

Fizyka Materii Skondensowanej

Domieszki i defekty



Inżynieria nanostruktur

Wydział Fizyki UW
Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl




Projekt: POKL 04.01.01-00-100/10-00 "Chemia, fizyka i biologia na potrzeby społeczeństwa XXI wieku: nowe makroierunki studiów I, II i III stopnia"

Klasyczny metal

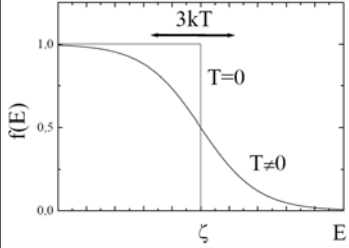
W $T \neq 0$ równowaga układu termodynamicznego (w warunkach $V = \text{const}$ i $N = \text{const}$) odpowiada minimum energii swobodnej Helmholtza $F = U - TS$, a nie minimum U – obsadzone są stany o większych energiach.

Dla fermionów w równowadze termodynamicznej – rozkład Fermiego-Diraca (μ – potencjał chemiczny, „poziom Fermiego“):

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f(x)}{\partial x}\right) dx = 1$$

czyli dla $T \rightarrow 0$
 $-\frac{\partial f(E, T)}{\partial E} = \delta(\mu)$



$0 < f(E) < 1$
 $f(\mu) = 0,5$
 dla $T = 0$ – rozkład schodkowy
 dla $T \neq 0$ – rozmycie rzędu $3 kT$
 $1 - f(E)$ – prawdopodobieństwo, że stan jest nieobsadzony

M. Baj

2013-06-02 2

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Niech $A(E)$ będzie jakąś wielkością fizyczną zależną od energii elektronu

$$A(T) = \int_{SB} A(\vec{k}) \cdot f(E(\vec{k}), T) \cdot \rho(\vec{k}) dV_k = \int_{\text{pasmo}} A(E) \cdot f(E, T) \cdot \rho(E) dE$$

jest uśrednionym termodynamicznie całkowitym wkładem do wielkości A od wszystkich elektronów w paśmie;

Dla metali $\mu \equiv E_F \approx 5 \text{ eV}$, więc $\frac{E_F}{k_B T} \gg 1$ dla $T = 300 \text{ K}$ ($k_B T = 25 \text{ meV}$). Wprowadzamy

$$G(E) = \int_0^E A(E') \cdot \rho(E') dE'$$

dostajemy

$$A(T) = \int_{\text{pasmo}} A(E) \cdot f(E, T) \cdot \rho(E) dE = \int_{\text{pasmo}} \frac{\partial G}{\partial E} \cdot f(E, T) dE$$

M. Baj

2013-06-02 3

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

$$A(T) = \int_{\text{pasmo}} A(E) \cdot f(E, T) \cdot \rho(E) dE = \int_{\text{pasmo}} \frac{\partial G}{\partial E} \cdot f(E, T) dE = \int_0^{E_{max}} \frac{\partial G}{\partial E} \cdot f(E, T) dE \approx$$

$$\approx [G(E) \cdot f(E, T)]_0^{E_{max}} - \int_0^{E_{max}} G(E) \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE \approx \int_0^{E_{max}} G(E) \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE$$

Znika w 0, bo $\rho(0) = 0$

Dla metali: znika w E_{max} , bo $f(E) = 0$

Wprowadzamy $x = \frac{E - E_F}{k_B T}$ czyli $E = E_F + x k_B T$

$$A(T) = \int_0^{E_{max}} G(E) \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE = \int_{\frac{-E_F}{k_B T}}^{\frac{E_{max} - E_F}{k_B T}} G(E_F + x k_B T) \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx \approx \int_{-\infty}^{\infty} \dots dx$$

M. Baj

2013-06-02 4

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Wprowadzamy $x = \frac{E-E_F}{k_B T}$ czyli $E = E_F + x k_B T$

$$A(T) \approx \int_{-\infty}^{\infty} G(E_F + x k_B T) \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx$$

Ze względu na silną degenerację istotny wkład do całki daje tylko obszar w pobliżu $x = 0 \Rightarrow$ rozwijamy funkcję G :

$$G(E_F + x k_B T) = G(E_F) + \left(\frac{\partial G}{\partial E}\right)_{E_F} x k_B T + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial E^2}\right)_{E_F} x^2 (k_B T)^2 + \dots$$

Korzystając z całkowania przez części oraz wzoru:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{e^x + 1} dx = \frac{\pi^2}{12}$$

Dostajemy:

$$A(T) \approx \int_0^{E_F} A(E) \cdot \rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial[A(E) \cdot \rho(E)]}{\partial E}\right)_{E_F}$$

Wyprowadzenie!

R. Stępniewski

2013-06-02

5

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Wyprowadzenie ($x = \frac{E-E_F}{k_B T}$, $dE = k_B T dx$):

$$A(T) = \int_0^{\infty} G(E) \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE = \int_{E_F/k_B T}^{\infty} G(E_F + x k_B T) \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \dots dx$$

Rozwijamy $G(E)$:

$$G(E_F + x k_B T) = G(E_F) + \left(\frac{\partial G}{\partial E}\right)_{E_F} x k_B T + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial E^2}\right)_{E_F} x^2 (k_B T)^2 + \dots$$

Ponieważ $\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)$ jest symetryczna czony nieparzyste nie dają wkładu do całki. Dostajemy:

$$A(T) \approx G(E_F) + (k_B T)^2 \left(\frac{\partial^2 G}{\partial E^2}\right)_{E_F} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} x^2 \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx + 0(T^4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} x^2 \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx = \int_0^{\infty} x^2 \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx = -x^2 f(x) \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} 2x \cdot f(x) dx = 2 \int_0^{\infty} \frac{x}{e^x + 1} dx$$

R. Stępniewski

2013-06-02

6

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Wyprowadzenie ($x = \frac{E-E_F}{k_B T}$):

$$A(T) \approx G(E_F) + (k_B T)^2 \left(\frac{\partial^2 G}{\partial E^2}\right)_{E_F} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} x^2 \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx + 0(T^4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} x^2 \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx = \int_0^{\infty} x^2 \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx = -x^2 f(x) \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} 2x \cdot f(x) dx = 2 \int_0^{\infty} \frac{x}{e^x + 1} dx$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x}{e^x + 1} dx = \frac{\pi^2}{12}$$

Ostatecznie (pamiętając, że $G(E) = \int_0^E A(E') \cdot \rho(E') dE'$):

$$A(T) \approx \int_0^{E_F} A(E) \cdot \rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial[A(E) \cdot \rho(E)]}{\partial E}\right)_{E_F}$$

R. Stępniewski

2013-06-02

7

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

$$A(T) \approx \int_0^{E_F} A(E) \cdot \rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial[A(E) \cdot \rho(E)]}{\partial E}\right)_{E_F}$$

Przykład:

Zależność $E_F(T)$ (podstawiamy $A(E) = 1$ i zakładamy $n(T) = \text{const} = \int_0^{E_{F0}} 1 \cdot \rho(E) dE - E_{F0}$ określa wtedy wartość energii Fermiego dla $T = 0K$). Dla $T \neq 0$:

$$\begin{aligned} n(T) &= \int_0^{E_F} 1 \cdot f(E) \cdot \rho(E) dE \approx \int_0^{E_F} \rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial[1 \cdot \rho(E)]}{\partial E}\right)_{E_F} \\ &\approx \int_0^{E_{F0}} \rho(E) dE + (E_F - E_{F0}) \rho(E_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial[1 \cdot \rho(E)]}{\partial E}\right)_{E_F} \end{aligned}$$

Stąd po przekształceniach:

$$E_F = E_{F0} - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial[\ln \rho(E)]}{\partial E}\right)_{E_F}$$

2013-06-02

8

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Przykład:

Zależność $E_F(T)$ (podstawiamy $A(E) = 1$ i zakładamy $n(T) = const = \int_0^{E_F} 1 \cdot \rho(E) dE$)

$$A(T) \approx \int_0^{E_F} A(E) \cdot \rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial [A(E) \cdot \rho(E)]}{\partial E} \right)_{E_F}$$

$$E_F = E_{F0} - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial [\ln \rho(E)]}{\partial E} \right)_{E_F}$$

Przykład:

Energia wewnętrzna gazu elektronowego (podstawiamy $A(E) = E$)

$$U(T) = U_0 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho(E_F)$$

W metalach gęstość stanów na powierzchni Fermiego decyduje o wszystkim!

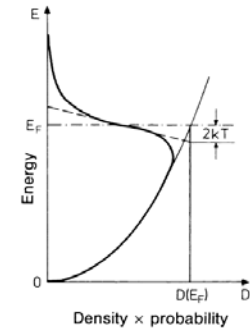
2013-06-02

9

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Przykład:



W metalach gęstość stanów na powierzchni Fermiego decyduje o wszystkim!

Fig. 6.7. Explanation of the specific heat capacity of quasi-free metal electrons. The effect of raising the temperature from 0K to T is to allow electrons from $\leq 2kT$ below the Fermi energy to be promoted to $\leq 2kT$ above E_F . The tangent (---) intersects the energy axis at $E_F + 2kT$

2013-06-02

10

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Przykład:

Zależność $E_F(T)$ (podstawiamy $A(E) = 1$ i zakładamy $n(T) = const$)

$$A(T) \approx \int_0^{E_F} A(E) \cdot \rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial [A(E) \cdot \rho(E)]}{\partial E} \right)_{E_F}$$

$$E_F = E_{F0} - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial [\ln \rho(E)]}{\partial E} \right)_{E_F}$$

Przykład:

Energia wewnętrzna gazu elektronowego (podstawiamy $A(E) = E$)

$$U(T) = U_0 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho(E_F)$$

W metalach liczą się elektrony na poziomie Fermiego:

$$\rho(E) \propto \sqrt{E} \Rightarrow \rho(E_F) \propto \sqrt{E_F} \Rightarrow \rho(E) = \rho(E_F) \sqrt{E/E_F}$$

$$n = \int_0^{E_F} \rho(E) dE = \frac{2}{3} \rho(E_F) \frac{E_F^{3/2}}{\sqrt{E_F}} = \frac{2}{3} \rho(E_F) E_F \Rightarrow \rho(E_F) = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F}$$

$$U(T) = U_0 + \frac{\pi^2}{4} (k_B T)^2 \frac{n}{E_F}$$

2013-06-02

11

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Przykład:

Energia wewnętrzna gazu elektronowego (podstawiamy $A(E) = E$)

$$U(T) = U_0 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho(E_F)$$

W metalach liczą się elektrony na poziomie Fermiego:

$$\rho(E) \propto \sqrt{E} \Rightarrow \rho(E_F) \propto \sqrt{E_F} \Rightarrow \rho(E) = \rho(E_F) \sqrt{E/E_F}$$

$$n = \int_0^{E_F} \rho(E) dE = \frac{2}{3} \rho(E_F) \frac{E_F^{3/2}}{\sqrt{E_F}} = \frac{2}{3} \rho(E_F) E_F \Rightarrow \rho(E_F) = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F}$$

$$U(T) = U_0 + \frac{\pi^2}{4} (k_B T)^2 \frac{n}{E_F}$$

Przykład:

Elektronowe ciepło molowe (podstawiamy $A(E) = E$, a gęstość $\rho(E_F) = n$, N_A , $k_B N_A = R$)

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{2} R \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$$

2013-06-02

12

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Przykład:

Zależność $E_F(T)$ (podstawiamy $A(E) = 1$ i zakładamy $n(T) = const$)

$$A(T) \approx \int_0^{E_F} A(E) \cdot \rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial [A(E) \cdot \rho(E)]}{\partial E} \right)_{E_F}$$

$$E_F = E_{F0} - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{\partial [\ln \rho(E)]}{\partial E} \right)_{E_F}$$

Przykład:

Energia wewnętrzna gazu elektronowego (podstawiamy $A(E) = E$)

$$U(T) = U_0 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho(E_F)$$

W metalach liczą się elektrony na poziomie Fermiego: $\rho(E) \propto \sqrt{E} \Rightarrow \rho(E_F) \propto \sqrt{E_F} \Rightarrow$

$$\rho(E) = \rho(E_F) \sqrt{E/E_F}$$

Przykład:

Elektronowe ciepło molowe (podstawiamy $A(E) = E$, a gęstość $\rho(E_F) = n = N_A$)

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{2} R \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$$

2013-06-02

13

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Przykład:

Elektronowe ciepło molowe (podstawiamy $A(E) = E$, a gęstość $\rho(E_F) = n = N_A$)

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{2} R \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$$

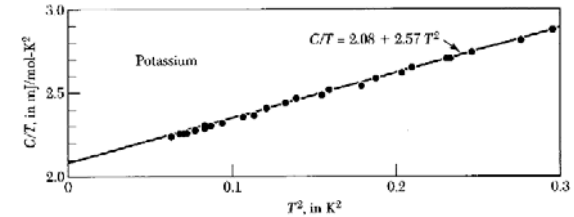


Figure 9 Experimental heat capacity values for potassium, plotted as C/T versus T^2 . (After W. H. Lichten and N. E. Phillips.)

Ch. Kittel

2013-06-02

14

Klasyczny metal

Średnia statystyczna (wielkości zależnej od energii):

Przykład:

Elektronowe ciepło molowe (podstawiamy $A(E) = E$, a gęstość $\rho(E_F) = n = N_A$)

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{2} R \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$$

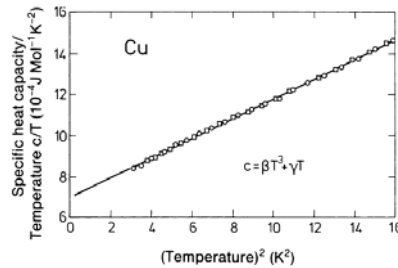


Fig. 6.8. Plot of c_v/T against T^2 for copper. The experimental points (\circ and \square) stem from two separate measurements [6.3]

lbach, Luth

2013-06-02

15

Pojemność ciepła (fononowa)

Model Debye'a:

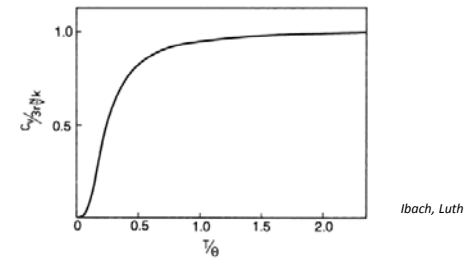
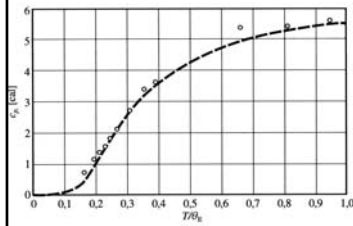


Fig. 5.3. The specific heat capacity per unit volume according to the Debye model. The specific heat is normalized to the Boltzmann constant k_B , the density of unit cells N/V and the number of atoms in the unit cell r . In this model different materials are only distinguished by their values of Debye temperature θ_D

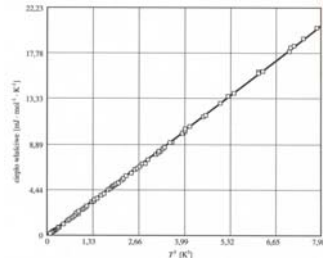
2013-06-02

16

Pojemność cieplna (fononowa)



diamant, linia – model Einsteina



stały argon, linia – model Debye'a

Ch. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego

2013-06-02

17

Statystyka elektronów w kryształach

Jeśli gaz elektronowy (dziurowy) nie jest silnie zdegenerowany, to w celu policzenia $A(T)$ trzeba wykonywać całkowania bez przybliżeń stosowanych powyżej dla metali:

$$A(T) = \int_{SB} A(E(\vec{k})) \cdot f(E(\vec{k}), T) \cdot \rho(\vec{k}) dV_k = \int_{\text{pasmo}} A(E) \cdot f(E, T) \cdot \rho(E) dE$$

Zarówno $A(E)$ jak i można rozwinąć na szereg: $f(E) = E^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n E^n$, a więc $A(T)$ będzie się wyrażało poprzez tzw. **całki Fermiego-Diraca** (czasami definiowane bez funkcji Γ Eulera stojącej przed całką):

$$F_j(\eta) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^j}{\exp(\varepsilon - \eta) + 1} d\varepsilon$$

Przykład:

dla $A = 1$ oraz trójwymiarowej gęstości stanów parabolicznego pasma przewodnictwa:

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$$

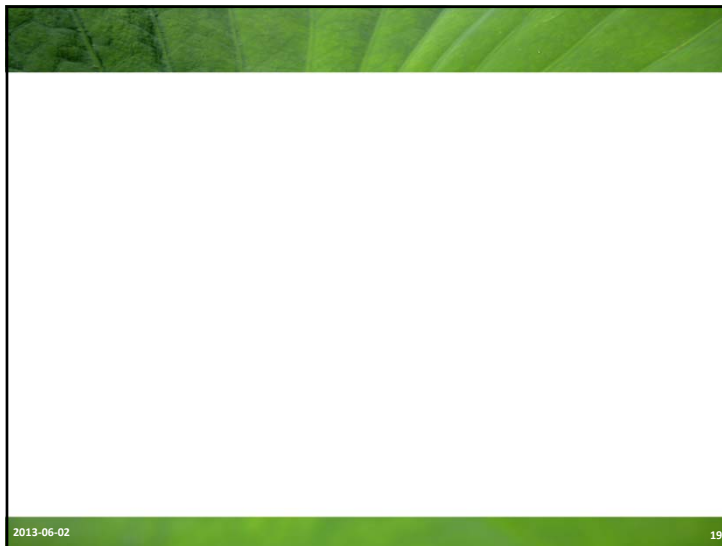
zredukowany poziom Fermiego

otrzymujemy:

$$n(T) = \int_0^{\infty} f(E, T) \rho(E) dE = 2 \left(\frac{m^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} F_{1/2}(\eta)$$

2013-06-02

18

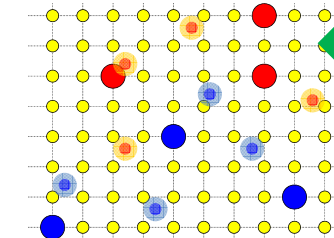


2013-06-02

19

Domieszki i defekty

- Nośniki:**
dziury +
elektrony -
- Domieszki:**
Akceptory (typ p)
Donory (typ n)



Półprzewodniki

	II	III	IV	V	VI
Be	B	C	N	O	
Mg	Al	Si	P	S	
Zn	Ga	Ge	As	Se	
Cd	In	Sn	Sb	Te	

- Grupa IV: diament, Si, Ge
Grupy III-V: GaAs, AlAs, InSb, InAs...
Grupy II-VI: ZnSe, CdTe, ZnO, SdS...

Domieszki i defekty

W jaki sposób kontrolować koncentrację nośników?

W półprzewodnikach spotykamy szereg odstępstw od idealnej struktury kryształu:

- defekty struktury kryształu, luki, atomy w położeniu międzywęzłowym, dyslokacje powstałe np. w procesie wzrostu.
- obce atomy (**domieszki**) wprowadzane intencjonalnie lub wskutek zanieczyszczeń (poziom czystości)

Wskutek ich występowania pojawiają się między innymi:

- stany dozwolone w przerwie wzbronionej na skutek odstępstw od potencjału idealnej sieci
- ładunki przestrzenne w izolatorach
- ekranowanie przez swobodne nośniki

Stany domieszkowe dzielimy na:

- **głębokie** – potencjał krótkozasięgowy, zlokalizowany głównie w obszarze jednej komórki elementarnej – np. luka, domieszka izoelektronowa (o tej samej wartościowości co macierzysty atom np. N w InP).
- **płytkie** - głównie potencjał długozasięgowy – kulombowski

2013-06-02

21

Domieszki i defekty

W jaki sposób kontrolować koncentrację nośników?

Defekty – odstępstwa od idealnej periodycznej struktury kryształu

Klasyfikacja defektów:

ze względu na zawartość obcych atomów:

- rodzime (niezawierające obcych atomów) i niesamoistne (np. domieszki)

ze względu na wymiar:

- punktowe – luki (np. V_{Ga} , V_{As} w GaAs), atomy międzywęzłowe (np. Ga), atomy antypodstawieniowe (np. As w miejscu Ga: As_{Ga}), obce atomy podstawieniowe, tzn. domieszki (np. Si_{Ga})
- kompleksy defektów punktowych, np. pary Frenkla $V_A - A_i$
- liniowe (np. dyslokacje),
- defekty powierzchniowe (np. granice ziaren)
- defekty objętościowe (np. wytrącenia)

M. Baj

2013-06-02

22

Domieszki i defekty

W jaki sposób kontrolować koncentrację nośników?

Defekty – odstępstwa od idealnej periodycznej struktury kryształu

Klasyfikacja defektów:

ze względu na ich aktywność elektryczną:

- donory (ewentualnie wielokrotne – np. As_{Ga} w GaAs jest podwójnym donorem), akceptory, domieszki izoelektronowe (np. N_p w GaP czy C_{Si} w krzemie)

ze względu na charakter (w szczególności lokalizację) funkcji falowej elektronu związanego przez defekt:

- **płytkie** (wodoropodobne, opisywane w przybliżeniu masy efektywnej, gdzie potencjał wiążący jest wolnozasięgowy – kulombowski), **długozasięgowy**
- **Głębokie** mające stany zlokalizowane leżące w przerwie energetycznej, i/lub stany rezonansowe, zdegenerowane z kontinuum stanów pasmowych, ale pomimo tego mające w dużym stopniu charakter zlokalizowany – np. luka, domieszki metali przejściowych, tzw. centra DX w związkach półprzewodnikowych $A_{VI}B_{VI}$ i $A_{III}B_V$ czy izoelektronowe domieszki N w GaAs lub GaP. Potencjał wiążący jest w dużym stopniu **krótkozasięgowy**.

M. Baj

2013-06-02

23

Domieszki i defekty

W jaki sposób kontrolować koncentrację nośników?

Defekty – odstępstwa od idealnej periodycznej struktury kryształu

Klasyfikacja defektów:

- wprowadzają stany zlokalizowane – zarówno w przerwie jak i stany rezonansowe
- determinują własności elektryczne półprzewodników
- mogą mieć bardzo poważny wpływ na niektóre własności optyczne (np. wydajność rekombinacji promienistej)
- prowadzą do powstawania obszarów ładunku przestrzennego (także w izolatorach)
- mogą mieć istotny, niepożądany wpływ na funkcjonowanie przyrządów półprzewodnikowych – np. dyslokacje

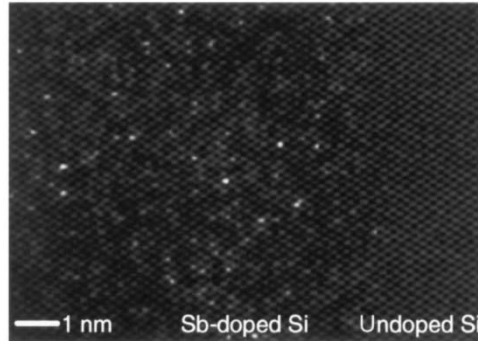
M. Baj

2013-06-02

24

Domieszki i defekty

Voyles, P. M. et al. *Nature* **416**, 826-829 (2002)



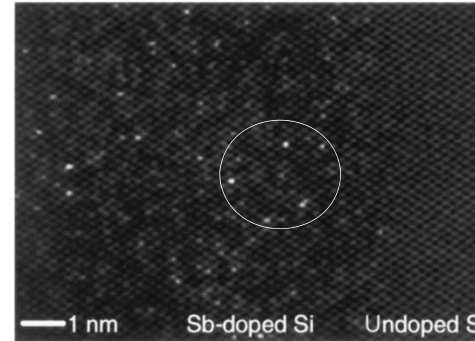
10²² atomów Si
10¹⁷ domieszek
Rozmiar tranzystora 50 nm
Średnia ilość domieszek 12.5

State-of-the-art TEM image of ultrathinned (5 nm) sample.

25

Domieszki i defekty

Voyles, P. M. et al. *Nature* **416**, 826-829 (2002)



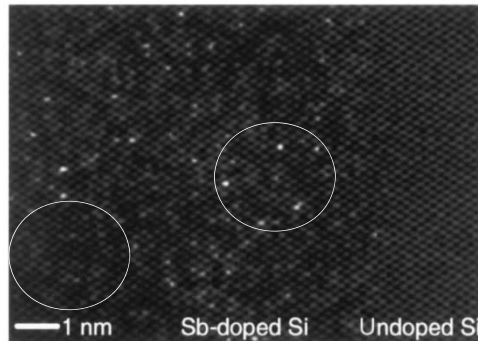
10²² atomów Si
10¹⁷ domieszek
Rozmiar tranzystora 50 nm
Średnia ilość domieszek 12.5

State-of-the-art TEM image of ultrathinned (5 nm) sample.

26

Domieszki i defekty

Voyles, P. M. et al. *Nature* **416**, 826-829 (2002)



10²² atomów Si
10¹⁷ domieszek
Rozmiar tranzystora 50 nm
Średnia ilość domieszek 12.5

State-of-the-art TEM image of ultrathinned (5 nm) sample.

27

Płytkie stany domieszkowe

Stan donorowy stowarzyszony ze sferycznym pasmem przewodnictwa z minimum w punkcie Γ :

Atom domieszki o wartościowości o jeden większej niż atom podstawiany – np. Si_{Ga} w GaAs staje się źródłem potencjału kulombowskiego zmodyfikowanego stałą dielektryczną kryształu, wywołanego dodatkowym protonem w jądrze. Dodatkowy elektron będący w paśmie przewodnictwa odczuwa ten potencjał. Jego stany są opisane **równaniem masy efektywnej**.

Potencjał domieszki – głównie kulombowski ekranowany statyczną stałą dielektryczną ϵ_s :

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r}$$

Część krótkozasięgową potencjału zaniedbujemy (przynajmniej na razie)

Równanie masy efektywnej na funkcję envelopes $\Phi(\vec{r})$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r}\right)\Phi(\vec{r}) = (E - E_c(0))\Phi(\vec{r})$$

gdzie $E_c(0)$ jest energią minimum pasma przewodnictwa.

2013-06-02

28

Płytkie stany domieszkowe

Równanie masy efektywnej na funkcję envelopes $\Phi(\vec{r})$ (przypomnienie z wykładu 9):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) + U(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r}) = E_n(\vec{k})\Psi(\vec{r})$$

gdzie $V(\vec{r})$ – potencjał periodyczny sieci, $U(\vec{r})$ – potencjał wolnozmienny (dodany), $V(\vec{r})$ – potencjał periodyczny sieci, $E_n(\vec{k})$ – energie dla $U(\vec{r}) = 0$.

Rozwiązaniami dla n -tego pasma są funkcje $\Psi_n(\vec{r}) = \Phi_n(\vec{r}) \cdot u_{n,\vec{k}_0}(\vec{r})$, gdzie $u_{n,\vec{k}_0}(\vec{r})$ – rozwiązanie dla $U(\vec{r}) = 0$ i $\vec{k} = \vec{k}_0$,

Jest to tzw. równanie masy efektywnej:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta + U(\vec{r})\right]\Phi_n(\vec{r}) = [E - E_n(0)]\Phi_n(\vec{r})$$

2013-06-02

29

Płytkie stany domieszkowe

Rozwiązanie jak dla „przeskalowanego” atomu wodoru. Energie stanów związanych:

$$E_n = -Ry^* \cdot \frac{1}{n^2}, \quad Ry^* = Ry \frac{1}{\epsilon_s^2} \left(\frac{m^*}{m_e}\right)$$

np. dla GaAs: $m^* = 0,067 m_e$, $\epsilon_s = 12,6 \Rightarrow Ry^* \approx 5,7 \text{ meV}$ – energia jonizacji donora względem dna pasma przewodnictwa

efektywny promień Bohra:

$$a_B^* = a_B \cdot \epsilon_s \left(\frac{m_e}{m^*}\right)$$

co dla GaAs daje $a_B^* \approx 100 \text{ \AA}$, co stanowi około 20 stałych sieci GaAs

2013-06-02

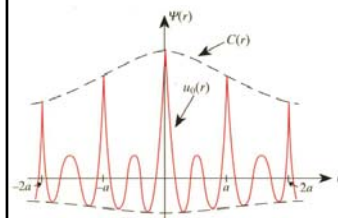
30

Płytkie stany domieszkowe

efektywny promień Bohra:

$$a_B^* = a_B \cdot \epsilon_s \left(\frac{m_e}{m^*}\right)$$

co dla GaAs daje $a_B^* \approx 100 \text{ \AA}$, co stanowi około 20 stałych sieci GaAs



Pełna funkcja falowa:

$$\Psi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r}) \cdot u_0(\vec{r})$$

$\Psi(\vec{r})$ – nieruchoma paczka falowa zbudowana ze stanów z okolicy $k = 0$

$\Phi(\vec{r})$ – wolnozmienna envelope

$u_0(\vec{r})$ – szybkozmienna funkcja Blocha

2013-06-02

31

Płytkie stany domieszkowe

Wolnozmienna envelope \Rightarrow paczka falowa zrobiona z funkcji Blocha z małego obszaru wokół (stan „zlokalizowany” w przestrzeni \vec{k})

Równanie masy efektywnej dopuszcza **rozwiązania stowarzyszone z innymi lokalnymi minimami pasma przewodnictwa** – pod każdym z bocznych minimów (np. w punkcie X czy L) mogą być stany wodoropodobne, które należy traktować jak stany wzbudzone.

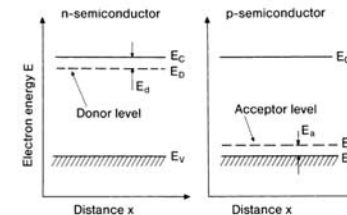


Fig. 12.7. Qualitative position of the ground state levels of donors and acceptors relative to the minimum of the conduction band E_C and the maximum of the valence band E_V . The quantities E_D and E_A are the ionization energies of the donor and acceptor, respectively

Ibach, Luth

2013-06-02

32

Płytkie stany domieszkowe

Wolnozmienna enwelopa \Rightarrow paczka falowa zrobiona z funkcji Blocha z małego obszaru wokół (stan „zlokalizowany” w przestrzeni \vec{k})

Równanie masy efektywnej dopuszcza **rozwiązania stowarzyszone z innymi lokalnymi minimami pasma przewodnictwa** – pod każdym z bocznych minimów (np. w punkcie X czy L) mogą być stany wodoropodobne, które należy traktować jak stany wzbudzone.

Część krótkozasięgową potencjału domieszki V_{cc} wprowadza poprawkę do energii stanów („central cell corrections”), zależną od atomu domieszki (tzw. przesunięcie chemiczne, „chemical shift”), istotną tylko dla wodoropodobnych stanów typu s :

$$\Delta E \approx \langle \Psi^* | V_{cc} | \Psi \rangle$$

Potencjalnie możliwe związanie dodatkowego elektronu: D^- (powinowactwo elektronowe wodoru $E_{ea} = 0,75 \text{ eV} \approx 0,055 \text{ Ry}$)

2013-06-02

33

Płytkie stany domieszkowe

Równanie masy efektywnej dopuszcza **rozwiązania stowarzyszone z innymi lokalnymi minimami pasma przewodnictwa** – pod każdym z bocznych minimów (np. w punkcie X czy L) mogą być stany wodoropodobne, które należy traktować jak stany wzbudzone.

Stan donorowy stowarzyszony z boczny minimum pasma przewodnictwa – powierzchnie stałej energii – elipsoidy obrotowe z minimum w \vec{k}_0 : $\vec{k} = \vec{k}_0 + \vec{k}_\perp + \vec{k}_\parallel$

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_\perp^2}{m_\perp} + \frac{k_\parallel^2}{m_\parallel} \right)$$

Równanie masy efektywnej na Φ :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_\perp} \frac{\partial^2}{\partial x_\perp^2} + \frac{1}{m_\parallel} \frac{\partial^2}{\partial x_\parallel^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r} \right] \Phi(\vec{r}) = [E - E_c(\vec{k}_0)] \Phi(\vec{r})$$

Symetria hamiltonianu – walcowa \Rightarrow będzie częściowo zniesiona degeneracja stanów wodoropodobnych.

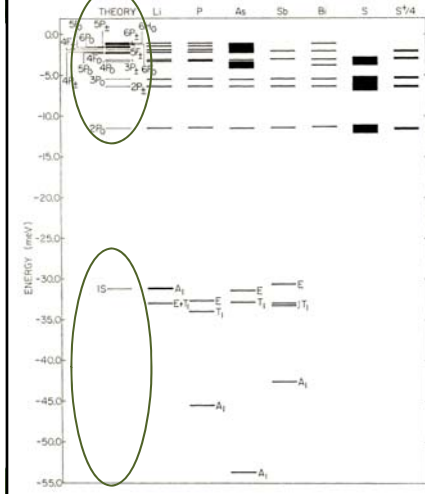
Jeśli np. chcemy znaleźć stan podstawowy, możemy zastosować metodę wariacyjną z funkcją próbną postaci (W. Kohn, J.M. Luttinger, *Physical Review* **98**, 915 (1955)):

$$\Phi(x, y, z) = (\pi a^2 b)^{-1/2} \exp \left[-\left(\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \right)^{1/2} \right]$$

2013-06-02

34

Płytkie stany domieszkowe



wyniki rachunków wariacyjnych dla krzemu – R.A. Faulkner, *Physical Review* **184**, 713 (1969) w porównaniu z danymi doświadczalnymi:

Stany wzbudzone – zupełnie nieźle

stan podstawowy – kiepsko; rachunek w ogóle nie przewiduje rozszczepienia stanu podstawowego

M. Baj.

35

Płytkie stany domieszkowe

Minimów jest 6 (a więc można byłoby oczekiwać 6-krotnej degeneracji, ale to w kryształach niemożliwe !)

- potencjał krótkozasięgowy sprzęga stany pod różnymi dolinami
- rozszczepienie (tzw. valley-orbit coupling), 6-krotna degeneracja zniesiona (1+2+3) + przesunięcie chemiczne
- funkcje falowe są odpowiednimi (reprezentacje nieprzywiedlne grupy T_d : A_1, E, T_2) kombinacjami funkcji z różnych dolin
- podobna sytuacja w innych półprzewodnikach z minimum pasma przewodnictwa poza punktem Γ (np. Ge, GaP ...)

M. Baj.

2013-06-02

36

Płytkie stany domieszkowe

Akceptory w półprzewodnikach o strukturze diamentu i blendy cynkowej znacznie bardziej skomplikowana sytuacja:

- degeneracja pasm w punkcie Γ
- pofałdowanie powierzchni izoenergetycznych („warping”) \Rightarrow nie da się wprowadzić prostego tensora masy efektywnej dla pasm walencyjnych, nie da się zastosować przybliżenia masy efektywnej w najprostszej postaci...

Literatura:

W. Kohn, D. Schechter, *Physical Review* **99**, 1903 (1955)
 A. Baldereschi, N.O. Lipari, *Physical Review B* **8**, 2697 (1973)
 A. Baldereschi, N.O. Lipari, *Physical Review B* **9**, 1527 (1974)

M. Baj.

2013-06-02

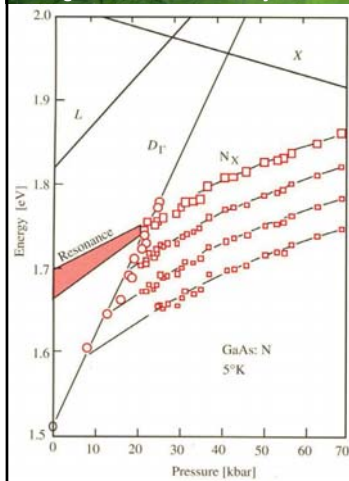
37



2013-06-02

38

Głębokie stany domieszkowe



Funkcja falowa elektronu (elektronów) **silnie zlokalizowana**, nie da się jej utworzyć jako kombinacji liniowej funkcji Blocha z niewielkiego obszaru strefy Brillouina:
 – trzeba brać całą SB i wiele pasm,
 – nie można mówić o stanach „stowarzyszonych” z jakimkolwiek ekstremum pasma,
 – w funkcji czynników zewnętrznych wpływających na strukturę pasmową (np. ciśnienie hydrostatyczne, mieszanie kryształów) energie tych stanów nie śledzą żadnego ekstremum, a raczej podążają za środkiem ciężkości pasma

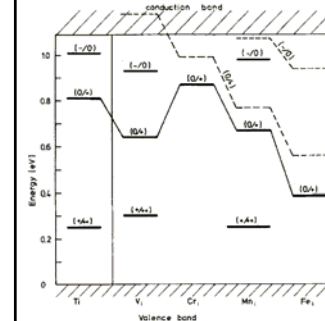
D.J. Wolford et al., in *Physics of Semiconductors 1984*, ed. J.D. Chadi, W.A. Harrison, p. 627

M. Baj.

39

Głębokie stany domieszkowe

Nie ma prostych, uniwersalnych metod opisu
 Możliwe **różne stany ładunkowe** centrum domieszkowego/defektu (przykład – metale przejściowe 3d)



Domieszki międzywęzłowe metali przejściowych w krzemie:
 • poziomy akceptorowe i donorowe
 • podobne energie poziomów dla różnych TMs

E. Weber, *Appl. Phys. A* **30**, 1 (1983)

Fig. 15. Energy levels of interstitial 3d metals in silicon (full lines), see Table 3, compared with the results of X_α calculations of DeLeo et al. [15] (broken lines)

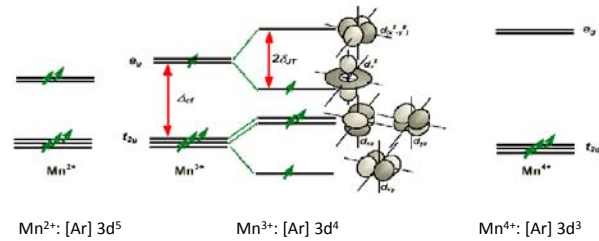
M. Baj.

40

Głębokie stany domieszkowe

Lokalna symetria defektu może wynikać z bilansu energii elektronej i energii oddziaływania z ligandami (przykład – **efekt Jahn-Tellera**)

Encyclopedia Britannica: According to the Jahn-Teller theorem, any molecule or complex ion in an electronically degenerate state will be unstable relative to a configuration of lower symmetry in which the degeneracy is absent.



M. Baj.

2013-06-02

41

Głębokie stany domieszkowe

Silna lokalizacja prowadzi do **dużego oddziaływania z siecią krystaliczną**:

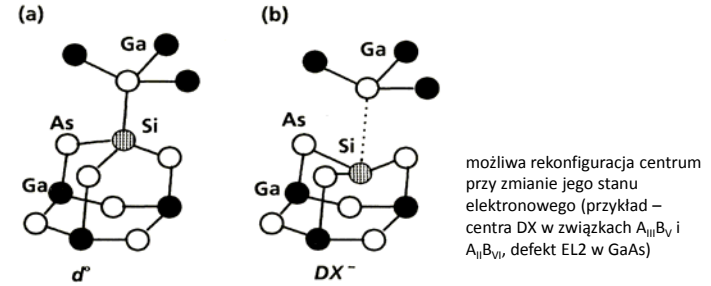


FIG. 2. Schematic views of the normal substitutional sites and the broken-bond configurations giving rise to the DX centers in Si- and S-doped Al_{1-x}Ga_{1-x}As alloys are shown

D.J. Chadi, K.J. Chang, *Phys. Rev. B* **39**, 10063 (1989)

M. Baj.

2013-06-02

42

Głębokie stany domieszkowe

metastabilne obsadzenia defektów elektronami
trwałe fotoprzewodnictwo
duże różnice między optycznymi i termicznymi energiami jonizacji

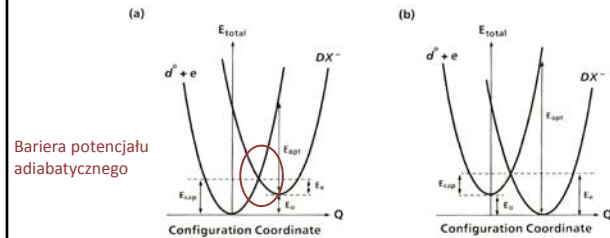


FIG. 1. Configuration-coordinate diagrams for DX centers in GaAs and typical Al_{1-x}Ga_{1-x}As alloys are shown in (a) and (b), respectively. The DX center is a metastable resonance in GaAs and has a higher energy than a shallow donor state (d⁰). For Al_{1-x}Ga_{1-x}As alloys characterized by x ≥ 0.22, DX centers are more stable than the shallow donors.

D.J. Chadi, K.J. Chang, *Phys. Rev. B* **39**, 10063 (1989)

M. Baj.

2013-06-02

43

Głębokie stany domieszkowe

Silne oddziaływanie z siecią może prowadzić do **ujemnej efektywnej wartości energii korelacji Hubbarda U** (tzw. „negative U”) – ma to miejsce zarówno w przypadku centrów DX, jak i np. dla V_{Si} w Si, Bi w Si, Zn w Si

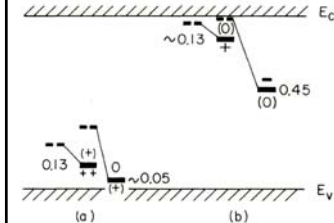


FIG. 1. (a) Suggested level positions for the isolated vacancy. Greater Jahn-Teller relaxation for the V³ state causes a level inversion with the first donor state (0/+) below the second (+/++). (b) Suggested level positions for interstitial boron. Change of lattice configuration as the charge state changes from B_i³⁺ → B_i²⁺ → B_i⁺ causes level inversion with the acceptor level (-/0) below the donor (0/+). The dashed lines indicate schematically the level positions before lattice readjustment. Level positions (in electronvolts) are denoted from the nearest band edge.

G.D. Watkins, J.R. Troxell, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 593 (1980)

Reakcje: $2V^+ \rightarrow V^0 + V^{++}$ i $2B_i^0 \rightarrow B_i^- + B_i^+$ prowadzą do obniżenia energii układów; przy podnoszeniu poziomu Fermiego względem energii poziomów defektowych.

Defekty te od razu wypalają po dwa elektrony

M. Baj.

2013-06-02

44



Obsadzenie poziomów domieszkowych

Obsadzenie poziomów domieszkowych/defektowych w stanie równowagi termodynamicznej

„Obsadzanie” stanów (nie tylko zlokalizowanych – domieszek czy defektów, ale także stanów pasmowych) elektronami oznacza **wymianę cząstek (elektronów) pomiędzy rezerwuarem i rozważanym podukładem**.

Wielki zespół kanoniczny (podukład wymienia cząstki i energię z otoczeniem)

Prawdopodobieństwo termodynamiczne (nieunormowane) znalezienia podukładu w stanie j , w którym znajduje się n_j cząstek (elektronów) i w którym energia podukładu wynosi E_j (jest to całkowita energia, obejmująca wszystkie n_j cząstek):

$$P_j = e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

ξ - potencjał chemiczny.

Suma statystyczna:

$$Z = \sum_j P_j = \sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}$$

2013-06-02

46

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Suma statystyczna:

$$Z = \sum_j P_j = \sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}$$

Średnie statystyczne:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_j A_j \cdot e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}}$$

Przykład:

elektron swobodny obsadzający (lub nie) stan elektronowy o danym \vec{k} i danym spinie:

możliwe 2 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E$$

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle = \frac{0 \cdot e^0 + 1 \cdot e^{-\beta(E - \xi)}}{1 + e^{-\beta(E - \xi)}} = \frac{1}{e^{\beta(E - \xi)} + 1} = f(E, T)$$

(rozkład Fermiego-Diraca)

2013-06-02

47

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład:

elektron swobodny obsadzający (lub nie) stan elektronowy o danym \vec{k} i dowolnym spinie:

możliwe 2 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E \text{ (spin } \uparrow)$$

$$n_2 = 1; E_2 = E \text{ (spin } \downarrow)$$

$$n_3 = 2; E_3 = 2E \text{ (spin } \uparrow\downarrow)$$

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle = \frac{0 \cdot e^0 + 1 \cdot e^{-\beta(E - \xi)} + 1 \cdot e^{-\beta(E - \xi)} + 2 \cdot e^{-\beta(2E - 2\xi)}}{1 + e^{-\beta(E - \xi)} + e^{-\beta(E - \xi)} + e^{-\beta(2E - 2\xi)}} = 2 \frac{e^{-\beta(E - \xi)}(1 + e^{-\beta(E - \xi)})}{(e^{-\beta(E - \xi)} + 1)^2} = 2f(E, T)$$

(rozkład Fermiego-Diraca x2)

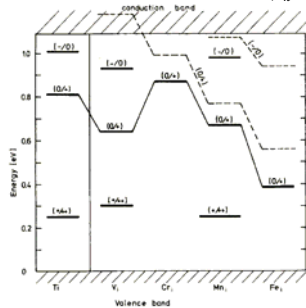
2013-06-02

48

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Stosunek prawdopodobieństw znalezienia domieszki/defektu z $n + 1$ elektronami i z n elektronami:

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{N_{n+1}}{N_n} = \frac{\sum_{j:n_j=n+1} e^{-\beta[E_j-(n+1)\xi]}}{\sum_{k:n_k=n} e^{-\beta[E_k-n\xi]}} = \frac{g_{n+1}}{g_n} \cdot e^{-\beta[(E_{n+1}-E_n)-\xi]}$$



$\sum_n N_n = N$ – koncentracja domieszek

E_{n+1} i E_n – najniższe spośród wszystkich energii E_j podkładu odpowiednio z $n + 1$ i n elektronami

Przy podnoszeniu poziomu Fermiego zapełniają się kolejne poziomy domieszkowe

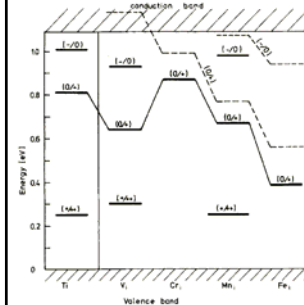
$E^{n+1/n}$ – tzw. energia poziomu domieszkowego/defektowego „numerowana” stanami ładunkowymi $n + 1$ i n

g_{n+1} , g_n – tzw. degeneracje stanów podkładu z $n + 1$ i n elektronami

Fig. 15. Energy levels of interstitial 3d metals in silicon (full lines), see Table 3, compared with the results of X_α calculations of DeLeo et al. [15] (broken lines)

Obsadzenie poziomów domieszkowych

g_{n+1} , g_n – tzw. degeneracje stanów podkładu z $n + 1$ i n elektronami
Degeneracje g_{n+1} i g_n uwzględniają możliwość występowania wielu różnych stanów podkładu odpowiadających tej samej liczbie cząstek (w tym stanów wzbudzonych):



$$g_n = \alpha_{n,0} + \sum_{i=1,2,\dots} \alpha_{n,i} e^{-\beta \epsilon_{n,i}}$$

$\alpha_{n,0}$ i $\alpha_{n,i}$ są degeneracjami odpowiednio stanu podstawowego podkładu z n elektronami oraz stanów wzbudzonych z energiami wyższymi od stanu podstawowego o $\epsilon_{n,i}$ (energie wzbudzeń)

Tak definiowane degeneracje g_n na ogół zależą od temperatury

Fig. 15. Energy levels of interstitial 3d metals in silicon (full lines), see Table 3, compared with the results of X_α calculations of DeLeo et al. [15] (broken lines)

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład – donor (pomijamy stany wzbudzone)

stan ładunkowy (+) realizowany na 1 sposób: $g_+ = 1$

stan ładunkowy (0) realizowany na 2 sposoby (spin \uparrow lub \downarrow): $g_0 = 2$

energia poziomu donorowego $E^{0/+} = E_D$

koncentracja donorów N_D

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{p_0}{p_+} = \frac{g_0}{g_+} \cdot e^{-\beta[E_D-\xi]}, \quad p_+ + p_0 = 1$$

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu donorowego:

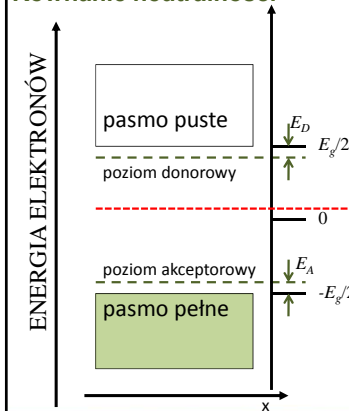
$$p_0 = \langle n \rangle = \frac{1}{1 + \frac{g_+}{g_0} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}}$$

koncentracja obsadzonych donorów (donorów neutralnych N_D^0)

$$N_D^0 = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}}$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności



Koncentracja nośników w półprzewodniku niesamoistnym

Rozważmy półprzewodnik, w którym:

N_A – koncentracja akceptorów

N_D – koncentracja donorów

N_A^0 – koncentracja neutralnych akceptorów

N_D^0 – koncentracja neutralnych donorów

n – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa

p – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Jeśli zarówno donory jak i akceptory są płytkie, a gaz elektronowy i dziurowy nie jest zdegenerowany, to: $E_D - \xi \gg k_B T$, $\xi - E_A \gg k_B T$, $N_D^0 \ll N_D$, $N_A^0 \ll N_A$ (czyli praktycznie wszystkie domieszki są zjonizowane).

$$\begin{cases} \Delta n = n - p \approx N_D - N_A \\ n \cdot p = n_i^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} n = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_i^2} + \Delta n \right] \\ p = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_i^2} - \Delta n \right] \end{cases}$$

Jeżeli $\Delta n > 0$ (półprzewodnik typu n – dla typu p rozważanie są symetryczne) i $\Delta n \gg n_i$, (w $T=300K$: $n_i(\text{Ge}) < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $n_i(\text{Si}) < 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, $n_i(\text{GaAs}) < 10^{10} \text{ cm}^{-3}$):

$$n \approx N_D - N_A$$

$$p \approx \frac{n_i^2}{N_D - N_A} = \frac{N_C(T) \cdot N_V(T)}{N_D - N_A} \cdot e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

koncentracja nośników większościowych jest określona przez efektywną koncentrację domieszek, koncentracja nośników mniejszościowych może być bardzo mała (np. Si).

2013-06-02

53

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Kompensacja

półprzewodniki kompensowane – zawierające zarówno donory jak i akceptory

w odpowiednio wysokich temperaturach koncentracja nośników większościowych dana przez efektywną koncentrację domieszek $|N_D - N_A|$

koncentracja centrów rozpraszających (ładunków): $N_D + N_A$

współczynnik kompensacji – stosunek koncentracji domieszek mniejszościowych do większościowych:

$$k = \frac{N_A}{N_D} \text{ dla typu } n$$

$$k = \frac{N_D}{N_A} \text{ dla typu } p$$

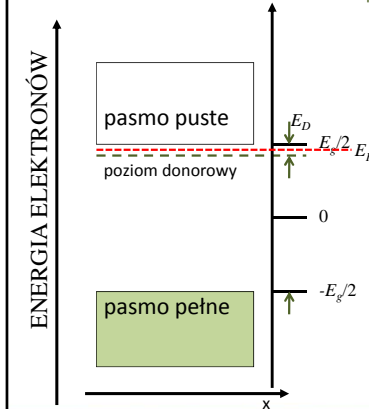
w półprzewodnikach silnie kompensowanych ($k \approx 1$) silne fluktuacje potencjału elektrostatycznego pochodzącego od domieszek, **lokalizacja związana z nieporządkiem, efekty perkolacyjne**, itp.

2013-06-02

54

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności – niska temperatura, obszar jonizacji termicznej domieszek



Niska temperatura, obszar jonizacji termicznej domieszek

Rozważmy półprzewodnik, w którym:
 $N_A \approx 0$ – koncentracja akceptorów
 N_D – koncentracja donorów
 N_A^0 – koncentracja neutralnych akceptorów
 N_D^0 – koncentracja neutralnych donorów
 n – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa
 $p \approx 0$ – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

Z warunku neutralności kryształu:

$$n = N_D - N_D^0$$

2013-06-02

55

Obsadzenie poziomów domieszkowych

teraz znaczna część donorów będzie neutralnych (energie liczone od dna pasma przewodnictwa):

$$N_D - N_D^0 = N_D - \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D - \xi]}} = \dots = \frac{N_D}{2} \cdot e^{\beta[E_D - \xi]}$$

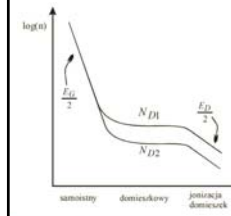
do policzenia obsadzenia pasma przewodnictwa możemy użyć rozkładu Boltzmanna:

$$n = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\xi - E_C}{k_B T}} = N_C(T) \cdot e^{\frac{\xi}{k_B T}}$$

Co wobec $n = N_D - N_D^0$ daje:

$$\xi = \frac{E_D}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left(\frac{N_D}{2N_C(T)} \right)$$

$$n(T) = \sqrt{\frac{N_C(T) \cdot N_D}{2}} \cdot e^{\frac{E_D}{2k_B T}}$$

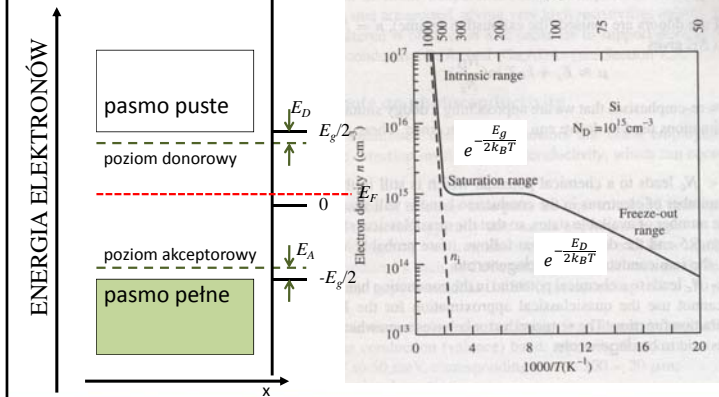


2013-06-02

56

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności



2013-06-02

57

Obsadzenie poziomów domieszkowych

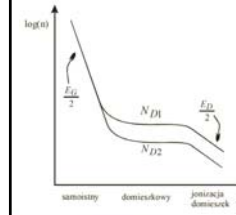
dla półprzewodników skompensowanych w niskich temperaturach energia aktywacji termicznej wynosi E_D , a nie $\frac{E_D}{2}$

jeśli domieszek jest dużo, tak, że funkcje falowe związanych na nich elektronów się przekrywają – energie jonizacji maleją, tworzą się pasma domieszkowe

przy koncentracjach domieszek rzędu:

$$a_B^* \cdot (N_D)^{\frac{1}{3}} \approx 0.26$$

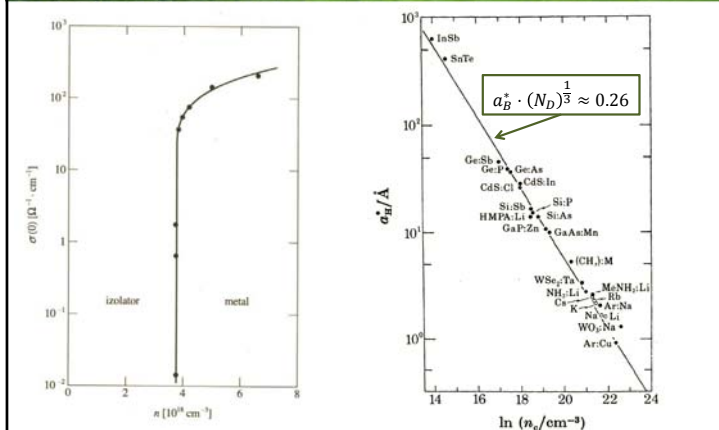
zachodzi przejście fazowe niemetale-metal (tzw. przejście Motta)



2013-06-02

58

Obsadzenie poziomów domieszkowych



P.P. Edwards, M.J. Sienko, *J. Am. Chem. Soc.* **103**, 2967 (1981)

2013-06-02

59