

Curs 12

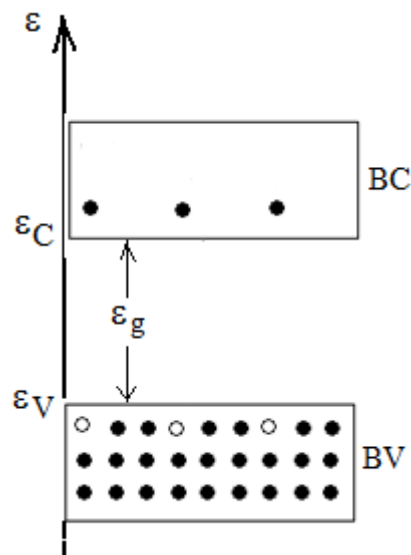
➤ Teoria de banda. Diagrama de benzi

- Energia electronului in atom este cuantificata: electronii unui element dat ocupa stari energetice discrete, si anume cei mai apropiati de nucleu ocupa nivele de energie cea mai joasa si sunt strans legati de atom. La formarea cristalului, nivelele electronice ale atomilor exteriori, se regasesc in benzi de stari de energie, pe care electronii cristalului le pot ocupa in conditii specifice cristalului (natura si dimensiunea atomilor, tipul fortelor de coeziune, temperatura); acestea se numesc benzi de stari permise si sunt delimitate de intervale de stari nepermise.
- Diagrama de benzi reflecta distributia electronilor paturii externe a atomilor care formeaza cristalul, pe stari de energie permise la achilibru (in absenta unui camp electric extern, a unui gradient de temperatura, a radiatiei), precum si evolutia acestei distributii in prezenta unuia sau a mai multor campuri mentionate anterior.
- Diagrama de benzi contine benzile de energie formate din nivelele de energie cele mai inalte pe care electronii atomilor le pot ocupa: ultima banda de stari energetice ocupate de electronii legati de atomi, se numeste **banda de valenta**. Electronii avand aceste energii nu se pot misca in cristal. Electronii cu energii mai mari decat cele din banda de valenta, devin liberi, se pot misca dand nastere unui curent electric; aceste stari se gasesc in **banda de conductie** a cristalului.
- Cele doua benzi de stari permise, sunt separate de un interval de energii nepermise pentru electroni, numit **banda interzisa**. Aceasta este o caracteristica de material, care reflecta abilitatea acestuia de a genera un curent electric; largimea benzii interzise exprima energia necesara unui electron din banda de valenta pentru a deveni liber.
- ✓ Solidele pentru care banda interzisa nu exista, pot genera un curent electric la aplicarea unui camp electric foarte slab sau incalzandu-l foarte putin. Aceste solide se numesc **conductori**.
- ✓ Solidele pentru care banda interzisa are largime apreciabila, nu pot genera curent electric pentru valori uzuale de camp si/sau de temperatura. Aceste solide se numesc **izolatori**.

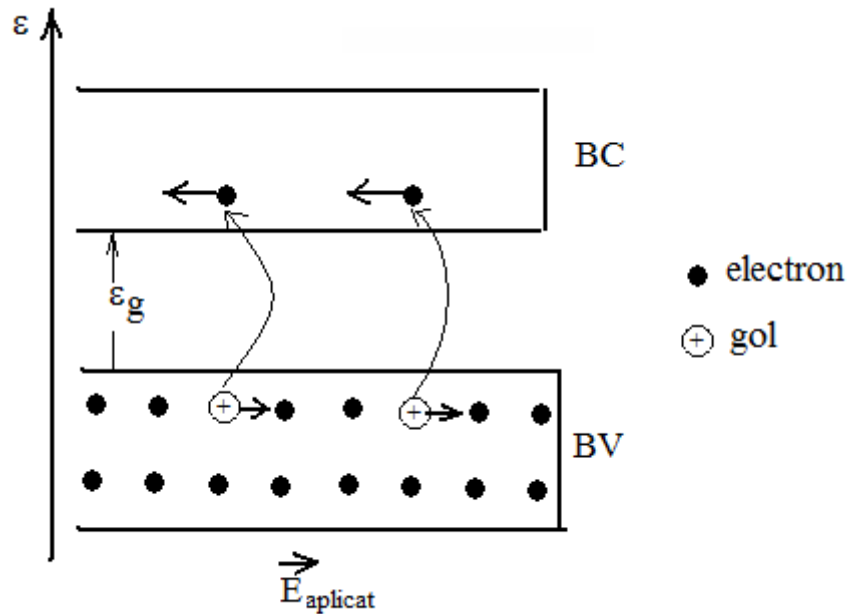
- ✓ Solidele pentru care banda interzisa are o largime comparabila cu energia castigata de un electron sub actiunea unui camp electric, prin incalzire sau prin iluminare, pot deveni din izolatori (in conditii de echilibru), conductori in conditii externe de camp, temperatura sau radiatie. Aceste solide se numesc *semiconductori*.

➤ **Golul. Generarea electron-gol**

- Electronul excitat (in prezenta campului) din banda de valenta devine liber in banda de conductie, dar lasa un loc liber in spatiu si o stare neocupata de energie in banda de valenta. Prin excitarea unui electron in banda de conductie, sarcina electrica din banda de valenta scade cu sarcina unui electron. Pentru conservarea numarului de stari in banda de valenta, aceasta situatie este echivalenta cu ocuparea starii libera de electron, cu o particula avand o sarcina elementara pozitiva. Aceasta particula se numeste *gol* si poate fi ocupata de un alt electron din banda de valenta, prin deplasare pe spatiul gol; se genereaza un curent de electroni si un curent, de sens opus, datorat deplasarii golului.
- Curentul net este unul de electroni si se adauga curentului dat de electronii excitati in banda de conductie. Prin excitarea unui electron in banda de conductie, se genereaza o pereche de purtatori, *electron-gol*. Astfel, semiconductorul are doua tipuri de purtatori de sarcina, electroni si goluri.



Mecanismul generării perechii electron-gol

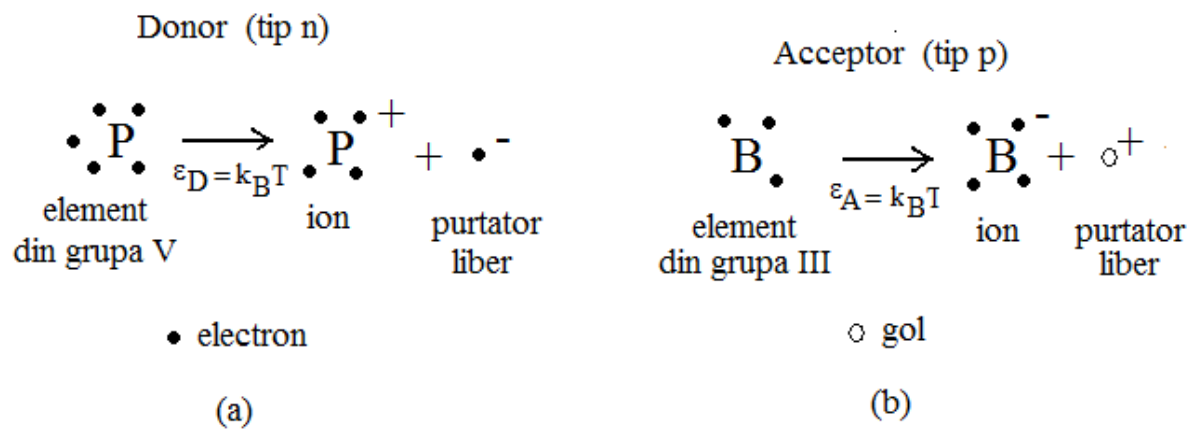


- In cazul semiconductorului pur, prin generarea unui numar de perechi electron-gol, se genereaza un numar de electroni liberi in banda de conductie, si un numar egal de goluri in banda de valenta. In acest caz, semiconductorul este *intrinsec*. Raportat la unitatea de volum a cristalului, concentratia de electroni liberi n_0 este egala cu concentratia de goluri libere p_0 , iar *concentratia intrinseca*, definita $n_i = n_0 = p_0$, este o caracteristica de material.

➤ Doparea. Semiconductor extrinsec

- Modificarea in exces a numarului purtatorilor de sarcina de un anumit tip (electroni in banda de conductie, goluri in banda de valenta) se poate face prin doparea sau impurificarea semiconductorului in procesul de obtinere. De exemplu, prin impurificarea siliciului, ai carui atomi au 4 electroni pe patura de valenta, se substituie atomi de siliciu cu atomi straini avand 5 sau 3 electroni pe patura de valenta. Daca dopantul are 5 electroni pe patura de valenta (fosfor-P), atunci prin ionizare se vor crea in exces electroni liberi in banda de conductie. Dopantul se numeste *donor*, iar *semiconductorul extrinsec de tip n* (a). Daca dopantul are 3 electroni pe patura de valenta (bor-B), atunci prin ionizare se vor crea in exces goluri libere in banda de conductie. Dopantul se numeste *acceptor*, iar *semiconductorul extrinsec de tip p* (b).

Energia de ionizare a atomilor de impuritate este comparabila cu energia termica in vecinatatea temperaturii camerei, astfel incat doparea este un instrument eficient de modificare a proprietatilor electrice ale semiconductorilor.



Doparea semiconductorului: (a) a siliciului cu donori; (b) a siliciului cu acceptori

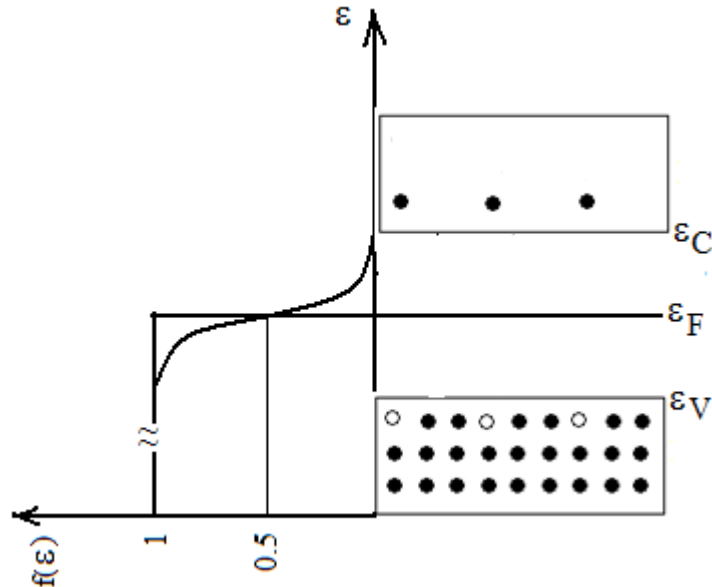
➤ Statistica purtatorilor

- Functia de distributie a electronilor exprima probabilitatea ca o stare de energie permisa ε , sa fie ocupata la o temperatura data T :

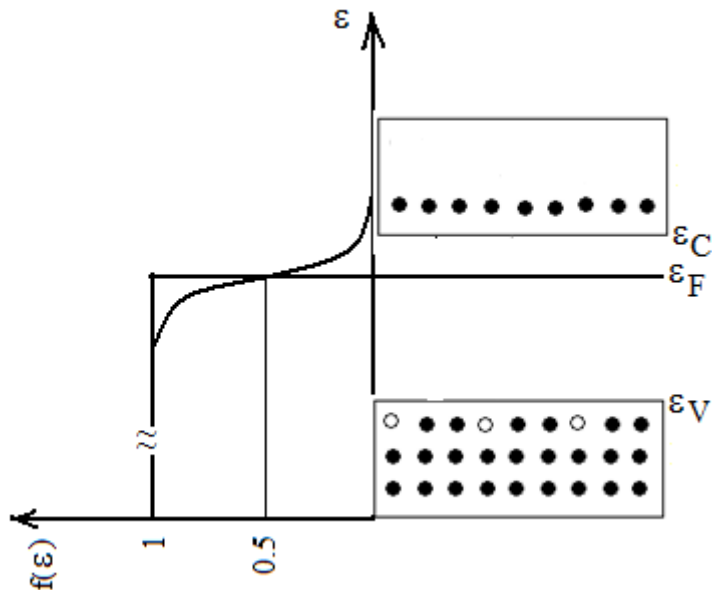
$$f(\varepsilon, T) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}} + 1}$$

- ✓ Nivelul Fermi ε_F reprezinta energia starii ocupata cu probabilitatea de 50%, la orice temperaturura T .
- ✓ Pentru $T \neq 0 K$, $f(\varepsilon, T)$ are valori nenule pentru valori $\varepsilon > \varepsilon_F$, $\varepsilon - \varepsilon_F \sim k_B T$ si pentru valori $\varepsilon < \varepsilon_F$, $\varepsilon_F - \varepsilon \sim k_B T$. Aceasta inseamna ca in aceste conditii, electronii pot ocupa stari deasupra nivelului Fermi, iar sub nivelul Fermi sunt stari libere de electroni.
- ✓ Pentru conductori, nivelul Fermi este situat in banda de conductie.
- ✓ Pentru izolatori, nivelul Fermi este situat in banda de valenta.
- In cazul semiconductorilor, se deosebesc urmatoarele cazuri:

- ✓ In cazul semiconductorului intrinsec, numarul purtatorilor de tip n(electroni in banda de conductie) este egal cu numarul purtatorilor de tip p(goluri in banda de valenta); nivelul Fermi este situat la jumatatea benzii interzise;

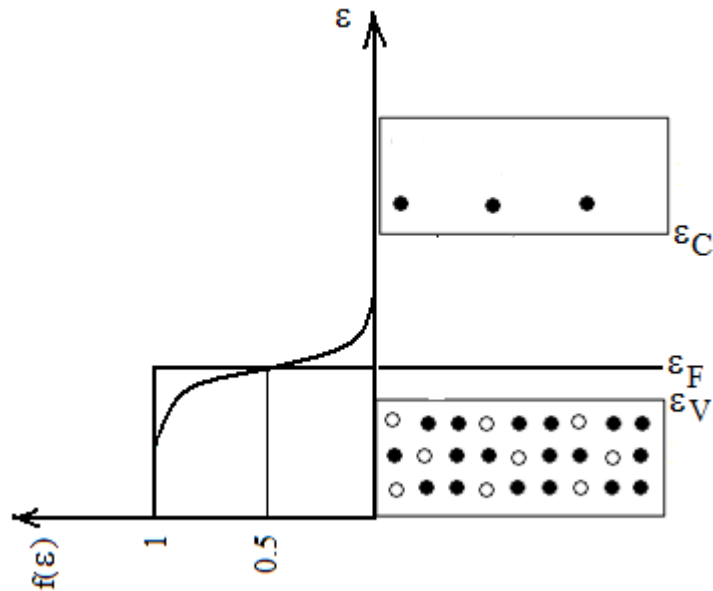


- ✓ In cazul semiconductorului extrinsec de tip n (numarul de electroni in banda de conductie, generati prin ionizarea termica a donozilor, este mult mai mare decat cel al golurilor din banda de valenta); functia de distributie are valori apreciabile la marginea benzii de conductie, ceea ce se obtine daca nivelul Fermi este situat in banda interzisa, in vecinatatea marginii benzii de conductie;



- ✓ In cazul semiconductorului extrinsec de tip p (numarul de goluri in banda de valenta, generati prin ionizarea termica a acceptozilor, este

mult mai mare decat cel al electronilor din banda de conductie); functia de distributie pentru electroni are valori apreciabil mai scazute la marginea benzii de valenta, ceea ce se obtine daca nivelul Fermi este situat in banda interzisa, in vecinatatea marginii benzii de valenta;



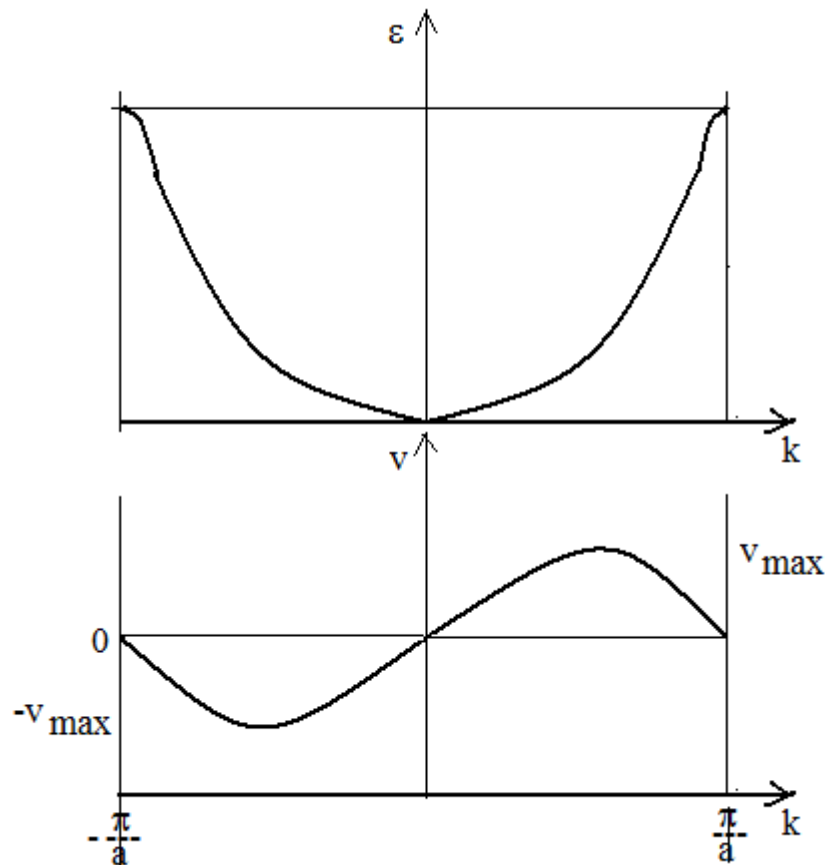
De notat:

Pozitionarea nivelului Fermi in vecinatatea benzii de conductie, descrie cresterea numarului de purtatori-electroni-in banda de conductie;
Pozitionarea nivelului Fermi in vecinatatea benzii de valenta, descrie cresterea numarului de purtatori-goluri -in banda de valenta.

➤ Conductivitate. Drift. Mobilitate

- In absenta unui camp electric extern, electronii in cristal sunt intr-o dinamica continua. Pornind de la momentul cristalin $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, de la expresia energiei intr-o banda $\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, se obtine expresia de definitie a vitezei $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(k)$.
- In absenta unui camp electric, $\vec{k} = 0$, viteza este $\vec{v} = 0$.

- In prezenta campului, electronul castiga cvasimpuls, se modifica valorile vectorului de unda; valorile distincte ale vectorului de unda \vec{k} sunt situate in prima zona Brillouin, unde viteza depinde de vectorul de unda, si anume are valori de la zero la valori maxime, pozitive si negative.



- Prin aplicarea campului, electronul isi modifica impulsul, viteza este diferita de zero; cand k creste de la 0 la $\frac{\pi}{a}$, electronul este accelerat, viteza atinge un maxim, apoi este decelerat si viteza ajunge din nou la zero. Datorita simetriei energiei, cand k creste de la 0 la $-\frac{\pi}{a}$, viteza are aceeasi comportare, dar cu valori negative.
- Efectul de decelerare a electronului poate fi explicat prin masa efectiva, definita ca derivata de ordinul doi a energiei $\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k^2} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial}{\partial k} \vec{v}$; o masa efectiva negativa produce un efect de decelerare a electronului intr-un camp care-l accelereaza.
- Curentul datorat electronilor cu energii distribuite in banda considerata, are expresia:

$$I = e \sum_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k})$$

- ✓ Daca toate stările \vec{k} din banda sunt ocupate, atunci $I = 0$.
- ✓ Daca numai un numar de stari sunt ocupate cu electroni, iar restul stărilor din banda sunt libere, atunci:

$$I = e \sum_{\vec{k}_{ocupat}} \vec{v}(\vec{k}) + e \sum_{\vec{k}_{neocupat}} \vec{v}(\vec{k}) = 0$$

Sau

$$-e \sum_{\vec{k}_{ocupat}} \vec{v}(\vec{k}) = e \sum_{\vec{k}_{neocupat}} \vec{v}(\vec{k})$$

Ceea ce este echivalent cu asocierea unei sarcini pozitive fiecărei stări neocupate cu electron. Particula fictivă cu această proprietate se numește **gol**.

Sarcina diferită și caracteristicile dinamice: viteza, masa efectivă, de asemenea diferite ale celor două tipuri de purtători, electroni și goli, conduc la proprietăți ale semiconductorului puternic dependente de tipul de purtători.