Institutt for fysikk, NTNU
Fag MNFFY 103 Elektrisitet og magnetisme
Vår 2003

Øving 9

Veiledning: Fredag 21. mars
Innleveringsfrist: Tirsdag 25. mars

Tetthet av elektroner og hull i halvleder
[Nok en øving med mye tekst, men ikke så forferdelig mye regning!]

I forelesningene (og i forrige øving) konstaterte vi simpelthen at produktet av n (dvs tettheten av elektroner i ledningsbåndet) og p (dvs tettheten av hull i valensbåndet) i en halvleder er konstant for gitt temperatur T, og gitt ved

$$n \cdot p = AT^3 \exp(-\frac{E_g}{k_B T})$$

der E_g er størrelsen på båndgapet, dvs avstanden fra toppen av valensbåndet, E_v, til bunnen av ledningsbåndet, E_c.
La oss kontrollere dette resultatet ved å beregne n og p. Vi skal gjøre et par antagelser underveis, men dette vil være *rimelige* antagelser, slik at resultatet stemmer bra med den virkelige verden.
For å bestemme antall ladningsbærere pr volumenhet, må vi kjenne følgende to størrelser:

- Tilstandstettheten $D(E)$, dvs hvor mange mulige tilstander vi kan putte elektroner (eller hull) i pr energienhet.
- Sannsynligheten $f(E)$ for at en tilstand med energi E vil være okkupert av et elektron, og sannsynligheten $1 - f(E)$ for at en tilstand vil være okkupert av et hull.

Vi begynner med tilstandstettheten, og her kommer *første antagelse* inn: Nær bunnen av ledningsbåndet har vi med god tilnærmelse en kvadratisk sammenheng mellom energien E og bølgetallet $\vec{k}$: $E(k) = E_c + \hbar^2 k^2/2m_c$. Størrelsen m_c er bestemt av krumningen på $E(k)$, ettersom $\partial^2 E/\partial k^2 = \hbar^2/m_c$. Hvis vi sammenligner med *frie* elektroner (dvs $E_{\text{fri}}(k) = \hbar^2 k^2/2m$, jfr forelesningene om "partikkel i boks"), ser vi at m_c kommer inn som en *effektiv masse* som ikke behøver å være like stor som elektronets "frie masse" m.

Poenget er: Ved bunnen av ledningsbåndet vil elektronene oppføre seg som frie elektroner, men med effektiv masse m_c istedetfor m. I en halvleder er typisk $m_c < m$.

For frie elektroner utledet vi i forelesningene et uttrykk for tilstandstettheten. Dette uttrykket kan vi nå bruke for tilstandene nær bunnen av ledningsbåndet, bare vi passer på å erstatte elektronmassen m med den effektive massen m_c, og dessuten husker på at bunnen av ledningsbåndet tilsvarer $E = E_c$ (og ikke $E = 0$ som for frie elektroner). Altså blir tilstandstettheten ved bunnen av ledningsbåndet:

$$D_c(E) = \frac{V}{2\hbar^3\pi^2}(2m_c)^{3/2}(E - E_c)^{1/2}$$

Her er V volumet til halvlederen.

Sannsynligheten for at en tilstand med energi E er okkupert ved temperaturen T er gitt ved Fermi-Dirac-fordelingen:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1}$$

Her kommer *andre antagelse* inn: Vi antar at det kjemiske potensialet μ ligger i båndgapet, og ikke for nær bunnen av ledningsbåndet. "Ikke for nær" innebærer at vi for alle $E > E_c$ kan neglisjere leddet 1 i nevneren. Dermed er

$$f(E) \simeq \exp\left(\frac{\mu - E}{k_B T}\right)$$

og vi har det vi trenger for å bestemme n.

a) Bruk ovenstående til å beregne antall elektroner i ledningsbåndet,

$$N_c = \int_{E_c}^{\infty} D_c(E) f(E) dE$$

og dermed også tettheten av elektroner, $n = N_c/V$.

Tips: Svaret skal bli på formen $n = A_n T^{3/2} \exp[(\mu - E_c)/k_B T]$, der A_n er en konstant som du skal bestemme.

Kommentar: Fritt-elektron-resultatet for $D_c(E)$ er som sagt bare gyldig nær bunnen av ledningsbåndet, dvs for $E \gtrsim E_c$. Likefullt er det en god

tilnærmelse å bruke fritt-elektron-resultatet for $D_c(E)$ helt opp til $E = \infty$ i uttrykket for N_c. Hvorfor?
Oppgitt:

$$\int_0^\infty x^{1/2} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

b) Beregning av hulltettheten p i valensbåndet følger samme spor. *Første antagelse* er igjen en tilnærmet kvadratisk sammenheng mellom E og k, denne gang nær toppen av valensbåndet:

$$E(k) \simeq E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}$$

Størrelsen m_v er igjen en effektiv masse, bestemt av krumningen på $E(k)$, nå ikke for elektroner, men for hull.
Med andre ord: Nær toppen av valensbåndet har vi tilstander som for fri partikler, ikke med masse m men med masse m_v. Igjen kan fritt-elektron-resultatet for tilstandstettheten adopteres, slik at

$$D_v(E) = \frac{V}{2\hbar^3 \pi^2} (2m_v)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

blir tettheten av tilstander for hull nær toppen av valensbåndet.
Er en tilstand okkupert av et hull, betyr det at tilstanden *ikke* er okkupert av et elektron. Og sannsynligheten for det må være

$$1 - f(E) = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\mu-E}{k_B T}\right) + 1}$$

Nok en gang gjelder *andre antagelse* beliggenheten av det kjemiske potensialet, nemlig at det ikke ligger for nær toppen av valensbåndet. Dermed kan vi for alle $E < E_v$ neglisjere leddet 1 i nevneren og får

$$1 - f(E) \simeq \exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right)$$

Bruk dette til å bestemme antall hull i valensbåndet, N_v, og dermed også tettheten av hull, $p = N_v/V$.
Tips: Svaret skal bli på formen $p = A_p T^{3/2} \exp[(E_v - \mu)/k_B T]$, der A_p er en konstant som du skal bestemme.

c) Vis at produktet $n \cdot p$ blir på formen gitt på side 1, dvs uavhengig av det kjemiske potensialet μ. Bestem konstanten A i det oppgitte uttrykket.

d) For en ren (intrinsikk) halvleder er $n = p = n_i$. Bruk dette sammen med de beregnede uttrykkene for n og p til å bestemme det kjemiske potensialet μ_i i en ren halvleder. Er resultatet i tråd med antagelsene om at μ ikke skulle ligge for nær ledningsbåndets bunn og valensbåndets topp? Hva blir betingelsen for at μ_i skal ligge eksakt midt i båndgapet?

e) Under forutsetning av fullstendig ionisering har vi i en p-type halvleder $p \simeq N_A$ der N_A er tettheten av forurensningsatomer (akseptorer). Bruk (noen av) resultatene funnet ovenfor til å vise at tettheten av elektroner n i en p-type halvleder kan uttrykkes på formen

$$n = n_i \exp\left(\frac{\mu - \mu_i}{k_B T}\right)$$

der n_i og μ_i er henholdsvis elektrontettheten og det kjemiske potensialet i en intrinsikk halvleder av samme materiale. Med utgangspunkt i at $n \cdot p = n_i^2$, vis også at det kjemiske potensialet μ blir

$$\begin{aligned}
\mu &= \mu_i - k_B T \ln \frac{N_A}{n_i} \\
&= \frac{E_v + E_c}{2} - k_B T \ln \left[\frac{N_A}{n_i} \left(\frac{m_c}{m_v} \right)^{3/4} \right]
\end{aligned}$$

Kommentar: På samme måte blir $n \simeq N_D$ i en n-type halvleder med N_D (ioniserte) donorer pr volumenhet, mens hulltettheten da blir

$$p = n_i \exp\left(\frac{\mu_i - \mu}{k_B T}\right)$$

og

$$\mu = \frac{E_v + E_c}{2} + k_B T \ln \left[\frac{N_D}{n_i} \left(\frac{m_v}{m_c} \right)^{3/4} \right]$$

Med andre ord: For økende mengde doping, dvs økende N_A (evt N_D) kryper det kjemiske potensialet nedover mot toppen av valensbåndet (evt oppover mot bunnen av ledningsbåndet). Ikke direkte urimelig, ettersom μ tilsvarer den energien der sannsynligheten for å ha en okkupert tilstand er lik 1/2.