

# Ширина запрещенной зоны в полупроводниках и методы её расчета

Выполнил : Тишевский А.В.

# Различия

- Полупроводники и диэлектрики различаются величиной  $E_g$ . Условно вещества с  $E_g > 2-3 \text{ eV}$  ( $1 \text{ eV} = 1.6021 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ ) относят к классу диэлектриков,
- вещества с  $E_g < 2-3 \text{ eV}$  - к классу полупроводников.
  - $1.5 \text{ eV} < E_g < 2-3 \text{ eV}$  - к классу широкозонных полупроводников,
  - $E_g < 0.1-0.2 \text{ eV}$  - к классу узкозонных полупроводников).



По величине  $E_g$  можно судить о типе химической связи, доминирующей в соединении, устойчивости соединения в определенном интервале изменений состава и внешних параметров, типе электронной проводимости в образцах, склонности материала к ионной проводимости, а также основных термодинамических характеристиках соединения (энтальпии образования  $H_F$ , энтропии  $\Delta S_m$  и температуры плавления  $T_m$  и других).



В полупроводниках валентная зона от зоны проводимости отделена конечным интервалом энергии  $\Delta E$ . В этом случае, чтобы перевести электрон в зону проводимости, ему необходимо сообщить энергию, равную *ширине запрещенной зоны*  $\Delta E$ . Эта энергия может быть передана электрону за счет энергии теплового движения или при воздействии излучения.

## Экспериментальное определение $E_g$ .

Экспериментально величина  $E_g$  определяется из анализа различных физических эффектов, связанных с переходами электронов из зоны проводимости в валентную зону под действием термической активации ( $E_g^{\text{term}}$ ), либо квантов света ( $E_g^{\text{opt}}$ ). Обычно  $E_g^{\text{term}}$  определяют по температурному ходу электросопротивления или коэффициента Холла в области собственной проводимости, а  $E_g^{\text{opt}}$  - из края полосы поглощения и длинноволновой границы фотопроводимости (Photo).

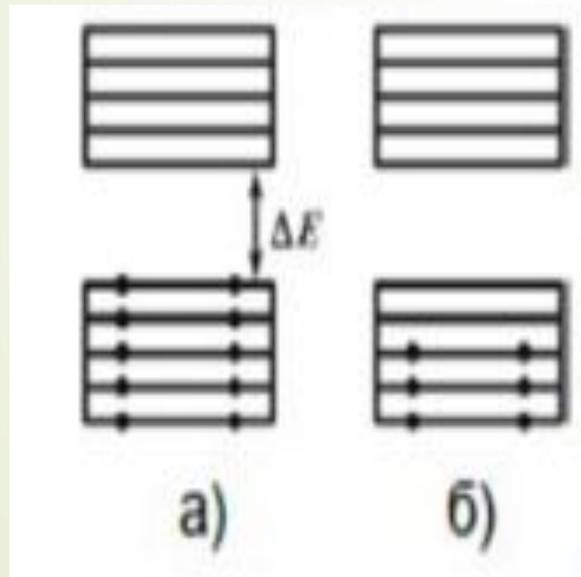
Одной из особенностей полупроводников является их способность увеличивать электропроводимость при воздействии на них излучения.

При воздействии света на полупроводник, возникает дополнительная проводимость (*фотопроводимость*). Фотопроводимость является непосредственным результатом поглощения света полупроводником. Явление поглощения света и возникновения фотопроводности можно объяснить на основе *зонной теории*.

Согласно зонной теории кристаллы, обладают широкими полосами (*зонами*) допустимых значений энергии, отделенных одна от другой запрещенными зонами. Ширина зон определяется величиной энергии связи между атомами, т. е. зависит от расстояния между ними. Количество уровней в зоне равно числу атомов, образующих кристалл ( $10^{22} \text{ см}^{-3}$ ).

В соответствии с принципом Паули в одном и том же энергетическом состоянии может находиться не более одного электрона. Поэтому электроны в энергетических зонах располагаются каждый на своем уровне и заполняют почти все разрешенные зоны. В полупроводниках (при низких температурах) на заполнение верхней энергетической зоны электронов не хватает — она пустая (рис. 5.26, а).

Эта верхняя незаполненная зона называется зоной проводимости. Она отделена запрещенной зоной от последней заполненной (или почти заполненной) зоны, которая называется валентной зоной. В металлах валентная зона заполнена на половину (рис. 5.26, б).

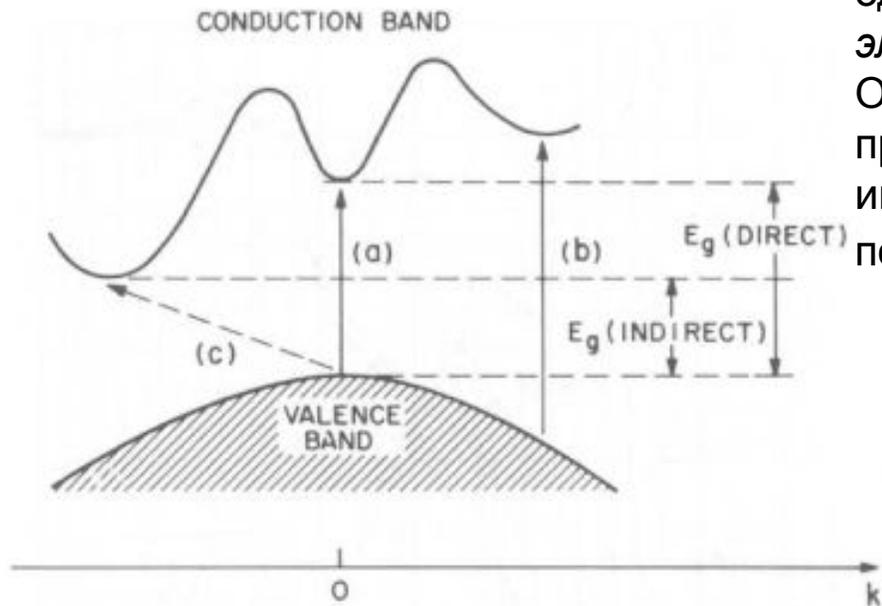


Переходы электронов из одной энергетической зоны в другую называются *межзонными переходами*.

# прямые и непрямые электронные переходы

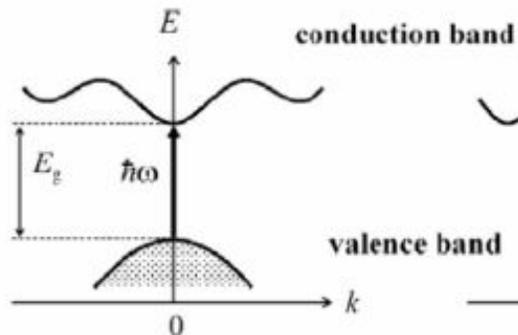
В случаях, когда края валентной зоны и зоны проводимости находятся при одинаковом значении волнового вектора, происходят *прямые электронные переходы*.

Однако зачастую верх валентной зоны и дно зоны проводимости находятся при разных значениях волнового вектора. Более того, форма зон может иметь несколько экстремумов при различных волновых векторах, как показано на приведенном рисунке.

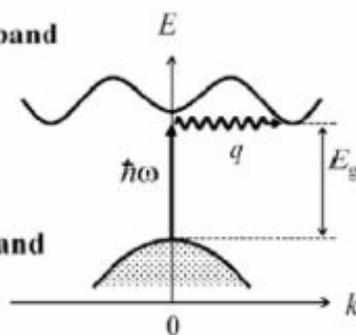


Тогда возможны *непрямые электронные переходы*. При этом квазиимпульс электрона изменяется (в случае прямых переходов квазиимпульс сохраняется) на некоторую величину  $q$  (см. рисунок). Для таких межзональных переходов необходимо участие в процессе дополнительных видов возбуждений, изменяющих квазиимпульс электрона (и, соответственно, энергию). Такими дополнительными возбуждениями зачастую выступают *фононы* (кванты тепловых колебаний кристаллической решетки).

(a) Direct band gap:  
C.B. minimum at  $k = 0$



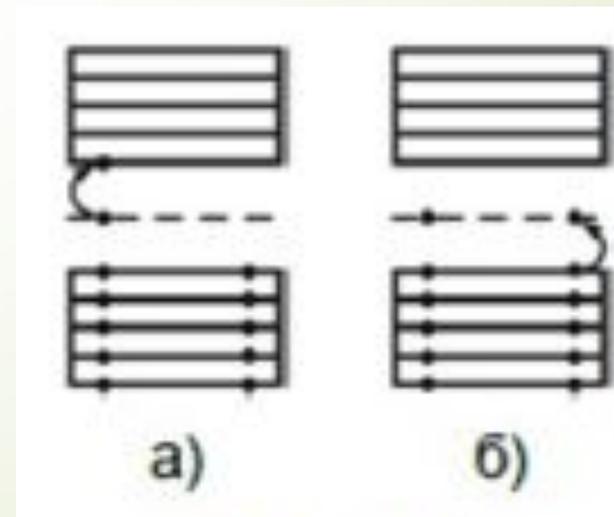
(b) Indirect band gap:  
C.B. minimum at  $k \neq 0$



При поглощении полупроводником квантов излучения с энергией  $h\nu$ , которая превышает ширину запрещенной зоны ( $h\nu > \Delta E$ ), электроны валентной зоны переходят в зону проводимости. В валентной зоне образуется *дырка*. Таким образом, при поглощении света с энергией  $h\nu > \Delta E$  возникает *собственная проводимость полупроводника*.

*Если длина волны света, не настолько мала, чтобы вызвать собственную проводимость, то полупроводник для такого кванта света будет прозрачным. Однако прозрачность, наблюдается только в тех образцах, которые очищены от примесей. При наличии примесей он бывает непрозрачным во всей области спектра почти до радиочастот.*

*Объясняется это тем, что энергетические уровни атомов примесей располагаются в области запрещенных значений энергии (рис. #) и, чтобы перейти электрону с донорного уровня в зону проводимости (рис. #, а) или с валентной зоны на акцепторный уровень (рис. #, б), необходима значительно меньшая энергия.*





У полупроводников, кроме собственного и примесного поглощения, наблюдается еще экситонное поглощение, поглощение свободными носителями заряда и решеткой. При расшифровке спектра поглощения необходимо учитывать, что различные виды поглощения могут накладываться один на другой и усложнять форму спектральной кривой.

Определение ш.з.з по его температурной зависимости электропроводности или сопротивления.

В случае одного типа носителей заряда электропроводность полупроводника определяется соотношением:

(1)

$$\sigma = qn\mu$$

где  $q$  – заряд электрона (дырки),  $n$  – концентрация носителей заряда;  $\mu$  – их подвижность.

В полупроводнике концентрация свободных электронов  $n$  равна концентрации дырок  $p$ . Температурную зависимость  $n$  и  $p$  можно представить соотношением:

$$n = p = A \cdot \exp(-\Delta E / 2kT) \quad (2)$$

где  $A$  - постоянная; в первом приближении не зависящая от температуры,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура.



Обычно в полупроводниках подвижность носителей заряда изменяется с температурой значительно медленнее, чем концентрация носителей заряда. Поэтому температурной зависимостью подвижности можно пренебречь и, считать, что изменение электропроводности с температурой будет определяться только изменением концентрации носителей заряда. В этом случае для удельной электропроводности полупроводника из (1) и (2) получим

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta E / 2kT) \quad (3) \text{ где } \sigma^0 \text{ – коэффициент, характерный для данного полупроводника.}$$

Уравнение (3) может быть использовано для экспериментального определения ширины запрещенной зоны изучаемого полупроводника. Задачу можно упростить, перейдя от измерения электропроводности к измерению сопротивления  $R$ .

Из уравнения (3) следует, что постоянная  $\sigma_0$  имеет смысл электропроводности для бесконечно большой температуры. Известна связь между  $\sigma$  и  $R$

$$\sigma = 1/\rho = l/SR \quad \text{и} \quad \sigma_0 = l/SR_0,$$

где  $\rho$  – удельное сопротивление,  $l$  и  $S$  – соответственно длина и площадь сечения материала полупроводника. Уравнение (3) можно преобразовать к виду

$$R = R_0 \exp(\Delta E / 2kT).$$

Прологарифмировав данное выражение, получим

$$\ln \frac{R}{R_0} = \frac{\Delta E}{2kT} \quad (4)$$

Из уравнения (4) следует, что график зависимости  $\ln R = f(1/T)$  представляет собой прямую, тангенс угла  $\alpha$  наклона которой, может быть использован для вычисления  $\Delta E$ :

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\ln(R_1 / R_0) - \ln(R_2 / R_0)}{1/T_1 - 1/T_2} = \frac{\ln(R_1 / R_2) T_1 T_2}{T_2 - T_1},$$

$$\Delta E = 2k \cdot \operatorname{tg} \alpha = 2k \frac{\ln(R_1 / R_2) T_1 T_2}{T_2 - T_1}, \quad (5)$$

где  $T_1$  и  $T_2$  – две произвольные температуры, взятые на графике, а  $R_1$  и  $R_2$  – соответствующие им сопротивления,  $\Delta E$  (эВ).

