

Εργαστήριο Οπτοηλεκτρονικής και Laser

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΘΕΩΡΙΑΣ ΗΜΙΑΓΩΓΩΝ

Γ. Μήτσου

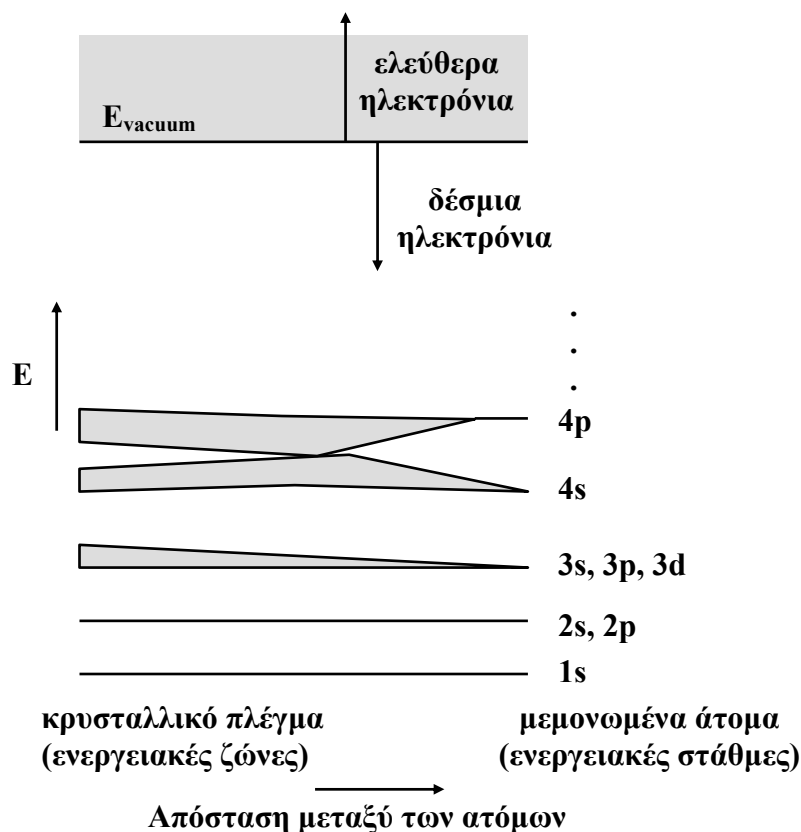
6.1 Εισαγωγή

Οι οπτοηλεκτρονικές διατάξεις, που θα μελετήσουμε στο δεύτερο μέρος του βιβλίου είναι κατασκευασμένες από ημιαγωγά υλικά της ομάδας IV του περιοδικού συστήματος, κυρίως Si και Ge ή ενώσεις στοιχείων της ομάδας III με στοιχεία της ομάδας V, όπως AlAs, GaAs, InAs καθώς και σε συνδυασμούς τους σε τριμερή ή τετραμερή κράματα. Για την κατανόηση της λειτουργίας αυτών των διατάξεων, απαραίτητη είναι η γνώση βασικών στοιχείων από τη θεωρία της φυσικής στερεάς κατάστασης καθώς και των μηχανισμών που αναπτύσσονται, κατά την κίνηση των ηλεκτρονίων, στο εσωτερικό των κρυσταλλικών στερεών.

Σ' αυτό το κεφάλαιο, χωρίς να υπεισέλθουμε σε λεπτομερή μαθηματική ανάλυση, θα εξετάσουμε τις ηλεκτρονικές ιδιότητες των ημιαγωγών μέσα από τα ενεργειακά τους διαγράμματα που προσδιορίζουν τα επίπεδα ενέργειας των ηλεκτρονίων, καθώς και τους μηχανισμούς που αναπτύσσονται κατά την αλληλεπίδρασή τους με το φως.

6.2 Ενεργειακές ζώνες

Σε ένα μεμονωμένο άτομο, τα ηλεκτρόνια βρίσκονται γύρω από τον πυρήνα και οι ενέργειές τους είναι κβαντισμένες, μπορεί δηλαδή να έχουν μόνο μια συγκεκριμένη



Σχήμα 6.1 Σχηματική παράσταση της μετατροπής των ενεργειακών σταθμών σε ζώνες κατά το σχηματισμό κρυσταλλικού στερεού.

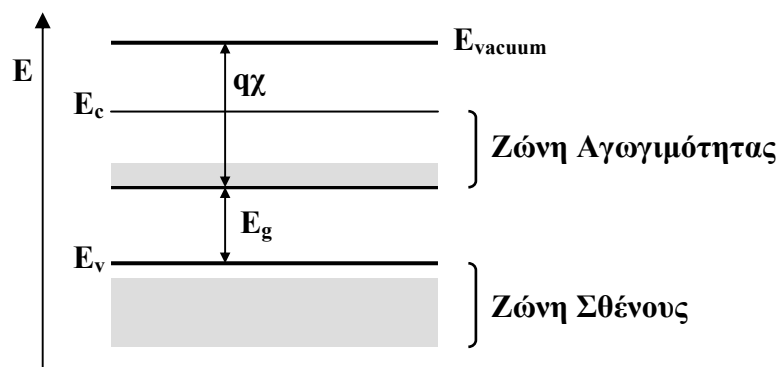
διάκριτη τιμή E_n ($n=1,2,3,\dots$). Στο **Σχήμα 6.1** φαίνεται το γραμμικό ενεργειακό φάσμα ενός τυπικού μεμονωμένου ατόμου αποτελούμενο από δυο καταστάσεις: την θε-

μελιώδη κατάσταση, όπου τα ηλεκτρόνια συγκρατούνται από τον πυρήνα με δυνάμεις Coulomb και την ελεύθερη κατάσταση όπου τα ηλεκτρόνια είναι ελεύθερα. Οι δυο αυτές περιοχές διαχωρίζονται από μια κατάσταση μηδενικής ενέργειας E_{vacuum} . Στη θεμελιώδη κατάσταση η ενέργεια του ηλεκτρονίου είναι αρνητική σε σχέση με τη στάθμη κενού. Οι επιτρεπόμενες ενεργειακές στάθμες είναι διάκριτες, χωρίζονται μεταξύ τους από απαγορευμένες περιοχές και περιλαμβάνουν ορισμένο αριθμό ηλεκτρονικών καταστάσεων.

Θεωρούμε τώρα την περίπτωση κατά την οποία N άτομα συνδέονται μεταξύ τους για το σχηματισμό ενός κρυσταλλικού στερεού. Καθώς οι αποστάσεις μεταξύ τους μικραίνουν, οι τροχιές των ηλεκτρονίων σθένους υπερκαλύπτονται και τα ηλεκτρόνια βλέπουν τους πυρήνες των γειτονικών ατόμων. Όμως η απαγορευτική αρχή του Pauli που ορίζει ότι δυο ηλεκτρόνια ενός ατόμου δεν μπορεί να υπάρχουν στην ίδια κατάσταση, υπαγορεύει το διαχωρισμό του ενεργειακού διαγράμματος σε N το πλήθος πολύ κοντά διατεταγμένες στάθμες. Καθώς η απόσταση μεταξύ των ατόμων ελαττώνεται, άλλες εσωτερικές τροχιές αρχίζουν να υπερκαλύπτονται και οι ενεργειακές τους στάθμες χωρίζονται επίσης σε N πολύ κοντά ταξινομημένες στάθμες. Κάθε ομάδα χωριστών ενεργειακών σταθμών ονομάζεται **ενεργειακή ζώνη**. Οι ζώνες διαχωρίζονται μεταξύ τους από **ενεργειακά χάσματα**, δηλαδή απαγορευμένες τιμές ενέργειας στις οποίες δεν μπορούν να υπάρξουν ελεύθεροι φορείς (**Σχήμα 6.1**).

Σε συνθήκες $T=0$ K, η ζώνη που είναι πλήρης καλείται **ζώνη σθένους** και τα ηλεκτρόνια δεν συμμετέχουν στην αγωγιμότητα του στερεού, αφού δεν υπάρχουν διαθέσιμες ενεργειακές καταστάσεις, που μπορούν να τις καταλάβουν υπό την επίδραση εξωτερικού πεδίου. Η αμέσως επόμενη ζώνη που είναι κενή ή μερικώς πληρωμένη, είναι γνωστή ως **ζώνη αγωγιμότητας**.

Ένα απλοποιημένο ενεργειακό διάγραμμα ημιαγωγού φαίνεται στο **Σχήμα 6.2**, όπου διακρίνεται η σχεδόν κενή ζώνη αγωγιμότητας. Η οριζόντια γραμμή E_c σημειώνει τον πυθμένα της ζώνης. Ομοίως, η κορυφή της ζώνης σθένους σημειώνεται από τη γραμμή



Σχήμα 6.2 Απλοποιημένο ενεργειακό διάγραμμα ημιαγωγού, όπου φαίνεται το ενεργειακό χάσμα E_g και η ενέργεια ελεύθερων ηλεκτρονίων E_{vacuum} εκτός κρυστάλλου.

μή E_v . Το ενεργειακό χάσμα βρίσκεται μεταξύ των δυο αυτών γραμμών, που χωρίζονται από ενέργεια E_g . Είναι δηλαδή, $E_g = E_c - E_v$.

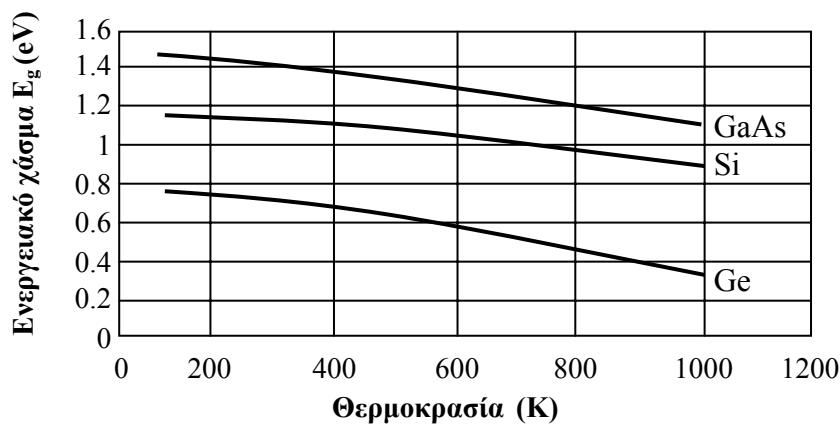
6.3 Εξάρτηση ενεργειακού χάσματος από τη θερμοκρασία

Το ενεργειακό χάσμα στους ημιαγωγούς εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Όταν αυτή αυξάνεται το χάσμα μικραίνει. Αυτή η συμπεριφορά μπορεί να κατανοηθεί καλύτερα αν σκεφθούμε ότι, λόγω της θερμικής ενέργειας, αυξάνει το πλάτος των ατομικών ταλαντώσεων και ως εκ τούτου, αυξάνει η απόσταση μεταξύ των ατόμων. Μια αύξηση των διατομικών αποστάσεων, ελαττώνει το δυναμικό που βλέπουν τα ηλεκτρόνια του κρυσταλλικού στερεού και αυτό με τη σειρά του μικραίνει το ενεργειακό χάσμα. Επίσης, μια απ'ευθείας διαμόρφωση των διατομικών αποστάσεων, όπως για παράδειγμα να τοποθετήσουμε τον κρύσταλλο σε σύστημα εφελκυσμού, επιφέρει ανάλογα αποτελέσματα. Η εξάρτηση του ενεργειακού χάσματος από τη θερμοκρασία, δίνεται από την πειραματική σχέση:

$$E_g(T) = E_g(0) - (\alpha T^2)/(T+\beta) \quad (6.1)$$

όπου α , β παράμετροι.

Στο **Σχήμα 6.3** φαίνεται γραφικά η σχέση θερμοκρασίας – ενεργειακού χάσματος.



Σχήμα 6.3 Εξάρτηση ενεργειακού χάσματος Ge , Si και $GaAs$ από τη θερμοκρασία.

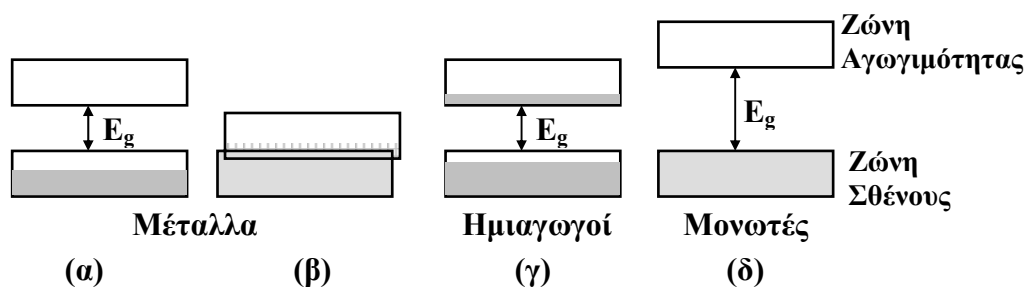
6.4 Μέταλλα, μονωτές και ημιαγωγοί

Ακόμα και αν γνωρίζουμε την ενεργειακή δομή ενός υλικού, χρειάζεται να ξέρουμε ποιες ενεργειακές στάθμες είναι κατειλημμένες και ποιες συγκεκριμένες ενεργειακές ζώνες είναι κενές, μερικώς πληρωμένες ή τελείως πληρωμένες. Οι κενές ζώνες δεν περιέχουν ηλεκτρόνια και δεν συμμετέχουν στην ηλεκτρική αγωγιμότητα του υλικού. Μερικώς πληρωμένες ζώνες περιέχουν ηλεκτρόνια και έχουν διαθέσιμες ενεργειακές στάθμες σε λίγο υψηλότερες ενέργειες. Οι ελεύθερες αυτές ενεργειακές στάθμες, επιτρέπουν στους φορείς να αποκτήσουν ενέργεια, όταν μετακινούνται υπό την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου. Σ' αυτή την περίπτωση, τα ηλεκτρόνια συμμετέχουν στην ηλεκτρική αγωγιμότητα του υλικού. Οι τελείως πληρωμένες ζώνες περιέχουν μεγάλο αριθμό ηλεκτρονίων, αλλά δεν συμμετέχουν στην ηλεκτρική αγωγιμότητα λόγω του ότι δεν αποκτούν ενέργεια, αφού δεν υπάρχουν διαθέσιμες ενεργειακές στάθμες.

Για να βρούμε τις πλήρεις ή κενές ζώνες θα πρέπει να ξέρουμε πόσα ηλεκτρόνια τοποθετούνται σε κάθε ζώνη και πόσα είναι διαθέσιμα. Κάθε ζώνη δημιουργείται από το διαχωρισμό μιας ή περισσότερων ατομικών ενεργειακών σταθμών. Επομένως, ο

ελάχιστος αριθμός σταθμών σε μια ζώνη ισούται με το διπλάσιο του αριθμού των ατόμων στο υλικό. Ο λόγος, που αναφερόμαστε στο διπλάσιο είναι ότι σε κάθε ενεργειακή στάθμη αντιστοιχούν δυο ηλεκτρόνια με αντίθετο σπιν. Για να απλοποιήσουμε περισσότερο την ανάλυση, θεωρούμε ότι μόνο τα ηλεκτρόνια σθένους παρουσιάζουν ενδιαφέρον. Τα ηλεκτρόνια, που βρίσκονται κοντά στον πυρήνα, λόγω της ισχυρής έλξης, δεν μπορούν να κινηθούν ελεύθερα στο υλικό.

Τέσσερις διαφορετικές πιθανές περιπτώσεις παρουσιάζονται στο **Σχήμα 6.4**.



Σχήμα 6.4 Πιθανά ενεργειακά διαγράμματα ενός κρυστάλλου.

(α) Μερικώς συμπληρωμένη ζώνη. (β) Δυο ζώνες επικαλυπτόμενες. (γ) Μια σχεδόν συμπληρωμένη ζώνη διαχωριζόμενη από μια σχεδόν κενή ζώνη με μικρό ενεργειακό χάσμα. (δ) Μια πλήρης και μια κενή ζώνες, διαχωριζόμενες από μεγάλο ενεργειακό χάσμα.

Η περίπτωση (α) παρουσιάζεται σε υλικά, που έχουν άτομα με ένα ηλεκτρόνιο σθένους ανά άτομο. Αυτά τα υλικά παρουσιάζουν υψηλή αγωγιμότητα, όπως για παράδειγμα ο χαλκός, ο χρυσός και το ασήμι. Υλικά, των οποίων τα άτομα έχουν δυο ηλεκτρόνια σθένους, παρουσιάζουν και αυτά υψηλή αγωγιμότητα όταν η πλήρης ζώνη επικαλύπτεται με την κενή ζώνη (περίπτωση β). Στην περίπτωση (δ), η αγωγιμότητα του υλικού είναι μηδενική λόγω του μεγάλου ενεργειακού χάσματος και το υλικό συμπεριφέρεται ως μονωτής. Στην περίπτωση (γ), η πλήρης ζώνη διαχωρίζεται από την κενή ζώνη με μικρό ενεργειακό χάσμα ($\approx 1\text{eV}$), που επιτρέπει στα ηλεκτρόνια να μετακινηθούν προς την αμέσως υψηλότερη ζώνη. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα μια σχεδόν πλήρη ζώνη (ζώνη σθένους) κάτω από μια σχεδόν κενή ζώνη (ζώνη αγωγιμότητας) και το υλικό συμπεριφέρεται ως ημιαγωγός.

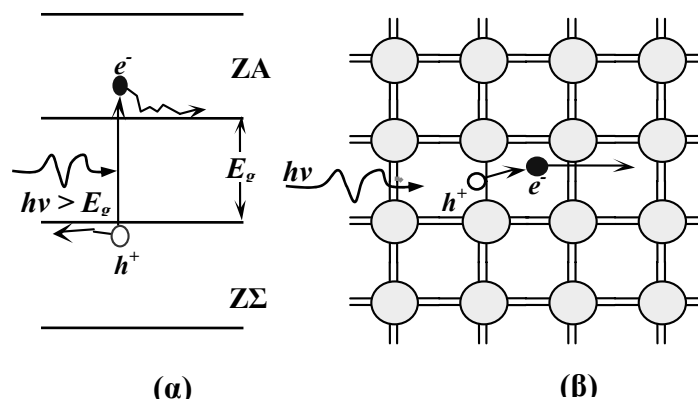
6.5 Ηλεκτρόνια και οπές

Η μετακίνηση των ηλεκτρονίων σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας, συνήθως γίνεται με θερμική ή οπτική διέγερση με ελάχιστο ποσό ενέργειας ίσο με το ενεργειακό χάσμα του κρυστάλλου E_g . Ένα ηλεκτρόνιο στη ζώνη αγωγιμότητας είναι ελεύθερο να κινηθεί στον κρύσταλλο και επίσης να ανταποκριθεί σε ηλεκτρικά πεδία, λόγω των κενών γειτονικών ενεργειακών ζωνών.

Ας θεωρήσουμε την περίπτωση, όπου ένα φωτόνιο με ενέργεια $h\nu > E_g$ αλληλεπιδρά με ένα ηλεκτρόνιο στη ζώνη σθένους και απορροφάται απ' αυτό (**Σχήμα 6.5**). Το ηλεκτρόνιο τότε αποκτά ενέργεια ικανή για να ξεπεράσει το ενεργειακό χάσμα E_g , να φθάσει στη ζώνη αγωγιμότητας και να καταστεί ελεύθερο. Είναι φανερό ότι κατά την μετακίνηση του ηλεκτρονίου προς τη ζώνη αγωγιμότητας, δημιουργείται μια ελεύθερη θέση στη ζώνη σθένους, που καλείται **οπή**. Η περιοχή γύρω από την οπή είναι θε-

τικά φορτισμένη λόγω της αφαίρεσης ενός αρνητικού φορτίου από μια ουδέτερη, κατά τα άλλα περιοχή. Η οπή, που συμβολίζεται ως h^+ , επίσης μετακινείται ελεύθερα στον κρύσταλλο λόγω του ότι ένα ηλεκτρόνιο γειτονικού δεσμού, μπορεί να καλύψει τη θέση της, δημιουργώντας έτσι μια καινούργια ελεύθερη θέση. Αυτό ισοδυναμεί με κίνηση της οπής προς την αντίθετη κατεύθυνση από αυτή του ηλεκτρονίου. Έτσι και τα ηλεκτρόνια και οι οπές με φορτία $-e$ και $+e$ αντίστοιχα, συμμετέχουν στην αγωγιμότητα του ημιαγωγού. Αν και στο συγκεκριμένο παράδειγμα, φωτόνιο ενέργειας $h\nu > E_g$ δημιουργεί ένα ζεύγος ηλεκτρονίου – οπής, υπάρχουν και άλλες πηγές ενέργειας, που επίσης δημιουργούν τέτοια ζεύγη.

Όταν ένα ηλεκτρόνιο μετακινηθεί από τη ζώνη αγωγιμότητας στη ζώνη σθένους, συναντά μια οπή την οποία και καλύπτει. Το φαινόμενο καλείται **επανασύνδεση** και έχει ως αποτέλεσμα την εξαφάνιση του ζεύγους ηλεκτρονίου – οπής. Σε μερικούς η-



Σχήμα 6.5 (α) Ένα φωτόνιο με ενέργεια $h\nu > E_g$ διεγείρει ένα ηλεκτρόνιο από τη ΖΣ στη ΖΑ. (β) Κάθε γραμμή σ' ένα δεσμό μεταξύ ατόμων Si-Si, είναι ένα ηλεκτρόνιο σθένους. Όταν ένα φωτόνιο σπάσει το δεσμό, δημιουργείται ένα ζεύγος ηλεκτρονίου – οπής.

μιαγωγούς, όπως GaAs και InP, το πλεονάζον ποσό ενέργειας του ηλεκτρονίου, που πέφτει από τη ζώνη αγωγιμότητας στη ζώνη σθένους, εκπέμπεται ως φωτόνιο. Στους ημιαγωγούς Si και Ge διαφεύγει υπό τη μορφή θερμότητας.

6.6 Διάγραμμα (E – k) – Ημιαγωγοί άμεσου και έμμεσου χάσματος

Κατά τη κβαντομηχανική, η κίνηση ενός σωματιδίου εκφράζεται από μια σειρά επίπεδων κυμάτων της μορφής $e^{j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})}$, όπου \vec{k} είναι η διεύθυνση κατά την οποία κινείται το σωματίδιο και καλείται κυματικό άνυσμα. Η συχνότητα ω συνδέεται με την ενέργεια E με τη σχέση $E = \hbar\omega$, όπου $\hbar = h/2\pi$ και επειδή $\omega = 2\pi\nu$, έχουμε τελικά $E = h\nu$. Η ορμή p συνδέεται με το κυματικό άνυσμα με τη σχέση $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

Στην περίπτωση ενός κλασσικού σωματιδίου μάζας m, που κινείται σε ελεύθερο χώρο, η ενέργεια συνδέεται με την ορμή με τη σχέση:

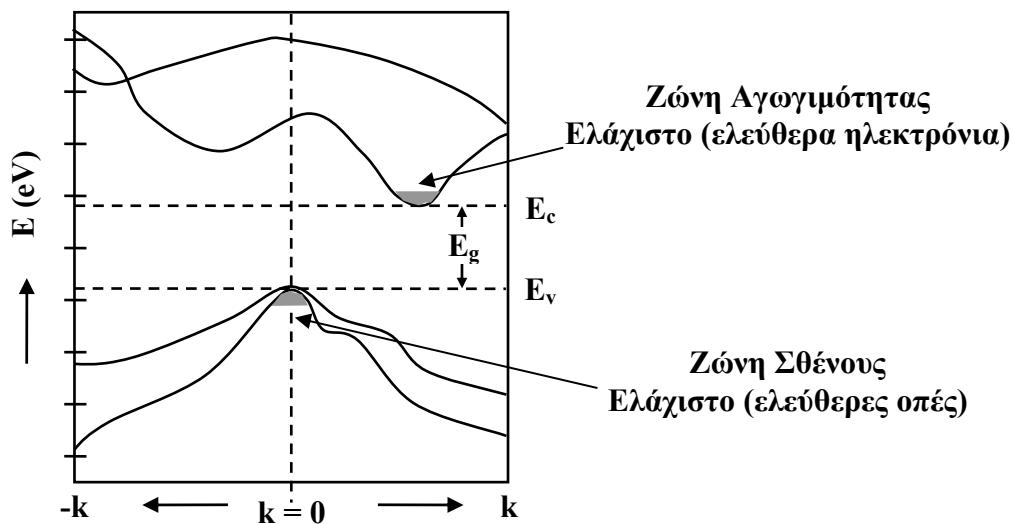
$$E = p^2/2m \quad (6.2)$$

ή αν χρησιμοποιήσουμε τη σχέση μεταξύ ορμής και κυματικού ανύσματος η σχέση (6.2) γίνεται:

$$E = (\hbar k)^2 / 2m \quad (6.3)$$

Στην περίπτωση των ημιαγωγών θεωρούμε τη σχέση ενέργειας/ορμής σε ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο (ή οπή) κινούμενο εντός του ημιαγωγού και όχι σε ελεύθερο χώρο.

Η απεικόνιση της συνάρτησης (6.3) είναι μια παραβολή. Στους ημιαγωγούς η εξάρτηση από το κυματικό άνυσμα είναι αρκετά περίπλοκη λόγω της αλληλεπίδρασης των



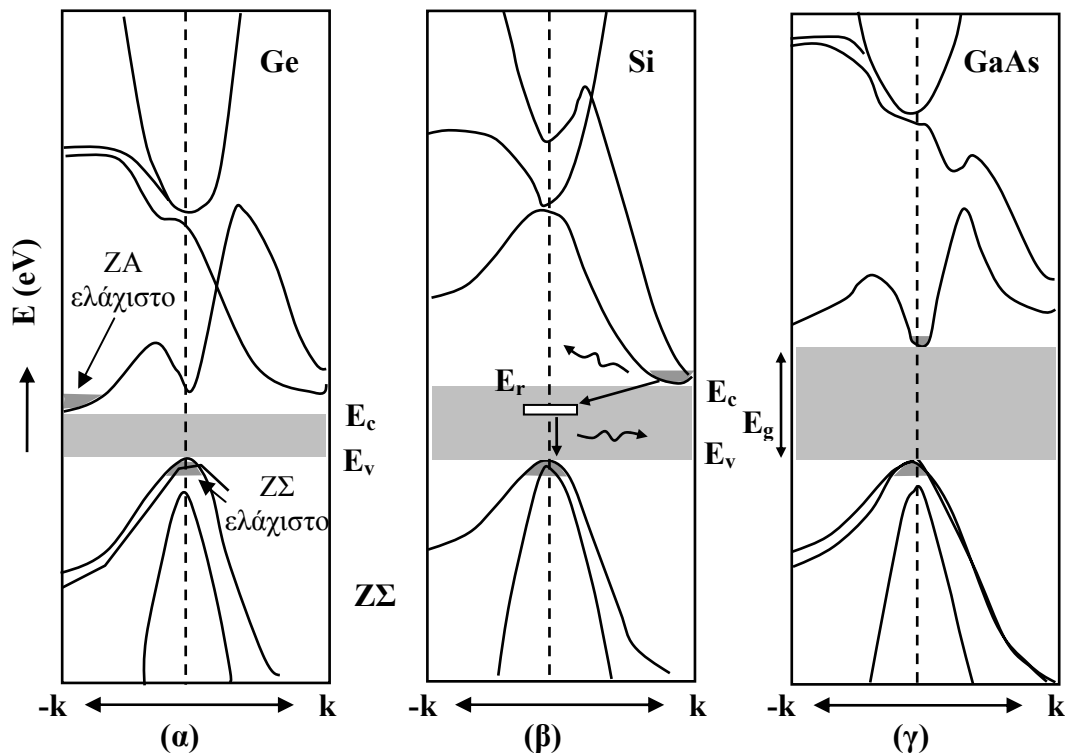
Σχήμα 6.6 Γενικό διάγραμμα $E - k$

ελεύθερων ηλεκτρονίων με το κρυσταλλικό δυναμικό, έτσι ώστε η σχέση (6.3) να ισχύει για μικρές τιμές του k . Στη γενική περίπτωση, η εξάρτηση της ενέργειας από κυματικό διάνυσμα σχετίζεται με τη διεύθυνση διάδοσης και παρουσιάζει δυο ελάχιστα. Ένα κεντρικό στη θέση $k = 0$ και ένα δευτερεύον, κοντά στο κεντρικό, επίσης παραβολικό.

Στο Σχήμα 6.6 παρουσιάζεται ένα απλό παράδειγμα της ζώνης σθένους και της ζώνης αγωγιμότητας στο επίπεδο ενέργειας - ορμής (διάγραμμα $E - k$). Παρατηρούμε ότι η ζώνη αγωγιμότητας παρουσιάζει μια ελάχιστη τιμή ενέργειας E_c και κάτω από συνθήκες ισορροπίας, τα ηλεκτρόνια βρίσκονται σ' αυτή την ελάχιστη ενεργειακή κατάσταση. Η σχέση $E - k$ για τη ζώνη σθένους, αντιστοιχεί στη σχέση ενέργειας - ορμής για τις οπές. Σ' αυτή την περίπτωση οι τιμές της ενέργειας αυξάνουν καθώς απομακρυνόμαστε από την κορυφή της ζώνης, με το ελάχιστο ενεργειακό επίπεδο E_v να υφίσταται στο μέγιστο σημείο της.

Μια βασική παράμετρος σε ένα ενεργειακό διάγραμμα, είναι αν ο πυθμένας της ζώνης αγωγιμότητας και η κορυφή της ζώνης σθένους εμφανίζονται στην ίδια τιμή του κυματικού ανύσματος k . Αν συμβαίνει αυτό, το ενεργειακό χάσμα είναι άμεσο και ο ημιαγωγός καλείται **ημιαγωγός άμεσου χάσματος**. Αν δεν εμφανίζονται στην ίδια τιμή, τότε το ενεργειακό χάσμα είναι έμμεσο και ο ημιαγωγός καλείται **ημιαγωγός έμμεσου χάσματος**. Στο Σχήμα 6.7 φαίνονται λεπτομερώς τα ενεργειακά διαγράμματα του Ge, Si και GaAs. Παρατηρούμε ότι οι κρύσταλλοι Ge και Si παρουσιάζουν ελάχιστο της ζώνης σθένους σε διαφορετική τιμή του k , απ' αυτήν που παρουσιάζει

ελάχιστο η ζώνη αγωγιμότητας και επομένως είναι ημιαγωγοί έμμεσου χάσματος. Ένα ηλεκτρόνιο, επομένως, που βρίσκεται στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας δεν



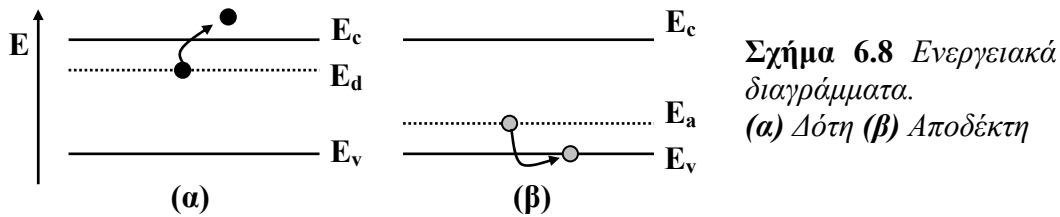
Σχήμα 6.7 Ζώνες αγωγιμότητας και σθένους για Ge, Si και GaAs.

μπορεί να επανασυνδεθεί άμεσα με μια οπή στην κορυφή της ζώνης σθένους, γιατί θα πρέπει να μεταβάλλει την ορμή του (δηλαδή το k), πράγμα που δεν ευνοείται από το νόμο διατήρησης της ορμής. Έτσι στους ημιαγωγούς Ge και Si δεν παρατηρούνται άμεσες επανασυνδέσεις ηλεκτρονίου – οπής. Η διαδικασία επανασυνδέσεων σ' αυτούς τους ημιαγωγούς πραγματοποιείται μέσω ενός **κέντρου επανασύνδεσης**, σε μια ενεργειακή στάθμη E_r εντός της ζώνης απογύμνωσης, όπως φαίνεται για παράδειγμα στο **Σχήμα 6.7β**. Αυτά τα κέντρα επανασύνδεσης μπορεί να δημιουργηθούν από πλεγματικές ατέλειες Σε πρώτη φάση το ηλεκτρόνιο χάνει ένα μέρος της ενέργειάς του και δεσμεύεται από το κέντρο επανασύνδεσης, με ταυτόχρονη μεταβολή της ορμής του και σε δεύτερη φάση μεταπίπτει στη ζώνη σθένους και επανασυνδέεται με μια οπή. Οι μεταβολή της ενέργειας και της ορμής του κατά τη διαδικασία δέσμευσης από το κέντρο επανασύνδεσης, μεταβιβάζεται σε πλεγματικές ταλαντώσεις. Επομένως στους ημιαγωγούς έμμεσου ενεργειακού χάσματος η πιθανότητα εκπομπής φωτονίων (**ακτινοβολούσες επανασυνδέσεις**) είναι μικρή. Σε μερικούς όμως ημιαγωγούς έμμεσου χάσματος, όπως για παράδειγμα GaP, η επανασύνδεση ηλεκτρονίου – οπής έχει ως αποτέλεσμα την εκπομπή φωτονίου.

Στο ενεργειακό διάγραμμα του GaAs, τα δυο ελάχιστα παρουσιάζονται στην ίδια τιμή του k και επομένως το GaAs είναι ημιαγωγός άμεσου χάσματος, όπου τα ζεύγη ηλεκτρονίου – οπής μπορούν να επανασυνδεθούν άμεσα και να εκπέμψουν ένα φωτόνιο. Η πλειοψηφία των διατάξεων φωτοεκπομπής (LEDs, δίοδοι Laser) χρησιμοποιούν ημιαγωγούς άμεσου ενεργειακού χάσματος.

6.7 Ημιαγωγοί προσμίξεων

Αν εισάγουμε ξένα άτομα σε ένα καθαρό κατά τα άλλα κρύσταλλο (**ενδογενές υλικό**), είναι δυνατό να δημιουργήσουμε ένα ημιαγωγό, που η συγκέντρωση φορέων μιας πολικότητας να είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτή του άλλου τύπου. Αυτοί οι ημιαγωγοί καλούνται **ημιαγωγοί πρόσμιξης**. Η δημιουργία ελεύθερων φορέων, απαιτεί όχι μόνο την παρουσία προσμίξεων, αλλά και την ικανότητά τους να προσθέσουν ηλεκτρόνια στη ζώνη αγωγιμότητας. Σ' αυτή την περίπτωση καλούνται **δότες**. Αν προσθέσουν οπές στη ζώνη σθένους, καλούνται **αποδέκτες** (δέχονται ένα ηλεκτρόνιο από τη ζώνη σθένους, δημιουργώντας έτσι μια οπή). Στο **Σχήμα 6.8** φαίνονται τα τυπικά ενεργειακά διαγράμματα ενός δότη και ενός αποδέκτη, όπου E_d και E_a οι αντίστοιχες ενέργειές τους. Το ενεργειακό επίπεδο του δότη, πριν τον ιονισμό, είναι συ-



μπληρωμένο.

Κατά τον ιονισμό, ο δότης δίνει ένα ηλεκτρόνιο στη ζώνη αγωγιμότητας ενώ ο αποδέκτης δίνει μια οπή στη ζώνη σθένους. Βαριές προσμίξεις, που η ενεργειακή στάθμη τους απέχει πολύ από τις δυο ζώνες μπορούν να αποτελέσουν κέντρα επανασύνδεσης. Τέτοιες προσμίξεις καλούνται και **παγίδες**. Ένας ημιαγωγός με προσμίξεις δοτών καλείται **n-τύπου**, ενώ με προσμίξεις αποδεκτών καλείται **p-τύπου**. Σ' ένα ημιαγωγό **n-τύπου** ($n > p$), τα ηλεκτρόνια είναι **φορείς πλειοψηφίας** και οι οπές **φορείς μειοψηφίας**. Στην περίπτωση **p-τύπου** ημιαγωγού ($p > n$), οι οπές είναι φορείς πλειοψηφίας και τα ηλεκτρόνια φορείς μειοψηφίας.

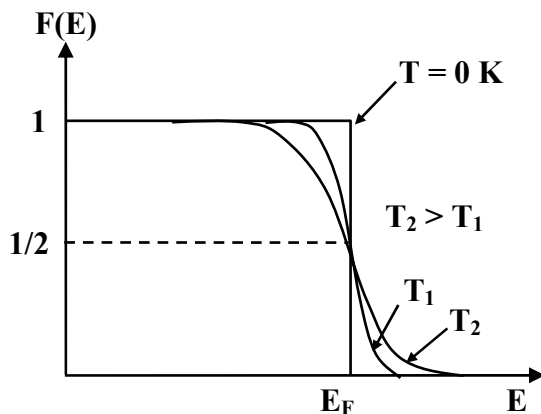
6.8 Στατιστική ημιαγωγών

Η συγκέντρωση των ελεύθερων ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας εξαρτάται από δυο παράγοντες. Ο ένας είναι η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων $D(E)$ όπου μπορεί να υπάρξουν ηλεκτρόνια και ο άλλος είναι η συνάρτηση κατανομής ενέργειας $F(E, T)$ των ελεύθερων ηλεκτρονίων. Η συνάρτηση κατανομής ενέργειας δίνεται από τη συνάρτηση κατανομής **Fermi-Dirac** και εκφράζει την πιθανότητα του να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο σε μια κβαντική κατάσταση ενέργειας E , όταν το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας.

$$F(E) = \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (6.4)$$

όπου k_B η σταθερά Boltzmann, T η θερμοκρασία σε (K) και E_F μια ενεργειακή παράμετρος που καλείται **ενέργεια Fermi** ή απλώς **στάθμη Fermi**

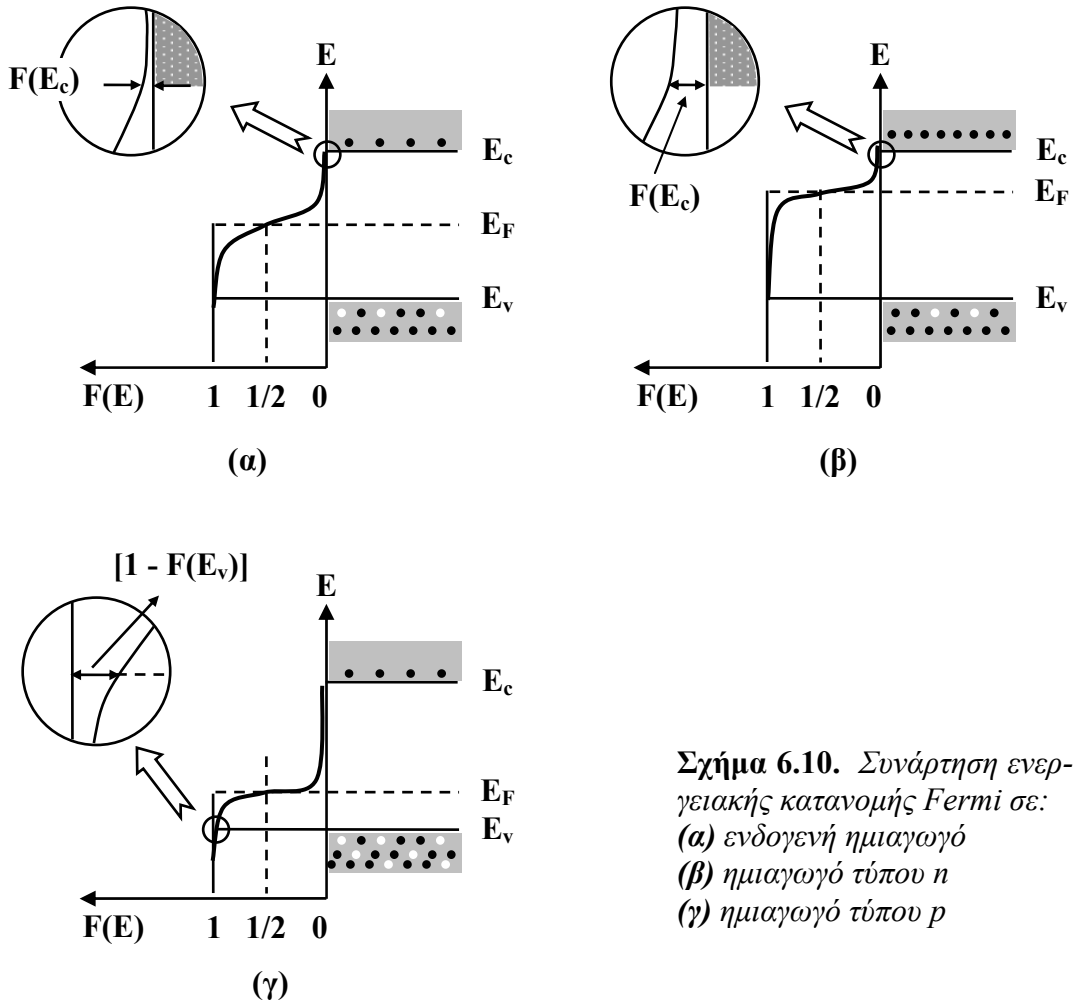
Η σχέση (6.4) στις περισσότερες πρακτικές περιπτώσεις μπορεί να προσεγγιστεί με τη συνάρτηση κατανομής Maxwell-Boltzmann.



Σχήμα 6.9 Συνάρτηση κατανομής Fermi – Dirac και στάθμη Fermi ως συνάρτηση της θερμοκρασίας.

Η στάθμη Fermi E_F είναι μια τιμή της ενέργειας στην οποία η πιθανότητα να καταληφθεί μια ενεργειακή κατάσταση είναι $1/2$. Πιο απλά, η στάθμη Fermi αποτελεί ένα δείκτη στο κατά πόσο υπάρχουν συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας και οπών στη ζώνη σθένους. Σε ένα μονωτή η στάθμη συναντάται στη ζώνη σθένους, ενώ σε έναν αγωγό ευρίσκεται στη ζώνη αγωγιμότητας. Στους ημιαγωγούς η ενέργεια Fermi ευρίσκεται μεταξύ της ζώνης σθένους και της ζώνης αγωγιμότητας και μπορεί να δρα είτε ως μονωτής, είτε ως αγωγός. Σε υλικό, που βρίσκεται υπό συνθήκες σκότους και σε θερμοδυναμική ισορροπία, $\Delta E_F = 0$ και η στάθμη Fermi είναι ομοιόμορφη κατά μήκος του.

Στο **Σχήμα 6.9** φαίνεται η συνάρτηση κατανομής Fermi με τη στάθμη Fermi, σε σχέση με τη θερμοκρασία. Σημειώστε ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας η κατανομή απλώνεται και είναι δυνατό να υπάρξουν συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων σε ενέργειες υψηλότερες της στάθμης Fermi και επομένως να βρεθούν από τη ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας. Αυτή η μεταπήδηση των ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας, έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία οπών στη ζώνη σθένους. Δηλαδή η αύξηση της θερμοκρασίας επιφέρει τη δημιουργία φωτοφορέων (**ενδογενείς φορείς**). Στις οπτοηλεκτρονικές διατάξεις, το φαινόμενο αυτό εμποδίζει την ομαλή λειτουργία τους σε υψηλές θερμοκρασίες, δεδομένου ότι δεν μπορεί να ελεγχθεί αποτελεσματικά η συμπεριφορά τους από ηλεκτρικά πεδία. Στο **Σχήμα 6.10** παρουσιάζονται τρία παραδείγματα της συμπεριφοράς ημιαγωγών υλικών, κατά τη μεταβολή της στάθμης Fermi εντός της ζώνης απογύμνωσης. Παρατηρείστε ότι όταν η στάθμη πλησιάζει τη ζώνη αγωγιμότητας, αυξάνει η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων σ' αυτή τη ζώνη, ενώ αυξάνει η συγκέντρωση των οπών όταν η στάθμη πλησιάζει τη ζώνη σθένους. Σημειώστε ότι η πιθανότητα να βρεθεί μια οπή σε μια ενεργειακή κατάσταση E , είναι $1 - F(E)$.



Σχήμα 6.10. Συνάρτηση ενεργειακής κατανομής Fermi σε:
 (α) ενδογενή ημιαγωγό
 (β) ημιαγωγό τύπου n
 (γ) ημιαγωγό τύπου p

Από την άλλη πλευρά η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων $D(E)$ εξαρτάται από το υλικό του ημιαγωγού. Προσεγγιστικά ισχύει:

$$D_n(E) = M_c \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(E - E_c)^{1/2}}{\hbar^3} (m_c^*)^{3/2} \quad \text{για τα ηλεκτρόνια} \quad (6.5)$$

και

$$D_p(E) = M_v \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(E_v - E)^{1/2}}{\hbar^3} (m_h^*)^{3/2} \quad \text{για τις οπές} \quad (6.6)$$

όπου M_c , M_v το πλήθος των ισοδύναμων ελάχιστων στις ζώνες αγωγιμότητας και σθένους αντίστοιχα και m_e^* , m_h^* η ενεργός μάζα των ηλεκτρονίων και των οπών σε Kg.

Αν n είναι η συγκέντρωση των ελεύθερων ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας, τότε:

$$n = \int_{E=E_c}^{\infty} F(E, T) D(E) dE \quad (6.7)$$

και στην περίπτωση που η στάθμη Fermi βρίσκεται σημαντικά πιο κάτω από την στάθμη E_c , δηλαδή η ενεργειακή διαφορά της στάθμης E_F από την ενέργεια E_c στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας είναι μεγάλη (περίπτωση στατιστικής κατανομής Maxwell-Boltzmann), τότε:

$$n = N_c \exp \left[-\frac{(E_c - E_F)}{k_B T} \right] \quad (6.8)$$

Όταν το σύστημα βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία, η στατιστική των οπών περιγράφεται από την ίδια στάθμη Fermi (θεωρούμε ότι βρίσκεται αρκετά πάνω από την ενέργεια E_v) και η συγκέντρωση (των οπών) p στη ζώνη σθένους προσδιορίζεται με παρόμοια ανάλυση με αυτή για τα ηλεκτρόνια και είναι:

$$p = N_v \exp \left[-\frac{(E_F - E_v)}{k_B T} \right] \quad (6.9)$$

όπου N_c , N_v είναι η πυκνότητα καταστάσεων (δηλαδή το πλήθος των ενεργειακών τιμών που μπορούν να κατέχουν τα ηλεκτρόνια ή οι οπές ανά μονάδα όγκου) στη ζώνη αγωγιμότητας και ζώνη σθένους αντίστοιχα.

Προσεγγιστικά ισχύει:

$$N_c = 2(2\pi m_e^* k_B T/h^2)^{3/2} M_c \quad (6.10)$$

και

$$N_v = 2(2\pi m_h^* k_B T/h^2)^{3/2} M_v \quad (6.11)$$

Οι πυκνότητες καταστάσεων είναι βασικές παράμετροι για τον προσδιορισμό των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών των ημιαγωγών. Οι σχέσεις (6.10) και (6.11) ισχύουν τόσο για τους ενδογενείς ημιαγωγούς, όσο και για τους ημιαγωγούς πρόσμιξης. Το γινόμενο np είναι ανεξάρτητο από τη στάθμη Fermi και δίνεται από τη σχέση:

$$np = N_c N_v e^{-E_g/k_B T} \quad (6.12)$$

όπου E_g το ενεργειακό χάσμα, δηλαδή $E_g = E_c - E_v$

Στην περίπτωση ενδογενούς ημιαγωγού $n = p \equiv n_i$ και επομένως:

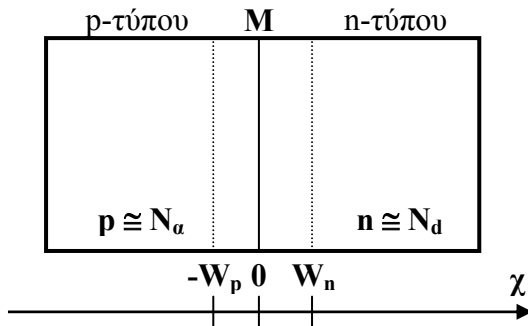
$$n_i^2 = N_c N_v e^{-E_g/k_B T} \quad (6.13)$$

όπου n_i η ενδογενής συγκέντρωση φορέων

6.9 Επαφή p-n

6.9.1 Δομή

Μια ημιαγωγός επαφή ή επαφή p-n, αποτελείται από δυο περιοχές ενός ημιαγωγού με αντίθετες προσμίξεις όπως φαίνεται στο **Σχήμα 6.11**. Η περιοχή αριστερά είναι p-τύπου με συγκεντρώσεις αποδεκτών N_a και η περιοχή δεξιά είναι n-τύπου με συγκεντρώσεις δοτών N_d . Θεωρούμε ότι οι προσμίξεις είναι ελαφρές, έτσι ώστε οι πυκνότητες των ηλεκτρονίων/οπών στην περιοχή n-τύπου/p-τύπου είναι περίπου ίση με την πυκνότητα των δοτών/αποδεκτών.

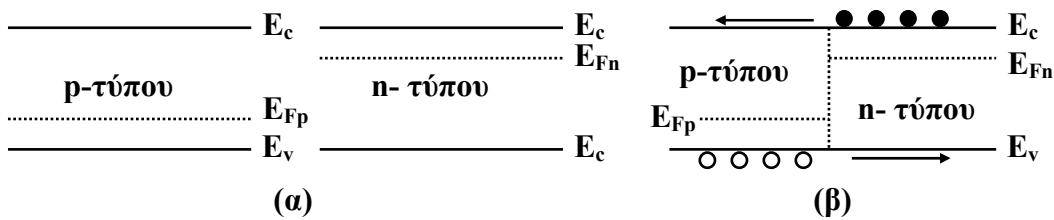


Σχήμα 6.11 Τομή μιας επαφής p-n.

Πολύ συχνά θα συναντήσουμε περιπτώσεις, όπου η μια περιοχή της επαφής παρουσιάζει βαριά πρόσμιξη. Σε μια τέτοια περίπτωση, μόνο η περιοχή ελαφράς πρόσμιξης παρουσιάζει ενδιαφέρον γιατί κυρίως αυτή προσδιορίζει τα χαρακτηριστικά της διάταξης. Στο παράδειγμα πάντως, υποθέτουμε η κατανομή των προσμίξεων στις δυο περιοχές είναι ομοιόμορφη

6.9.2 Επίπεδο ενεργειακό διάγραμμα

Φανταστείτε ότι φέρνουμε σε επαφή τις δυο περιοχές του ημιαγωγού και ευθυγραμμίζουμε τις ενεργειακές τους ζώνες. Αυτό θα μας δώσει ένα ενεργειακό διάγραμμα, γνωστό ως **επίπεδο ενεργειακό διάγραμμα** (**Σχήμα 6.12**).



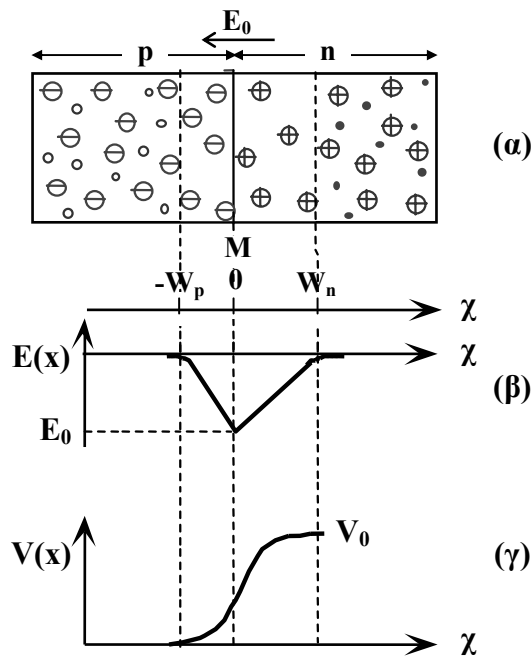
Σχήμα 6.12 Ενεργειακό διάγραμμα επαφής p-n. (α) πριν και (β) μετά την ένωση των περιοχών n-τύπου και p-τύπου.

Σημειώστε ότι οι ενέργειες Fermi E_{Fp} και E_{Fn} δεν ευθυγραμμίζονται αυτόματα και ότι το διάγραμμα δεν είναι ισορροπημένο αφού και τα ηλεκτρόνια και οι οπές μπορούν να χάσουν ενέργεια, περνώντας την επαφή. Θα πρέπει, επομένως να προηγηθεί μετακίνηση των φορέων πριν φτάσουμε σε θερμική ισορροπία. Υποδηλώνει επίσης την απουσία ηλεκτρικού πεδίου.

6.9.3 Ανοιχτό κύκλωμα

Στην περίπτωση ανοιχτού κυκλώματος, δηλαδή χωρίς εξωτερική πόλωση, οι οπές διαχέονται από την περιοχή p προς την περιοχή n και επανασυνδέονται με τα ηλεκτρόνια, που είναι φορείς πλειοψηφίας. Η περιοχή n, κοντά στην επαφή απογυμνώνεται έτσι από φορείς πλειοψηφίας και δημιουργείται πλεόνασμα θετικού φορτίου (θετικά ιόντα δότη). Ομοίως, τα ηλεκτρόνια διαχέονται από την περιοχή n προς την περιοχή p και επανασυνδέονται με τις οπές, που είναι φορείς πλειοψηφίας. Η περιοχή p κοντά στην επαφή απογυμνώνεται από φορείς πλειοψηφίας και δημιουργείται πλεόνασμα αρνητικού φορτίου (αρνητικά ιόντα αποδέκτη). Δημιουργείται επομένως, εκατέρωθεν της επαφής, μια περιοχή απογυμνωμένη από ελεύθερους φορείς, με εύρος $W_0 = W_p + W_n$ που καλείται **ζώνη αποκοπής**.

Εξ αιτίας του διαχωρισμού των φορέων, αναπτύσσεται στη ζώνη ένα εσωτερικό ηλεκτρικό πεδίο E_0 , που τείνει να σαρώσει τις οπές/ηλεκτρόνια προς κατευθύνσεις αντίθετες από τις κατευθύνσεις διάχυσής τους. Είναι φανερό ότι όσο περισσότερες οπές/ηλεκτρόνια διαχέονται, το εσωτερικό πεδίο E_0 θα αυξάνει μέχρι να ισορροπήσει το σύστημα. Μέχρι δηλαδή οι οπές/ηλεκτρόνια, που διαχέονται να ισορροπήσουν με τις οπές/ηλεκτρόνια, που σαρώνονται από το πεδίο (**Σχήμα 6.13α**).



Σχήμα 6.13 Χαρακτηριστικές ιδιότητες επαφής p-n

Η μεταβολή του ηλεκτρικού πεδίου, κατά μήκος της επαφής p-n, φαίνεται στο **Σχήμα 6.13β**. Σημειώστε ότι το $E(x)$ φτάνει τη μέγιστη τιμή του E_0 στο M. Αν θεωρήσουμε ότι το δυναμικό $V(x)$ στην περιοχή p είναι μηδέν, τότε βλέπουμε ότι στη ζώνη αποκοπής αυξάνει για να φτάσει μια μέγιστη τιμή V_0 στην περιοχή n. Το V_0 καλείται και **ενσωματωμένο δυναμικό**.

Αποδεικνύεται ότι:

$$V_0 = \frac{kT}{e} \ln \frac{N_a N_d}{n_i^2} \quad (6.14)$$

όπου:

$k =$ σταθερά Boltzmann $1.3807 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

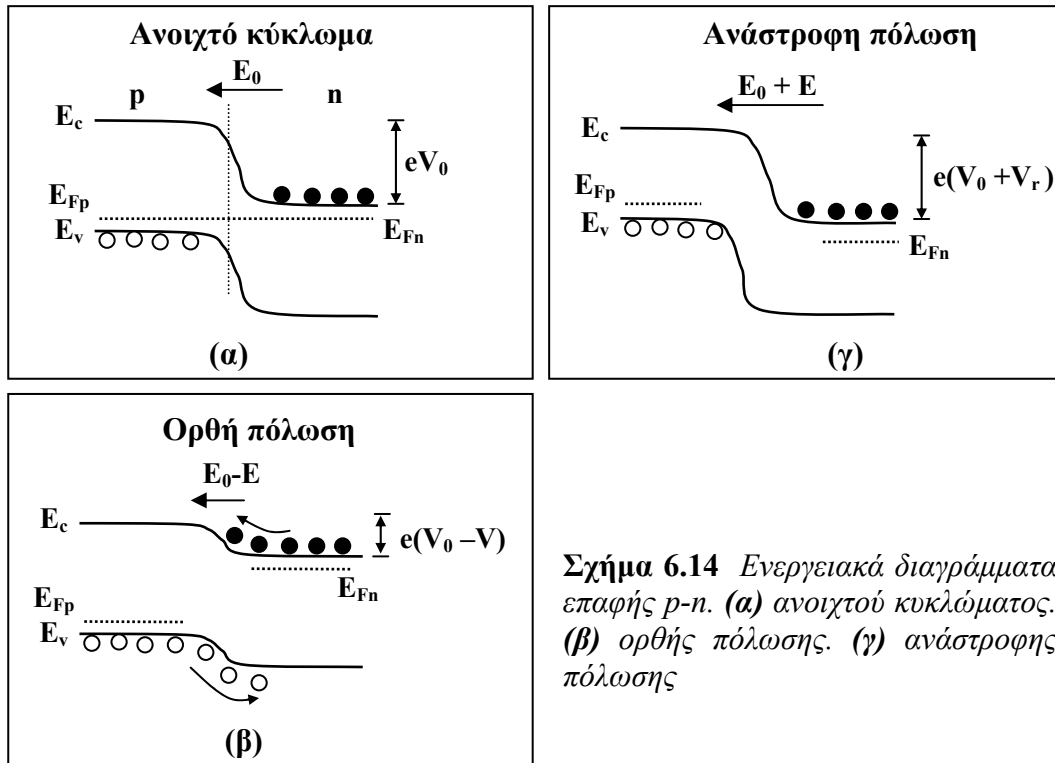
$T =$ απόλυτη θερμοκρασία σε K

$$n_i^2 = np$$

6.9.4 Ορθή και ανάστροφη πόλωση

Αν στα άκρα της επαφής p-n, εφαρμόσουμε τάση V (ορθής φοράς), τότε κατά μήκος της ζώνης αποκοπής δημιουργείται πτώση τάσης και το ενσωματωμένο δυναμικό θα μειωθεί κατά $V_0 - V$ με συνέπεια τη μείωση του πεδίου. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση του εύρους της ζώνης αποκοπής, πράγμα που σημαίνει ότι ο αριθμός των φορέων που διαχέονται αυξάνει. Το αντίθετο συμβαίνει κατά την ανάστροφη πόλωση, όπου το δυναμικό αυξάνει κατά $V_0 + V$.

6.9.5 Ενεργειακά διαγράμματα



Σχήμα 6.14 Ενεργειακά διαγράμματα επαφής p-n. (α) ανοιχτού κυκλώματος. (β) ορθής πόλωσης. (γ) ανάστροφης πόλωσης

6.9.6 Ανοιχτό κύκλωμα

Στο **Σχήμα 6.14α** φαίνεται το ενεργειακό διάγραμμα μιας επαφής p-n υπό συνθήκες ανοιχτού κυκλώματος. Αν E_{Fn} και E_{Fp} είναι οι στάθμες Fermi στις περιοχές p και n αντίστοιχα, τότε σε κατάσταση ισορροπίας η στάθμη Fermi πρέπει να είναι ομοιόμορφη κατά μήκος των δυο περιοχών. Στην περιοχή n, μακριά από την επαφή M, οι στάθμες $E_c - E_{Fn}$ είναι ίδιες όπως θα ήταν στην περίπτωση, που το n - τύπου υλικό θα ήταν απομονωμένο. Οι ίδιες συνθήκες ισχύουν και στην περιοχή p, δηλαδή $E_{Fp} - E_v$ είναι ίδιες. Είναι φανερό ότι για να έχουμε, τις στάθμες $E_{Fn} - E_{Fp}$ και $E_c - E_v$ ίδιες, κατά μήκος του συστήματος, θα πρέπει να κάμψουμε τις $E_c - E_v$ κοντά στην επαφή M.

Τη στιγμή, που οι δυο ημιαγωγοί ενώνονται για να σχηματίσουν την επαφή, τα ηλεκτρόνια διαχέονται από την περιοχή n προς την περιοχή p , απογυμνώνοντας την n κοντά στην επαφή. Έτσι, όσο πλησιάζουμε προς το M η E_c θα πρέπει να απομακρύνεται από την E_{Fn} , πράγμα που φαίνεται καθαρά στο σχήμα. Αντίστοιχα, στην περιοχή p η E_v απομακρύνεται από την E_{Fp} .

Η ηλεκτροστατική δυναμική ενέργεια (ΗΔΕ) των ηλεκτρονίων, μεταβάλλεται από μηδέν (στην περιοχή p) σε $-eV_0$ (στην περιοχή n), δηλαδή η συνολική του ενέργεια ελαττώνεται κατά eV_0 . Με άλλα λόγια, τα ηλεκτρόνια της περιοχής n στην E_c θα πρέπει να ξεπεράσουν ένα **φράγμα δυναμικού** eV_0 για να μετακινηθούν προς την E_c της περιοχής p . Το ίδιο φράγμα δυναμικού εμποδίζει και τη διάχυση των οπών από την p στη n περιοχή.

6.9.7 Ορθή και ανάστροφη πόλωση

Όταν η επαφή p - n πολωθεί ορθά με μια τάση V , δημιουργείται μια πτώση τάσης κατά μήκος της περιοχής απογύμνωσης, ελαττώνοντας το φράγμα δυναμικού από eV_0 σε $e(V_0 - V)$, έτσι που τα ηλεκτρόνια της πλευράς n να μπορούν να ξεπεράσουν το φράγμα και να διαχυθούν προς την πλευρά p (**Σχήμα 6.14β**). Σε αντικατάσταση των ηλεκτρονίων που διαχέονται προς την περιοχή p , η περιοχή n τροφοδοτείται με ηλεκτρόνια από τον αρνητικό πόλο της πηγής. Κατά τον ίδιο τρόπο, οι οπές μπορούν να διαχυθούν από την p στην n περιοχή, που διατηρεί τα φορτία της από το θετικό πόλο της πηγής. Αυτή η διαδικασία διάχυσης – αντικατάστασης φορέων, δημιουργεί ροή ρεύματος στο κύκλωμα ημιαγωγού – εξωτερικής πόλωσης.

Στην περίπτωση ανάστροφης πόλωσης, $V = V_r$, της επαφής p - n η περιοχή απογύμνωσης δέχεται μια πτώση τάσης, που προστίθεται στο ενσωματωμένο δυναμικό V_0 με αποτέλεσμα την αύξηση του φράγματος δυναμικού σε $e(V_0 + V_r)$, όπως φαίνεται στο **Σχήμα 6.14γ**. Σ' αυτή την περίπτωση, στο κύκλωμα ρέει ένα μικρό ανάστροφο ρεύμα λόγω θερμικών διεργασιών.