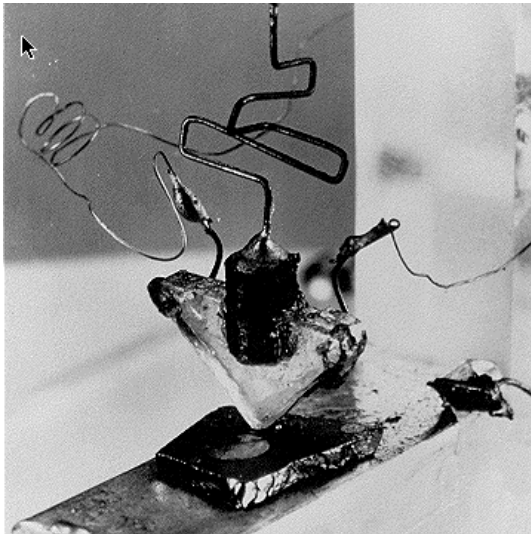


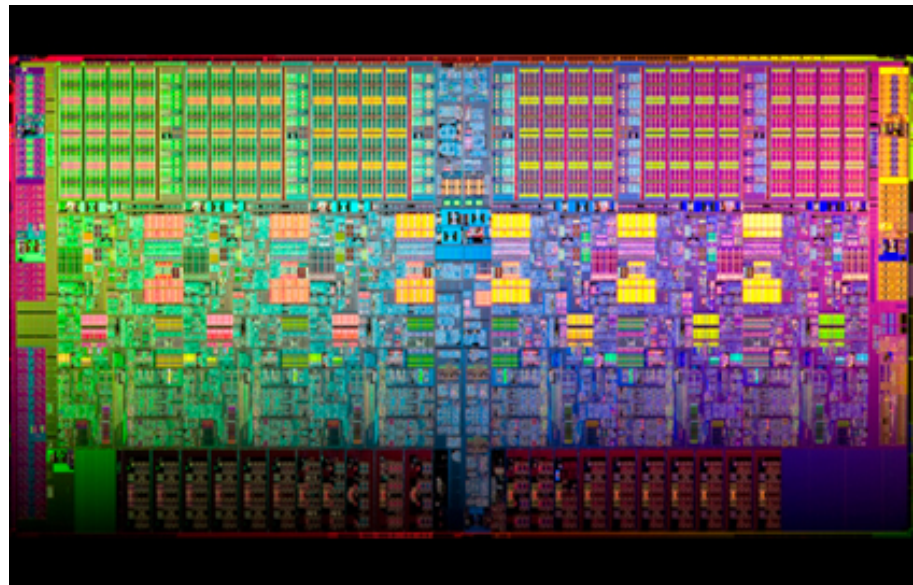
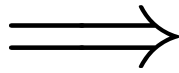
11. Halvledare

[HH 5, Kittel 8, AM 28]

All modern datorteknologi baserar sig helt på halvledande materials fysik. Detta är ett bemerkningsvärt faktum, om man tänker på att den allra första transistorn tillverkades 1947.



1947, 1 transistor

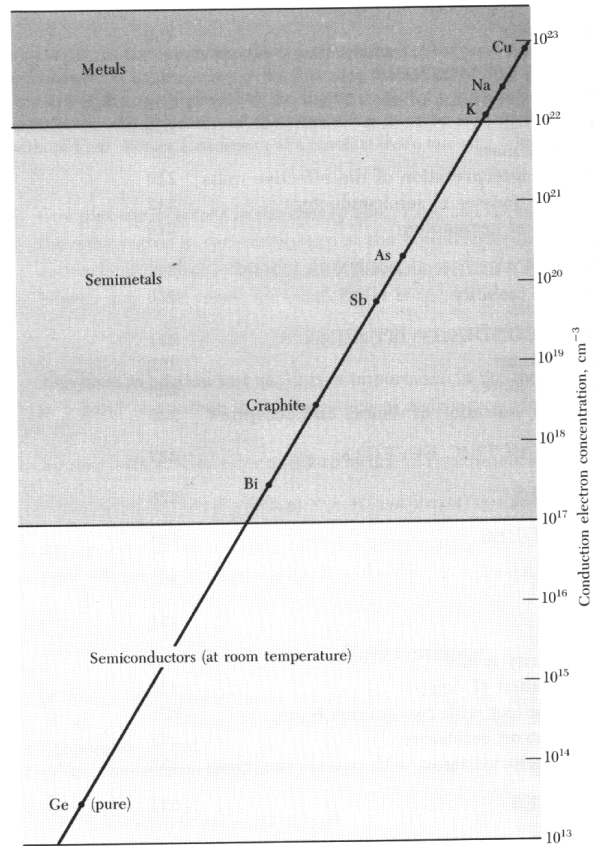


2012, Intel Westmere, 6.8 miljarder transistorer

I själva verket kan man med fog anse att detta är ekonomiskt sett materialfysikens största framgång genom tiderna.

11.1. Halvledande material

En halvledare är ett material som är ickeledande vid 0 K, men uppvisar en mätbar ledningsförmåga vid högre temperaturer. I.o.m. att vi vet att elledningsförmågan är proportionell mot antalet laddningsbärare (elektroner eller hål) kan man för någon viss temperatur definiera en gräns för antalet laddningsbärare som definierar om ett material är en halvledare eller semimetall. Här är ett exempel på en sådan definition [Kittel]:



Laddningsdensitets-gränsen har här satts vid 1×10^{17} laddningsbärare/cm³. I.o.m. att typiska fasta material har atomdensiteter $\sim 10^{23}$ atomer/cm³, innebär gränsen alltså att det finns bara ungefär en laddningsbärare per en miljon atomer vid den övre gränsen, och ännu mindre vid lägre temperaturer.

De vanligaste halvledande materialen kan lätt klassificeras på följande sätt.

Grundämnen som är halvledande är Si, Ge och α -Sn. De är alla i grupp IV i det periodiska systemet:

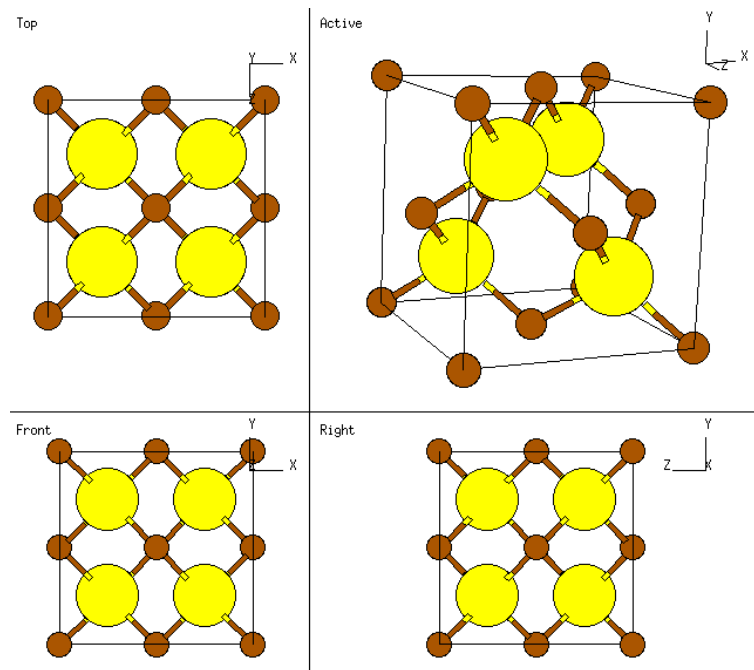
I												VIII					
H	II											III	IV	V	VI	VII	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	III	IV	V	VI	VII	VIII			I	II	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	110	111	112		114		116		118
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Nuförtiden räknas också C i diamantform ofta som en halvledare, trots att dess bandgap är så brett att rent diamant är i praktiken nästan ickeledande.

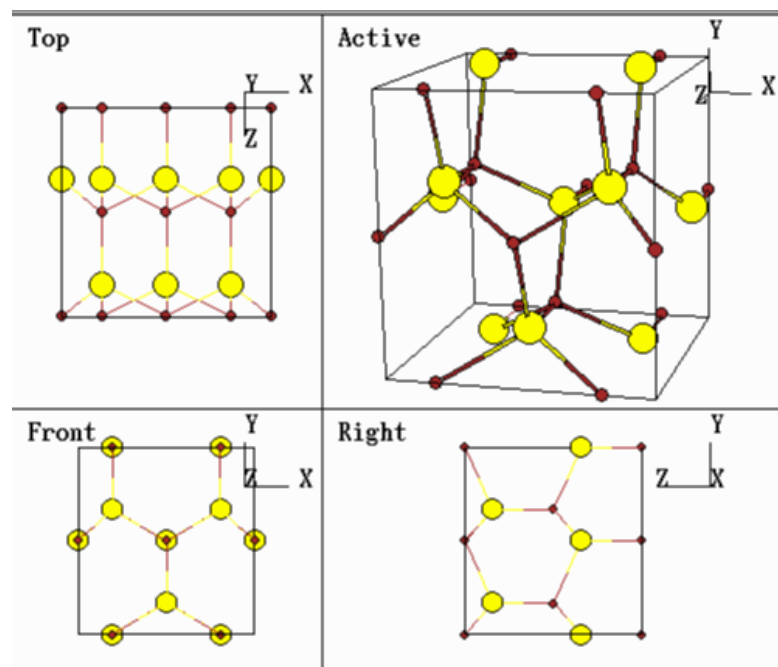
I de flesta övriga halvledare är atomernas omgivning på samma sätt tetraedriska som i diamant. Det finns två vanliga kristallstrukturer som uppfyller detta krav. Den ena är **zinkblende**, som ju är exakt diamantstrukturen med två olika atomtyper på alternerande platser. Den andra strukturen är **wurtzit**. Skillnaden mellan dessa två strukturer är lätt och förstå med en analogi till FCC- och HCP-strukturen. Diamantstrukturen kan ju anses vara en FCC-struktur med en bas på två atomer. Packningsordningen mellan de hexagonala basplanen i FCC är ju ABCABCABC, och i diamant/zinkblende därmed AaBbCcAaBbCc. Wurtzit kan på motsvarande sätt anses vara en HCP-struktur med en bas på två atomer. Packningsordningen i HCP är ju ABABABAB, och därmed i wurtzit AaBbAaBbAaBb.

Strukturerna illustreras här:

Zinkblende:



Wurtzit:



Alla dessa strukturer kräver alltså att en atom har fyra närmaste grannar. Bindningarna i strukturerna måste åtminstone till en stor del bestå av kovalenta bindningar. Alltså är det ganska klart att för att bilda en av strukturerna, bör man ha *i medeltal* fyra valenselektroner per atom. Detta krav kan fyllas antingen genom att bara ha grundämnen i grupp IV i strukturen, eller genom att t.ex. kombinera ett grundämne i grupp III med en i grupp V, eller en i grupp II med en i grupp VI. Kombinationen I-VII hör man inte mycket om.

På detta sätt kommer man fram till följande klassificering av halvledare: grundämneshalvledare, IV-IV-material, III-V-material och II-VI-material. Alla icke-grundämneshalvledare är också kända som **kompound-halvledare**.

Här är några exempel på halvledarmaterial av intresse idag (listan innehåller helt enkelt material som föreläsaren minns att han nångång hört talas om i verkliga sammanhang...) [MUTU]

Grupp	Struktur	Ämnen
IV	diamant	C, Si, Ge
IV-IV	zinkblende	β -SiC, $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$, $\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{C}_{1-x-y}$
IV-IV	wurtzit	SiC
III-V	zinkblende	GaAs, AlAs, InAs, BN
III-V	wurtzit	GaN, AlN
II-VI	zinkblende	ZnS, ZnSe

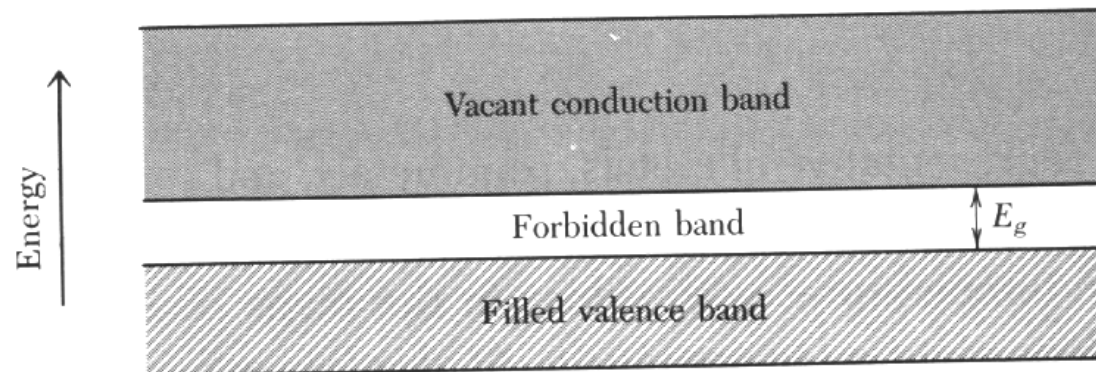
Men denna tabell innehöll alltså bara några exempel, nästan alla tänkbara kombinationer av III-V eller II-VI-material är faktiskt halvledare. Vidare bör man ännu notera att många av compound-halvledarna existerar i en stor massa blandningar: t.ex. systemet $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{0.5-x-y}\text{As}$ används i en massa olika variationer av värden på x och y .

Det existerar ytterligare halvledarmaterial som har ingenting att göra med de tetragonala strukturerna, men dessa hör man tämligen sällan nånting om.

11.2. Bandgap

Gemensamt för alla tetragonala halvledare är alltså att vid 0 K är det översta valensenergibandet helt fyllt, och det följande energibandet helt tomt. Om sedan temperaturen ökas, kommer en del elektroner att exciteras till det följande energibandet, där de kan leda elektricitet. Därför kallas det första ofyllda energibandet i halvledare i allmänhet för **ledningsbandet**. För att man inte i allmänhet behöver befatta sig med lägre eller högre energiband än dessa två, kallas det översta valensbandet bara för **valensbandet**, gapet mellan valens- och ledningsbandet **energigapet**, det **förbjudna bandet** eller bland experter helt enkelt bara **gapet** ("the gap").

Schematiskt ritas energi-områdena ofta helt enkelt i formen:



vilket alltså inte alls betraktar den detaljerade strukturen hos energibandet. Ofta kan man faktiskt ignorera strukturen. Men det finns ett viktigt kvalitativt drag i den detaljerade strukturen som är bra att känna till.

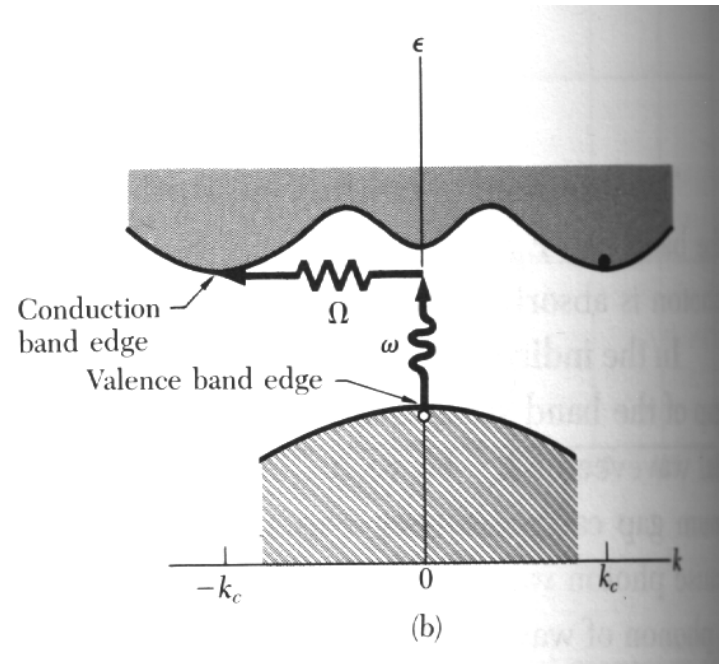
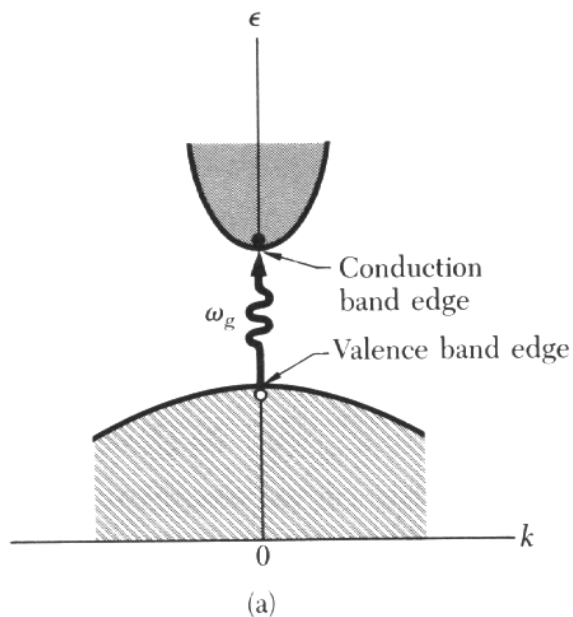
Med energigapet menas alltså det minsta energiavståndet mellan valens- och ledningsbandet. Om maximet i valensbandet och minimet i ledningsbandet ligger vid samma \mathbf{k} -värde, kan elektroner förflyttas direkt från ett band till ett annat, och man talar om ett **direkt bandgap**. Om så inte är fallet, måste en elektron som förflyttas till ledningsbandets minimum spridas t.ex. från en fonon som har ett vågtal \mathbf{q} som är lika med skillnaden \mathbf{k}_c i läget i \mathbf{k} -rymden mellan maximet i valensbandet och minimet i ledningsbandet:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{k}_c \quad (1)$$

Dessa material är kända som **indirekta bandgaps** material. Absorptionen eller emissionen av en fonon med vågtalet Ω i processen kommer att ändra på elektronens energi en smula,

$$\hbar\omega = E_G + \hbar\Omega \quad (2)$$

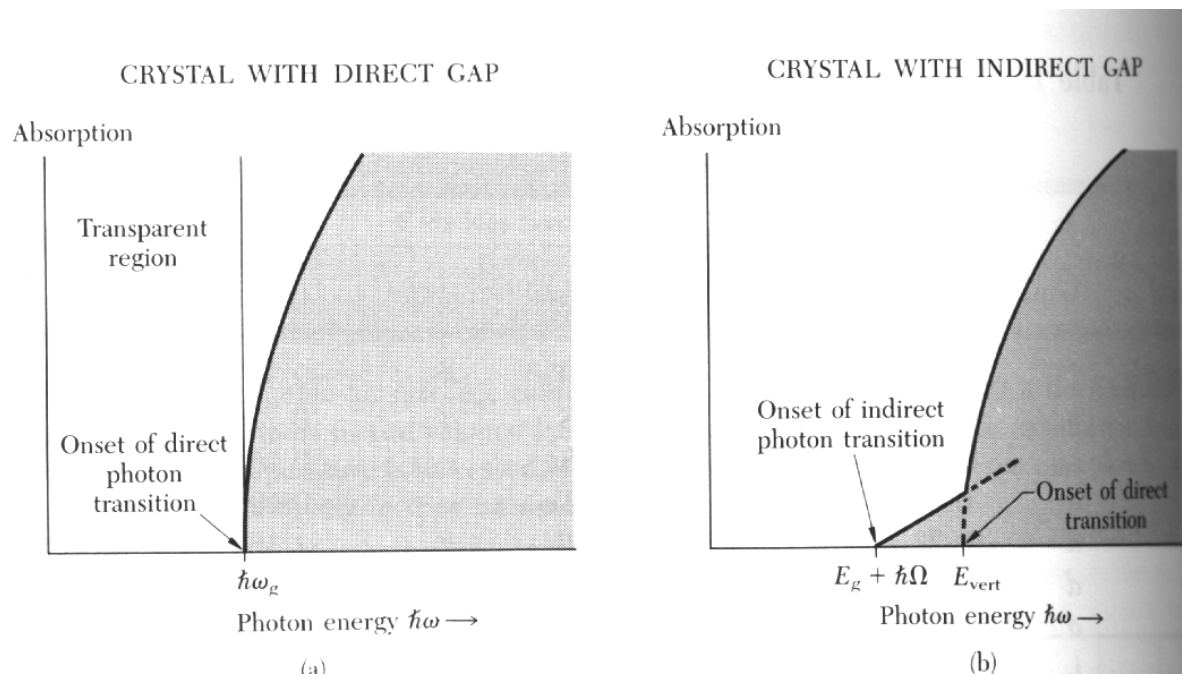
men då fononenergierna är oftast små ($\sim 0.01 - 0.03$ eV) är detta av föga praktisk betydelse.



Detta är alltså kravet för att transitionen kan ske vid den minimala energin. Vid höga temperaturer är det givetvis också möjligt att transitionen sker direkt vid $\mathbf{k} = 0$ till det högre energivärdet.

Man kan mäta bandgapets energi t.ex. genom att mäta fotoners absorptions i materialet. I.o.m. att inga energier existerar i gapet, kommer fotoner som har en energi inom gapets vidd omöjliga att kunna absorberas av en elektron i kristallen.

Absorptionsspektren kommer alltså kvalitativt att se ut på följande sätt för direkta och indirekta bandgaps material:



I.o.m. att en förflyttning som kräver växelverkan med en fonon är svårare att åstadkomma än en direkt förflyttning, kunde man tänka sig att direkta material är inte fördelaktiga som halvledare. Men p.g.a. fononerna låga energi är det lätt att skapa dem, så detta är inte ett allvarligt problem.

Alla vanliga grundämnes-halvledare (C, Si och Ge) är indirekta bandgaps material:

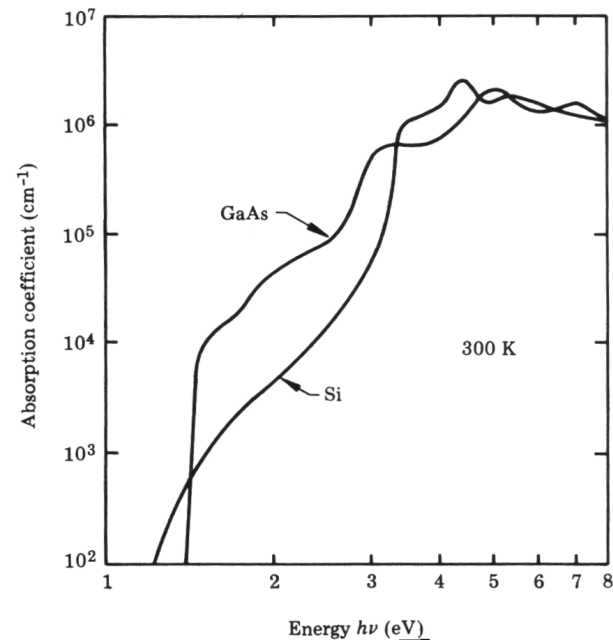
Table 1 Energy gap between the valence and conduction bands

(*i* = indirect gap; *d* = direct gap)

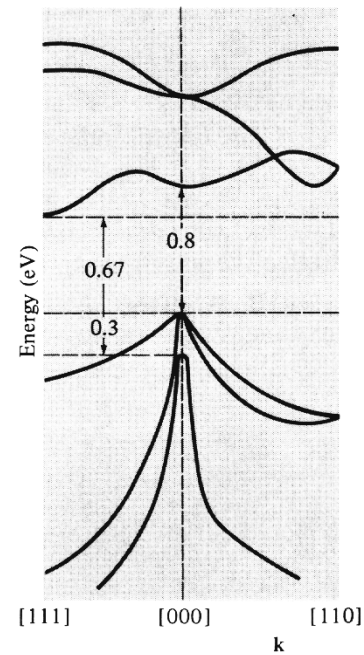
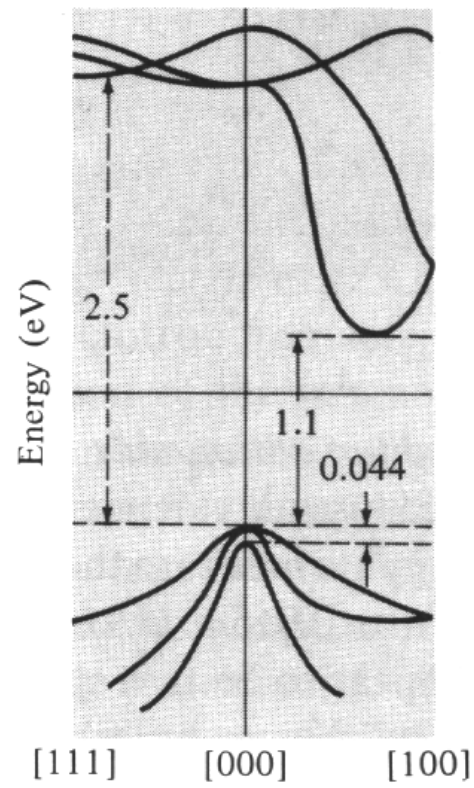
Crystal	Gap	E_g , eV		Crystal	Gap	E_g , eV	
		0 K	300 K			0 K	300 K
Diamond	<i>i</i>	5.4		HgTe ^a	<i>d</i>	-0.30	
Si	<i>i</i>	1.17	1.11	PbS	<i>d</i>	0.286	0.34–0.37
Ge	<i>i</i>	0.744	0.66	PbSe	<i>i</i>	0.165	0.27
α Sn	<i>d</i>	0.00	0.00	PbTe	<i>i</i>	0.190	0.29
InSb	<i>d</i>	0.23	0.17	CdS	<i>d</i>	2.582	2.42
InAs	<i>d</i>	0.43	0.36	CdSe	<i>d</i>	1.840	1.74
InP	<i>d</i>	1.42	1.27	CdTe	<i>d</i>	1.607	1.44
GaP	<i>i</i>	2.32	2.25	ZnO		3.436	3.2
GaAs	<i>d</i>	1.52	1.43	ZnS		3.91	3.6
GaSb	<i>d</i>	0.81	0.68	SnTe	<i>d</i>	0.3	0.18
AlSb	<i>i</i>	1.65	1.6	AgCl		—	3.2
SiC(hex)	<i>i</i>	3.0	—	AgI		—	2.8
Te	<i>d</i>	0.33	—	Cu ₂ O	<i>d</i>	2.172	—
ZnSb		0.56	0.56	TiO ₂		3.03	—

^aHgTe is a semimetal; the bands overlap.

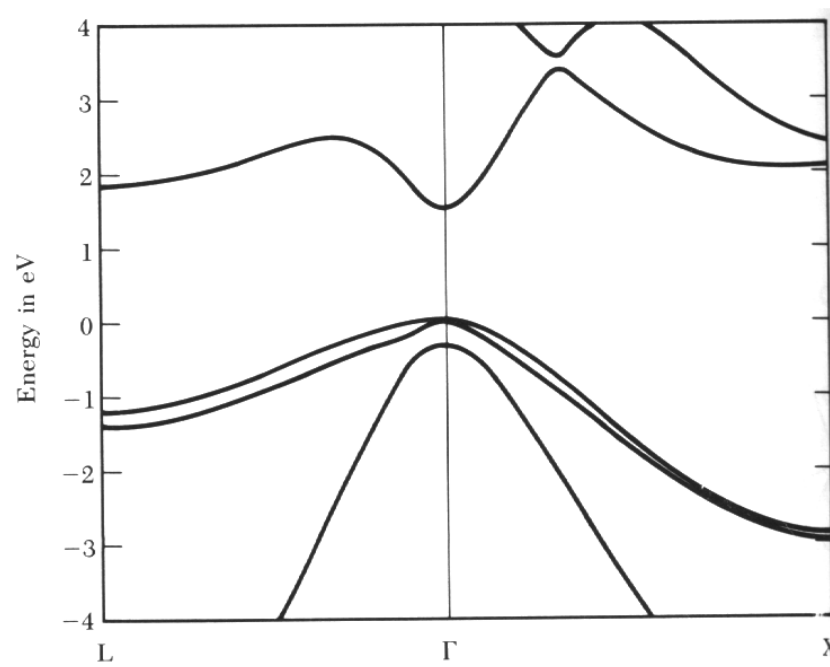
Direkta bandgaps material har ofta mycket bättre optisk absorption än indirekta gaps material. Detta gör dem till viktiga material i optiska tillämpningar som solarceller och lasrar.



Den detaljerade bandstrukturen ser ut på följande sätt i Si, Ge:



och i den direkta halvledaren GaAs:



Absorptionsspektret och bandgapsenergierna ovan förklarar för övrigt också en annan viktig aspekt hos material: deras genomskinlighet. Material utan bandgap (=metaller) kan absorbera ljus vid alla energier/våglängder, och är därmed inte genomskinliga. Halvledare med bandgap kring ~ 1 eV kan inte absorbera strålning med en energi mindre än 1 eV (en del av det infraröda ljuset), men nog synligt ljus. Insulatorer är ofta genomskinliga därför att de har ett bandgap som är större än det synliga ljusets energier!

Diamant är genomskinligt p.g.a. att dess bandgap på 5.4 eV (se tabellen) är större än synliga ljusets energiområde $\sim 1.8 - 3.1$ eV.

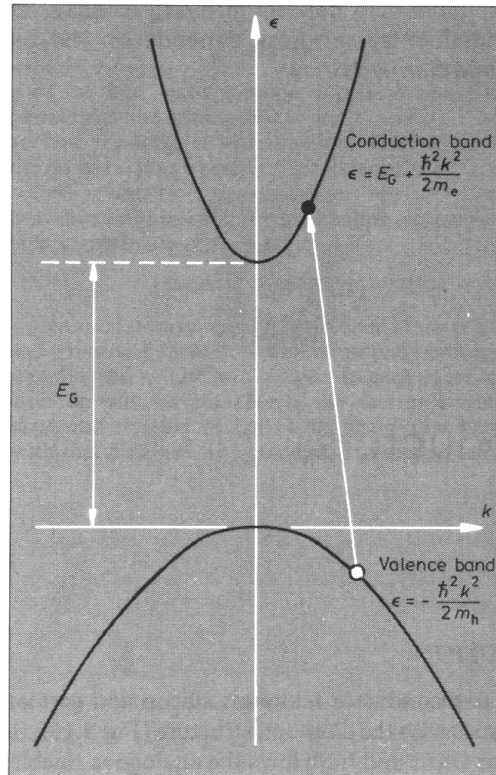
11.3. Ledningsegenskaper

Som en grov första approximation kan vi anta att fonon-absorptionsprocessen inte väsentligen förändrar på förflyttningen av en elektron från valens- till ledningsbandet. Detta kan motiveras med att fononernas energier ju är ganska små, ~ 0.01 eV. Vidare kan vi, om vi bara betraktar förflyttningar nära minimet och maximet i energibandet, approximera formen av dispersionsrelationen kring \mathbf{k} -värdet där elektronen flyttas till ledningsbandet som en parabel. Då kan energibandens dispersionsrelationer skrivas

$$\varepsilon = E_G + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \quad \text{för ledningsbandet} \quad (3)$$

$$\varepsilon = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h} \quad \text{för valensbandet} \quad (4)$$

Här är massorna m_e och m_h i ekvationerna *effektiva* massor för elektroner i ledningsbandet respektive hål i valensbandet. Energins nollpunkt har satts vid toppen av valensbandet, som är en mycket vanlig konvention i branschen.



Då kan man beskriva förflyttningen (excitationen) av en elektron med vågtalet k i valensbandet till tillståndet k_1 i ledningsbandet som en process som kräver energin

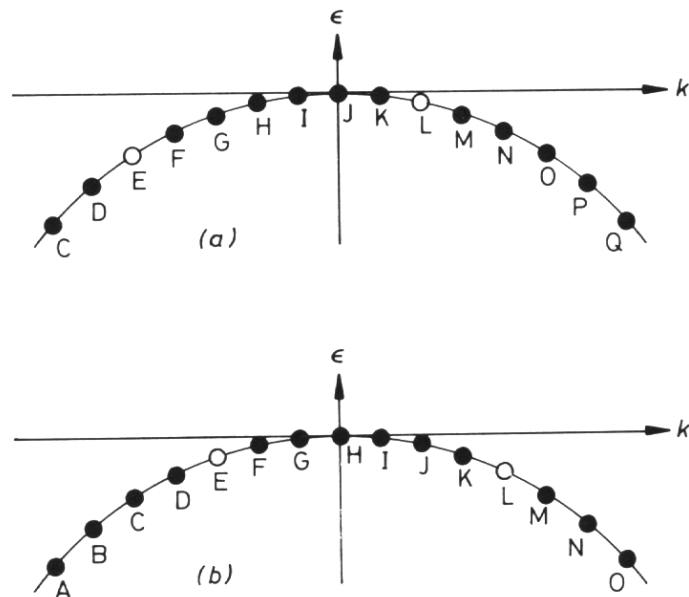
$$\Delta\varepsilon = E_G + \frac{\hbar^2\mathbf{k}_1^2}{2m_e} - \left(-\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_h}\right) = E_G + \frac{\hbar^2\mathbf{k}_1^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_h} \quad (5)$$

Den sista termen kan nu tolkas som energin som krävs för att skapa ett hål i valensbandet, som alltså är positiv och lika med

$$\varepsilon_h = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h} \quad (6)$$

Hålens dispersionsrelation är alltså helt enkelt det motsatta värdet på elektronernas i valensbandet.

För att härleda en rörelseekvation för hålena, kan vi betrakta följande bild över elektroner och hål (E och L) i valensbandet:



Ett elfält som tillämpas på elektronerna kommer i enlighet med rörelse-ekvationen som härleddes i kapitel 10 att leda till en rörelseekvation

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -eE \quad (7)$$

Detta gäller alltså för alla elektroner. Då kommer hålena E och L mellan elektronerna att förflyttas med elektronerna, så samma rörelseekvation gäller även för dem. Om vi använder oss av den

effektiva massan kan vi som i kapitel 10 skriva om detta som

$$-m_h \frac{d\mathbf{v}_h}{dt} = -e\mathbf{E} \quad (8)$$

Hålenas hastighet \mathbf{v}_h är samma som elektronernas grupphastighet,

$$\mathbf{v}_h = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{d\mathbf{k}} \quad (9)$$

Om vi ännu definierar hålenas kristallrörelsemängd med $\mathbf{p}_h = \hbar\mathbf{k}$ kan vi skriva rörelseekvationerna som

$$\frac{d\mathbf{p}_h}{dt} = e\mathbf{E} \quad (10)$$

$$m_h \frac{d\mathbf{v}_h}{dt} = e\mathbf{E} \quad (11)$$

Om vi nu ännu tänker oss att hålen kan spridas i kristallen med något medelintervall τ_h , och lägger till ett magnetfält \mathbf{H} , kommer i analogi med fri-elektronmodellen rörelse-ekvationen för hål att bli

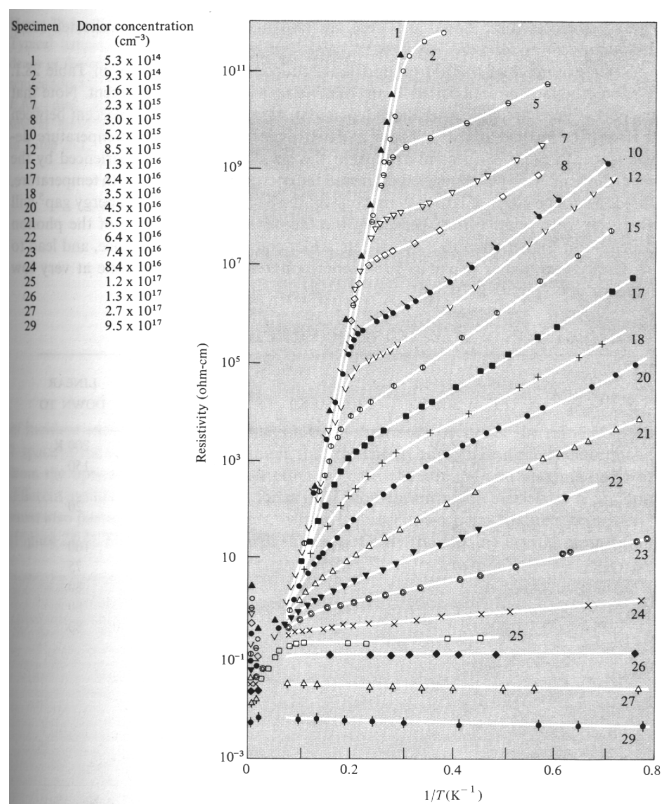
$$m_h \left(\frac{d\mathbf{v}_h}{dt} + \frac{\mathbf{v}_h}{\tau_h} \right) = e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{H}) \quad (12)$$

Vad betyder spridning av ett hål ? Man kan förstå det som spridning av de omgivande elektronerna; om en elektron sprids från tillståndet \mathbf{k}_1 till tillståndet \mathbf{k}_2 motsvarar detta spridning av ett hål från \mathbf{k}_2 till \mathbf{k}_1 . Därmed kommer tidskonstanterna τ för elektroner och hål i valensbandet att motsvara varann.

I valensbandet i halvledare kommer ström helt att flyta p.g.a. hål, i.o.m. att ett fullt valensband ju är ickeledande. I.o.m. att all ström som flyter i en halvledare kommer antingen från hål i valensbandet eller elektroner i ledningsbandet, kallas dessa kollektivt för **laddningsbärarna** ("charge carriers") i halvledaren.

11.3.1. Termisk excitation av laddningsbärare

Den elektriska konduktiviteten i halvledare är nästan alltid starkt beroende på temperaturen. Detta är i själva verket en av definitionerna på en halvledare; i.o.m. att metallers elektriska konduktivitet är bara en svag funktion av temperaturen, är halvledare lätta att skilja från dessa från konduktiviteten:



Orsaken kan förstås med Fermistatistik. Fermi-distributionen säger ju att sannolikheten att ett tillstånd med energin ε är exciterat är

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1} \quad (13)$$

där vi bör komma ihåg att den kemiska potentialen $\mu = \mu(T)$ är en temperaturberoende funktion. Energinivån

$$\varepsilon_F = \mu(T) \quad (14)$$

är känd som Fermi-nivån i halvledarfysiken.

Här bör noteras en möjlig källa till konfusion: medan man för metaller ofta brukar beteckna

$$\varepsilon_F = \mu(T = 0) \quad (15)$$

är hos halvledare oftast Fermi-energin och den kemiska potentialen identiska och alltså båda temperaturberoende (orsaken hänger förmodligen ihop med att de allra flesta halvledare tillämpningar fungerar i ett snävt temperaturintervall kring 300 K, så man kan ofta glömma temperaturberoendet i praktiskt arbete efter att man en gång bestämt sin Fermi-nivå vid 300 K).

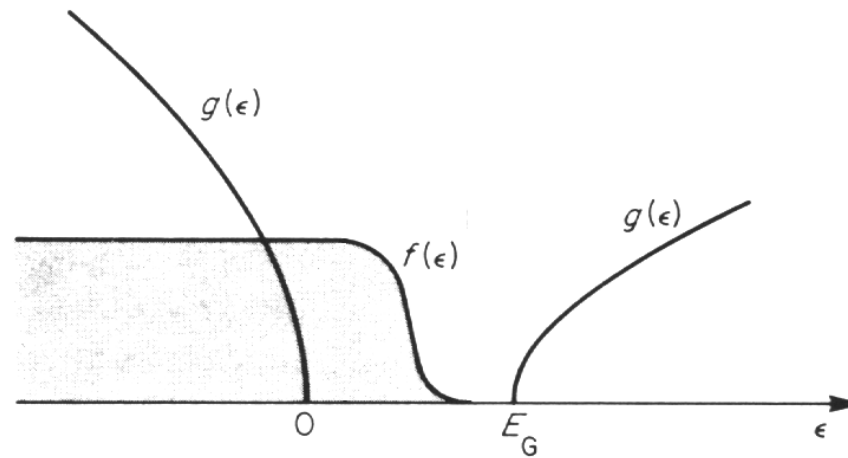
För att beräkna antalet laddningsbärare behöver vi dessutom tillståndstätheten. Denna kan beräknas på samma sätt som vi gjorde tidigare för fria elektroner, utom att vi bör nu använda dispersionsrelationerna för valens- och ledningsbandet, ekv. (4) och (3).

Resultatet blir

$$g_c(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}(2m_e)^{3/2}\sqrt{\varepsilon - E_G} \quad \text{för ledningsbandet} \quad (16)$$

$$g_v(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}(2m_h)^{3/2}\sqrt{-\varepsilon} \quad \text{för valensbandet} \quad (17)$$

där vi bör notera att energin i valensbandet ju nu är negativt, så g_v är nog en reell storhet. Tillståndstätheten visas i bilden nedan, som också illustrerar Fermi-funktionen $f(\varepsilon)$.



Utöver dessa **intrinsiska** elektrontillstånd, kan det finnas donorer och acceptorer som ger upphov till fler elektrontillstånd inom energibandet. Vi beskriver i kapitel () hur dessa kan uppstå.

De flesta halvledare hade ju energigap $E_G \sim 1$ eV. Därmed är $k_B T \approx 1/40$ eV vid 300 K mycket mindre än E_G . Dessutom är Fermi-nivån nästan alltid ungefär i mitten av energigapet, så vi kan

approximera Fermi-funktionen med en Boltzmann-distribution i **ledningsbandet**:

$$e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} \gg 1 \implies f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1} \approx e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T} \quad (18)$$

Nu kan vi beräkna elektrondensiteten n (för "negative") i ledningsbandet:

$$n = \frac{1}{V} \int_{E_G}^{\infty} f(\varepsilon) g_c(\varepsilon) d\varepsilon \quad (19)$$

$$\approx \frac{1}{V} \int_{E_G}^{\infty} e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T} \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_e)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - E_G} d\varepsilon \quad (20)$$

$$= \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_G}^{\infty} e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T} \sqrt{\varepsilon - E_G} d\varepsilon \quad (21)$$

$$= \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{(\mu-E_G)/k_B T} \int_0^{\infty} e^{-(\varepsilon-E_G)/k_B T} \sqrt{\varepsilon - E_G} d(\varepsilon - E_G) \quad (22)$$

$$= \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{(\mu-E_G)/k_B T} \int_0^{\infty} e^{-x/k_B T} \sqrt{x} dx \quad (23)$$

$$= \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{(\mu-E_G)/k_B T} \frac{(k_B T)^{3/2} \pi^{1/2}}{2} \quad (24)$$

$$= 2 \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mu-E_G)/k_B T} \quad (25)$$

där vi använt oss av integreringsregeln [Mathematica]

$$\int_0^{\infty} e^{-x/a} \sqrt{x} dx = \frac{a^{3/2} \pi^{1/2}}{2} \quad (26)$$

som gäller då $\text{Re}(a) > 0$.

Den pre-exponentiella faktorn brukar ofta betecknas med

$$N_C = 2 \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad (27)$$

(Observera att boken Hook&Hall ekv. 5.16, använder h istället för \hbar i resultatet, ekv. 8.39.)

Sannolikheten att ett tillstånd i valensbandet är ockuperat av ett *hål* är

$$1 - f(\varepsilon) = 1 - \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1} = \frac{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1} = \frac{1}{e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T} + 1} \quad (28)$$

Om vi nu gör motsvarande approximation som ovan för låga temperaturer,

$$e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T} \gg 1 \implies 1 - f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T} + 1} \approx e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} \quad (29)$$

och nu kan vi beräkna håldensiteten i valensbandet p (för “positive”) som ovan med

$$p = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^0 (1 - f(\varepsilon)) g_v(\varepsilon) d\varepsilon \quad (30)$$

$$\approx \frac{1}{V} \int_{-\infty}^0 e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_h)^{3/2} \sqrt{-\varepsilon} d\varepsilon \quad (31)$$

$$= \frac{(2m_h)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^0 e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} \sqrt{-\varepsilon} d\varepsilon \quad (32)$$

$$= \frac{(2m_h)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{-\mu/k_B T} \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon/k_B T} \sqrt{-\varepsilon} d\varepsilon \quad (33)$$

$$= \frac{(2m_h)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{-\mu/k_B T} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon_h/k_B T} \sqrt{\varepsilon_h} d\varepsilon_h \quad (34)$$

$$= \frac{(2m_h)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{-\mu/k_B T} \frac{(k_B T)^{3/2} \pi^{1/2}}{2} \quad (35)$$

$$= 2 \left(\frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\mu/k_B T} \quad (36)$$

och här brukar man beteckna

$$N_V = 2 \left(\frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad (37)$$

Vi ser alltså att i denna approximation ges antalet ledningselektroner av en Boltzmann-distribution (vilket ju är en ganska vitsig slump, för elektronerna följer ju egentligen Fermistatistik), och att elektronernas och hålenas energier är kvadratiska med k (ekv. (3),(4)), som i sin tur är proportionell mot grupphastigheten. Alltså kan vi i detta specifika fall behandla ledningselektronerna som klassiska partiklar i en gas, och de klassiska resultaten som ekvipartitionsteoremet gäller här. Alltså borde i princip Drude-teorins resultat gälla för laddningsbärarna i halvledare (så länge vi är i låga exciterade tillstånd nära minimet och maximet i bandena).

Genom att multiplicera ekvationerna (25) och (36) med varann, får vi

$$np = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-E_G/k_B T} \quad (38)$$

Detta säger att produkten av elektronernas och hålens koncentration är bara beroende av E_G och T , men inte över det exakta läget på Fermivån μ (annat än via dess svaga temperaturberoende) !

Detta innebär att storheten np kan väntas vara konstant i halvledare oberoende av var Fermivån ligger.

Denna lag är för övrigt analog med lagen om massverkan ("mass action") i kemi, som säger t.ex. att produkten av väte och hydroxyljoner i en vattenlösning är konstant.

11.3.2. Ledning i intrinsiska (rena) halvledare

I rena halvledarmaterial, som även kallas **intrinsiska**, kommer all elektrisk ledning att vara en rent termisk effekt. Det enda möjliga sättet att skapa elektroner eller hål är genom termisk excitation. Därmed gäller att deras antal bör vara konstant, och alltså

$$n_i = p_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_G/2k_B T} = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_G/2k_B T} \quad (39)$$

där underindexet i står för **intrinsisk** laddningskoncentration.

En intressant följd av att np bör vara konstant är att för vilken som helst halvledare gäller

$$np = n_i(T)^2 \quad (40)$$

där $n_i(T)$ lätt kan bestämmas med ekvation (39).

Om vi dividerar ekvationerna (25) och (36) med varann fås

$$\frac{p}{n} = 1 = \frac{2 \left(\frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\mu/k_B T}}{2 \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mu - E_G)/k_B T}} = \left(\frac{m_h}{m_e} \right)^{3/2} e^{(-2\mu + E_G)/k_B T} \quad (41)$$

varur fås

$$\frac{(-2\mu + E_G)}{k_B T} = \ln \left(\left(\frac{m_h}{m_e} \right)^{3/2} \right) \implies \mu = \frac{1}{2} E_G + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_h}{m_e} \right) \quad (42)$$

För att $k_B T \ll E_G$, och för att m_h och m_e oftast är åtminstone av samma storleksordning, är den senare termen mycket liten, och Fermi-nivån kommer att ligga ungefär i mitten av energibandet i intrinsiska halvledare.

T.ex. vid rumstemperatur är laddningskoncentrationen i kisel 2×10^{10} laddningar/cm³ och i germanium 2×10^{13} laddningar/cm³. Nu kan vi uppskatta hur rent materialet borde vara för att den skulle bete sig intrinsiskt. För att intrinsiskt beteende skulle observeras, borde antalet elektriskt aktiva orenheter i material vara högst av samma ordning som den intrinsiska laddningstätheten.

I.o.m. att atomdensiteten i båda är ungefär

$$\rho_a = 5 \times 10^{22} \text{ atomer/cm}^3 \quad (43)$$

betyder detta att deras renhetsgrad borde vara av ordningen 1 orenhet/ 10^{12} eller 1 orenhet/ 10^9 atomer för Si respektive Ge. Detta är orsaken till att halvledarforskningen kom igång sent, då det är extremt svårt att göra kristaller med renheter som ens närmas sig dessa värden. Men med en zon-raffineringssteknik kan man faktiskt numera åstadkomma nästan perfekt intrinsiskt Ge (s.k. HPGe, High Purity Germanium), som används bl.a. i strålningsdetektorer (och kostar skjortan).

Mobiliteten μ för laddningsbärare definierades som (jfr. kapitel 8):

$$\mu = \frac{|\mathbf{v}|}{|\mathbf{E}|} \quad (44)$$

Nu kan både elektroner och hål leda elektricitet, så vi bör skilja på deras mobilitet μ_e och μ_h (vilket också undviker konfusion med Fermivån $\mu(T)$). Då kan vi skriva konduktiviteten för en halvledare som

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h \quad (45)$$

där n och p är laddningarnas koncentrationer. Själva mobiliteterna kan i enlighet med fria elektroners

teori också skrivs

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e}; \quad \mu_h = \frac{e\tau_h}{m_h}; \quad (46)$$

Medeltiden mellan kollisioner τ beror bara svagt på temperaturen, så konduktivitetsens temperaturberoende kommer att domineras av det starka beroendet hos n och p .

I följande tabell listas några konduktiviteter. Dessa visar sig vara av stor betydelse därför att transistorers signalhastighet visar sig vara direkt proportionell mot μ_e eller μ_h .

Table 3 Carrier mobilities at room temperature, in cm²/V-s

Crystal	Electrons	Holes	Crystal	Electrons	Holes
Diamond	1800	1200	GaAs	8000	300
Si	1350	480	GaSb	5000	1000
Ge	3600	1800	PbS	550	600
InSb	800	450	PbSe	1020	930
InAs	30000	450	PbTe	2500	1000
InP	4500	100	AgCl	50	—
AlAs	280	—	KBr (100 K)	100	—
AlSb	900	400	SiC	100	10–20

11.3.3. Dopade halvledare

Intrinsiska halvledare är inte särdeles nyttiga i sig i.o.m. att de är svåra att tillverka, och har ganska litet frihetsgrader i hur de beter sig.

Men genom att introducera redan ett mycket litet antal orenheter i en halvledare kan man drastiskt ändra på dess ledningsegenskaper. Här behandlar vi enbart orenheter i Si och Ge för enkelhets skull. Orenheter i kompondhalvledare beter sig i huvuddrag likadant, men det uppstår komplikationer p.g.a. den kemiska strukturen.

T.ex. en atom B på 100000 atomer Si ändrar på kisels konduktivitet med en faktor 1000.

Man kan introducera dopningsatomer i kisel genom att addera dem i det smultna kiset i tillverkningskedet genom att tillåta dem att diffundera in vid höga temperaturer, eller genom att skjuta in dem "med våld" med en accelerator, s.k. **jonimplantering**. I alla dessa krävs det för att få önskade donor-egenskaper att atomerna sitter på substitutionella gitterplatser. Vid tillväxt hamnar de på substitutionella platser automatiskt, men vid jonimplantering måste man hetta upp kristallen efteråt för att få de dit. Ändå används jonimplantering numera mest därför att processen är mycket bättre kontrollerbar än diffusion eller tillväxt.

En orenhet på en substitutionell plats kommer sedan att ändra på kislrets elektriska egenskaper beroende på dess valens.

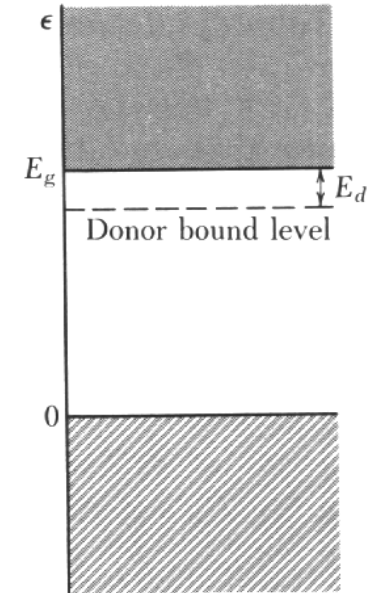
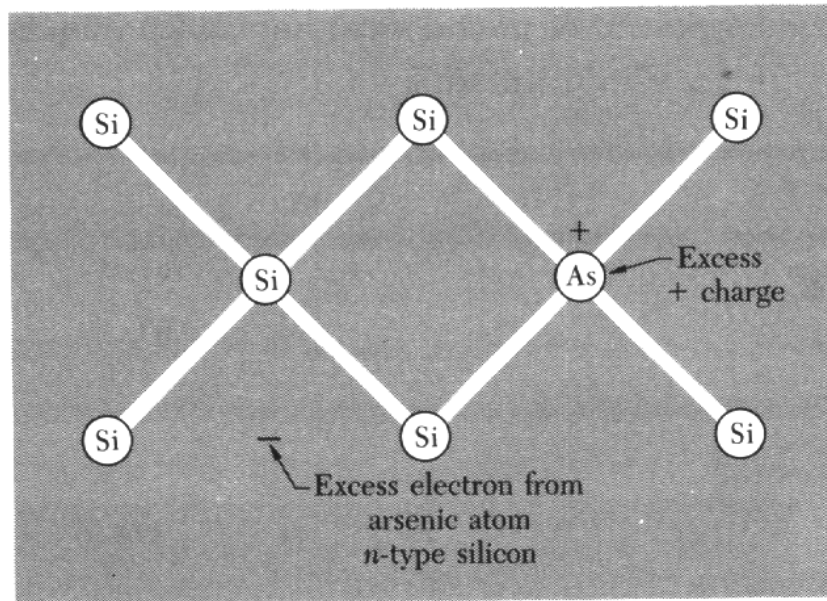
11.3.3.1. Donorer

Ifall atomen man adderat har fem yttre elektroner, behövs endast fyra för att bilda de fyra tetraedriska (sp^3)-bindningarna i kisel. En elektron "doneras" då till gittret, så man talar om en **donor-atom**. Den extra elektronen ryms inte i valensbandet, som ju är fylld i kisel, så den hamnar lätt till ledningsbandet. Då blir donor-atomen en positivt laddad jon, som kan introducera ett extra tillstånd till energinivåerna i materialet.

Om man betraktar nu systemet med den negativa elektronen och den positivt laddade orenhetsjonen, kommer de att ha en Coulombisk växelverkan av typen

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (47)$$

där ϵ är mediets dielektriska konstant.



För att uppskatta energin för den attraktiva växelverkan, noterar vi att växelverkan är ju den samma som i en väteatom. Då kan vi använda oss av Bohr-modellens resultat för jonisationsenergin för en elektron i väteatomen, med modifikationen att vi använder $\epsilon\epsilon_0$ i stället för ϵ_0 för den dielektriska konstanten, och den effektiva massan m_e istället för den verkliga m , och får

$$E_d = \frac{e^4 m_e}{2(4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar)^2} = - \left(\frac{m_e}{m\epsilon^2} \right) \times 13.6 \text{ eV} \quad (48)$$

där vi använt oss av resultatet att jonisationsenergin för väteatomen är 13.6 eV. På samma sätt ger Bohr-modellen också direkt en uppskattning för elektronens bindningsradie som

$$a_d = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \left(\frac{m\epsilon}{m_e}\right) \times 0.53 \text{ \AA} \quad (49)$$

För kisel är $\epsilon = 11.7$ och $m_e \approx 0.2m$, och därmed

$$E_d = 0.02 \text{ eV}; \quad a_d = 31 \text{ \AA}; \quad (50)$$

och för germanium är $\epsilon = 15.8$ och $m_e \approx 0.1m$, och därmed

$$E_d = 0.005 \text{ eV}; \quad a_d = 84 \text{ \AA}; \quad (51)$$

(HH använder andra värden, dessa är från Kittel som jag litar mera på). Alltså leder den stora dielektriska konstanten och låga effektiva massan till en svagt bunden vågfunktion mycket långt från atomen.

Vi kan genast dra tre viktiga slutsatser från dessa värden.

1) I.o.m. den stora radien för det bundna tillståndet, kan en tillräckligt hög donorkoncentration leda till att de extra elektrontillståndena börjar överlappa, och därmed bildas ett kontinuerligt donor-energi band i kristallen. Elektrisk ledning kan då ske genom rörelse bara i donorbandet, ifall det finns några tomrum där. (jfr. kapitel ()).

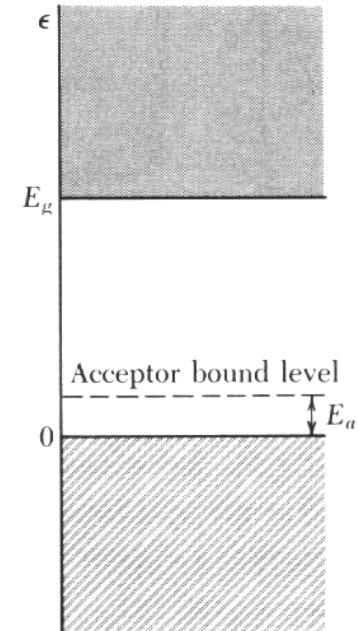
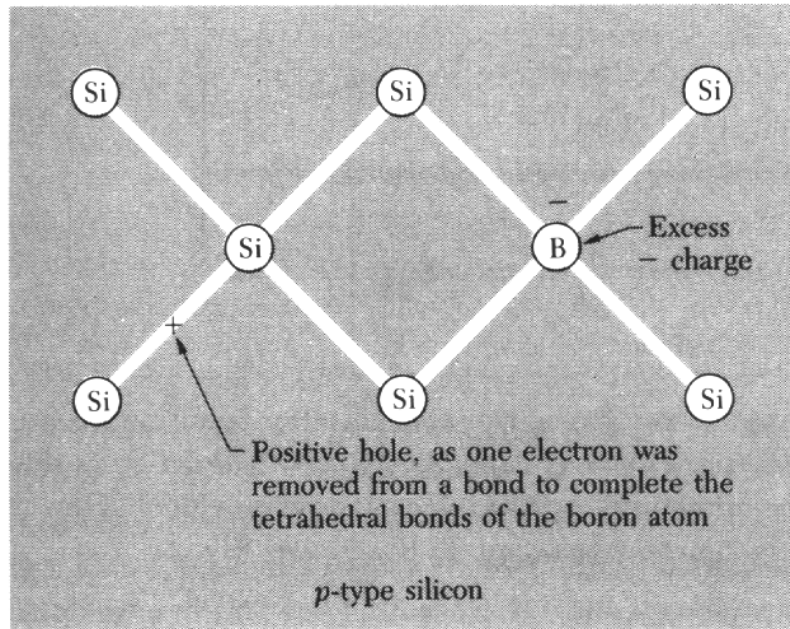
2) I.o.m. att $E_d \ll E_G \sim 1$ eV, kommer donorbandet att vara just under ledningsbandets övre gräns (jfr. bilden ovan).

3) I.o.m. att rumstemperatur är $1/40 = 0.025$ eV, kommer en stor del av donor-elektronerna att vara exciterade till ledningsbandet vid rumstemperatur.

De vanligaste donorererna som används i kisel är As och P, i den ordningen.

11.3.3.2. Acceptorer

På samma sätt som en pentavalent orenhet kan donera en elektron till ett kiselgitter, kan en trivalent atom acceptera en elektron, och kallas då en **acceptor-atom**. Detta kan också tänkas som att ha ett **hål** som är bundet vid den negativa kärnan. I princip kan man uppskatta dess energi på samma sätt med Bohrmodellen som för elektroner, och tänka sig att Bohr-atomerna donerar ett hål till valensbandet, vilket leder till en extra energinivå just ovanför valensbandets övre kant:



Den överlägset vanligaste acceptorn i kisel är B.

Här är ännu en tabell på några verkliga donor- och acceptor-energier:

TABLE 5.1 Band gaps, donor and acceptor energies, relative permittivities and intrinsic carrier concentrations for Si and Ge

	E_G (eV)	E_D (eV)		E_A (eV)		ϵ	Intrinsic carrier concentration (m^{-3}) at 300 K
	at $T = 0$ K	P	As	B	Al		
Si	1.08	0.045	0.049	0.045	0.057	11.7	2×10^{16}
Ge	0.66	0.012	0.013	0.010	0.010	15.8	2×10^{19}

(Data from the *American Institute of Physics Handbook*, 3rd edn, McGraw-Hill, New York (1972))

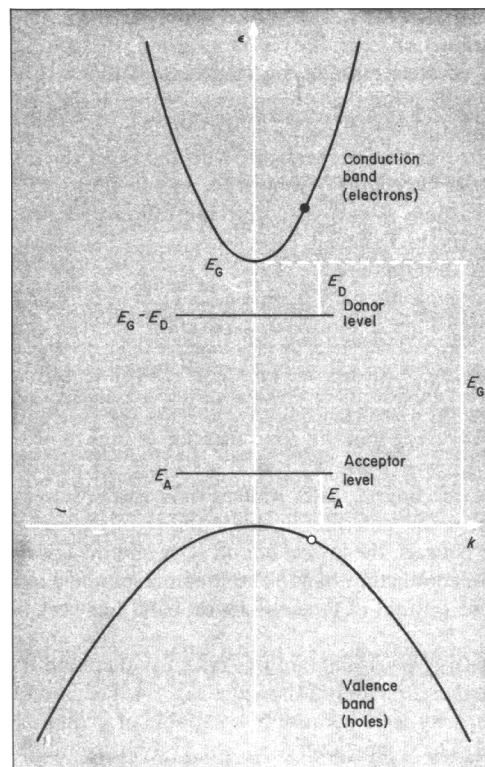
De är inte helt samma som i vår uppskattning bl.a. p.g.a. att i verkligheten är den effektiva massan en tensor som beror på gitterriktningen, vars behandling inte är helt trivialt.

I verkligheten har de flesta kiselbitar både donorer och acceptorer i olika koncentrationer. Lednings-egenskaperna kommer att bestämmas av vilka det finns fler av. En mätning av Hall-effekten kan användas för att uppskatta vilken typ av laddningar som dominerar ledningen; ett positivt förtecken för Hall-koefficienten innebär att elektroner dominerar, ett negativt att hål dominerar.

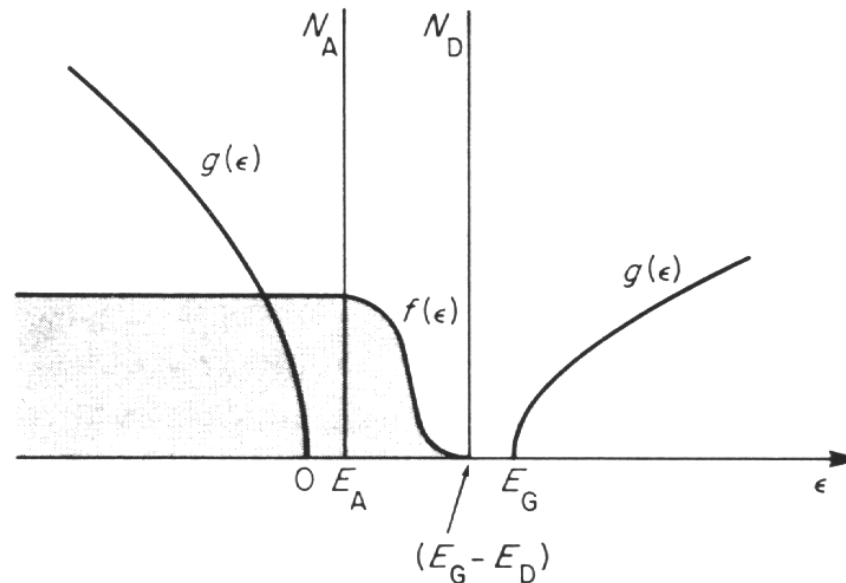
Donorer och acceptorer som har energinivåer nära gapets gränser kallas ofta kollektivt för “**shallow dopants**”. Det finns också orenheter och defekter som har nivåer nära mitten av energigapet. Dessa energinivåer brukar kallas “**deep levels**” för att de är djupt inne i energigapet.

11.3.4. Ledning i dopade halvledare

Om vi nu igen betraktar vår möjligast enkla bild av en bandstruktur, men denna gång med donor- och acceptor-nivåer med, kan vi beräkna hur donorer och acceptorer påverkar bilden av de elektriska egenskaperna.



Betrakta igen vårt system med ett energigap, men som denna gång har koncentrationer av N_A acceptorer och N_D donorer.



Nu kommer en del av elektronerna i donornivåerna att vara exciterade till ledningsbandet. Vi betecknar dessa exciterade, positiva donor-atomers koncentration med N_D^+ . På samma sätt kommer en del av acceptorerna att vara exciterade genom att ha bidragit ett hål till valensbandet. Vi betecknar de exciterade, negativa acceptorernas koncentration med N_A^- .

De exciterade elektronerna resp. hålen kommer då att bidra till ett ökat antal ledningselektroner n och hål p . För att laddningsneutralitet skulle bevaras bör det gälla att

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \quad (52)$$

Donorernas och acceptorernas koncentrationer kan beräknas ur Fermi-funktionen som

$$N_D^+ = N_D [1 - f(E_G - E_D)] \quad (53)$$

och

$$N_A^- = N_A f(E_A) \quad (54)$$

Orsaken till att tecknena är åt denna riktning är att för donorer är sannolikheten att en elektron finns vid energin $E_G - E_D$ $f(E_G - E_D)$, och därmed sannolikheten att den är exciterad 1- detta. För acceptorer är sannolikheten att en elektron exciteras från valensbandet till E_A just $f(E_A)$.

Men nu är det också viktigt att inse att Fermi-nivån kommer att ändra sin plats då vi har ett stort antal donorer och acceptorer i kristallen. Man kan i princip beräkna Fermi-nivån μ genom att kombinera ekvationerna (25), (36), (52), (53) och (54) och därmed n och p . I praktiken går detta inte att göra analytiskt i det allmänna fallet, så vi betraktar några instruktiva specialfall.

Betrakta först ett system där antalet donorer dominerar över antalet acceptorer. Vid 0 K kommer alla acceptor-nivåer att vara fyllda av elektroner från donorerna, i.o.m. att donorerens energier ligger mycket högre. Då har vi kvar $N_D - N_A$ donornivåer. I.o.m. att enbart Fermi-nivån kan vara delvis ockuperad vid 0 K, kommer nu helt enkelt $\mu = E_G - E_D$. Vid låga temperaturer $k_B T \ll E_D$ ändrar Fermi-nivån inte mycket, och elektronkoncentrationen i ledningsbandet blir (ekv. (25))

$$n = N_C e^{\overbrace{(E_G - E_D - E_G)}^{\mu}/k_B T} = N_C e^{-E_D/k_B T} \quad (55)$$

För att $E_D \ll E_G$ kommer nu elektronkoncentrationen n att vara mycket större än den intrinsiska koncentrationen n_i (39). Men för att $np = n_i p_i$ är konstant i olika system (ekv. (38)) med samma gap, leder detta alltså nu till att

$$np = n_i p_i \text{ och } n \gg n_i \implies p = \frac{n_i p_i}{n} \ll p_i \text{ och då } n_i = p_i \text{ också } p \ll n \quad (56)$$

Ett sådant material, med mycket mer donorer än acceptorer, är känt som ett **n-typs** material för att $n \gg p$. I ett material med mycket acceptorer gäller $p \gg n$ och detta är känt som **p-typs** material.

I n-typs material kallas elektroner för **majoritets-laddningsbärare** och acceptorer för **minoritets-laddningsbärare**, och vice versa för p-typs material

För p-typs material kan man med samma argument som ovan lätt visa att $\mu \approx E_A$ vid låga temperaturer, och därmed

$$p \approx N_v e^{-E_A/k_B T} \quad (57)$$

Om vi igen betraktar n-typs material, och tänker oss att vi höjer temperaturen, kommer vi till en situation då de allra flesta donornivåerna är joniserade. Fortfarande kommer acceptorerna att ha en del av donorelektronerna. Därmed kommer elektronkoncentrationen i ledningsbandet att vara

$$n = N_D - N_A \quad (58)$$

Fermi-nivån kan beräknas med att slå ihop ekv. (25) med detta, och ger då

$$\mu = E_G - k_B T \ln \left(\frac{N_C}{N_D - N_A} \right) \quad (59)$$

vilket kommer alltså att sjunka med temperaturen. Densiteten av hål kan nu beräknas med ekv.

(38) till

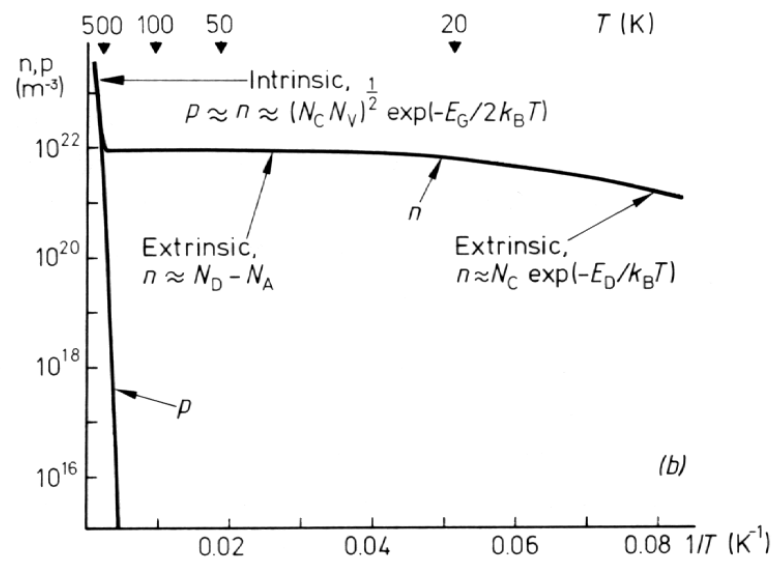
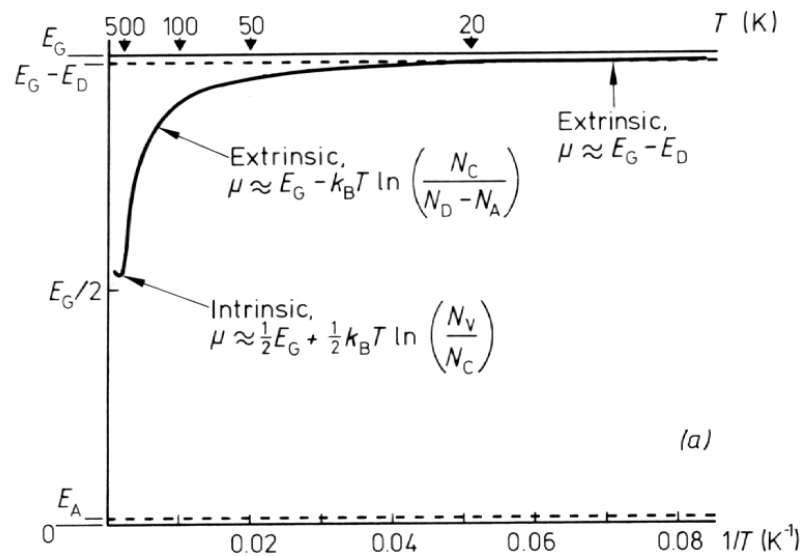
$$p = \frac{4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-E_G/k_B T}}{n} = \frac{4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-E_G/k_B T}}{N_D - N_A} \quad (60)$$

som alltså ökar starkt med temperaturen.

I praktiken fungerar de flesta halvledare som används just i detta temperaturområde; man väljer på flit donorer som ger en nivå i detta område, för då kommer majoritetsladdningsdensiteten att vara ungefär temperaturoberoende, vilket är önskvärt i praktiska komponenter.

Till slut, då man ökar temperaturen tillräckligt kommer elektroner i valensbandet att börja exciteras till donor-bandet och ledningsbandet, och man når ett tillstånd då man har ungefär lika mycket elektroner och hål, och Fermi-nivån ligger nära gapets mitt. Då beter sig halvledaren ungefär som en odopad halvledare, och detta område kallas därför **intrinsiskt**. Området vid lägre temperaturer då donorkoncentrationen är av betydelse kallas **extrinsiskt**.

Temperaturbeteendet illustreras i bilden nedan. Notera att temperaturen anges som $1/T$!



För p-typs halvledare kan man på motsvarande sätt härleda i det intermediära, extrinsiska temperaturområdet

$$p = N_A - N_D \quad (61)$$

$$\mu = k_B T \ln \left(\frac{N_V}{N_A - N_D} \right) \quad (62)$$

Om man ännu betraktar fallet av ett n-typs material där vi inte har alls minoritetsledare, kommer donornivån att vara nästan helt fylld vid låga temperaturer, och Fermi-nivån ligga mellan donornivån och ledningsbandet. Då kan man härleda antalet joniserade donorer som för en intrinsisk halvledare, med undantaget av att donornivån tar valensbandets plats. Vi får då

$$N_D^+ = N_D e^{(E_G - E_D - \mu)/k_B T} \quad (63)$$

I.o.m. att vi nu inte har några hål alls, kräver laddningsneutralitet att $n = N_D^+$ och vi får med ekv. (25) och ekvationen ovan

$$n = \sqrt{N_C N_D} e^{-E_D/2k_B T} \quad (64)$$

Jämförelse av ekvationerna (55) och (64) visar att exponenten skiljer på en faktor på två. Så

vid låga temperaturer kan ett materials beteende bero drastiskt också på koncentrationen av minoritetsladdningsbärare.

11.4. Transportegenskaper

[HH 5.5]

Laddningsbärarnas rörelse kan som ovan konstaterades som en god approximation beskrivas som rörelse hos klassiska partiklar, och skrivs för elektroner och hål som

$$m_e \left(\frac{d\mathbf{v}_e}{dt} + \frac{\mathbf{v}_e}{\tau_e} \right) = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v}_e \times \mathbf{H} \quad (65)$$

$$m_h \left(\frac{d\mathbf{v}_h}{dt} + \frac{\mathbf{v}_h}{\tau_h} \right) = +e\mathbf{E} + e\mathbf{v}_h \times \mathbf{H} \quad (66)$$

11.4.1. Elledning

Ifall bara ett tidsberoende elfält \mathbf{E} existerar, får vi som lösning till ekvationerna

$$\mathbf{v}_e = -\frac{e\tau_e}{m_e}\mathbf{E} = -\mu_e\mathbf{E} \quad (67)$$

$$\mathbf{v}_h = +\frac{e\tau_h}{m_h}\mathbf{E} = +\mu_h\mathbf{E} \quad (68)$$

där vi har beräknat mobiliteterna

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e} \quad \text{sam} \quad \mu_h = \frac{e\tau_h}{m_h} \quad (69)$$

Strömtätheten kan beräknas som en summa över elektronernas och hålens egenskaper som

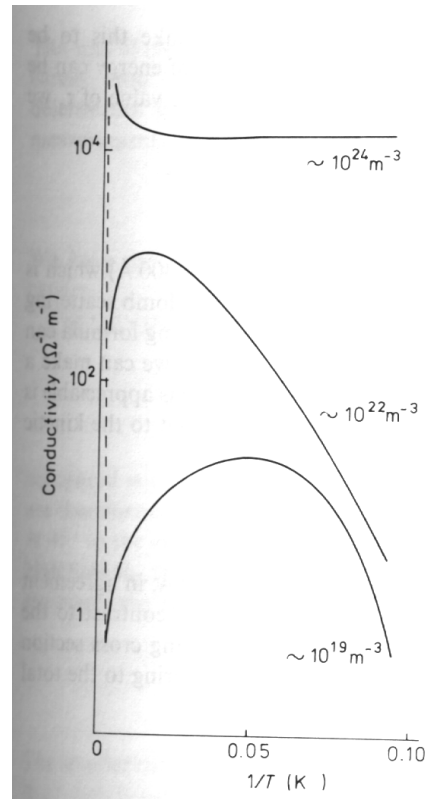
$$\mathbf{j} = -nev_e + pev_h = \left(\frac{ne^2\tau_e}{m_e} + \frac{pe^2\tau_h}{m_h} \right) \mathbf{E} = (ne\mu_e + pe\mu_h)\mathbf{E} = \sigma\mathbf{E} \quad (70)$$

där vi samtidigt fått konduktiviteten

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h \quad (71)$$

Dessa ekvationer är helt samma som ekvationerna (44) - (46) för intrinsiska halvledare ovan, då de inte har något explicit beroende på dopningskoncentrationen i sig. Men p.g.a. att vi just såg att dopningsgraden mycket starkt påverkar n och p , kommer också konduktiviteten att starkt bero på dopningsgraden.

I bilden här visas uppmätt konduktivitet för olika grader av As-dopning i n-typs Ge. Notera att bilden igen är av Arrhenius-typ, $\log()$ vs. $1/T$.



I det renaste provet ser man en dramatisk uppgång i konduktivitet vid de högsta temperaturerna (den streckade linjen), vilket beror på övergången till intrinsiskt beteende.

Vid låga temperaturer faller konduktiviteten i de renare provena p.g.a. elektroner “frysas in” på donornivåerna. Vid höga temperaturer faller den p.g.a. det ökade antalet fononer som elektronerna kan spridas från.

Det mest orena provet beter sig vid medelhöga temperaturer som en metall i att konduktiviteten är ungefär oberoende av temperaturen. Orsaken är att vid denna koncentration börjar de "bundna nivåerna" i donorererna överlappa, och vi får ett ledande donorband.

11.4.2. Hall-effekten

Vi har redan flera gånger under kursen behandlat Hall-effekten, men för repetitions skull är här än en gång en illustration av den:

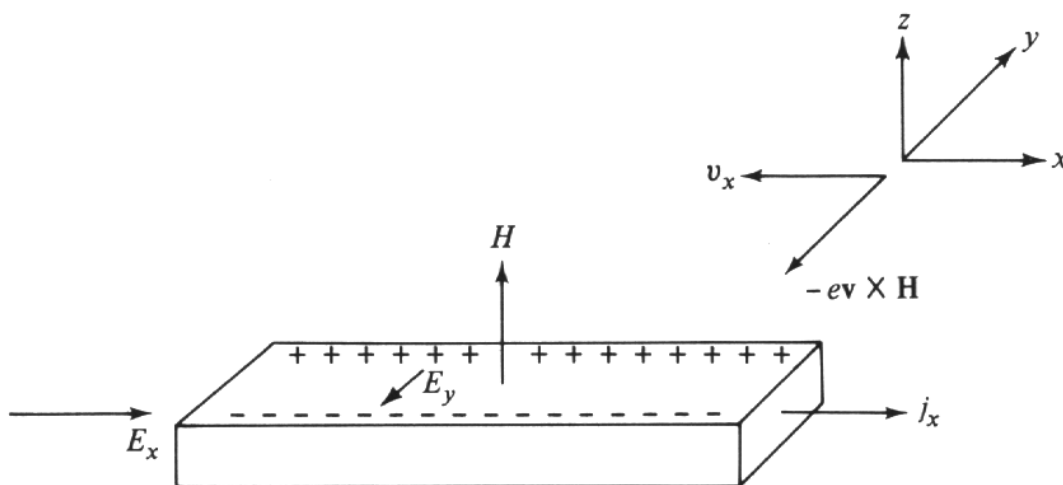


Figure 1.3
Schematic view of Hall's experiment.

Hall-koefficienten R_H definierades ju med

$$\mathbf{E}_H = R_H \mathbf{H} \times \mathbf{j} \quad (72)$$

och värdet på R_H har visats bli i en fri-elektronmodell

$$R_H = \begin{cases} -\frac{1}{ne} & \text{för elektroner} \\ +\frac{1}{ne} & \text{för hål} \end{cases} \quad (73)$$

i SI-enheter. I halvledare stämmer detta resultat ifall den ena typen av laddningsbärare dominerar; annars blir det fråga om en mycket komplicerad beräkning där både hål och elektroner måste beaktas.

Men en mätning av Hall-effektens tecken visar alltså vilken typ av laddningsbärare dominerar.

Jämförelse med ekv. (71) visar att man kan om den ena typen dominerar bestämma mobiliteten med

$$\mu = |R_H|\sigma \quad (74)$$

där σ är konduktiviteten. I.o.m. att R_H och σ ju är lätta att mäta, kan man alltså bestämma den helt mikroskopiska storleken μ med en mätning av dem.

11.5. Laddningskoncentrationer utanför jämvikt

De flesta halvledarkomponenter fungerar i tillstånd där laddningskoncentrationerna är *inte* i termisk jämvikt överallt. För att kunna behandla sådana fall, måste vi härleda ekvationer för laddningskoncentrationernas beteende utanför jämvikt.

Vi skriver laddningskoncentrationerna så att de kan bero på tiden t och en dimension x . Man kan generalisera ekvationerna till 3 dimensioner, men ofta är detta inte nödvändigt, då en stor del av också de moderna halvledarkomponenternas funktionsprincip grundar sig på en 1-dimensionell idé. Alltså kan vi skriva laddningsdensiteterna som

$$n(x, t) = n_0 + n'(x, t) \quad (75)$$

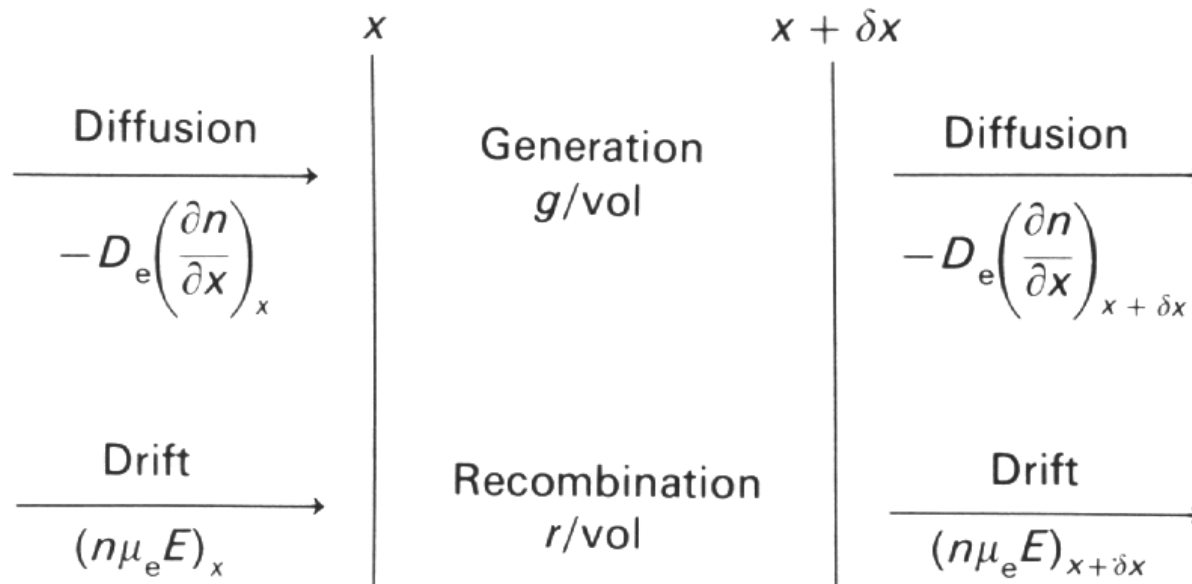
$$p(x, t) = p_0 + p'(x, t) \quad (76)$$

där n_0 och p_0 är laddningsdensiteterna vid termisk jämvikt. Vi antar vidare att förändringarna n' och p' är små jämfört med *majoritetsladdningsbärarnas* koncentration. Alltså gäller t.ex. i n-typs material

$$n' \ll n_0 \quad \text{och} \quad p' \ll n_0 \quad (77)$$

11.5.1. Kontinuitetsekvationen

Betrakta följande system:



Här kan nu mellan x och $x + \delta x$ laddningar antingen genereras eller rekombineras p.g.a. någon mekanism. Utanför området $[x, x + \delta x]$ är laddningskoncentrationen konstant.

Med **rekombination** menas att hål och elektroner möter varann och förstörs därmed (alltså att en elektron i ledningsbandet faller tillbaka till ett tomt tillstånd i valensbandet). Vi betecknar här **raten**

av rekombination per enhetsvolym med

$$r \tag{78}$$

Laddningsbärare kan också **genereras** genom någon process, t.ex. genom att en elektron får energi av belysning eller kollisioner med atomer och flyttas då till ledningsbandet. Samtidigt skapas givetvis också ett hål i valensbandet. Vi kallar raten för generering per enhetsvolym med

$$g \tag{79}$$

Ifall laddningsbärarnas koncentration beror på platsen, kan det också förekomma **diffusion** i systemet. Ifall diffusionen är koncentrationsoberoende kan den beskrivas med **Ficks lag**, som säger att laddningsantals-ström-densiteterna J är

$$J_e = -D_e \frac{\partial n}{\partial x} \tag{80}$$

$$J_h = -D_h \frac{\partial p}{\partial x} \tag{81}$$

där D_e och D_h är diffusionskonstanterna för elektroner och hål. Detta är alltså strömmen av antalet laddningar, inte den elektriska strömmen (skillnaden är ju bara en faktor e). Den sammanlagda

raten med vilken elektroner kommer in i området $[x, x + \delta x]$ är skillnaden mellan $J_e(x)$ och $J_e(x + \delta x)$ och kan skrivas

$$J_e(x) - J_e(x + \delta x) = J_e(x) - J_e\left(x\left(1 + \frac{\delta x}{x}\right)\right) \approx J_e(x) - J_e(x) - \frac{\partial J_e(x)}{\partial x} x \frac{\delta x}{x} = -\frac{\partial J_e(x)}{\partial x} \delta x \quad (82)$$

där vi använt oss av den vanliga första ordningens Taylor-approximation för fallet $\delta x \ll x$. Alltså fås med att använda detta och ekv. (80) för elektroner

$$-\frac{\partial J_e(x)}{\partial x} \delta x = D_e \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \delta x \quad (83)$$

Om vi ännu har ett elfält E i x -riktningen, leder detta till **laddningars rörelse i elfält** och därmed elströmmar $\sigma E = \pm n e \mu E$. Laddningsantals-strömmarna blir då

$$J_e = -n \mu_e E \quad (84)$$

$$J_h = -p \mu_p E \quad (85)$$

Som för diffusion ges skillnaden i antalet laddningsbärare som kommer in i området $[x, x + \delta x]$ av

$$-\frac{\partial J_e(x)}{\partial x} \delta x = \mu_e \frac{\partial(nE)}{\partial x} \delta x \quad (86)$$

Genom att slå ihop alla kontributioner som listats ovan, ekv. (79), (78), (83) och (86), och dividera bort en term δx , får vi den totala förändringen i laddningsdensitet-förändrings-raten i området $[x, x + \delta x]$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g - r + D_e \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu_e \frac{\partial(nE)}{\partial x} \quad (87)$$

Detta är känt som **kontinuitetsekvationen** för elektroner. För hål är kontinuitetsekvationen

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g - r + D_h \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_h \frac{\partial(pE)}{\partial x} \quad (88)$$

11.5.2. Elektrisk neutralitet

Dessa två ekvationer ger bilden av att elektroner och hål skulle röra sig oberoende. Men i själva verket är deras rörelse starkt kopplad, då laddningsneutralitet kräver att elektron- och hålkoncentrationen kan avvika från varann antingen bara under en mycket kort tid, eller bara i ett litet område.

Hela laddningsdensiteten ρ i en halvledare är

$$\rho = e(p + N_D^+ - n - N_A^-) \quad (89)$$

Genom insättning av ekvationerna (75) och (76) får vi

$$\rho = e(p_0 + p'(x, t) + N_D^+ - n_0 - n'(x, t) - N_A^-) \quad (90)$$

och med ekvationen för laddningsneutralitet (52):

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \quad (91)$$

får vi

$$\rho = e(p'(x, t) - n'(x, t)) \quad (92)$$

Alltså ser vi att laddningsneutralitet $\rho = 0$ uppnås då laddningstätheterna är lika. Ifall de *inte* är lika, kan vi använda Gauss lag

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon\epsilon_0} \quad (93)$$

för att beräkna effekten på elfältet. Då vi nu antar att bara x -dimensionen är ohomogen, fås helt enkelt

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{e(p' - n')}{\epsilon\epsilon_0} \quad (94)$$

Om vi nu vill beräkna effekten av ett icke-jämviktsläge på ett system där majoritetsladdningsbäraren är elektroner, får vi med kontinuitetsekvationen (87)

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = g - r + D_e \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + \mu_e \underbrace{\frac{\partial(n'E)}{\partial x}}_{\frac{\partial n'}{\partial x} E + n' \frac{\partial(E)}{\partial x}} \quad (95)$$

(n_0 faller genast bort då den ju inte är tidsberoende) och alltså

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = g - r + D_e \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + \mu_e E \frac{\partial n'}{\partial x} + \mu_e n' \frac{e(p' - n')}{\epsilon\epsilon_0} \quad (96)$$

Ifall det inte finns ett yttre fält, kommer E att vara av samma storleksordning som den lilla förändringen i laddningsdensitet n' , och termen $E\partial n'/\partial x$ kommer att vara av andra ordningen i förändringen och kan lämnas bort. Om ännu tidsberoendet i rekombinations- och genereringsprocesserna är svagt, kan man skriva om detta som

$$\tau_D \frac{\partial n'}{\partial t} = (p' - n') + \lambda_D^2 \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} \quad (97)$$

där vi infört konstanterna

$$\tau_D = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{ne\mu_e} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\sigma_e} \quad (98)$$

som är den **dielektriska relaxations-tiden** och

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0 D_e}{ne\mu_e}} \quad (99)$$

som är känt som **Debye-längden**. Med hjälp av Einsteins diffusion-relation

$$D = \frac{k_B T}{e} \mu \quad (100)$$

(bevisas inte här och nu) kan detta också skrivas som

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 k_B T}{ne^2}} \quad (101)$$

Dessa storheter är viktiga mått på hur länge eller hur långt en laddnings-ojämvikt kan bevaras i en halvledare. Om man lite analyserar dem ser man att Debye-längden är ett mått på ungefär en hur lång väg från varann elektroner och hål kan vara i ojämvikt, och den dielektriska relaxations-tiden ett mått på hur länge ojämvikten kan bestå. En grov uppskattning för τ_D får vi med $\epsilon = 11.7$ för Si och ett typiskt värde för σ på $100 \text{ } 1/\Omega \text{ m}$, vilket ger

$$\tau_D \approx 10^{-12} \text{ s} \quad (102)$$

För λ_D kan vi på liknande sätt uppskatta med $T = 300 \text{ K}$ och $n = 10^{16} \text{ } 1/\text{cm}^3$

$$\lambda_D \approx 400 \text{ Å} \quad (103)$$

Detta berättar för oss att laddnings-icke-neutralitet kan förekomma bara för mycket korta tider och områden. Tidsskalan är så liten den nästan alltid kan negligeras.

Längdskalan verkar också vara det. Men vi måste komma ihåg att halvledarkomponenters längder blir mindre och mindre. Nu (2015) är typiska dimensioner av ordningen 20-30 nm = 200 – 300 Å. Detta är ett verkligt problem i dagens tillverkning: delarna blir så små att kontinuitetsapproximationer inte mera alltid gäller...

Men i de fall då vi kan anta att $p' = n'$ kan vi skriva hela kontinuitetsekvationen som

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = g - r + D_e \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + \mu_e E \frac{\partial n'}{\partial x} \quad (104)$$

Det visar sig att ofta är man intresserad av minoritets-laddningsbärarnas egenskaper. Då kan man i.o.m. att $p' = n'$ tillämpa detta på p-typs material!

11.5.3. Generation och rekombination

Vid termisk jämvikt är raten av rekombination och generering lika stor, och vi betecknar båda med $g_0(T)$. Raten för att excitera elektroner är uppenbart oberoende av n' och p' i första approximation, då n' och $p' \ll n$. Däremot kan raten för rekombination av exciterade elektroner förväntas vara proportionell mot n och p , i.o.m. att rekombination förutsätter att en ledningselektron "hittar" ett hål. Alltså kan vi skriva rekombinationsraten r som

$$r = k(T)np \quad (105)$$

där $k(T)$ är någon funktion som beror på temperatur, men inte laddningsbärarkoncentration. Då fås

$$g - r = g_0(T) - k(T)np = g_0(T) - k(T)(n_0 + n')(p_0 + p') \quad (106)$$

och i.o.m. att vi måste ha $g_0(T) = r_0 = k(T)n_0p_0$ fås

$$g - r = -k(T)(n_0p' + p_0n' + n'p') \quad (107)$$

I denna ekvations parentesterm är n_0p' den dominerande termen i n-typs material och p_0n' i p-typs material. Termen

$$- k(T)n_0p' \quad (108)$$

kan också skrivas

$$\frac{p'}{\tau_n} \quad (109)$$

där τ_n är den s.k. **minoritets-laddningsbärar-livstiden** (“minority carrier lifetime”), och är alltså ett mått på hur länge hål kan förväntas existera i n -typs material. Alltså kan kontinuitetsekvationen för elektroner i p -typs material nu skrivas

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = -\frac{n'}{\tau_p} + D_e \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + \mu_e E \frac{\partial n'}{\partial x} \quad (110)$$

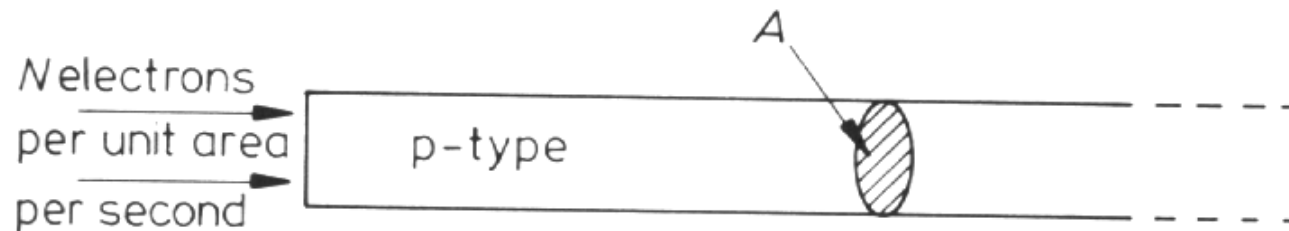
och får hål i n -typs material

$$\frac{\partial p'}{\partial t} = -\frac{p'}{\tau_n} + D_h \frac{\partial^2 p'}{\partial x^2} - \mu_h E \frac{\partial p'}{\partial x} \quad (111)$$

Minoritets-laddningsbärarnas livstider är typiskt av ordningen 10^{-7} s, alltså mycket större än den dielektriska livstiden τ_D .

11.5.4. Konstant injektion av minoritets-laddnings-bärare

Betrakta ett system där elektroner injiceras i en p-typs halvledare med en konstant rat N per enhetsarea A .



Vid jämvikt är $\partial n' / \partial t = 0$ och då $E = 0$ får ekv. (110) formen

$$0 = -\frac{n'}{\tau_p} + D_e \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} \implies \frac{n'}{\tau_p} = D_e \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} \quad (112)$$

vilket med hjälp av variabeln

$$L_e = \sqrt{D_e \tau_p} \quad (113)$$

kan skrivas

$$\frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} = \frac{n'}{L_e^2} \quad (114)$$

Storheten L_e har dimensioner av längd (diffusionskonstanten D har dimensionen cm^2/s) och kallas elektronernas **diffusionslängd**.

Lösningen till diff.ekvationen (114) är

$$n' = C_1 e^{-x/L_e} + C_2 e^{+x/L_e} \quad (115)$$

Om staven börjar vid $x = 0$ är den senare termen uppenbart ofysikalisk, så vi sätter $C_2 = 0$. Nu kan vi bestämmas C_1 från att kräva att elektronernas ström dn'/dt bör vara $= N$ vid $x = 0$:

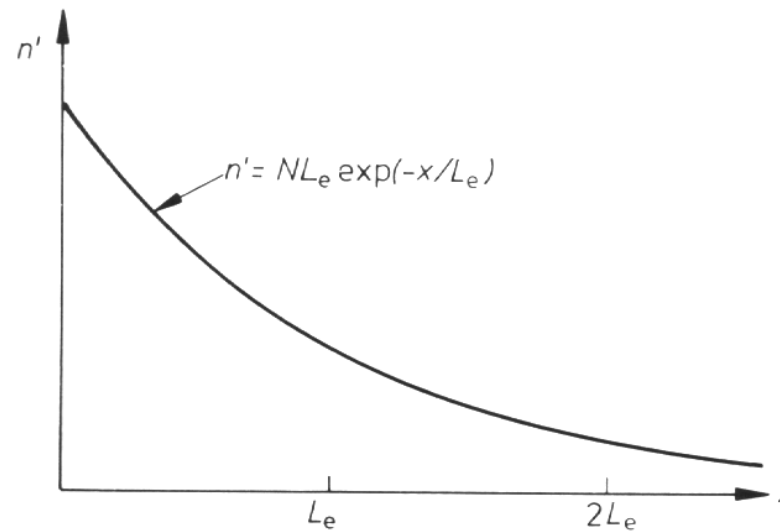
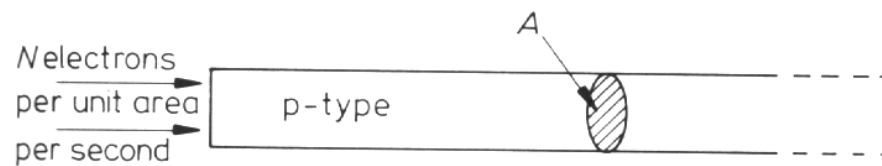
$$N = -D_e \left. \frac{\partial n'}{\partial x} \right|_{x=0} = -D_e C_1 e^{-0/L_e} \frac{1}{L_e} \implies C_1 = \frac{N L_e}{D_e} \quad (116)$$

Alltså fås

$$n' = \frac{N L_e}{D_e} e^{-x/L_e} \quad (117)$$

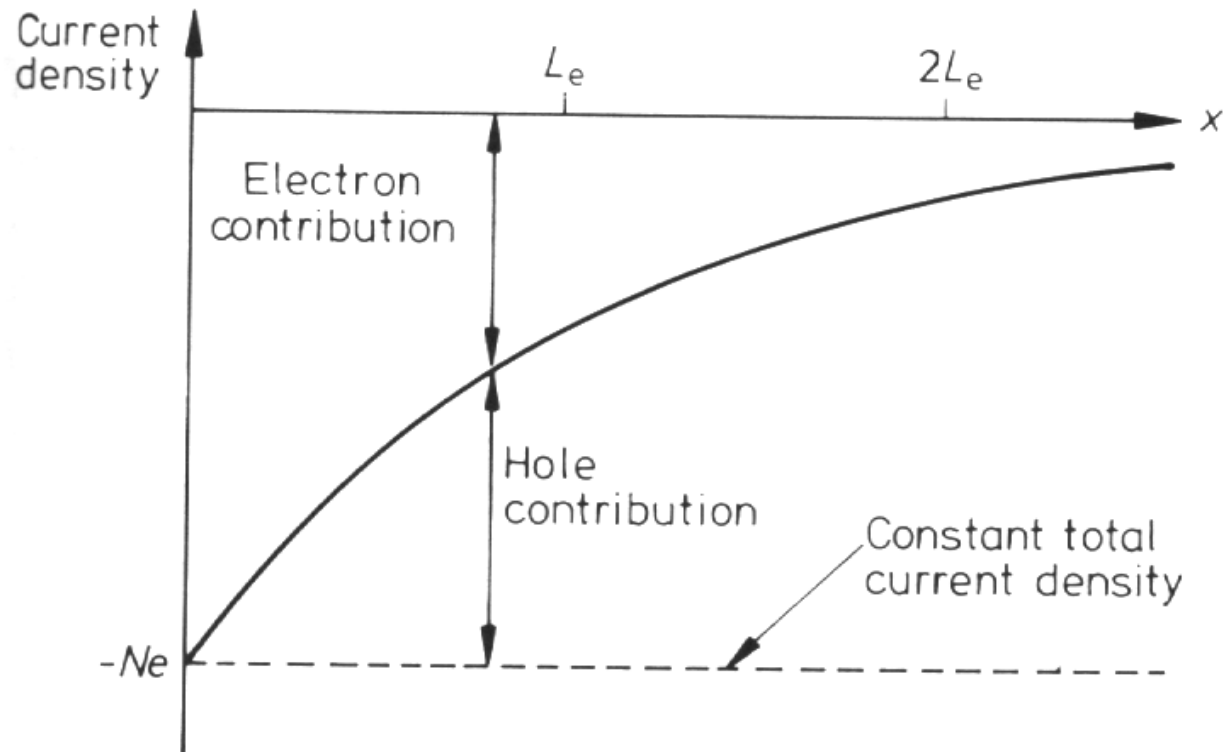
Observera att boken har ett fel här, D_e saknas!

Detta beteende illustreras i följande bild:



Elektronkoncentrationen avtar alltså exponentiellt med x , och L_e ger konstanten för hur den avtar. Det som är ännu mer intressant är att den elektriska strömmen från elektroner $J_e = D_e \partial n' / \partial x'$ också avtar exponentiellt. Men för att bevara laddningsneutralitet måste den totala strömmen vara

konstant, så vi måste ha en hålström med exakt motsatt x -beroende än elektronströmmen. Detta illustreras i följande bild:

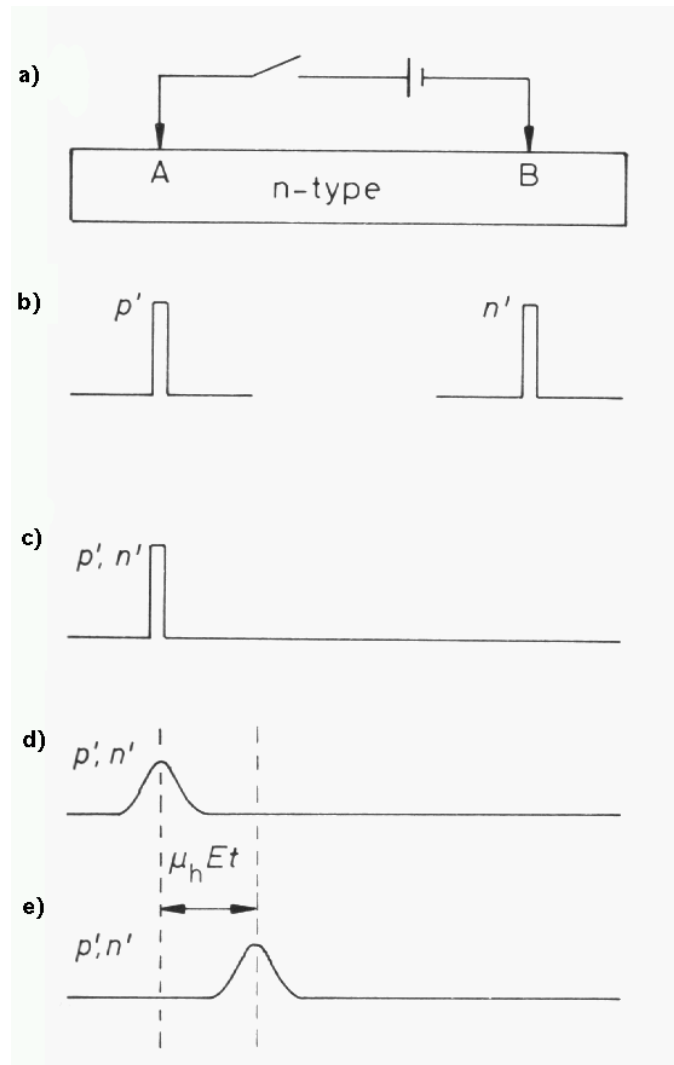


Vad som händer är alltså att elektronerna som skjuts konstant in, rekombineras med hål längs med x -riktningen, så deras ström avtar. Men samtidigt strömmar det in hål från andra hållet för att tillgodose de inkommande elektronerna med nya hål att rekombinera med.

Storheten L_e är typiskt av storleksordningen $100 \mu\text{m}$ [Mayer-Lau sid. 75], och börjar alltså närma sig makroskopiska mått! Detta är av stor betydelse vid halvledartillverkning.

11.5.5. Injektion av minoritets-laddnings-bärare i en puls

Betrakta följande experiment:



Vid **(a)** stängs kretsen för en mycket kort stund, så elektroner kommer in vid B och hål i A **(b)**.

Nu har vi en situation med uppenbar laddnings-ojämvt, så majoritetsbärarna n' rör sig snabbt till minoritetsbärarnas position p' . Detta kräver några dielektriska relaxationstider τ_D , och sker alltså mycket snabbt. Nu har vi situation **(c)**

Det som sker till följande är att (den mycket långsammare) rekombinationen och diffusionen tar vid, så laddningspulsen $n'p'$ börjar spridas ut och försvinna **(d)**.

Matematiskt kan allt detta beskrivas genom att lösa ekvation **(111)**, vilket ger

$$p'(x, t) = \frac{P}{\sqrt{4\pi D_h t}} e^{-\frac{t}{\tau_n} - \frac{x^2}{4D_h t}} \quad (118)$$

där P är antalet hål som kommer in.

Om man ännu lägger ett yttre elfält över systemet, kommer pulsen av hål att röra på sig med en hastighet $\mu_h E$ **(e)** Genom att mäta formen och rörelse-hastigheten på pulsen som funktion av tid kan man direkt bestämma hålets mobilitet μ_h , diffusionskonstant D_h och livstid τ_h !

11.6. Elektriska egenskaper hos kolnanomaterial

[Arkady Krasheninnikovs föredrag på Nanoll]

Kolnanomaterialen grafen och kolnanorör har mycket intressant elektriska egenskaper.

Grafen är en halvledare/semimetall (beroende på synvinkel) med ett bandgap på 0. Ännu intressantare är dock att tillståndstätheten kring Fermivån inte har den normala parabolformen (ekvation 5) utan istället är linjär med k :

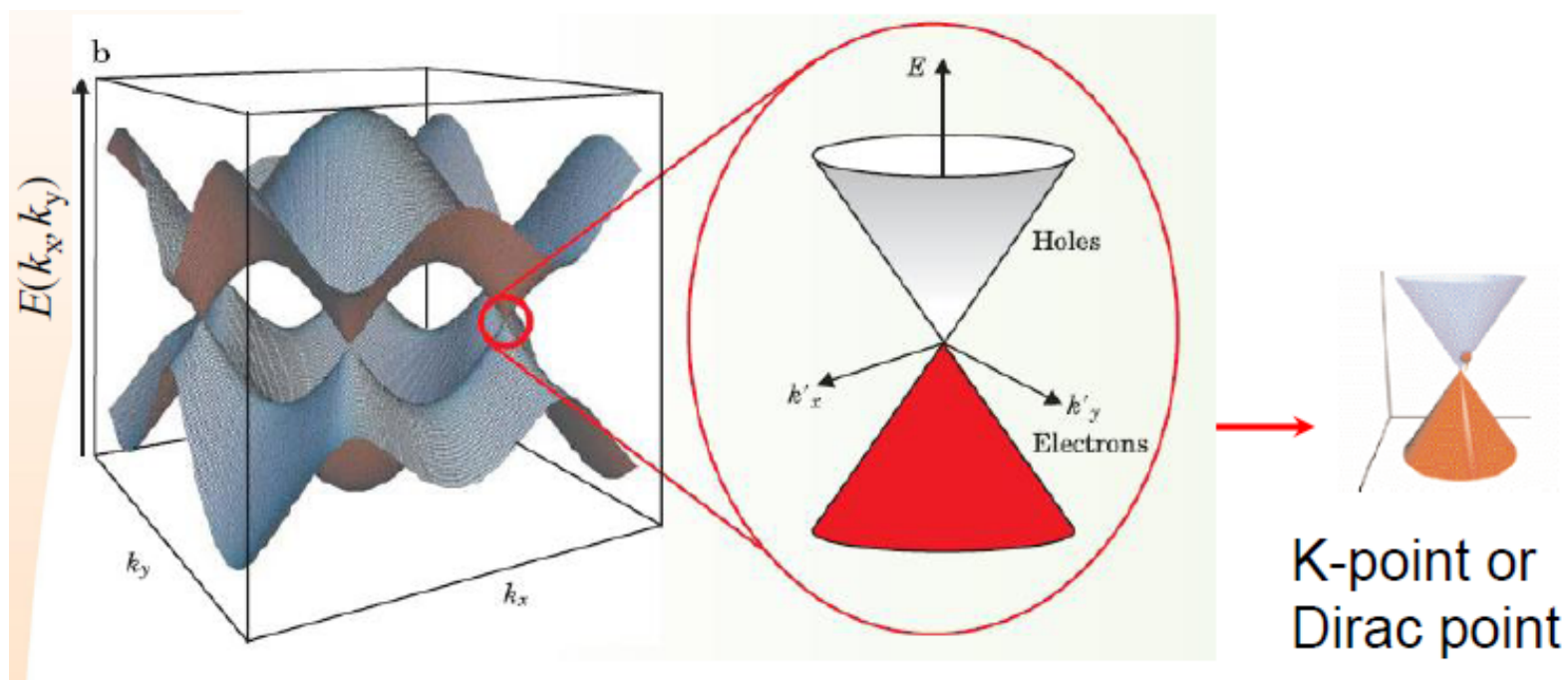
$$E(k) = v_F k \quad (119)$$

Notera också att ekvationen inte har elektronens massa i sig! Därmed kan elektroner i perfekt grafen anses vara en experimentell analogi med masslösa Dirac-fermioner, alltså elementarpartiklar som rör sig rent relativistiskt.

Strukturen ges i bättre detalj med ekvationen

$$E(k_x, k_y) = \pm \sqrt{1 + 4 \cos^2(k_x/2) + 4 \cos(k_x/2) \cos(\sqrt{3}k_y/2)} \quad (120)$$

och leder till en koniska form kring Fermivån i reciproka rymden, som illustreras här:



Tillståndstätheten i grafen i sin tur är av formen

$$g(E) \propto E \quad (121)$$

som också avviker från den vanliga \sqrt{E} -formen.

Kolnanorörs elektroniska egenskaper har sin utgångspunkt i dem för grafen, men det att röret är

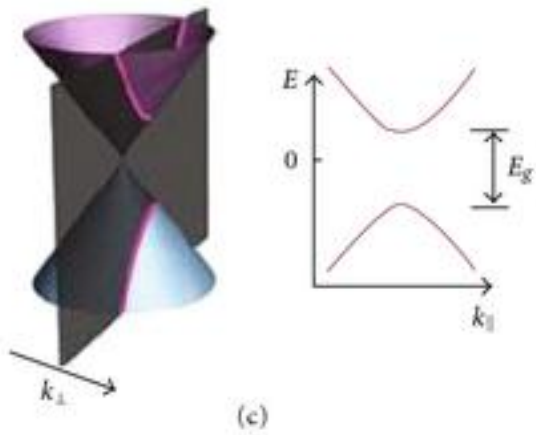
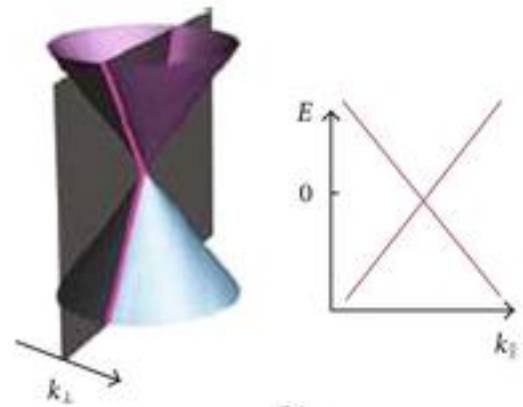
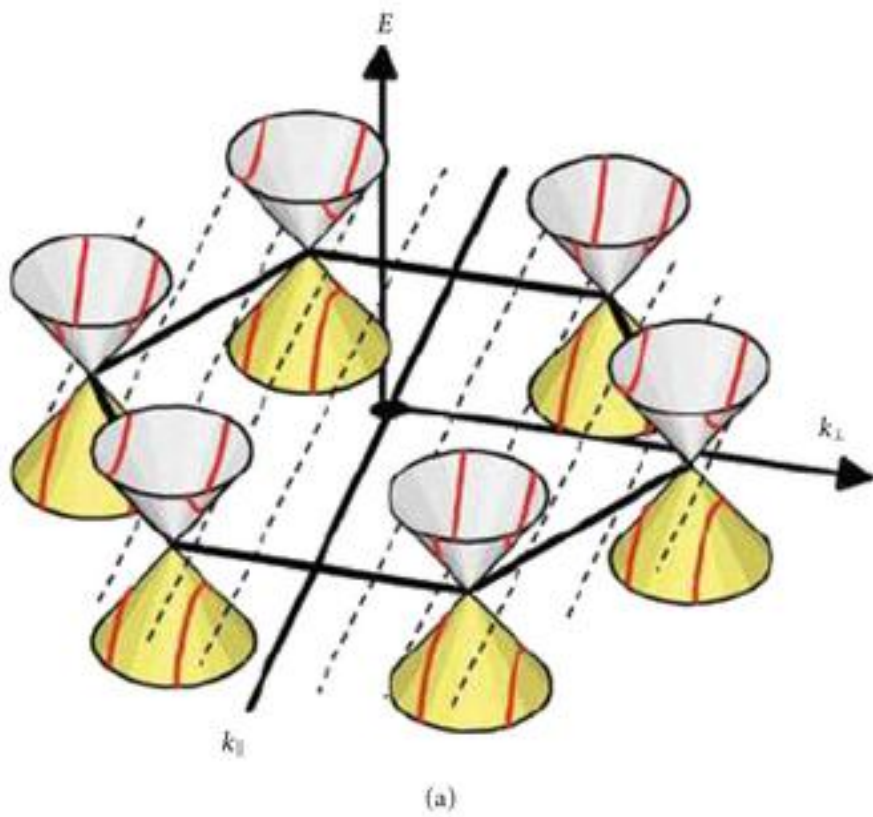
rullat ihop ändrar på den elektroniska strukturen på ett avgörande sätt. För vissa rullningsriktningar öppnas det ett bandgap i reciproka rummet, så materialet blir en halvledare. Mer specifikt för ett rör (n, m) :

$n - m = 3i$: (i är ett heltal): tuben är metallisk

annars : tuben är halvledande med bandgap upp till ~ 2 eV

Notera dock att i mycket små tuber ($n + m \lesssim 5$) gäller detta inte mera utan bilden blir mer komplicerad.

Resultatet kan härledas med en tätbindningsmodell, och kan kvalitativt förstås komma från att böjningen i en kon leder till att alla tillstånd i grafens elektrontillståndskon är inte möjliga, utan konen skärs längs med linjer. Endast om skärningen råkar korsa punkten där konerna möts, är konen metallisk:



[<http://www.hindawi.com/journals/jnt/2011/471241/fig6/>]

[Experimentellt bevis: Wilder et al, Nature 391 (1998) 59]

Vad har du åtminstone lärt dig i detta kapitel?

- De vanligaste halvledarmaterialens kristallstrukturer
- Begreppet bandgap och varför det är centralt för halvledare
- Skillnaden mellan direkta och indirekta bandgaps material och hur det hänger ihop med optiska egenskaper
- Att både elektroner och hål är viktiga laddningsbärare i halvledare
- Begreppen intrinsiskt elektrontillstånd, donor, acceptor
- Hur dopningatomers valens hänger ihop med om de är donorer och acceptorer
- Hur ledning sker i dopade halvledare
- Begreppen n-typ, p-typ, majoritets- och minoritetsladdningsbärare
- Du känner till kvalitativt den speciella bandstrukturen i grafen och nanorör, och vet vilka nanorör är metalliska och vilka halvledande.