Modul IV Halvleder og metaller

Kandidatnummer: 15

Oppgave 3 Først klassifiserer vi den relevante informasjonen.

Direkte båndgap: 1,42 eV

(1) Elektroner i konduksjonsbånd: 0,067 eV $\left(\frac{m_e}{m}\right)$

(2) Lette hull: 0,082 eV (m_{lh}/m)

(3) Tunge hull: 0,45 eV (m_{hh}/m)

De tre siste verdiene er eksperimentelle verdier for den effektive masse for halvlederen GaAs. Vi har den generelle formelen for energi dispersjon.

(1) $E(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ (for elektroner i kond. bånd)

(2) $E(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}$ (tunge hull)

(3) $E(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}}$ (lette hull)

Vi går så over til steget med å finne relasjonene

(1) $m^* = \frac{m_e}{m} \Rightarrow 0{,}067 = \frac{m_e}{m} \Rightarrow m_e = 0{,}067 \cdot m$

som gir oss

$m_e = 0{,}067 \text{ eV} \cdot 0{,}511 \cdot 10^6 \text{ eV} = \underline{34237 \text{ eV}}$

Vi gjorde det samme for (2) og (3) og fikk:

$$m_{hh} = 229950 \text{ eV}$$
$$m_{eh} = 41902 \text{ eV}$$

Disse setter vi så inn i de generelle formlene for energi dispersjon. (Her påpeker jeg at jeg setter $E_g = 1,5 \cdot 10^6 \text{ eV}$ for (1))

Vi har at: $\hbar = \frac{4,135 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot s}{2\pi} = \underline{6,581 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot s}$

Dette gir oss da

$$(1) \quad E(k) = 1,5 \cdot 10^6 + \frac{(6,581 \cdot 10^{-16})^2}{2 \cdot (34237)} k^2$$

$$(2) \quad E(k) = -\left(\frac{(6,581 \cdot 10^{-16})^2}{2 \cdot (229950)}\right) k^2$$

$$(3) \quad E(k) = -\left(\frac{(6,581 \cdot 10^{-16})^2}{2 \cdot (41902)}\right) k^2$$

Dette skal vi så plotte, jeg gjorde i MATLAB. Koden følger nedenfor.

```
k = linspace(-10e20, 10e20);
h = 6.581e-16
```

```
Ee = 1,56e6 + ((h.^2)./(2*34237)*k.^2;
Eh = -((h.^2)./(2*(229950)))*k.^2;
El = -((h.^2)./(2*(41902)))*k.^2;

plot (k,Ee,'r',k,Eh,'b',k,El,'g');
xlabel ('wavenumber, k');
ylabel ('E(eV))');
title ('Energi i eV ut i fra bølgetall');
```

Selve grafen følger som vedlegg.

Siste aspektet i oppgaven var å forklare opprinnelsen til begrepene: „light holes" og „heavy holes". Det følger så nedenfor.

Hull er elektroner som mangler i ellers fylte bånd. Bølgevektoren til hullet er relatert til det manglende elektronet ved $k_h = -k_e$.
En forklaring av begrepene er at valensbåndet ved gammapunktet (Γ) er 3-foldig degenerert. Ut i fra figuren ser vi at lette hull bånd har større stigningstall enn tungt hull bånd. Sistnevnte er flatere i sin form. Tunge hull er i tunge hull båndet, mens lette hull er i lette hull båndet. Tunge hull er tyngre enn lette hull, noe som medfører at den effektive massen til tunge hull er større enn det til lette hull. Derfor responderer de også forskjellig til anvendte elektriske felt

lette hull responderer raskere.

For GaAs har vi spesielt at lett-hull effektiv masse er langt nærmere elektron konduksjons båndmassen. Samtidig er det slik at m_c^* og m_{lh}^* skaleres ut i fra grafen omtrent likt, men med forskjellige fortegn. Det betyr at ut i fra litteraturen på nettet at tungt hull effektiv massen er nesten uavhengig av materialet.

Vi fikk også opplyst i oppgaveteksten at GaAs er et direkte-båndgap halvleder. Det gir at elektronkonduksjonen er gitt av (1), mens valensbåndet er karakterisert av at det er trefoldig nært kanten, med tungt hull og lett hull degenerert i sentrum. Den tredje degenerasjonen er et bånd kalt for soh (som ikke fås med her).

<u>Oppgave 4</u> a) Vi skal kalkulere verdien til ioniserings-nivået for elektroner til å bli eksitert til konduksjons-båndet. I tillegg skal det brukes effektiv masse approksimasjon. Vi har da ligningen:

$$E_c - E_d = \frac{m^* q^4}{2(4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r)^2 \hbar^2 l^2} = \frac{13{,}6}{l^2}\left(\frac{m^*}{m}\frac{\varepsilon_0^2}{\varepsilon^2}\right)$$

med $l = 1, 2, 3, 4 \ldots$

Dette gir oss da $\Delta E = 13{,}6 \left(\frac{m^*}{m}\right) \cdot \frac{1}{\varepsilon^2}$

som er nødvendig for å eksitere elektronet fra donornivå til konduksjonsbåndet. Fra litteraturen har vi $m^* = 0,2\, m$ og $\varepsilon = 11,68$. Det gir ΔE:

$$\Delta E = 13,6\ eV \left(\frac{0,2m}{m}\right) \cdot \frac{1}{(11,68)^2}$$

$$\Delta E \approx \underline{\underline{0,02\ eV}}$$

b) Så skal vi kalkulere Bohr orbit og estimere dopingkonsentrasjonen til å transformere lokaliserte tilstander til urenhetsbånd, Bohr radius i et materiale er:

$$a = \frac{4\pi \varepsilon_r \varepsilon_0 \hbar^2}{m_e q^2} = a_0 \varepsilon_r \frac{m^*}{m_e}$$

Verdiene for $m^* = 0,2\, m_e$ og $\varepsilon_r = 11,68$ (som før)

Så finner vi a_0 nedenfor

$$a_0 = \frac{4\pi \varepsilon_0 \hbar^2}{m^* q^2} = \underline{0,53\ \mathring{A}}$$

Dette gir oss

$$a = 0,53\ \mathring{A} \cdot \frac{11,68}{0,2} \approx \underline{\underline{31\ \mathring{A}}}$$

Så går vi over til del 2 av oppgaven. Der skal vi estimere dopingkonsentrasjonen for å transformere lokaliserte tilstander til et urenhetsbånd.

For at tilstandene skal være lokaliserte og ikke overlappe, så må det være $d = 2a$ mellom hvert fosforatom. Per volum $V = \frac{4\pi a^3}{3}$ er det

ét fosforatom som ureinhet. Dopingkonsentrasjon oppgis som standard i cm^{-3} og det er dette vi må bruke for å finne konsentrasjonen med et fosfor-atom.

$$\frac{1\ cm^3}{V} = \frac{(1\times 10^{-2})^3}{\frac{4\pi}{3}(31\cdot 10^{-10})^3}$$

$$\approx \underline{\underline{8{,}01\cdot 10^{18}\ \text{fosfor}/cm^3}}$$

<u>Oppgave 5</u> Vi skal se på bærerkonsentrasjonen som funksjon av temperaturen i en P-dopet Silisium. Vi har flere karakteristiske temperaturgrenser å forholde oss til: donor freezing out, full donor activation og overtaking av intrinsikke bærer. Grensene er henholdsvis lav, mellom og høye temperaturer.

Jeg skal først gå litt nærmere på grensene:

<u>Utfrysing:</u> $E_d \gg k_B T$

Her er ikke den termale energien nok til å ionisere alle donorer, men noen av dem er ionisert noe som betyr at deres elektroner er eksitert fra deres donornivåer E_d og inn til konduksjonsbåndet: $n \propto \exp(-E_d / 2k_B T)$

Mellomstadie-temperatur (Ekstrinsikk): $E_d \ll k_B T \ll E_g$
Her er alle donorer ionisert, men den termale energien er ikke nok til å eksitere elektroner langs det intrinsikke båndgap:

$$n = \text{konstant}$$

Høy temperatur (intrinsikk): $E_g \ll k_B T$
Den termale energien er nok til å eksitere elektroner langs båndgapet og til å produsere intrinsikke ladningsbærere. Det følger skaleringen:

$$n \propto \exp(-E_g / 2k_B T)$$

$E_d = 45 \cdot 10^{-3}$ eV og $E_g = 1{,}11$ eV er tabellverdier vi må bruke i oppgaven.

Nå kommer vi til punktet for å finne likevektspunktet. Konsentrasjonen av elektroner med tilstrekkelig termal energi til å entre konduksjonsbånd (og derav skape samme konsentrasjon av hull i valensbåndet) er gitt av

$$n_i \approx \exp\left(\frac{-E_d}{k_B T}\right) \cdot N_c$$

Mens for intrinsikke halvledere, er energien halvveis langs gapet, slik at vi får

$$n_i \approx \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right) \cdot N_i$$

Kryssningspunktet er $N_D = N_c \cdot \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right)$

og $N_D = N_i \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right)$

Vi setter en grense $N_c = N_i$ som er hovedsakelig og dette gir oss f. eks.:

$$N_c = N_i = \underline{4{,}0 \cdot 10^{21}\ \text{cm}^{-3}}$$

Vi får da

$$T_0 = -\frac{E_d}{k_B \ln\left(\frac{N_d}{N_c}\right)} = \underline{49{,}3\ \text{K}}$$

$$T_1 = -\frac{E_g}{2 \cdot k_B \ln\left(\frac{N_d}{N_c}\right)} = \underline{602{,}3\ \text{K}}$$

Det betyr altså at vi med grensene for intrinsikk på 602,3 K og 49,3 K for freeze out får en likevektskonsentrasjon på $4{,}0 \cdot 10^{21}\ \text{cm}^{-3}$.

b) Så skal vi beregne E_F posisjonen relativt til E_i:

Vi har formlene

$$E_c - E_F = -k_B T \ln\left(\frac{N_D}{N_c}\right) \qquad (4)$$

$$E_F - E_i = k_B T \ \cancel{\ln} \left(\frac{N_A}{N_i}\right) \qquad (5)$$

Vi begynner med (4) for 49,3 K

$$E_F - E_i = -8{,}617 \cdot 10^{-5} \cdot 49{,}3 \cdot \ln\left(\frac{10^{17}}{4{,}0 \cdot 10^{21}}\right)$$

$E_c - E_F = \underline{0,045 \text{ eV}}$

Det var for den lave temperaturen, så ser vi på den høye temperaturen. Vi finner først N_i, som er en tabellverdi som kalles for intrinsikk konsentrasjon og er $1,5 \cdot 10^{10}$ cm^{-3}

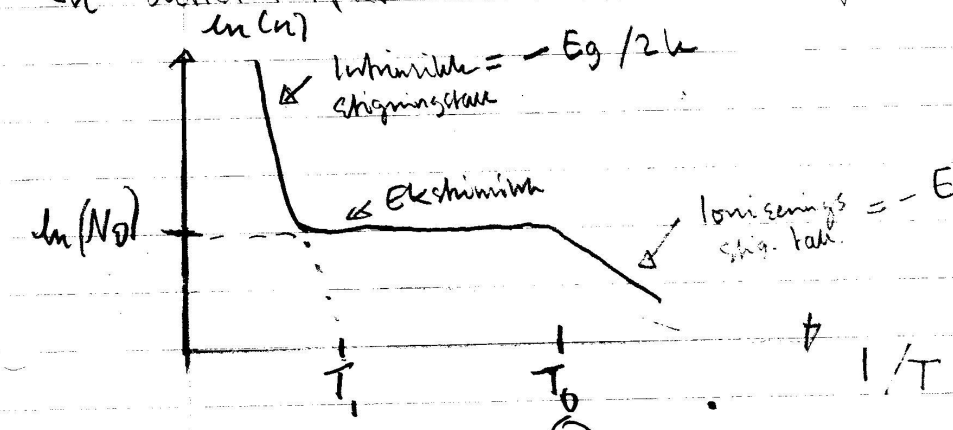
Det gir da

$$E_F - E_i = 8,617 \cdot 10^{-5} \cdot 602,3 \cdot \ln\left(\frac{10^{17}}{1,5 \cdot 10^{10}}\right)$$
$$= \underline{0,815 \text{ eV}}$$

Vi har fra den første oppgaven (a) at hvis temperaturen blir høy, så vil materialet oppføre seg som et intrinsikk materiale. Det er derfor (5) blir slik det blir. Vi har da at (4) er på donornivå og at (5) er på intrinsikk nivå.

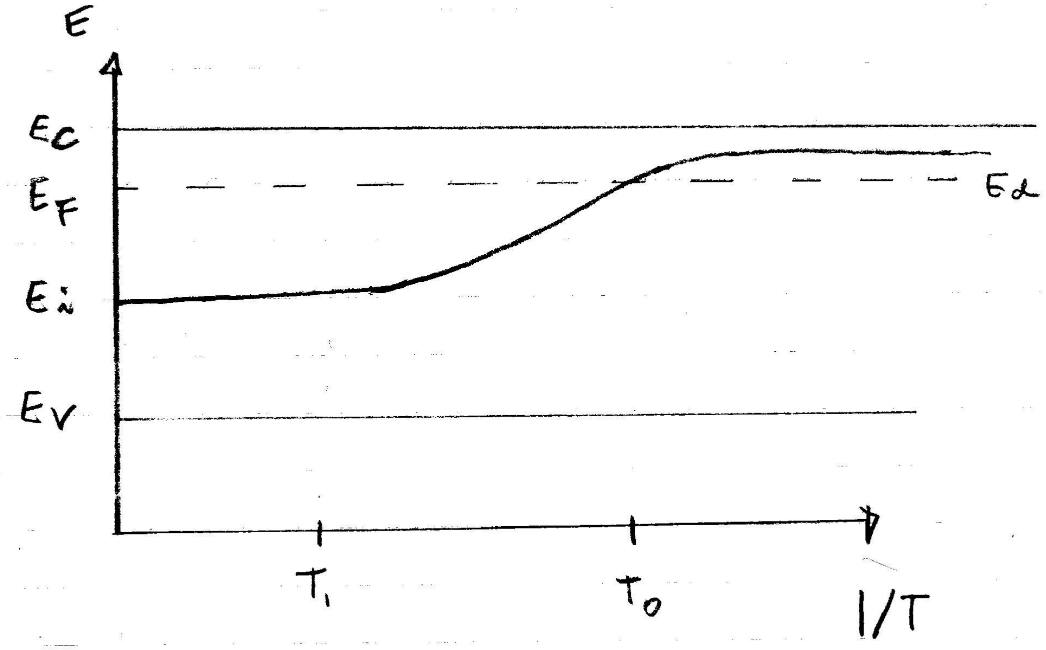
c) I denne deloppgaven skal vi plotte elektronkonsentrasjonen og E_F som funksjon av $1/T$.

En litteraturplot av elektronkonsentrasjonen er som følgende:

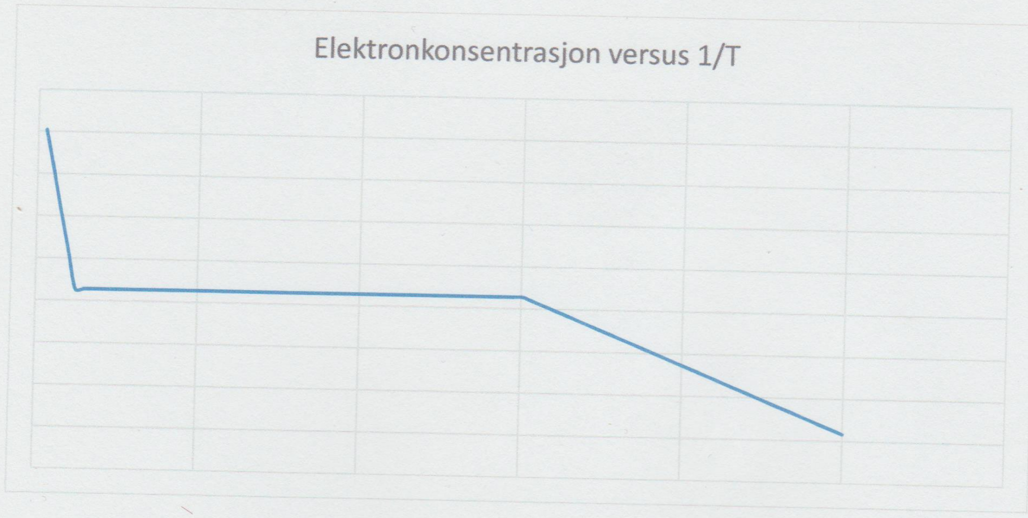


Jeg skal så forsøke å plotte dette i Excel. Dette ble gjort i tabellform og med en plot. Grafen følger som vedlegg.

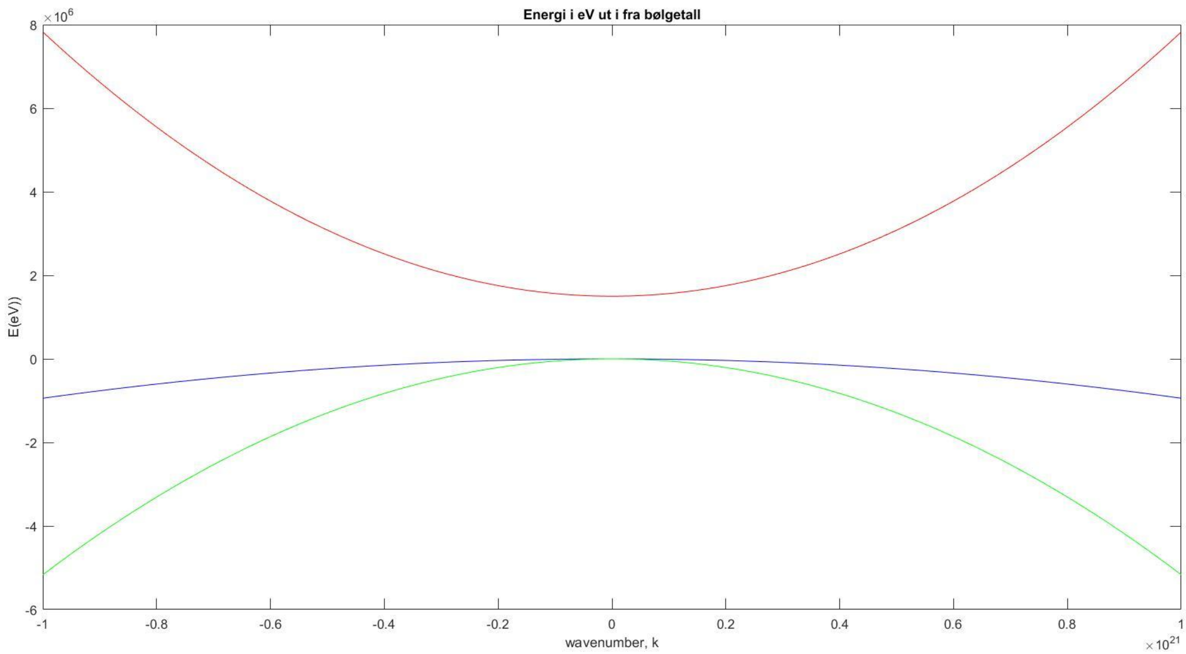
I andre del av funksjonen skal vi plotte E_F som funksjon av $1/T$. Også dette ble gjort i Excel. En plot av denne funksjonen ser slik ut:



Jeg legger ikke ved en Excel eller MATLAB her fordi det er unødvendig. Det viktigste er at man ser hvordan plottet går.



Grafen over viser elektronkonsentrasjon versus 1/T. Vi ser at det ligner ganske på litteratur-verdien med en intrinsik del til venstre. En ekstrinsik del i midten som går frem til ioniseringsdelen (eller donor freeze out) ved T0. T1 = der intrinsik tar slutt. X-aksen er 1/T, mens Y-aksen er elektronkonsentrasjonen gitt i ln (N).



Energi i eV ut i fra bølgetall
×10^6
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
E(eV))
-1
-0.8
-0.6
-0.4
-0.2
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
wavenumber, k
×10^21