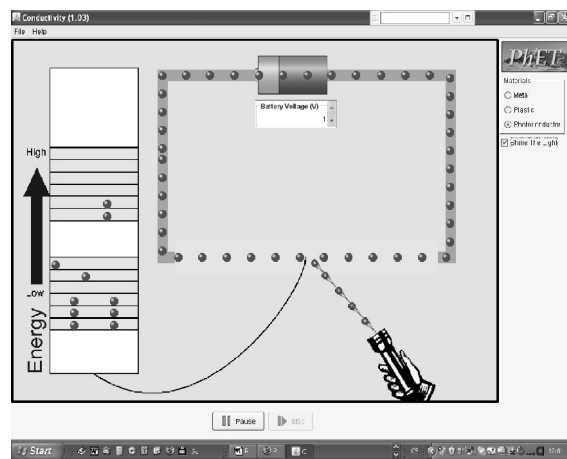
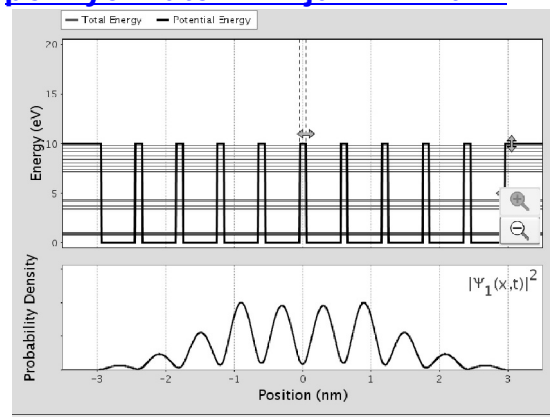


41- 1 ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI PEVNÝCH LÁTEK

Jak funguje polovodič?



Co je to pásové energetické schéma pevných látek? A jak vzniká?



Pásová teorie pevných látek

Rozdělení pevných látek, koncentrace volných nosičů náboje

Elektrická vodivost pevných látek - elektrony a díry

Hallův jev a magnetorezistence

Elektrické vlastnosti látek jsou vyjádřeny zejména prostřednictvím permitivity a elektrické susceptibility a měrnou elektrickou vodivostí. **Permitivita různých látek se mění v rozpětí asi 6 řádů**, zatímco **měrná elektrická vodivost až v rozpětí převyšujícím 20 řádů**. Látky s měrnou elektrickou vodivostí menší než asi $10^{-8} \Omega^{-1} m^{-1}$ zařazujeme mezi izolátory, látky s vodivostí větší než asi $10^6 \Omega^{-1} m^{-1}$ mezi kovy. Zbytek tvoří tzv. polovodiče. Úkolem fyziky je objasnit tyto velké rozdíly a poskytnout tak technice možnosti na jejich aktivní ovlivňování a tím získávání látek s lepšími vlastnostmi.

V následujících článcích této kapitoly prozkoumáme elektrické vlastnosti všech skupenství látek, objasníme fyzikální rozdíly mezi kovem, izolantem a polovodičem a v závěru si všimneme elektrického náboje ve vakuu.

41.3 Pásová teorie pevných látek

Pevné látky mohou být vodiči, nevodiči i polovodiči. Elektrická vodivost těchto jinak dosti málo odlišných látek se pohybuje v intervalu téměř 20 řádů. Tyto zvláštnosti pevných látek, jako i mnohé další vlastnosti, zejména optické, úspěšně vysvětluje tzv. pásová teorie, se kterou se v tomto článku podrobněji seznámíme. Ihned v úvodu můžeme říci, že energetické hladiny izolovaných atomů při vytvoření pevné látky se v důsledku vzájemného působení rozštěpí na

systém pásů. Štěpení energetických hladin při vytváření pevné látky, je zřejmé na příkladu sodíku z obr. 41.6 a obr. 41.7. Pro jednoduchost budeme předpokládat, že zkoumáme jen ideální, tj. bezporuchový a bezpříměsový krystal při teplotě $T=0\text{ K}$.

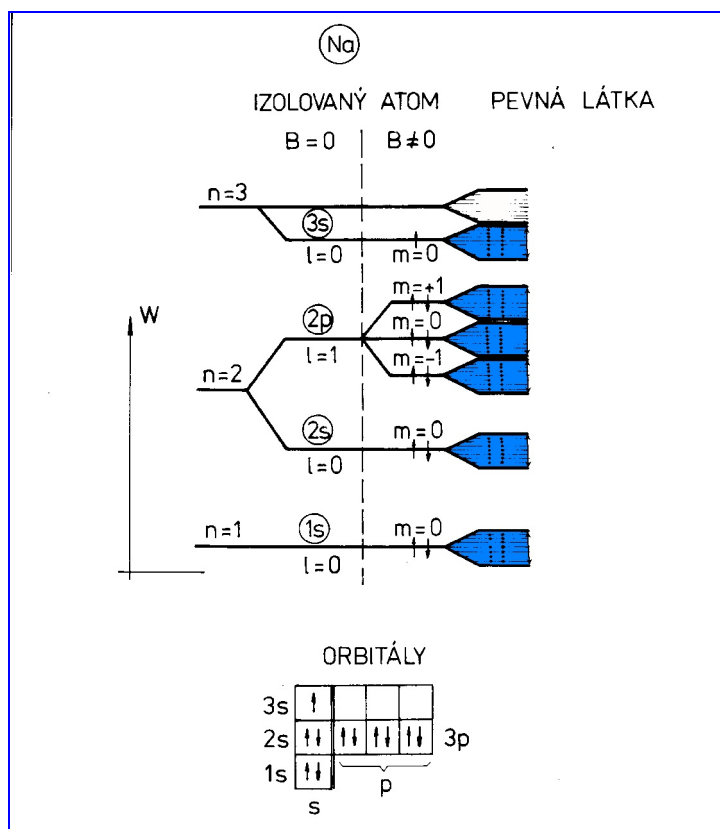
41.10

Energetické spektrum elektronů v krystalu je pásové. Každý energetický pás obsahuje tolik dovolených energetických hladin, kolik je atomů v krystalu, tj. s ohledem i na spin elektronů obsahuje dvakrát tolik kvantových elektronových stavů, kolik je atomů v krystalu.

Výklad vzniku pásové energetické struktury na příkladu sodíku (Na)

Na obr. 41.6 až 41.8. je kvalitativně vykreslen vznik pásové struktury u sodíku (Na). Protože má poslední elektron v orbitálu M, 3s jen jeden ($3s^1$), vznikne částečně zaplněný pás energií, který ukazuje na to, že sodík je kov.

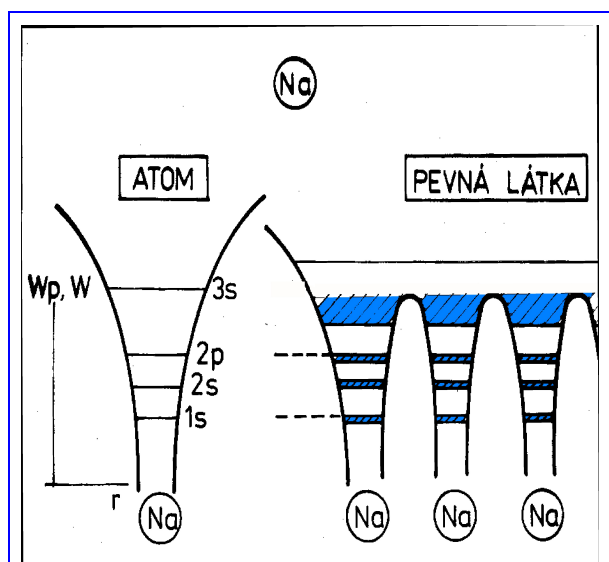
Obrázek 1: Elektronové (kvantované) energetické schéma atomu sodíku v izolovaném atomu (s a bez magnetického pole) a v pevné látce



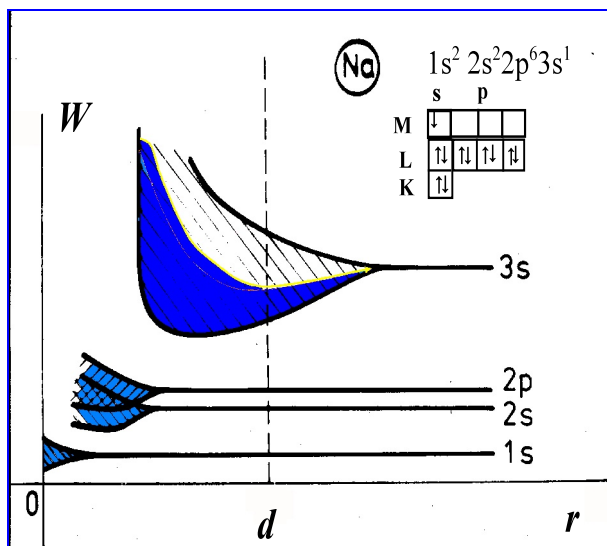
Obr. 41.6

Obrázek 2: Průběh potenciální energie W_p elektronu v atomu a pevné látce sodíku (pásky obsazené elektrony jsou vyznačeny modře)

Orázek 3: Vznik elektronových



Obr. 41.8



Obr. 41.7

energetických pásů v sodíku při zmenšování meziatomové vzdálenosti r .

Výklad pásové teorie pevných látek

Problém energetických stavů elektronů v krystalech skládajících se z N atomů s jedním valenčním elektronem můžeme formulovat napsáním Schrödingerovy rovnice pro systém elektronů

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_j \psi + \sum_{j=1}^N W_{pj}(\mathbf{r}) \psi + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|} = W \psi, \quad (41.25)$$

kde $j \neq k$.

V relaci (41.25) první člen odpovídá součtu kinetických energií jednotlivých elektronů, druhý člen součtu potenciálních energií elektronů v elektrických polích jader, třetí člen vyjadřuje celkovou vzájemnou potenciální energii elektronů a W celkovou energii systému elektronů. Vlastní pohyb jader a jejich vzájemnou potenciální energii jsme s ohledem na výše uvedený předpoklad neuvažovali. Říkáme, že problém řešíme v tzv. adiabatické aproximaci. (Elektrony "adiabaticky" sledují pohyb jader, takže okamžitě zaujmou stav charakteristický pro jádra nacházející se v klidu). Rovnice (41.25) není analyticky řešitelná. Problém je však možno podstatně zjednodušit předpokladem, že vliv všech ostatních

elektronů např. na j -tý elektron můžeme nahradit účinkem jakéhosi průměrného pole, ve kterém tento elektron nabývá potenciální energii W_{po} . Třetí člen v rovnici (41.25) můžeme potom napsat ve tvaru $\Sigma W_{po}\Psi$, čímž se celá rovnice rozpadne na systém N stejných rovnic (kde N je počet všech elektronů) platných pro každý elektron zvlášť.

Tato rovnice má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + W_p(r)\Psi + W_{po}\Psi = W\Psi, \quad (41.26)$$

kde W již nyní značí jen celkovou energii jednotlivého elektronu. Uvedené zjednodušení výchozí rovnice se nazývá jednoelektronová aproximace. Vztažnou hladinu pak můžeme lehce zvolit tak, aby bylo $W_{po}=0$.

Ani rovnici (41.26) však neumíme bezprostředně řešit, protože neznáme skutečný průběh potenciální energie $W_p(r)$. Situaci je tedy nutno dále zjednodušovat. V Sommerfeldově metodě se proměnlivá potenciální energie $W_p(r)$ aproximuje konstantou. Celý problém se tím redukuje na problém jediné potenciálové jámy, který jsme řešili v článku 33.1. Tato metoda dává dobré výsledky pro kovy, protože prakticky volné elektrony se v nich pohybují relativně daleko od svých mateřských jader, takže potenciální energie má jen nepatrné zvlnění (obr. 41.8).

V tzv. Kronigově-Penneyově metodě se průběh potenciální energie nahrazuje systémem pravoúhlých potenciálových jam.

Závěr

Vidíme tedy, že **energie elektronů v krystalu je kvantována**, protože hodnoty k ve vztahu pro energii mají jen diskrétní hodnoty a dále, že **všechny dovozené energie odpovídající energetické hladině elektronu v izolovaném atomu jsou podle toho seskupeny do pásu**. Energetické spektrum elektronů v krystalu je pásové, jak tvrdí ve větě **41.10. V každém páse (lineárního) krystalu je právě tolik dovozených energetických hladin, kolik je atomů v krystalu (N)**. Jelikož spin nemá ve vyšetřovaném případě vliv na energii elektronů a tedy **na každé hladině se mohou nacházet dva elektrony s opačně orientovanými spiny**, můžeme konstatovat, že v každém páse dovozených energií elektronů v krystalu skládajícím se z N atomů je $2N$ dovozených kvantových stavů. Toto tvrzení zůstává v platnosti i pro reálný trojrozměrný krystal a má velký význam při klasifikaci pevných látek na vodiče, nevodiče a polovodiče.

41.4 Dělení pevných látek podle elektrické vodivosti, koncentrace volných nosičů náboje

V předcházejícím článku jsme konstatovali, že pásové spektrum umožňuje jednoduchou klasifikaci pevných látek z hlediska jejich elektrické vodivosti. Ukážeme si, že umožňuje přirozeně rozdělit všechny pevné látky na **vodiče a nevodiče** (věty 41.11 a 41.12) a pochopit, že v přírodě mohou existovat i látky s elektrickou vodivostí nacházející se mezi těmito extrémními případy. Nazýváme je **polovodiče** (věty 41.13 a 41.14).

41.11

Nevodiče jsou pevné látky, které se vyznačují jen prázdnými a úplně zaplněnými pásy dovolených energií při teplotě $T = 0 \text{ K}$. (Obr. 41.12)

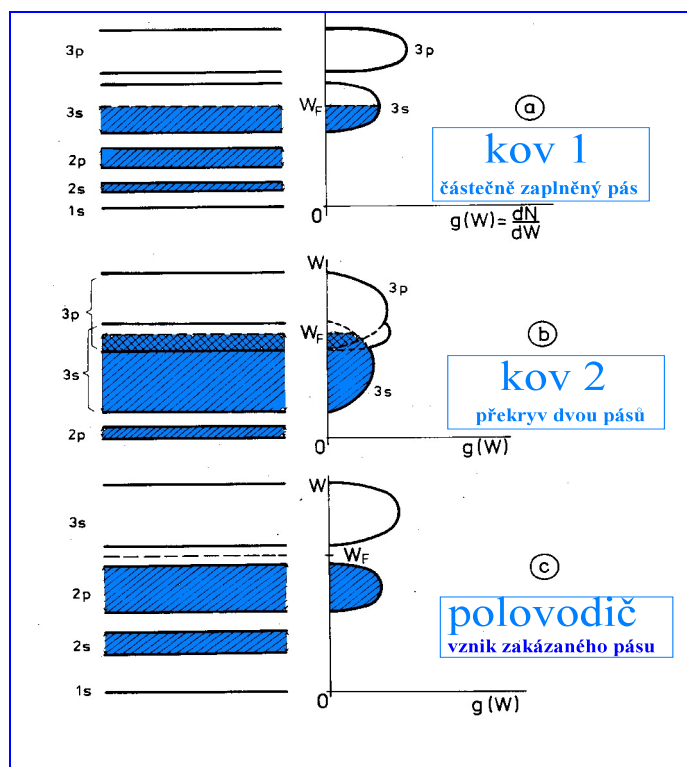
41.12

Vodiče jsou pevné látky, které mají jeden pás energií jen částečně zaplněný při teplotě $T=0 \text{ K}$. (Obr. 41.12)

41.13

Polovodiče jsou pevné látky, které mají mezi tzv. **valenčním a vodivostním pásem zakázaný pás energií** se šířkou ne větší než asi 2 eV při teplotě $T=0 \text{ K}$. (Obr. 41.12)

Obrázek 1: Pásová energetická struktura pevných látek (zakresleno pro $T = 0 \text{ K}$), a,b-kovu [a-při částečném zaplnění pásu ($3s$), b) při překryvu pásů ($3s+3p$)] c-izolantu a polovodiče

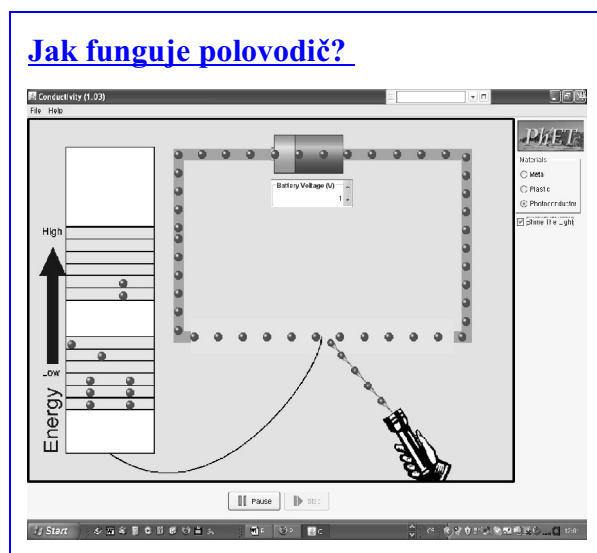


Obr. 41.12

Komentář

Jelikož v každém pásu dovolených energií můžeme "umístit" $2N$ elektronů, kde N je počet atomů krystalu, mají látky se sudým počtem elektronů, tj. se sudým mocenstvím, jen pásy úplně obsazené, nebo prázdné. Ani jedno ani druhé však nemůže přispět k elektrické vodivosti látky, protože v prvním případě elektrony nemohou měnit své stavy a ve druhém případě nejsou volné elektrony. **Takové látky jsou tedy nevodiči.**

Látky s lichým mocenstvím mají poslední pás, ve kterém jsou ještě elektrony, zaplněn jen do poloviny. V takových případech může vzniknout elektrický proud, **proto tyto látky jsou vodiči.** Skutečně, jednomocné a trojmocné prvky (Li, Na, K, In, Cu, Ag) jsou vodiče (kovy) (obr. 41.12a), zatímco prvky se sudým počtem elektronů (Se, S, Si, Ge) jsou (při teplotě $T=0\text{ K}$) nevodiče (obr. 41.12c). Ukážeme si však, že část těchto látek je výhodnější zařadit mezi **polovodiče**. Vážnějším faktem však je, že i mezi prvky (a sloučeninami) se sudým počtem elektronů známe výborné vodiče, např. Mg, Ca, Zn, Ni a Fe. V těchto případech se podařilo dokázat, že poslední elektrony zaplněný pás se překrývá s následujícím prázdným pásem (obr. 41.12b), takže výsledný pás je potom jen částečně zaplněn a může podmínit elektrickou vodivost.



41.14

Koncentrace volných elektronů ve vodivostním pásu čistého a bezporuchového **vlastního** polovodiče je vyjádřena vztahem

kde A je určitá konstanta, ΔW je **šířka zakázaného pásu** rovna dvojnásobku tzv. aktivační energie ΔW a T je teplota. Koncentrace volných děr ve valenčním pásu se řídí obdobným vztahem a jejich koncentrace je rovna koncentraci volných elektronů ve vodivostním pásu.

$$n = A \cdot e^{-\frac{W_a}{kT}} = A \cdot e^{-\frac{\Delta W}{2kT}}, \quad (41.37 \text{ a})$$

Koncentrace volných elektronů ve vodivostním pásu **nevládního polovodiče** je vyjádřena vztahem

$$n = A \cdot e^{-\frac{\Delta W}{2kT}} + (AN_D)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\Delta W_D}{2kT}}, \quad (41.37 \text{ b})$$

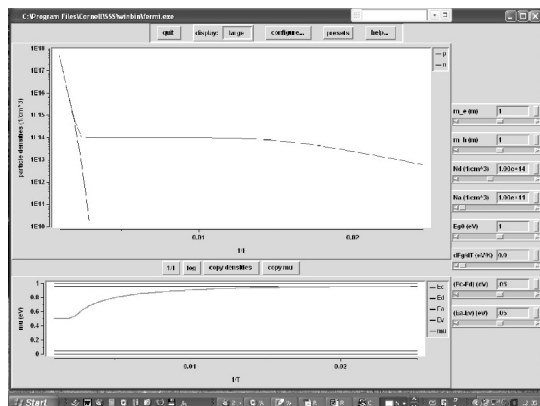
kde první člen vyjadřuje koncentraci elektronů vlastního polovodiče a druhý vyjadřuje příspěvek od **donorů**, kde N_D je koncentrace donorů a ΔW_D je jejich energetická poloha vzhledem k vodivostnímu pásu. (Obr. 41.26 další přednášky)

Koncentrace volných děr ve valenčním pásu **nevládního polovodiče** je vyjádřena vztahem

$$p = A \cdot e^{-\frac{\Delta W}{2kT}} + (AN_A)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\Delta W_A}{2kT}}, \quad (41.37 \text{ c})$$

kde první člen vyjadřuje koncentraci volných děr vlastního polovodiče a druhý vyjadřuje příspěvek od **akceptorů**, kde N_A je koncentrace akceptorů a ΔW_A je jejich energetická poloha vzhledem k valenčnímu pásu. (Obr. 41.26 další přednášky)

Vypočítejte kalkulátorem Cornell University teplotní závislost koncentrace elektronů a děr pro čisté Ge (t.j. bez přísad) v teplotním intervalu T(200-400K).



Poznámka k spuštění z vašich počítačů: nutno stáhnout balík Cornell v adresáři:

<http://zamestnanci.fai.utb.cz/~schaue r/Cornell>

a od tam spustit : /SSS/winbin/fermi.exe

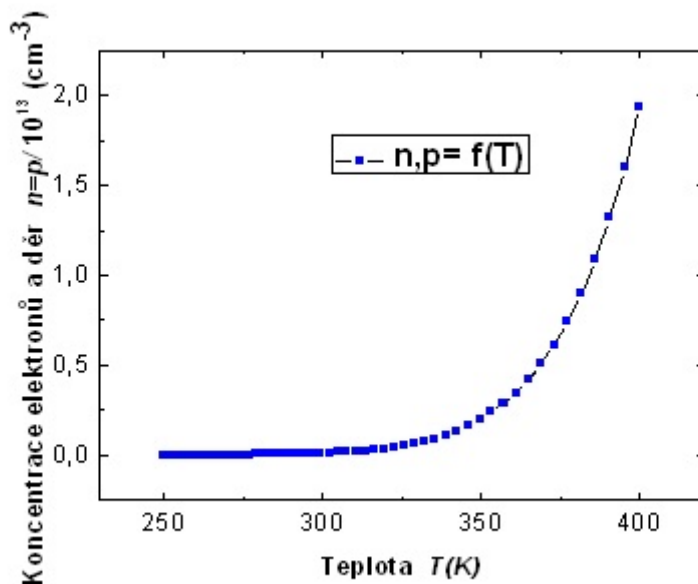
Příklad:

teplotní závislosti koncentrace elektronů ve **vlastním polovodiči**

Vlastní polovodič - Si šířka zakázaného pásu : $\Delta W = 1,1 \text{ eV}$, $A = 1,6 \cdot 10^{27} \text{ m}^{-3}$.

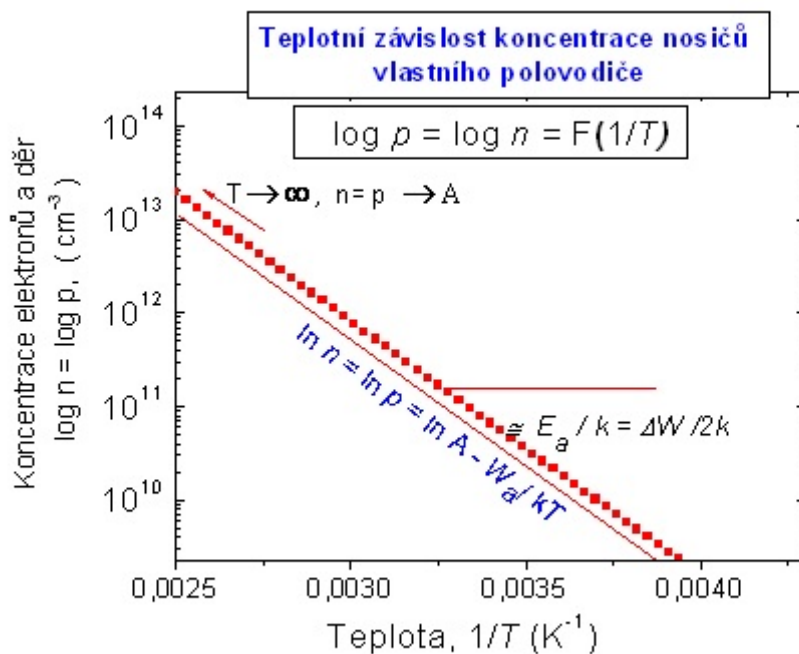
Koncentrace elektronů a děr jako funkce teploty u Si, $n, p = f(T)$

$$n = A \cdot e^{-\frac{\Delta W}{2kT}},$$



a odpovídající Arrheniova závislost $\ln n, p = F(1/T)$
(pozor na log vs ln při vynášení a vyhodnocení).

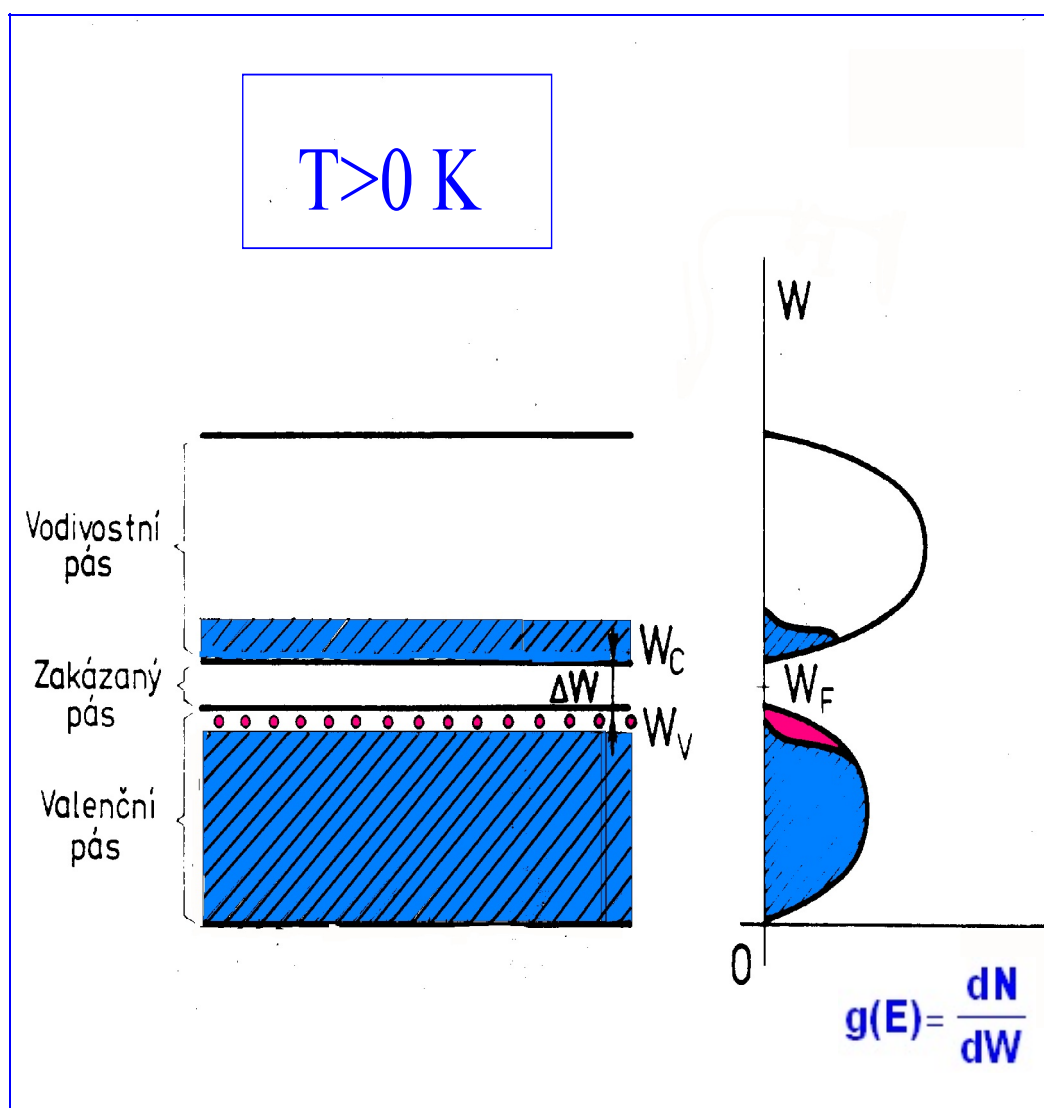
$$\ln n = \ln p = \ln A - \frac{W_a}{kT} = \ln A - \frac{\Delta W}{2kT},$$



Výklad vodivosti pevných látek No 1 - důležité !

Zatím jsme předpokládali, že elektrony musí být umístěny v pásech trvale a že nemají možnost přecházet z jednoho pásu do druhého. Taková je situace jen v látkách, ve kterých šířka **zakázaného pásu** ležící mezi posledním pásem obsahujícím valenční elektrony (**valenční pás**) a nejbližším prázdným pásem, je dostatečně velká. Takové látky jsou vždy dobrými izolanty. Je-li však zakázaný pás tak úzký, že absorpcí fononů dostatečné energie mohou elektrony přeskočit z valenčního pásu do nejbližšího prázdného pásu, vznikne stav podobný vodiči - poslední pás bude jen částečně zaplněn. Tento pás může proto podmínit elektrickou vodivost látky. Nazývá se proto **vodivostní pás**. Látky, které se vyznačují touto pásovou strukturou (obr. 41.13) nazýváme **polovodiče**.

Obrázek 2: Pásová energetická struktura polovodiče zakresleno pro $T > 0\text{K}$



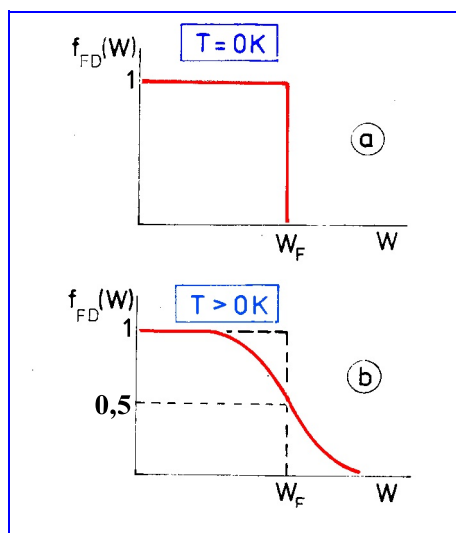
Obr. 41.13

Zůstává nám jen vyřešit otázku, **co znamená "úzký" zakázaný pás**. Odpověď na tuto otázku najdeme tak, že vypočítáme, kolik elektronů při dané teplotě najdeme již ve vodivostním pásu. Použijeme k tomu metody statistické fyziky. Již vícekrát jsme připoměli, že pro elektrony v rovnováze musíme používat Fermiovu-Diracovu rozdělovací funkci, kterou jsme vyjádřili ve tvaru (9.22) a to

$$f(W) = \frac{1}{e^{\frac{W-W_F}{kT}} + 1} \quad (41.39)$$

Energie W_F se nazývá Fermiova energie (hladina) a má v teorii pevných látek velmi důležitou funkci. Průběh Fermiovy - Diracovy rozdělovací funkce je na Obr. 41.21. Z definice plyne, že při $T > 0$ K je pravděpodobnost obsazení stavů s energií $W = W_F$ $f(W) = 0,5$.

Obrázek 3: Fermiova -Diracova funkce, a) při teplotě absolutní nuly, b) při vyšší teplotě



Obr. 41.21

Podle výkladu článku 9.5 můžeme tuto funkci interpretovat jako pravděpodobnost obsazení stavu s energií E elektronem. Je-li tedy v intervalu W a $W + dW$ v objemové jednotce $dN = g(W) dW$ dovolených stavů, přičemž funkce $g(W)$ definuje jejich energetickou hustotu, můžeme koncentraci elektrony obsazených stavů vyjádřit vztahem

$$dn = f(W) dN = f(W) g(W) dW$$

a koncentraci elektronů v celém pásu integrálem

$$n = \int_{W_1}^{W_2} f(W) g(W) dW \quad (41.40)$$

kde W_1 a W_2 jsou energie odpovídající dnu resp. hornímu okraji pásu. Obr. 41.15. Ve skutečnosti vzhledem k diskrétnosti stavů v pásu, bychom měli počítat koncentraci sumací, avšak s ohledem na velmi malý rozdíl mezi jednotlivými energiemi ($\Delta W \doteq 10^{-22} \text{ eV}$) můžeme sumaci nahradit integrálem.

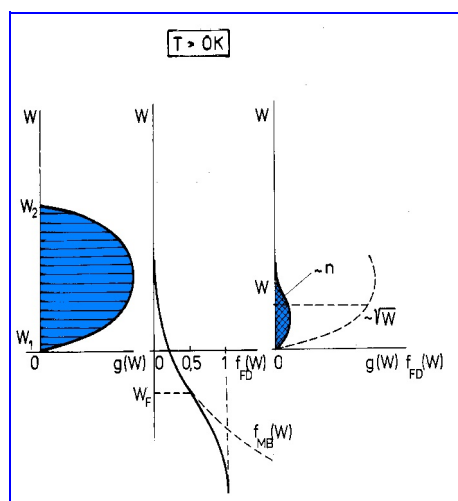
Abychom mohli integrál (41.40) vypočítat, potřebujeme znát energetickou hustotu dovolených stavů $g(W)$. Hustota stavů v pásu pevné látky se odvozuje v učebnicích polovodičů (je uveden v Kapitole 41 skript), nám stačí uvést jeho tvar

$$g(W) = \frac{dN^x}{V dW} = \frac{4\pi}{h^3} (2m)^{3/2} (W)^{1/2}. \quad (41.44)$$

Vidíme, že hustota stavů roste s druhou odmocninou energie, měřené od dna pásu (Obr. 41.15).

Koncentrace elektronů najdeme již nyní tak, že do vztahu (41.40) dosadíme funkce (41.39) a (41.44) a integrujeme. Vztah pro koncentraci elektronů v pásu n pak je

$$n = \frac{2(2\pi m kT)^{3/2}}{h^3} e^{-\frac{W_F}{kT}} = A e^{-\frac{W_F}{kT}}, \quad (41.46)$$



Obr. 41.15

kde T je teplota k a h jsou Boltzmannova a Planckova konstanta, W_F je poloha Fermiovy energie a konstanta A (někdy se nazývá **efektivní hustota stavů příslušného - vodivostního, příp. valenčního pásu**) má hodnotu $10^{26} - 10^{27} \text{ m}^{-3}$ podle toho, o jakou látku se jedná. .

Vztah (41.46) můžeme považovat za platný, jestliže platí nerovnost

$$\frac{W_F}{kT} \ll 1,$$

neboli pro koncentraci elektronů

$$n \ll A = \frac{2(2\pi m kT)^{3/2}}{h^3} = 10^{25} \text{ m}^{-3}. \quad (41.47)$$

Tato podmínka má veliký praktický význam. Pro všechny pásy, ve kterých je koncentrace elektronů menší než asi 10^{25} m^{-3} můžeme nahradit Fermiovu-Diracovu statistiku Maxwellovou-Boltzmannovou. Prakticky všechny polovodiče patří do této skupiny látek, zatímco kovy mezi látky, ve kterých musíme důsledně používat Fermiovu-Diracovu statistiku. V této souvislosti označujeme elektronový plyn v kovech za degenerovaný a v polovodičích za nedegenerovaný.

Vztah (41.46) tedy správně vystihuje koncentraci elektronů v polovodičích, avšak zatím není prakticky použitelný, protože **neznáme polohu Fermiho energie W_F** . Na její určení použijeme samozřejmý poznatek, že **koncentrace volných elektronů ve vodivostním pásu se rovná koncentraci volných děr, (zatím budeme díru považovat za neobsazené místo ve valenčním pásu, později provedeme výklad pojmu díra)**. Jejich koncentraci p najdeme podobným způsobem, jen musíme uvážit, že pravděpodobnost výskytu neobsazeného stavu není $f(W)$, ale $1-f(W)$ a hranice integrování vzhledem na volbu $W_{lc} = 0$ musí být nyní $-\Delta W$ a $-\infty$, kde ΔW je posunutí valenčního pásu oproti vodivostnímu, neboli šířka zakázaného pásu. Dostaneme tak výsledek

$$p = A e^{-\frac{\Delta W + W_F}{kT}}. \quad (41.48)$$

Z rovnice $n = p$ vyplývá potom rovnice

$$e^{-\frac{2W_F}{kT}} = e^{\frac{\Delta W}{kT}},$$

tj. vztah $W_F = -\Delta W/2$, podle kterého Fermiho hladina "leží" ve vzdálenosti $\Delta W/2$ pod vodivostním pásem, tj. přesně ve středu zakázaného pásu. S přihlédnutím na tento výsledek přechází vztah (41.46) na tvar (41.37), který jsme měli najít. Jeho numerické vyhodnocení pro různé šířky zakázaného pásu poskytuje TABULKA. Jestliže si uvědomíme, že koncentrace řádu 10^{16} m^{-3} (10^{10} cm^{-3}) ještě poskytuje měřitelnou elektrickou vodivost, vidíme, že **za polovodič můžeme považovat jen takové látky, ve kterých šířka zakázaného pásu není větší než asi 2 eV** , což tvrdíme ve větě 41.13. Nejznámější polovodiče jsou Ge (germanium) a Si (křemík) které mají šířku zakázaného pásu přibližně $0,7$ a $1,1 \text{ eV}$.

TABULKA

závislost koncentrace volných elektronů n a děr p na šířce zakázaného pásu ΔW pro dvě teploty pro několik polovodičů

látka	zakázaný pás energií $\Delta W / (eV)$	koncentrace elektronů n a koncentrace děr p $n = p / (m^{-3})$ $t = 20^\circ C$	koncentrace elektronů n a koncentrace děr p $n = p / (m^{-3})$ $t = 320^\circ C$
InSb	0,03	$4 \cdot 10^{24}$	$1 \cdot 10^{26}$
Ge	0,74	$3 \cdot 10^{19}$	$1 \cdot 10^{25}$
Si	1,1	$1 \cdot 10^{16}$	$1 \cdot 10^{20}$
GaAs	1,5	$\sim 10^{12}$	$1 \cdot 10^{18}$
SiC	2,0		$\sim 10^{15}$