

FÉLVEZETŐ FIZIKA ÖSSZEFOGLALÓ

1. A diszperziós reláció

A kvantummechanikában bármilyen részecskerendszer elméleti vizsgálatához, többek között a lehetséges energiaértékeinek kiszámításához, a megfelelő **Schrödinger-egyenlet** megoldása szükséges. Az utóbbi egy **parciális differenciálegyenlet**, annyi változóval, amennyi szabadságfokkal rendelkezik a vizsgálandó rendszer. A szilárdtest fizikában ez a rendszer a kristály összes elektronjából és atommagjából áll. Azaz a szabadságfok-szám, illetve a Schrödinger-egyenlet változóinak száma nagyságrendileg 10^{22} - 10^{23} . Matematikailag ez egy rendkívül bonyolult feladat.

Ebből kifolyólag a modern szilárd test kvantumelmélet néhány **egyszerűsítést** tesz, melyeket összességben „**sávmegközelítésnek**” hívnak:

1. Az elektronmozgás vizsgálatánál az atommagokat, nagy tömegük miatt, mozdulatlan mezőforrásnak veszik.
2. Az atommagok elhelyezkedése a térben szigorúan periodikus: az atommagok az ideális kristályrács csomópontjaiban helyezkednek el.
3. Az elektronok közötti kölcsönhatást egy effektív külső mezővel helyettesítik.

Egy kristályban a Pauli-elvnek megfelelően nem lehet két azonos állapotú elektron. Az elektronok úgy rendeződnek el, hogy energiájuk egymástól kismértékben eltérő legyen. Így sávok alakulnak ki. Ideális kristály esetén a vegyérték elektronok (két rácspont vegyértékkötéssel összekötő elektronok) a vegyértéksávnak (valenciasávnak) megfelelő energiákon helyezkednek el. A betöltetlen elektronállapotok vezetési sávot és vegyértéksávot a tiltott sáv választja el.

Az elektronok a Schrödinger-egyenlettel írhatók le:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(\vec{r})\psi = -\frac{\hbar}{j}\frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (1.1)$$

ahol $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, $U(\vec{r})$ a külső potenciális energia, \hbar a Planck-állandó 2π -ed

része, ψ az elektron adott térrészben való tartózkodásának valószínűségét leíró függvény.

Az elektron ΔV térfogatban való tartózkodásának valószínűsége:

$$\int_{(\Delta V)} |\psi|^2 dV. \quad (1.2)$$

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet felírásához időben periodikus, ω körfrekvenciájú hullámfüggvényt tételezünk fel:

$$\psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) \exp(i\omega t - i\vec{k}\vec{r}), \quad (1.3)$$

ahol ω az elektronnak, mint hullámnak a körfrekvenciája, $|\vec{k}|$ pedig az elektronhullám hullámszáma (az egységnyi távolságra jutó hullámok száma).

Az elektron-energia a frekvenciával kifejezve

$$E = \hbar\omega. \quad (1.4)$$

Az m tömegű elektron kinetikus energiája a \vec{v} sebességgel, illetve a $\vec{p} = m\vec{v}$ impulzussal kifejezve

$$E = \frac{m\vec{v}^2}{2} = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (1.5)$$

A Schrödinger-egyenletből külső erőterétől mentes esetben ekkor a

$$E = \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2m}. \quad (1.6)$$

Kristályrács periodikus erőterében mozgó elektronokra hasonló összefüggés írható fel

$$E = \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2m_{eff}(k)}. \quad (1.7)$$

Az (1.6) és (1.7) energia és a frekvencia közötti összefüggéseket **diszperziós relációknak** nevezik.

Az (1.7)-ben az elektron tömege helyett az m_{eff} szerepel, mely kifejezésre juttatja a kristályrács hatását.

Az effektív tömeg függ a hullámszámtól (kristályiránytól). Nagyságrendileg nem tér el az elektron tömegétől. Általában $m > m_{eff}$.

Ismerve az $E - \vec{p}$ relációt, kifejezhetjük az effektív tömeget az energia impulzusbeli másodfokú deriváltjaként

$$m_{eff} = \left(\frac{d^2 E}{d\vec{p}^2} \right)^{-1}. \quad (1.8)$$

Állandó effektív tömeg esetén a k_x, k_y, k_z hullámszám koordináta-rendszerben (az ún. k -térben) az állandó E energiákhoz tartozó geometriai helyek egy gömb felületén helyezkednek el. k -től függő effektív tömeg esetén ez a gömb ellipszoiddá fajul, sőt csak a k -tér egyes részeihez tartozhatnak fizikailag értelmezett tartományai a diszperziós relációnak. A

vegyértéksáv elektronjaira (a vegyértékkötésben levő elektronokra) a diszperziós reláció mindig a $k = 0$ helyen levő középpontú, gömbszerű felületekkel írható le, a vezetési sávra vonatkozóan (a vegyértékkötésben nem levő, a kristályrácsban „szabadon” mozgó elektronokra) a kristályrács szimmetriától függően rendszerint több, nem $k = 0$ centrumú ellipszoid lehetséges. Elemi félvezetőkénél nincs $k = 0$ centrumú tartomány, az $A^{III}B^V$ anyagoknál (pl. *GaAs*) rendszerint több ellipszoid mellett $k = 0$ centrumú is van. Az ábrán (2.2 ábra, BME) látható a szilíciumra és *GaAs*-ra a vezetési sávot leíró ellipszoidokat. A térbeli ábrázolás helyett a diszperziós relációkat rendszerint $[100]$ és $[111]$ irányú metszetekkel szokták ábrázolni. Ábránkon ezt is feltüntettük.

2. Az elektronállapotok sűrűsége

Vizsgáljuk egy félvezető $\Delta x \Delta y \Delta z$ térfogatát, melyben elektronok tartózkodnak.

Az elektron két fő jellemzőjével írható le:

- hol van az elektron (a térben);
- mekkora impulzusa van (milyen \vec{k} -hullámvektor tartozik hozzá).

Ha egy elektron helyzetét $\Delta x \Delta y \Delta z$ pontossággal ismerjük, akkor a Heisenberg-féle határozatlansági reláció alapján meghatározható a szóban forgó elektron \vec{k} -hullámvektorának határozatlansága:

$$\Delta x \Delta k_x = 2\pi, \quad \Delta y \Delta k_y = 2\pi, \quad \Delta z \Delta k_z = 2\pi. \quad (1.9)$$

Ha egy hullámszám koordináta-rendszert veszünk fel, ebben a koordináta-rendszerben – a \vec{k} -térben – minden

$$V_{elemi} = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \frac{8\pi^3}{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad (1.10)$$

térfogatban lehet egy elektronhoz tartozó \vec{k} -vektor végpontja. A 0 és $|\vec{k}|$ közötti értékű hullámvektorok a $|\vec{k}|$ sugarú gömbben végződnek, melynek térfogata

$$V_{teljes} = \frac{4}{3} \pi |\vec{k}|^3. \quad (1.11)$$

Ebben a gömbben

$$N = 2 \frac{V_{teljes}}{V_{elemi}} = 2 \frac{\frac{4}{3} \pi |\vec{k}|^3}{\frac{8\pi^3}{\Delta x \Delta y \Delta z}} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \Delta x \Delta y \Delta z \quad (1.12)$$

számú elektronállapot lehetséges. A 2 szorzó tényező azért van, mert két ellentétes spinnel rendelkező elektron lehetséges.

A félvezető egységnyi térfogatához

$$N'(k) = \frac{N}{\Delta x \Delta y \Delta z} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \quad (1.13)$$

számú elektronállapot tartozik.

Felhasználva az (1.7) diszperziós relációt, az egységnyi térfogatban

$$N'(E) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_{eff}}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{3}{2}} \quad (1.14)$$

számú elektronállapot lehet.

Az E és $E + dE$ között lehetséges elektronállapotok mennyisége, a lehetséges elektronállapotok sűrűsége

$$N(E) = \frac{dN'(E)}{dE} = 4\pi \left(\frac{2m_{eff}}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}. \quad (1.15)$$

A vezetési elektronokra

$$N_c(E) = 4\pi \left(\frac{2m_n}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.16)$$

ahol m_n az elektronok effektív tömege, E_c a vezetési sáv aljához tartozó energia.

A vegyértéksávban levő lyukakra

$$N_v(E) = 4\pi \left(\frac{2m_p}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.17)$$

ahol m_p a lyukak effektív tömege, E_v a vegyértéksáv tetejéhez tartozó energia.

Az ábra (2.5 ábra, BME) a lehetséges elektronállapot sűrűségének energiafüggését adja meg.

A diagramon mind a vezetési, mind a vegyértéksávra fel vannak tüntetve a lehetséges állapotok sűrűségei.

3. Fermi-statisztika, intrinsic félvezető

A félvezető kristályban levő elektron és lyukkonzentrációk a lehetséges állapotok sűrűsége és azok betöltöttségének mértéke alapján határozhatók meg.

Az elektronoknak, - mint tömeggel rendelkező elemi részecskének – energia szerinti eloszlása Fermi-Dirac statisztikával írható le. Annak valószínűségét, hogy egy E energiájú elektronállapot be van töltve, az

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (1.18)$$

függvény adja meg (2.6 ábra, BME). A Fermi-szint az az energia, melynek betöltöttségi valószínűsége pontosan 0,5. Az $f(E)$ függvény szimmetrikus a Fermi-nívóhoz képest.

E és $E + dE$ közötti elemi energia intervallumban $N_c(E)dE$ számú lehetséges elektronállapot található, a betöltöttség mértéke $f(E)$, így az elemi energiaintervallumban levő elektronmennyiség

$$dn_0 = N_c(E)f(E)dE . \quad (1.19)$$

Az elektronok koncentrációját a vezetési sávban levő betöltött állapotok összes mennyisége adja

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} N_c(E)f(E)dE . \quad (1.20)$$

A lyukak koncentrációját – azaz a térfogategységben található be nem töltött vegyértékkötések mennyiségét – pedig a

$$p_0 = \int_{-\infty}^{E_v} N_c(E)(1 - f(E))dE . \quad (1.21)$$

Az adalékoltan, idegen atomokat nem tartalmazó félvezető anyagban – az **intrinsic félvezetőben** – kizárólag **termikus gerjesztés** következtében keletkeznek elektron-lyuk párok, és így az **elektronkoncentráció megegyezik a lyukkoncentrációval**, vagyis

$$n_i = p_i . \quad (1.22)$$

Ezt a koncentrációt **intrinsic koncentrációnak** nevezzük.

4. Adalékolt félvezetők

A félvezető kristályba az eredeti félvezető anyag atomjai helyébe szubsztitucionális adalékatomokat vihetünk be. Az adalékatomokhoz a tiltott sávban levő lehetséges elektronállapotok tartoznak (2.8 ábra, BME).

Adalékolt félvezető **donor** vagy **akceptor** adalékot tartalmazhat. Az öt vegyértékű elemek (P , As , Sb) donorként, a három vegyértékűek (B , Al , Ga , In) akceptorként hatnak.

A donor betöltöttségének valószínűsége is Fermi-dirac statisztikával írható le, azonban figyelembe kell venni, hogy egy elektron szinten két (ellentétes spinnel rendelkező) elektron helyezkedhet el, de itt csak egy van, ezért két azonos energiájú állapot létezik, de betöltetlen csak egy, ezért

$$f(E_d) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)}. \quad (1.23)$$

Ebből a betöltött – a vezetési elektront ki nem bocsátott – ionizálatlan donorok koncentrációja, N_d adalékatom koncentráció esetén

$$N_d - N_d^+ = \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)} \quad (1.24)$$

és az ionizált donoratomok koncentrációja

$$N_d^+ = N_d - \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)}. \quad (1.25)$$

Elemi átalakítások után

$$N_d^+ = \frac{N_d}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_d - E_F}{kT}\right)}. \quad (1.26)$$

A donoratomok N_d^+ -nel megegyező számú elektronnal járulnak hozzá a szabad elektronok mennyiségéhez. Mivel a donorok ionizációs energiája szilíciumban kb. 50 meV (a donorállapotok energiaszintje ennyire helyezkedik el a vezetési sáv alja alatt), szobahőmérsékleten alkalmazhatjuk az

$$N_d^+ \cong N_d \quad (1.27)$$

közelítést mindaddig, amíg a Fermi-nívó a vezetési sáv alját kb. $5kT$ -re meg nem közelíti. Ha ebben az esetben akarjuk meghatározni az elektron- és lyukkonzentráció értékét, figyelembe kell venni, hogy a vezetési sávban levő elektronkoncentrációt gyakorlatilag a donorkonzentráció határozza meg, vagyis

$$N_d^+ \cong n_0 = \int_{E_c}^{\infty} N_c(E) f(E) dE. \quad (1.28)$$

az pedig azt jelenti, hogy a Fermi-nívó, mely az intrinsic anyagnál a tiltott sáv közepétől alig eltérő helyen helyezkedik el, most az adalékkonzentrációtól függő mértékben a vezetési sáv felé tolódik. Ez együtt jár azzal is, hogy a vegyértékkötések betöltöttsége fokozódik, vagyis

$$\begin{aligned} n_0 &> n_i \\ p_0 &< n_i \end{aligned}. \quad (1.29)$$

A Fermi-nívó így mérőszáma lehet az adalékolás mértékének.

Akceptoradalek esetében az előzőkhöz hasonló módon az akceptoratomok koncentrációjával (N_a) közel egyenlő számú vegyértékkötésben nem lesz elektron – tehát ennyi lyuk lesz

$$p_0 \cong N_a^- \quad (1.30)$$

és így az előzőkhöz hasonló megfontolások alapján

$$\begin{aligned} p_0 &> p_i \\ n_0 &< n_i \end{aligned} \quad (1.31)$$

A Fermi-nívó ebben az esetben sáv közepétől a vegyértéksáv irányába tolódik el.

5. Töltéshordozók koncentrációja

A töltéshordozó koncentrációk és a Fermi-szint helyzete közötti kapcsolat meghatározható az (1.19)-(1.21) összefüggések alapján.

Az (1.16), (1.17) lehetséges állapotok sűrűsége és az (1.18) betöltöttség valószínűségét leíró összefüggések helyettesítése után az elektron-, illetve a lyukkonzentráció

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} N_c(E) f(E) dE = 4\pi \frac{(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_{E_c}^{\infty} \frac{\sqrt{E - E_c}}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} dE, \quad (1.32)$$

$$p_0 = \int_{-\infty}^{E_v} N_v(E) (1 - f(E)) dE = 4\pi \frac{(2m_p)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_{-\infty}^{E_v} \frac{\sqrt{E_v - E}}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)} dE. \quad (1.33)$$

Feltételezzük, hogy az effektív tömeg független az energiától.

Bevezetve az

$$x = \frac{E - E_c}{kT} \quad (0 \leq x \leq \infty) \quad (1.34a)$$

$$\xi = E_F - E_c, \quad \xi^* = \frac{\xi}{kT} \quad (1.34b)$$

és

$$y = \frac{E_v - E}{kT} \quad (0 \leq y \leq \infty) \quad (1.35a)$$

$$\eta = E_v - E_F, \quad \eta^* = \frac{\eta}{kT} \quad (1.35b)$$

jelöléseket, töltéshordozó koncentrációkra az

$$n_0 = 4\pi \frac{(2m_n kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{1 + \exp(x - \xi^*)}, \quad (1.36)$$

$$p_0 = 4\pi \frac{(2m_p kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{y^{\frac{1}{2}} dx}{1 + \exp(y - \eta^*)} \quad (1.37)$$

összefüggéseket kapjuk.

Továbbá bevezetjük az

$$N_c = 2 \frac{(2\pi m_n kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3}, \quad (1.38)$$

$$N_v = 2 \frac{(2\pi m_p kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \quad (1.39)$$

a vezetési sávbeli, illetve vegyértéksávbeli effektív állapot-sűrűségeket.

Felhasználva a fenti jelöléseket az (1.32) egyenletet ilyen alakot ölt

$$n_0 = N_c \Phi_{1/2}(\xi^*), \quad (1.36)$$

ahol

$$\Phi_{1/2}(\xi^*) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{1 + \exp(x - \xi^*)}. \quad (1.37)$$

Az (1.37) integrál értéke csak ξ^* paramétertől függ, azaz a Fermi-energiától és a hőmérséklettől. Ez az integrál 1/2-indexű Fermi-Dirac integrálként vált ismeretessé. Nem fejezhető ki elemi függvényekkel, ezért kiszámításához numerikus módszereket alkalmaznak.

Az (1.33) egyenlet átírható hasonló alakra

$$p_0 = N_v \Phi_{1/2}(\eta^*). \quad (1.38)$$

$(E - E_F) > 3kT$ és $(E - E_F) < -3kT$ energiáknál az $f(E)$ értéke több mint 20, illetve 0,05-nél kevesebb. Ilyenkor a Fermi-Dirac-statisztikát felválthatjuk a **Maxwell-Boltzmann-statisztikával**:

$$f(E) = \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right). \quad (1.39)$$

Ezzel az elektron-, illetve lyukkonzentrációk meghatározásához szükséges integrálok zárt formában előállíthatók

$$n_0 = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{kT}\right), \quad (1.40)$$

$$p_0 = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{kT}\right). \quad (1.41)$$

Ez a közelítés tehát addig jó, amíg a Fermi-nívó a vezetési sáv alját, illetve a vegyértéksáv tetejét néhány kT értékig meg nem közelíti.

Az (1.40), (1.41) egyenlet szorzata - figyelembe véve, hogy a tiltott sáv szélessége

$$E_g = E_c - E_v. \quad (1.42)$$

az ún. **tömeghatás törvényét** adja

$$n_0 p_0 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right). \quad (1.43)$$

A tömeghatás törvény is addig érvényes ebben a formájában – tehát a Fermi-szint helyzetétől függetlenül – amíg az elektronokra, illetve a lyukakra a Boltzmann-statisztika alkalmazható.

6. A Fermi-nívó helyzete

A Fermi-szint helyzetét a következő összefüggés alapján számítjuk

$$E_{Fi} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln\left(\frac{m_p}{m_n}\right) + \frac{1}{2} kT \ln\left(\frac{n_0}{p_0}\right). \quad (1.44)$$

Mivel egy intrinsic félvezetőben $n_0 = p_0$, így

$$E_{Fi} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln\left(\frac{m_p}{m_n}\right). \quad (1.45)$$

Az elektron-, lyuk koncentrációkat ((1.40, 1.41 összefüggés)) kifejezhetjük intrinsic koncentráción keresztül:

$$n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right), \quad (1.46)$$

$$p_0 = n_i \exp\left(-\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right). \quad (1.47)$$

Az (1.25) egyenletből, felhasználva, hogy $n_0 \cong N_d$

$$E_{Fn} = E_{Fi} + kT \ln\left(\frac{N_d}{n_i}\right), \quad (\text{ha } N_d \gg n_i) \quad (1.48)$$

$$E_{Fp} = E_{Fi} - kT \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right). \quad (\text{ha } N_a \gg n_i) \quad (1.49)$$

Látható, hogy az adalékolás hatására a Fermi-nívó a sávközépről eltolódik: donor adalék esetén a vezetési sáv felé, akceptor adalék esetén a vegyértéksáv felé. Az eltolódás mértéke egy nagyságrendnyi adaléksűrűség-változás esetén $kT \ln 10 = 60 \text{ meV}$.

7. A koncentráció hőmérsékleti függése

Szorozzuk össze az (1.40, 1.41) egyenleteket, használjuk fel az (1.38, 1.39) összefüggéseket, akkor

$$n_0 p_0 = \frac{4}{h^6} (2\pi)^3 (m_n m_p)^{3/2} (kT)^3 \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{kT}\right). \quad (1.50)$$

Felhasználva a tiltott sáv szélességének kifejezését ($E_g = E_c - E_v$) megkapjuk a töltéshordozók hőmérsékletfüggését:

$$n_0 p_0 = n_i^2 = \text{const} \cdot T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \quad (1.51)$$

1. Nagy hőmérsékleten a többségi (és ezzel együtt a kisebbségi) töltéshordozók koncentrációját a termikus gerjesztés határozza meg – az anyag intrinsic anyagként viselkedik. Ebben a szakaszban a görbe meredeksége: $\frac{E_g}{2k}$.
2. Közepes hőmérsékleten a többségi töltéshordozók koncentrációja hőmérséklet-független, az adalékatomok koncentrációjával gyakorlatilag megegyezik.
3. Alacsony hőmérsékleten a többségi töltéshordozók koncentrációja csökken, mert egyre kevesebb adalékatom ionizálódik.

8. Az eszközfizika alapegyenletei

Félvezető struktúrákban és eszközökben lejátszódó elektromos folyamatok olyan alapösszefüggésekkel írhatók le, melyek jellemzik

- a) a töltéshordozók mennyiségének időbeli változását (töltésmegmaradás törvények, illetve folytonossági egyenletek);
- b) a töltéshordozók mozgásából származó áramokat (transzportegyenletek);
- c) a töltéshordozók mennyisége és helyhez kötött töltések kapcsolatát az elektromos erőterrel (Poisson-egyenlet, illetve Gauss-törvény);
- d) a vezetési és eltolási áramok összegezési szabályát (Maxwell-féle áram-egyenlet).

Ezek az összefüggések általában differenciál egyenletek, és az elektromos mennyiségek mellett félvezető anyagjellemzőket is tartalmaznak.

$$A \quad 3kT = \frac{3 \cdot 300 \text{ K} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \cdot 1 \text{ eV}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}} = \frac{1,242 \cdot 10^{-20}}{1,6 \cdot 10^{-19}} = \frac{0,1242}{1,6} \approx 0,078 \text{ eV}.$$