

Лабораторная работа № 40

Определение ширины запрещённой зоны полупроводника

Цель работы: определить ширину запрещённой зоны полупроводника по температурной зависимости электропроводности. Сравнить результат измерений с табличным значением.

Теория

Энергетическое распределение электронов. При абсолютном нуле температуры ионной решётки свободные электроны попарно заполняют в зоне проводимости все уровни энергии от низшего до некоторого максимального. Теперь рассмотрим энергетическое распределение в электронном газе при произвольной температуре.

Найдём количество электронов $dN(E)$, имеющих энергию в интервале $E, E + dE$. Для этого необходимо количество возможных состояний $dG(E)$ в интервале dE умножить на вероятность заполнения состояния $f(E)$, называемую *функцией распределения*,

$$dN(E) = \text{вероятность} \times \text{число состояний} = f(E) \cdot dG(E) \quad (1)$$

Число состояний свободных электронов в интервале dE . В классической механике состояние материальной точки полностью определяется заданием координаты и скорости (или импульса). В шестимерном *фазовом пространстве* с координатами $\{\vec{r}, \vec{p}\} \equiv \{x, y, z, p_x, p_y, p_z\}$ этому состоянию соответствует точка. Плотность расположения точек и их общее количество бесконечны.

В квантовой механике координата и соответствующая компонента импульса связаны соотношением неопределённостей

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq h, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq h,$$

где $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с - постоянная Планка. Следовательно, одному состоянию микрочастицы соответствует "кубик" с минимальным "объёмом" в фазовом пространстве

$$\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z \geq h^3.$$

Точнее задать состояние микрочастицы невозможно.

Электроны могут свободно перемещаться в кристалле, неопределённость пространственных координат электрона равна размерам кристалла. Поэтому пространственный объём, который занимает электрон, равен объёму кристалла: $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z = V$. Тогда минимальный объём одного состояния в пространстве импульсов

$$\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z = h^3/V$$

Энергия свободной нерелятивистской частицы связана с величиной импульса¹ $E = p^2/2m$. Найдём число состояний с модулем импульса в интервале $p, p + dp$. В пространстве импульсов таким состояниям соответствует слой между сферами радиусом p и $p + dp$ (рис. 1). Объём этого сферического слоя равен $4\pi p^2 dp$.

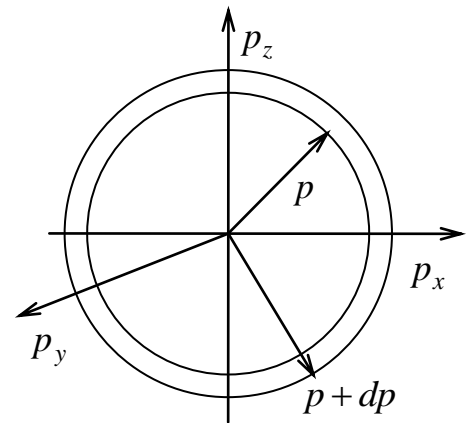


Рис. 1

$$p^2 = 2mE, \quad dp = \sqrt{2m} \frac{1}{2} \frac{dE}{\sqrt{E}}$$

Тогда

$$4\pi p^2 dp = 4\pi \cdot 2mE \cdot \sqrt{2m} \frac{1}{2} \frac{dE}{\sqrt{E}} = 2\pi(2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE$$

Таким образом, число состояний в интервале энергий $E, E + dE$ равно

$$\frac{4\pi p^2 dp}{h^3} V = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE.$$

¹ Такая связь подразумевает, что начало отсчёта энергии находится на уровне дна зоны проводимости, тогда как в предыдущем разделе "Элементы квантовой теории твёрдого тела" начало соответствовало нулю потенциальной энергии взаимодействия зарядов. Ничего страшного: функция распределения, как показано ниже, зависит от *разности* энергий, т.е. не зависит от положения начала отсчёта.

Каждому энергетическому состоянию соответствуют два состояния электронов с противоположными направлениями спинов. Поэтому окончательно полное число состояний электронов в интервале $E, E + dE$ равно

$$dG(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE \quad (2)$$

Контрольные вопросы

1. Что такое фазовое пространство?
2. Как описывается в фазовом пространстве состояние классической частицы и квантовой микрочастицы?

Функция распределения Ферми-Дирака. Микрочастицы со спином $h/2$ или $1/2$ в единицах h , в том числе электроны, подчиняются принципу Паули (см. "Теория ..."). Такие частицы называются *фермионами*. Если электронный газ взаимодействует с термостатом, имеющим температуру T , например, с кристаллической решёткой, то вероятность электрону занять состояние с энергией E описывается функцией распределения Ферми-Дирака

$$f_F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \quad (3)$$

Здесь $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана, E_F – *химический потенциал*, который в физике твёрдого тела называют *энергией Ферми* или *уровнем Ферми*. Эта важная характеристика распределения нам потребуется в лаб. раб. № 44. Энергию Ферми определяют из полного числа частиц в системе по (1)

$$\int dN(E) = N = \int f_F(E) \cdot dG(E) \quad (4)$$

Энергия Ферми зависит от структуры уровней и, вообще говоря, от температуры. В собственных полупроводниках при $T \approx 0 \div 300$ К уровень

Ферми совпадает с серединой запрещённой зоны (см. "Элементы теории ...", рис. 8б), в примесных полупроводниках – с серединой запрещённой зоны примеси ("Элементы теории ...", рис. 10б,г и рис. 11б,г).

Рассмотрим функцию Ферми-Дирака для газа свободных электронов зоны проводимости. При $T \rightarrow 0$ и при $E > E_F$ получаем $(E - E_F)/kT \rightarrow \infty$, т.е. $f_F(E) \rightarrow 0$. При $E < E_F$ показатель экспоненты $(E - E_F)/kT \rightarrow -\infty$, т.е. $f_F(E) \rightarrow 1$. Таким образом, при $T \rightarrow 0$ функция Ферми-Дирака описывает уже рассмотренный случай ("Элементы теории ...", рис. 7а), полученный нами из принципа Паули и требования минимальной энергии электронного газа при $T = 0$. На рис. 2 изображён график этой функции в виде ступеньки². Уровень Ферми электронного газа – это максимальная энергия электрона при $T = 0$.

График функции Ферми-Дирака при $T > 0$ - штриховая кривая на рис. 2. Возникает вопрос: как вероятность заполнения подуровня может быть дробной, меньше единицы? Ведь

подуровень либо занят, либо свободен, т.е. число заполнения подуровня либо единица, либо ноль. Объяснение: функция распределения описывает вероятность, усреднённую по

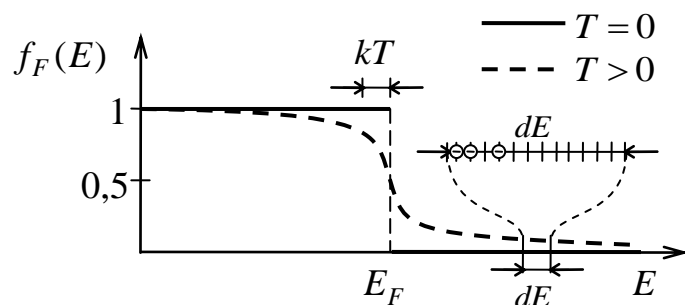


Рис. 2

бесконечно малому интервалу dE . Если присмотреться к этому интервалу с "увеличительным стеклом" (увеличенная выноска интервала dE), то видно, что в нём заполнена только часть подуровней, т.е. средняя вероятность заполнения меньше единицы. Вероятность заполнения подуровней с $E = E_F$ всегда равна 0,5.

При $T > 0$ электроны могут получать дополнительную энергию от тепловых колебаний решётки (*фононов*) и переходить на более высокие

² На всех предыдущих рисунках ось энергии была вертикальной.

подуровни, $E > E_F$. Вследствие этого число электронов с $E < E_F$ уменьшается, т.к. полное число электронов в зоне проводимости не меняется: тепловой энергии недостаточно, чтобы перебросить дополнительные электроны из нижележащей валентной зоны. При $T \approx 300 \text{ K}$ средняя тепловая энергия

$$kT \approx 1/40 \text{ эВ} \ll E_F \sim 1 \div 10 \text{ эВ}.$$

Поэтому полное число электронов, подвергшихся тепловому возбуждению, составляет малую часть от общего числа электронов в зоне проводимости: $\Delta N / N \sim 1 \div 2\%$.

Рассмотрим высокоэнергетический "хвост" функции распределения, $E > E_F$, точнее, $E \gg E_F$. Тогда

$$\frac{E}{e^{kT}} \gg 1$$

Поэтому единичным слагаемым в знаменателе (3) можно пренебречь. Тогда

$$f_F(E) \approx e^{-\frac{E-E_F}{kT}} = e^{-\frac{E_F}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} \quad (5)$$

т.е. при $E \gg E_F$ распределение Ферми-Дирака совпадает с распределением Максвелла-Больцмана. Этот важный результат мы используем в дальнейшем.

Контрольные вопросы

3. Какие частицы называются фермионами, каково их свойство?
4. Нарисуйте график функции Ферми-Дирака при $T = 0$.
5. Поясните, как график функции Ферми-Дирака при $T = 0$ согласуется с распределением электронов в зоне проводимости проводника.
6. Нарисуйте график функции Ферми-Дирака при $T > 0$.
7. С каким распределением совпадает распределение Ферми-Дирака при $T \gg 0$?

Температурная зависимость концентрации подвижных носителей в собственном полупроводнике. Определим концентрацию свободных электронов в зоне проводимости из (4):

$$n = \frac{N}{V} = \int f_F(E) \cdot dG(E) \quad (6)$$

Интегрировать нужно по всем подуровням зоны проводимости, от нуля, совпадающего с E_C (рис. 8б), и до верхнего уровня. Поскольку в собственном полупроводнике занята только малая часть подуровней этой зоны, верхний предел можно заменить на бесконечный. Кроме того, заменим точное распределение Ферми-Дирака его высокоэнергетическим приближением (5). Тогда (6)

$$n = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^2 e^{\frac{3}{2} \frac{E_F}{kT}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} \sqrt{E} dE \quad (7)$$

Этот интеграл пропорционален $T^{3/2}$ (без доказательства). Во-вторых, для собственного полупроводника энергия Ферми отрицательна относительно дна зоны проводимости: $E_F = -\Delta E_g / 2$ ("Элементы теории ...", рис. 8б).

Поэтому

$$n = CT^2 e^{\frac{3}{2} \frac{\Delta E_g}{2kT}} \quad (8)$$

где C - постоянная.

Оценим изменение сомножителей с температурой. В условиях лабораторной работы температура изменяется от 20 до 55 °С, $T_{\min} = 293 K$, $T_{\max} = 328 K$, $\delta T = (T_{\max} - T_{\min}) / T_{\min} \approx 0,12$. Следовательно, относительное изменение множителя $\delta(T^{3/2}) \approx 1,5 \cdot 0,12 = 0,18 = 18\%$. Относительное изменение экспоненты

$$\left| \delta \left(e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}} \right) \right| = \left| \frac{\Delta \left(e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}} \right)}{e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT_{\min}}}} \right| \approx \frac{e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT_{\min}}}}{e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT_{\min}}}} \frac{\Delta E_g}{2kT_{\min}^2} \Delta T = \frac{\Delta E_g}{2kT_{\min}} \frac{\Delta T}{T_{\min}} \quad (9)$$

Пусть $\Delta E_g/2 = 0,5$ эВ, $kT \approx 1/40$ эВ. Тогда экспоненциальный множитель меняется с температурой в $20 \cdot 0,12 = 2,4$ раза. Т.е. изменение экспоненциального множителя намного сильнее влияет на концентрацию свободных носителей. Поэтому изменением множителя $T^{3/2}$ можно пренебречь. Окончательно концентрация электронов в зоне проводимости

$$n(T) = C_1 e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}} \quad (10)$$

где C_1 - постоянная.

Температурная зависимость электропроводности и ширина запрещённой зоны собственного полупроводника. Из закона Ома для участка цепи $U = IR$, где U - напряжение на этом участке, I - ток, $R = \rho l / S$ - сопротивление этого участка, ρ - удельное сопротивление, l - длина участка, S - его поперечное сечение, получаем удельную электропроводность вещества

$$\sigma \equiv \frac{1}{\rho} = \frac{I l}{U S} \quad (\text{См} = \text{сименс}) \quad (11)$$

Напряжённость электрического поля $\mathcal{E} = U/l$ в приближении однородного поля в веществе, плотность тока $j = I/S$. Поэтому из (11) получаем локальный закон Ома $j = \sigma \mathcal{E}$. Плотность потока частиц со средней скоростью \bar{v} равна $n\bar{v}$ (1-й семестр, "Давление газа на стенку"), а плотность тока $j = qn\bar{v}$. Скорость дрейфа частиц в веществе под действием электрического поля пропорциональна напряжённости поля $\bar{v} = \mu \mathcal{E}$, где μ - подвижность.³ Подставляя все эти формулы в $j = \sigma \mathcal{E}$, получаем выражение электропроводности через концентрацию электронов проводимости

$$\sigma = qn\mu \quad (12)$$

³ Размерность подвижности выведите самостоятельно, исходя из определения.

В собственном полупроводнике подвижными носителями заряда являются не только электроны, но и дырки. Поэтому

$$\sigma = qn_i\mu_n + qp_i\mu_p = qn_i(\mu_n + \mu_p) \quad (13)$$

где μ_n , μ_p - подвижности электронов и дырок, которые зависят от $T^{3/2}$ и в рассмотренном выше приближении могут считаться постоянными.

Подставляя концентрацию (10) в (13), получаем температурную зависимость электропроводности

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}} \quad (14)$$

Логарифмируя (14), получаем линейную зависимость логарифма электропроводности от обратной температуры $1/T$

$$\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{\Delta E_g}{2k} \frac{1}{T} \quad (15)$$

В переменных $\ln \sigma$ и $1/T$ график этой зависимости имеет вид прямой (рис. 3), причём ширина запрещённой зоны пропорциональна угловому коэффициенту наклона этой прямой, определённому по координатам двух точек $(\ln \sigma_1, 1/T_1)$ и $(\ln \sigma_2, 1/T_2)$:

$$\Delta E_g = -2k \frac{\Delta(\ln \sigma)}{\Delta(1/T)} = -2k \frac{\ln \sigma_2 - \ln \sigma_1}{1/T_2 - 1/T_1} \quad (16)$$

Подставляя (11) в (16) и преобразуя разность логарифмов, получаем окончательное выражение ширины запрещённой зоны полупроводника через измеренные значения тока, напряжения и температуры

$$\boxed{\Delta E_g = -2k \frac{\ln \frac{I_2}{U_2} - \ln \frac{I_1}{U_1}}{1/T_2 - 1/T_1}} \quad (17)$$

Таким образом, ширина запрещённой зоны макроскопического образца полупроводника не зависит от его размеров. Поэтому на рис. 3 по вертикальной оси можно откладывать не $\ln \sigma$, а $\ln(I/U)$.

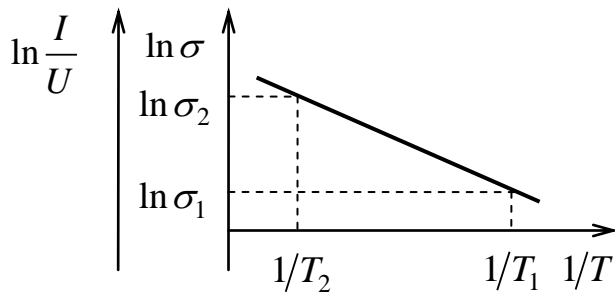


Рис. 3

В низкоразмерных структурах (квантовых нитях, квантовых точках), у которых один или несколько размеров сравнимы с диаметром атома, ширина запрещённой зоны зависит от этих размеров. Такие структуры – объект

исследования *наноэлектроники*.

Контрольные вопросы

10. Выберите формулу, описывающую температурную зависимость электропроводности собственного полупроводника. (в тест)
11. Выберите рисунок, правильно описывающий температурную зависимость электропроводности собственного полупроводника. (в тест)

Общая температурная зависимость электропроводности полупроводника. Можно показать, что температурная зависимость электропроводности примесного полупроводника в области низких температур может быть описана формулой (14) с заменой ширины запрещённой зоны на энергию ионизации примеси. В переменных $\ln \sigma$ и $1/T$ график этой зависимости будет линейным, а угловой коэффициент наклона прямой будет пропорциональным энергии ионизации примеси. На рис. 4 изображён общий график температурной зависимости электропроводности. На прямых 1-2 примесной проводимости и 3-4 собственной проводимости электропроводность пропорциональна концентрации. Угол наклона прямой собственной проводимости больше, часто намного больше, угла наклона прямой примесной проводимости.

Прямые 1-2 и 3-4 соединяются переходным участком 2-3. Это область *истощения примеси*. По мере роста температуры от точки 1 к точке 2 растёт концентрация примесных носителей.

В точке 2 все атомы примеси ионизованы, примесь не может обеспечить дальнейший рост концентрации.

Концентрация собственных носителей в точке T_2 , это точка 5 на штриховом продолжении прямой 3-4, ещё слишком мала, чтобы обеспечить

рост электропроводности. Поэтому от точки 2 электропроводность полупроводника уменьшается подобно электропроводности металлов: концентрация свободных носителей практически постоянна, но с температурой растёт рассеяние носителей на тепловых колебаниях кристаллической решётки, т.е. растёт сопротивление току. Только при дальнейшем росте температуры, от точки 3, становится значительной концентрация собственных носителей.

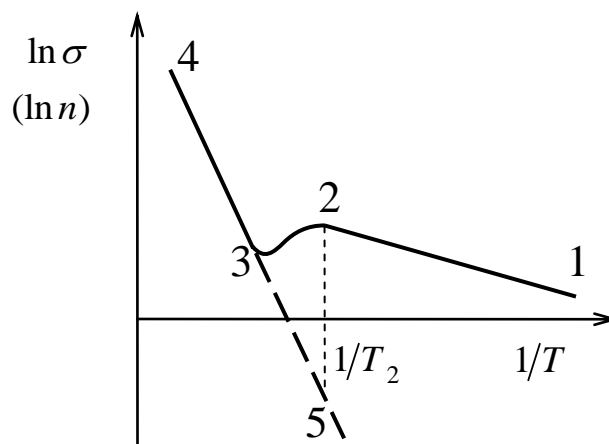


Рис. 4

Контрольные вопросы

- На рис. показан график изменения электропроводности полупроводника в широком температурном диапазоне. Укажите области собственной проводимости, примесной проводимости, области истощения примеси. (в тест)

Описание экспериментальной установки

Электрическая принципиальная схема измерительной установки показана на рис. 5. Амперметром измеряется ток I через образец полупроводника. Ток регулируется с помощью переменного сопротивления R . Переключатель направления тока на рис. 5 не показан. Вольтметр измеряет напряжение U_{3-4} между контактами 3 и 4. Для измерения температурной зависимости образец помещён в электрическую нагревательную печь. Цепь питания печи с выключателем на рис. 5 не показана. С помощью омметра Ω измеряется сопротивление датчика 5

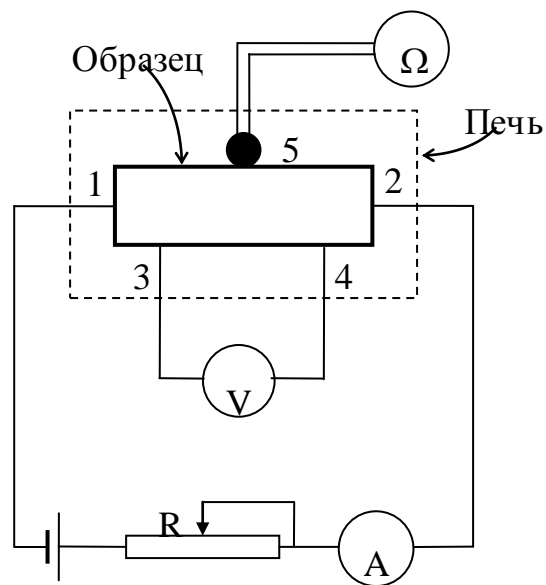


Рис. 5

температуры образца - термометра сопротивления (терморезистора). Затем по градуировочной кривой, имеющейся на передней панели каждой установки, необходимо пересчитать сопротивление в значение температуры.

Первичные измеряемые величины: ток, напряжение и сопротивление.

Особенности измерений. При включённой печи температура полупроводникового образца непрерывно возрастает, поэтому сложно записать одномоментные показания трёх приборов. В наше время, когда космические корабли бороздят просторы Большого театра, можно панели приборов сфотографировать на один снимок. Во-вторых, можно уменьшить скорость изменения температуры, отключив на короткое время печь и дождавшись, когда температура перестанет меняться.

Задание к работе

1. Измерить ток и напряжение на образце полупроводника при комнатной температуре.

2. Включить электропечь и измерить ток и напряжение при различных значениях температуры полупроводника. В диапазоне $20 \div 55$ °С измерить не менее 5-6 точек. Для устранения влияния термоЭДС между контактами 3 и 4 повторить все измерения при обратном направлении тока.
3. Вычислить среднеквадратичное отклонение $\ln(I/U)$ при комнатной температуре, исходя из погрешностей измерения I и U .
4. Построить графики $\ln(I/U)$ от $1/T$ для прямого и обратного направлений тока.
5. По графикам определить ширину запрещённой зоны ΔE_g полупроводника.
6. Сравнить полученный результат с табличным.

Контрольные вопросы по заданию к работе

15. Каков график предполагаемой теоретической зависимости собственной проводимости от температуры?
16. Как по графику определить ширину запрещённой зоны?