

**UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA**  
**Facultatea de Fizică și Inginerie**  
**Departamentul Fizica Aplicată și Informatică**

**Valentina NICORICI, Andrei NICORICI**

**TEORIA ELECTRONICĂ A  
CORPULUI SOLID**

*Note de curs*

*Aprobat de  
Consiliul Calității al USM*

*Chișinău 2022*

CZU 537.311.322:539.2(075.8)

N 67

*Recomandat spre publicare de:*  
Departamentul Fizica Aplicată și Informatică al USM  
(proces-verbal nr. 3 din 16.11.2021);  
Consiliul Facultății de Fizică și Inginerie a USM  
(proces-verbal nr. 4 din 17.12.2021)

Recenzenți:

*Dumitru Nedeoglo, doctor habilitat, profesor universitar (USM);*

*Elena Hajdeu-Chicaroș, doctor, cercetător științific superior  
(Institutul de Fizică Aplicată)*

**DESCRIEREA CIP A CAMEREI NAȚIONALE A CĂRȚII DIN  
REPUBLICA MOLDOVA**

**Nicorici, Valentina.**

Teoria electronică a corpului solid: Note de curs / Valentina Nicorici, Andrei Nicorici; Universitatea de Stat din Moldova, Facultatea de Fizică și Inginerie, Departamentul Fizica Aplicată și Informatică. – Chișinău: CEP USM, 2022. – 176 p.: fig.

Bibliogr.: p. 175 (16 tit.). – 50 ex.

ISBN 978-9975-159-27-2.

537.311.322:539.2(075.8)

N 67

**ISBN 978-9975-159-27-2**

© V. Nicorici, A. Nicorici, 2022

© USM, 2022

## CUPRINS

<i>Introducere</i> .....	5
--------------------------	---

### **Capitolul I. TEORIA DE BENZI A CORPULUI SOLID**

1.1. Nivelurile energetice ale atomilor liberi.....	7
1.2. Formarea benzilor energetice în corpurile cristaline.....	9
1.3. Ecuația Schrödinger pentru cristal.....	13
1.4. Simplificarea rezolvării ecuației Schrödinger.....	16
1.5. Spectrul energetic al electronilor (modelul Krönig-Penney). ..	20
1.6. Masa efectivă a purtătorilor de sarcină în cristal.....	30

### **Capitolul II. STATISTICA ELECTRONILOR ȘI A GOLURILOR ÎN SEMICONDUCTORI**

2.1. Funcția de distribuție Fermi-Dirac.....	37
2.2. Densitatea de stări energetice.....	41
2.3. Criteriul de degenerare.....	43
2.4. Concentrația gazului electronic.....	44
2.5. Semiconductorul intrinsec.....	48
2.6. Semiconductorul extrinsec și legea acțiunii maselor .....	54
2.7. Semiconductorul extrinsec cu un singur tip de impurități... ..	58
2.8. Semiconductorul cu impurități donoare și acceptoare.....	70
2.9. Semiconductorul degenerat.....	76

### **Capitolul III. ÎMPRĂȘTIEREA PURTĂTORILOR DE SARCINĂ**

3.1. Cauzele împrăștierii purtătorilor de sarcină. Mobilitatea și timpul de relaxare .....	81
3.2. Ecuația cinetică a lui Boltzmann.....	85
3.3. Împrăștierea pe impuritățile ionizate.....	91

3.4. Împrăștierea pe impuritățile neutre.....	95
3.5. Împrăștierea pe dislocații.....	96
3.6. Împrăștierea pe defectele punctiforme.....	98
3.7. Oscilațiile termice ale rețelei cristaline.....	98
3.8. Spectrul oscilațiilor normale ale rețelei. Fononii.....	105
3.9. Timpul de relaxare în cazul împrăștierii pe oscilațiile termice ale rețelei .....	109
3.10. Mobilitatea în prezența a câtorva mecanisme de împrăștiere .....	118

#### **Capitolul IV. PARTICULARITĂȚILE CONDUCTIBILITĂȚII ÎN SEMICONDUCTORI**

4.1. Dependența conductibilității de temperatură în semiconductori .....	122
4.2. Abaterea de la legea lui Ohm în câmpurile electrice puternice	127
4.3. Efectul Gunn.....	135

#### **Capitolul V. FENOMENELE CINETICE ÎN SEMICONDUCTORI**

5.1. Efectul Hall în semiconductorul cu un singur tip de purtători de sarcină.....	141
5.2. Câmpuri magnetice slabe și puternice.....	144
5.3. Efectul magnetorezistiv.....	147
5.4. Efectul Hall în semiconductori cu conductibilitate mixtă ...	150
5.5. Clasificarea efectelor termoelectrice în semiconductori.....	155
5.6. Efecte termomagnetice în semiconductori.....	164
<b>Bibliografie.....</b>	<b>175</b>

## *Introducere*

Notele de curs prezentate vor servi în calitate de material didactic pentru cursul de lecții la fizica corpului solid, care este predat studenților de la Specialitatea 0533.1 *Fizică* conform Planului de învățământ. Utilitatea editării acestor note de curs este dictată de necesitățile industriei electronice moderne, care presupun cunoașterea atât a teoriei benzilor, cât și a diverselor fenomene care se observă în corpurile solide.

Notele de curs conțin informația care va fi utilizată la studierea cursurilor speciale ce vor urma conform planului de învățământ în cadrul acestei specialități. În lucrare este descrisă formarea benzilor de energie și este analizat modelul cel mai des folosit – modelul Krönig-Penney, sunt deduse formulele de bază ale statisticii electronilor și ale golurilor, sunt expuse principiile generale ale împrăștierii purtătorilor de sarcină. O atenție deosebită se acordă fenomenelor galvanomagnetice, termoelectrice și termomagnetice în semiconductori.

Disciplina „Teoria electronică a corpului solid“ contribuie la dezvoltarea competențelor ce permit a identifica procesele electronice în corpurile solide; a dirija dispozitivele electronice ce funcționează în baza fenomenelor de transport în câmpurile electrice și magnetice; a utiliza metodele, utilajul și tehnologiile moderne la măsurarea caracteristicilor și parametrilor diferitor materiale.

Beneficiari ai acestui curs sunt viitorii fizicieni, care vor putea activa în calitate de cercetători științifici în instituțiile de cercetare, ingineri-specialiști la întreprinderile ce au tangențe cu producția dispozitivelor semiconductoare.

Notele de curs sunt structurate în modul următor: cuprins, introducere, 5 capitole, conform curriculumului la disciplina respectivă, cu conținutul propriu-zis, și lista bibliografică.

Partea practică a disciplinei, care constă din seminare pe rezolvare de probleme și lucrări de laborator, are drept suport didactic: Culegere de probleme la fizica semiconductoarelor (autori A.Nicorici, V.Nicorici, D.Nedeoglo) editată în 2010, Chișinău <https://phys.usm.md/wp->

content/uploads/Problemar-Fizica-s\_c.pdf și Кинетические и контактные явления в полупроводниках (методическое пособие по выполнению лабораторных работ, autori Д.Недеогло, Н.Недеогло, В.Никорич, Т.Юрьева) [https://moodle.usm.md/pluginfile.php/446992/mod\\_resource/content/1/Fenomene%20cinetice%20si%20de%20contact\\_ghid%20metodic.pdf](https://moodle.usm.md/pluginfile.php/446992/mod_resource/content/1/Fenomene%20cinetice%20si%20de%20contact_ghid%20metodic.pdf).

Considerăm drept obligație onorabilă aducerea de mulțumiri sincere recenzenților: profesorului universitar *Dumitru Nedeoglo* și doctorului în științe fizice *Elena Hajdeu-Chicaros* pentru observațiile valoroase și indicațiile utile.

***Autorii***

# Capitolul I. TEORIA DE BENZI A CORPULUI SOLID

## 1.1. Nivelurile energetice ale atomilor liberi

Înainte de a trece la studierea benzilor de energie ale corpului solid este necesar să ne referim la nivelurile energetice ale atomilor liberi, cu alte cuvinte – ale atomilor ce nu interacționează între ei. După *Bohr* (luând în considerare dualismul mișcării electronilor: mișcarea corpusculară și mișcarea ondulatorie), energia totală  $E$  a unui electron în stare legată în atom pentru atomii simpli hidrogenoizi este

$$E = T + U = \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \epsilon_0 n^2} \quad (1.1)$$

unde:

$$T = \frac{mv^2}{2} \quad (1.2)$$

– energia cinetică a electronului;

$$U = \frac{-Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} \quad (1.3)$$

– energia potențială de interacțiune coulombiană a electronului cu nucleul atomic de sarcină  $Ze$ ;

$Z$  – numărul atomic,

$m$  – masa electronului,

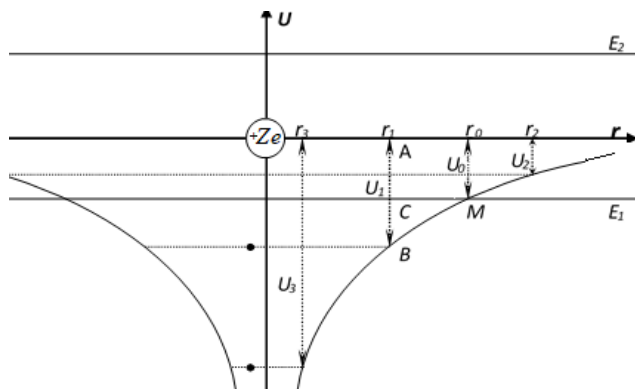
$\epsilon_0$  – permitivitatea dielectrică a vidului,

$n$  – numărul cuantic principal care determină nivelul energetic al electronului în atom,

$r$  – distanța dintre nucleu și electron.

Să cercetăm cazul următor. Considerăm că nucleul cu sarcina  $+Ze$  se află în originea axelor de coordonate, iar un electron de valență se află la o oarecare distanță  $r$  de la nucleu. De-a lungul axei  $OX$  depunem distanța  $r$ , pe axa  $OY$  – energia potențială  $U$  și energia totală  $E$  a electronului. Folosind formula (1.3) putem construi graficul dependenței energiei potențiale a electronului de distanța  $r$  (Fig. 1.1). Graficul obținut reprezintă două curbe – hiperbole și se observă că pentru orice valoare a lui  $r$  energia potențială  $U$  este o mărime negativă. Dacă distanța dintre nucleu și electron este, de exemplu  $r_1$ , atunci

segmentul  $AB$  este energia potențială  $U_1$  a electronului, care se află la distanța  $r_1$  de la nucleu  $Ze$ .



**Fig. 1.1.** Energia totală  $E$  și potențială  $U$  a unui electron în stare legată de atom.

Dacă distanța  $r$  este infinit de mare, atunci energia potențială pentru acest electron este nulă, ceea ce înseamnă că electronul nu interacționează cu nucleul; cu alte cuvinte, el este liber. Astfel, se poate face concluzia că  $U$  este energia care trebuie comunicată electronului pentru ca el să devină liber. Cu alte cuvinte,  $U$  este o barieră de potențial pentru electron și cu cât mai mic este  $r$ , adică, cu cât mai aproape de nucleu se află electronul, cu atât mai adânc el se află în groapa potențială. Rezultă că Figura 1.1 reprezintă un model ce determină energia electronului în groapa de potențial a atomului în dependență de poziția acestuia.

Din formula (1.1) se vede că energia totală a electronului  $E$  nu depinde de distanța  $r$ , ceea ce pe desen poate fi reprezentat prin linii orizontale. Energia  $E_1(r_1)$  este mai mică ca zero, iar  $E_2(r_2)$  – mai mare.

Din (1.1) energia cinetică  $T$  este

$$T = E - U. \quad (1.4)$$

Dacă electronul are energia totală  $E=E_1$  (segmentul  $AC$ ), atunci energia cinetică este dată de segmentul  $BC$ . Reieșind din (1.4),



electronul nu poate să se afle la distanța  $r$  mai mare ca  $r_0$  (de exemplu,  $r_2 > r_0$ ), deoarece în acest caz energia cinetică  $T$  ar fi mai mică decât zero, ceea ce este lipsit de sens fizic. Aceasta înseamnă că electronul cu energia totală  $E_1$  nu poate depăși distanța  $r_0$ ; cu alte cuvinte, electronul este legat de atom. Dacă energia totală este mai mare, de exemplu  $E$  este negativă și  $E > E_1$ , atunci domeniul de deplasare al electronului spre dreapta este mai mare, dar el totuși nu este liber, fiind legat de nucleul atomic. Dacă energia totală a electronului este pozitivă, de exemplu  $E_2$ , atunci energia cinetică  $T$  este mai mare ca zero pentru orice valoare a lui  $r$  și electronul se poate mișca liber în spațiu. În acest caz electronul este liber.

*În cazul electronului legat, energia totală a electronului  $E_1$  este negativă, pentru electronul liber  $-E$  este mai mare ca zero. Pentru ca electronul să treacă din stare legată în stare liberă, este necesar să i se comunice o energie  $\Delta E$  care este egală cu lungimea segmentului AC:*

$$\Delta E = 0 - (-E) = E_1. \quad (1.5)$$

Această energie se numește *energie de ionizare a atomului*.

## ***1.2. Formarea benzilor energetice în corpurile cristaline***

Vom cerceta formarea corpului cristalin pentru un caz particular, luând drept prototip natriul. Ultimul face parte din grupa întâia a Sistemului Periodic al elementelor și are în total unsprezece electroni, care sunt distribuiți pe nivelurile  $s$  și  $p$  astfel:  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$ . Mai întâi vom analiza cazul unidimensional, când atomii sunt aranjați într-un șir, la distanța  $r \gg a$  unul față de altul, unde  $a$  este parametrul rețelei cristaline. Să desenăm schema energetică pentru acești atomi (Fig. 1.2). De-a lungul axei  $OX$  depunem distanța dintre atomi  $r$ , iar pe  $OY$  – energia potențială  $U$ . Dependența  $U$  de  $r$  este reprezentată ca și în paragraful **1.1.** sub forma unor curbe.

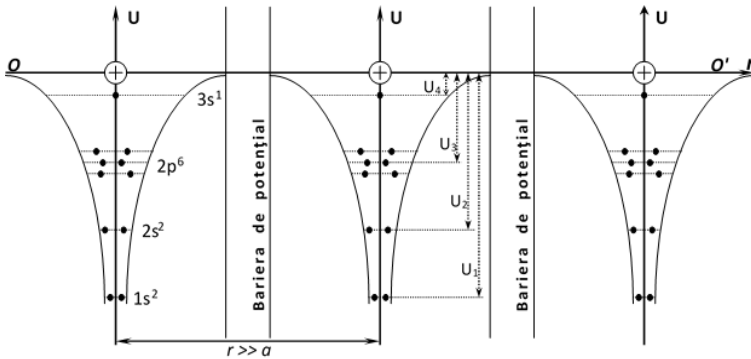


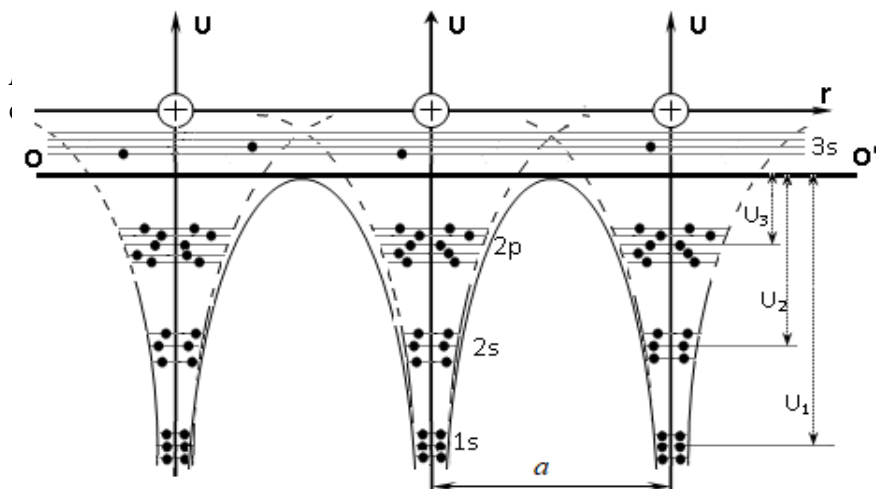
Fig. 1.2. Nivelurile energetice ale electronilor în atomii de natriu.

Nivelurile energetice  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$  și  $3s$  sunt reprezentate prin linii orizontale, iar electronii – prin cerculețe. Înălțimea barierei de potențial pentru acești electroni este egală cu  $U_1$ ,  $U_2$ ,  $U_3$  și  $U_4$ , respectiv nivelurilor energetice menționate mai sus. Menționăm că energia se indică de la axa  $OX$  (nivelul vidului, dreapta  $OO'$ ) până la nivelul energetic ocupat de electron. Pentru electronii de pe nivelurile energetice inferioare bariera de potențial este mai mare, adică pentru electronii de pe nivelul  $1s$  această energie este  $U_1$  pentru electronii de pe nivelul  $3s$  –  $U_4$ , care este mai mică decât  $U_1$ . Electronii atomilor nu pot trece de la un atom la altul, deoarece au de învins o barieră mare de potențial, care împiedică trecerea liberă a electronului de la un atom la altul.

Să micșorăm distanța dintre atomi. Forța de interacțiune dintre acești atomi crește și la distanța  $r = a$  atinge o valoare caracteristică pentru cristalul dat.

Ce se întâmplă în acest caz cu înălțimea barierei și cu nivelurile energetice? Să desenăm schema energetică (Fig. 1.3). Curbele potențiale ale atomilor izolați (linii întrerupte) se suprapun, forma lor se schimbă și se transformă în potențialul rezultat – „parabole întoarse” (linii continue). Curbele potențiale rezultante coboară mai jos de axa  $OX$  și în niciun punct al rețelei de ioni potențialul nu este egal cu zero. Înălțimea barierei de potențial pentru electroni se socoate de la nivelul  $OO'$ , care trece prin vârfurile potențialului rezultat. În afară de aceasta,

la formarea corpului cristalin în loc de niveluri energetice discrete apar benzile de energie.



*Fig. 1.3.* Câmpul potențial al rețelei cristaline și formarea benzilor de energie.

Vom analiza mai detaliat aceste două urmări ale formării corpului cristalin.

a) Înălțimea barierelor de potențial pentru electronii din benzile de energie formate din nivelurile  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$  este reprezentată prin segmentele  $U_1$ ,  $U_2$  și  $U_3$ , respectiv. Se observă că înălțimea barierei de potențial, care trebuie învinsă de către electroni pentru a trece de la un atom la altul, este mai mică față de cazul atomilor izolați. Trecerea electronilor de pe nivelurile  $3s$  de la un atom la altul nu necesită niciun consum de energie, adică bariera de potențial pentru acești electroni este nulă și electronii pot trece liber de la un atom la altul în tot volumul cristalului. Acești electroni nu aparțin unui anumit ion, ei pot fi considerați liberi și formează așa-numitul gaz electronic. Noi am cercetat cazul unidimensional. Pentru cazul tridimensional vom avea o micșorare și mai mare a barierei. Micșorarea barierei de potențial se explică prin atracția coulombiană a electronilor unui atom de către nucleele atomilor vecini. Este clar că această acțiune va fi mai puternică

asupra electronilor exteriori. Deci, micșorarea distanței dintre atomi duce la micșorarea barierei de potențial pentru electroni.

b) La formarea cristalului, poziția nivelurilor energetice ale electronilor se modifică, nivelurile se despică și formează benzi de energie. Conform principiului Pauli, pe fiecare nivel din banda de energie se află cel mult doi electroni; de aceea, la formarea corpului cristalin nivelurile cu aceeași energie ale atomilor diferiți nu se suprapun, dar se situează alături la o distanță infinit de mică. Deci, apare un sistem de benzi de energie permise, separate de benzile de energie interzise, care se notează prin  $E_g$ . Lățimea benzii energetice depinde de natura atomilor și de structura cristalină a substanței. Banda de energie nu reprezintă o serie continuă de valori ale energiei electronului, ci un sistem de niveluri energetice discrete. Numărul total al nivelurilor de energie în bandă este egal cu produsul  $N \cdot g$ , unde  $N$  este numărul total de electroni din cristal, iar  $g$  – gradul de degenerare al nivelului energetic al electronului din atomul izolat din care s-a format banda de energie și este

$$g = 2l + 1, \quad (1.6)$$

unde  $l$  – numărul cuantic secundar.

Pentru nivelul  $s$  numărul  $l = 0$  și atunci  $g = 1$ , iar pentru nivelul  $p$  numărul  $l = 1$  și  $g = 3$ . Deci, cea mai mare modificare a energiei potențiale are loc pentru electronii ce se află pe nivelurile exterioare, iar benzile lor de energie vor fi mai late în comparație cu benzile de energie formate din nivelurile inferioare.

Deoarece lățimea benzii permise este aproximativ de  $\approx 1$  eV, iar numărul de atomi într-o unitate de volum ( $1 \text{ cm}^3$ ) este de ordinul  $5 \cdot 10^{22}$ , rezultă că intervalul de energie între nivelurile discrete în limitele zonei permise este foarte mic ( $< 10^{-22} \text{ eV}$ ), mult mai mic decât energia termică a electronului  $k_0T$  (la  $T=100K$   $k_0T=8,6 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$ , iar la  $T=300K$   $k_0T = 0,026 \text{ eV}$ ). Deci, putem considera că în limitele zonei permise energia se schimbă cvasicontinuu.

În toate procesele ce au loc în semiconductori participă numai electronii care sunt distribuiți pe ultimele benzi de energie. Banda de energie, care ia naștere din nivelurile atomice ale electronilor de valență, se numește *bandă de valență*. Nivelurile energetice ale atomului, care nu sunt ocupate de electroni în stare fundamentală, în urma despicării vor forma una sau mai multe benzi energetice libere, cea mai de jos purtând denumirea *bandă de conducție*. Deci, banda de conducție poate fi ocupată de electroni numai când are loc excitarea electronilor (temperatura, radiația etc.) din banda de valență.

Există materiale care au  $E_g = 0$ . Acestea sunt metalele, în care are loc suprapunerea benzii de conducție cu cea de valență. În dielectrice banda interzisă este atât de mare, încât electronul nu poate nimeri în banda de conducție la nicio temperatură sau alt tip de excitare.

Semiconductorii sunt niște materiale intermediare ( $E_g$  se află în intervalul de la 0 până la 3...4 eV). Pentru a reprezenta diagrama de benzi energetice, de obicei, se limitează doar la ultimele două benzi: banda de conducție, a cărei margine inferioară se notează prin  $E_C$ , și banda de valență, a cărei margine superioară se notează cu litera  $E_V$ . Electronii care se află în banda de valență nu se pot deplasa liber prin cristal, deci sunt electroni legați. Electronii care se află în banda de conducție sunt electroni liberi.

*La formarea corpului solid:*

- *energia potențială rezultantă (înălțimea barierei de potențial) se micșorează;*
- *nivelurile energetice inițiale ale atomilor izolați se despică, formând benzi de energie, care constau din niveluri energetice discrete;*
- *lățimea benzii interzise determină proprietățile electrice ale materialului.*

### ***1.3. Ecuația Schrödinger pentru cristal***

În paragrafele precedente problema formării benzilor de energie ale electronilor în corpurile cristaline a fost cercetată calitativ. Pentru a

obține un rezultat cantitativ este necesar de a rezolva ecuația lui Schrödinger, care permite a determina stările staționare ale spectrului energetic al ansamblelor de nuclee atomice și electroni care formează cristalul. Ecuația staționară a lui Schrödinger este

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (1.7)$$

unde:

$\hat{H}$  – hamiltonianul sistemului ce include toate formele de energie în cristal;

$\psi$  – funcția de undă proprie ce depinde de coordonatele tuturor electronilor  $r_i$  și ale tuturor nucleelor  $R_\alpha$ .

$$\psi = \psi(r_i, R_\alpha), \quad (1.8)$$

$E$  – energia sumară a tuturor particulelor din cristal, nucleelor  $E_n$  și a electronilor  $E_e$

$$E = E_n + E_e. \quad (1.9)$$

Hamiltonianul sistemului are următoarea formă

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{U}_e + \hat{U}_n + \hat{U}_{en} + \hat{V}, \quad (1.10)$$

unde:

1.  $\hat{T}_e$  – operatorul energiei cinetice a electronilor cu masa  $m_i$

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^n \hat{T}_i = \sum_{i=1}^n (-\hbar^2 / 2m_i) \Delta_i, \quad (1.11)$$

unde  $n$  este numărul total de electroni,  $\Delta_i$  este operatorul lui Laplas pentru electroni, care reprezintă operația de diferențiere

$$(\Delta_i = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}).$$

2.  $\hat{T}_n$  – operatorul energiei cinetice a nucleelor cu masa  $M_\alpha$

$$\hat{T}_n = \sum_{\alpha=1}^N \hat{T}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^N (-\hbar^2 / 2M_\alpha) \Delta_\alpha, \quad (1.12)$$

unde  $N$  este numărul total de nuclee.

3.  $\hat{U}_e$  – operatorul energiei potențiale de interacțiune coulombiană dintre perechile de electroni

$$\begin{aligned}\widehat{U}_e &= \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{j, i \neq j}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{j, i \neq j}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{j, i \neq j}^n \widehat{U}_{ij}(r_{ij})\end{aligned}\quad (1.13)$$

Menționăm că  $i$  nu poate fi egal cu  $j$ , deoarece electronul nu poate interacționa cu el însuși,  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  este distanța dintre electronii  $i$  și  $j$ , iar coeficientul  $\frac{1}{2}$  indică că interacțiunea dintre electronii  $i$  cu  $j$  ( $j$  cu  $i$ ) se ia în calcul o singură dată.

4.  $\widehat{U}_n$  – operatorul energiei potențiale de interacțiune coulombiană dintre perechile de nucleu

$$\begin{aligned}\widehat{U}_n &= \frac{1}{2} \sum_\alpha^N \sum_{\beta, \alpha \neq \beta}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_\alpha^N \sum_{\beta, \alpha \neq \beta}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{\alpha\beta}} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_\alpha^N \sum_{\beta, \alpha \neq \beta}^N \widehat{U}_{\alpha\beta}(R_{\alpha\beta}),\end{aligned}\quad (1.14)$$

unde  $N$  – numărul total de nucleu,  $R_{\alpha\beta}$  – distanța dintre nucleele  $\alpha$  și  $\beta$ .

5.  $U_{e,n}$  – operatorul energiei potențiale de interacțiune dintre electronul  $i$  și nucleul  $\alpha$

$$\widehat{U}_{en} = -\frac{1}{2} \sum_i^n \sum_\alpha^N \frac{Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_\alpha - \vec{r}_i|} = -\frac{1}{2} \sum_i^n \sum_\alpha^N \widehat{U}_{\alpha,i}(R_\alpha, r_i), \quad (1.15)$$

unde  $|\vec{R}_\alpha - \vec{r}_i|$  este distanța dintre electronul  $i$  și nucleul  $\alpha$ .

6.  $\widehat{V}$  – operatorul energiei întregului sistem de particule într-un câmp exterior  $V = V(r_i, R_\alpha)$ .

Numărul de variabile independente în ecuația (1.7) depinde de numărul total de particule (electroni și nucleu), pe care le conține cristalul dat și de numărul de ordine al fiecărui atom  $Z$ . Dacă cristalul conține  $N$  atomi, atunci ecuația Schrödinger va avea  $3(Z+1)$  variabile. Într-adevăr, pentru un atom sunt necesare  $3Z+3$  coordonate:  $3Z$  – trei coordonate pentru  $Z$  electroni plus 3 coordonate pentru determinarea poziției nucleului. Deoarece într-o unitate de volum de cristal ( $1 \text{ cm}^3$ ) se găsesc aproximativ  $5 \cdot 10^{22}$  atomi, atunci pentru  $Z > 10$  numărul total de variabile va fi mai mare decât  $10^{24}$ , deci este imposibil de a rezolva această ecuație pe cale tradițională. Teoria corpului solid constă în determinarea unor metode de aproximare, care să permită rezolvarea ecuației Schrödinger pentru cristal. Una dintre metodele de simplificare este reducerea

problemei cu multe particule la mai multe probleme pentru fiecare particulă în parte. În acest caz, de la ecuația (1.7) vom trece la un sistem de ecuații în care fiecare ecuație va descrie mișcarea unei singure particule ce nu interacționează cu celelalte.

*Rezolvarea ecuației Schrödinger permite determinarea stărilor electronilor în corpurile solide, ceea ce este important pentru caracterizarea materialelor electronice, în particular a proprietăților electrice, magnetice și termice, inclusiv a proceselor de împrăștiere.*

#### 1.4. Simplificarea rezolvării ecuației Schrödinger

Pentru rezolvarea ecuației Schrödinger se recurge la un șir de aproximări.

*Aproximarea adiabatică* constă în împărțirea tuturor particulelor în particule ușoare – electroni și particule grele – nucleele atomice. Considerăm că în stare de echilibru energiile cinetice medii ale celor două feluri de particule sunt de același ordin ca mărime. Atunci obținem:

$$\frac{m_i v_i^2}{2} = \frac{M_\alpha V_\alpha^2}{2}, \text{ de unde } \sqrt{\frac{m_i}{M_\alpha}} = \frac{V_\alpha}{v_i} = 10^{-4} \dots 10^{-2}. \quad (1.16)$$

Deoarece masa nucleului  $M_\alpha$  este cu mult mai mare decât masa electronului  $m_i$  și raportul lor are valoarea de doar  $10^{-4} \dots 10^{-2}$ , rezultă că viteza de deplasare a electronilor este de cel puțin cu două ordine mai mare decât viteza de deplasare a nucleelor. Deci, la orice deplasare a nucleului, practic momentan, se stabilește o nouă distribuție spațială a electronilor; cu alte cuvinte, în orice moment de timp se poate considera că electronul se mișcă în câmpul potențial al nucleelor presupuse fixe. În acest caz energia cinetică a nucleelor este egală cu zero, iar energia lor de interacțiune este o mărime constantă, care la fel poate deveni zero la alegerea convenabilă a originii sistemului de coordonate. Această presupunere exclude posibilitatea schimbării reciproce de energie dintre electroni și nuclee, mișcarea electronilor și a nucleelor este reciproc independentă și aproximarea se numește *adiabatică*. Pe de altă parte, în intervalul de timp în care nucleele se vor deplasa cât de cât esențial,



electronii vor reuși să parcurgă o distanță destul de mare și mișcarea lor poate fi considerată ca o mișcare în câmpul de potențial al tuturor electronilor, care sunt repartizați în spațiu aproximativ uniform.

Hamiltonianul sistemului este

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_n, \quad (1.17)$$

unde 
$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{U}_e + \hat{U}_{en}. \quad (1.18)$$

Forma operatorilor  $\hat{T}_e$  și  $\hat{U}_e$  nu se schimbă (formulele (1.11) și (1.13)), dar

$$\hat{U}_{en} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha,i}^{N,n} \hat{U}_{\alpha,i}(R_{\alpha 0}, r_i), \quad (1.19)$$

unde coordonata nucleelor fixe este  $R_{\alpha 0}$ .

În același timp, luând în considerare caracterul probabilistic al funcției de undă, ultima poate fi reprezentată prin produsul funcțiilor de undă ale electronilor  $\psi_e(r_i, R_{\alpha 0})$  și ale nucleelor  $\psi_n(R_{\alpha 0})$

$$\psi = \psi_e(r_i, R_{\alpha 0}) \cdot \psi_n(R_{\alpha 0}), \quad (1.20)$$

iar energia totală a sistemului este

$$E = E_e + E_n. \quad (1.21)$$

Deoarece în toate procesele ce au loc în corpurile solide rolul principal îl joacă electronii, ulterior vom acorda mai multă atenție ecuației Schrödinger doar pentru electroni

$$\hat{H}_e \psi(r_i, R_{\alpha 0}) = E_e \psi(r_i, R_{\alpha 0}). \quad (1.22)$$

Rezolvând această ecuație se poate determina spectrul energetic al electronilor, însă rezolvarea ei rămâne încă destul de dificilă, din care cauză se recurge la următorul pas de aproximare.

*Aproximarea electronilor de valență.* În acest caz se consideră că sistemul este alcătuit din două subsisteme de particule: electronii de valență și restul atomului – ionii, care, la rândul lor, sunt formați din nucleu și ceilalți electroni. În acest caz, ecuația (1.22) va fi scrisă numai pentru electronii de valență ai atomilor. Acești electroni se deplasează în

câmpul potențial al ionilor fixe. Însă și această aproximare nu simplifică mult rezolvarea ecuației (1.22).

*Aproximarea unielectronică (Hartri Fock).* Această metodă este una dintre cele mai răspândite metode de transformare a problemei multielectronice la o problemă unielectronică. Metoda constă în înlocuirea energiei de interacțiune dintre perechile de electroni cu energia de interacțiune dintre fiecare electron și câmpul mediu efectiv datorat tuturor celorlalți electroni. Energia de interacțiune dintre electroni și nuclee se înlocuiește cu energia de interacțiune dintre fiecare electron și câmpul electric datorat tuturor ionilor cristalului considerați fixe.

Dacă notăm cu  $\Omega_i$  energia potențială a electronului  $i$  în câmpul mediu al celorlalți electroni, atunci suma dublă după  $i$  și  $j$  în expresia pentru energia potențială de interacțiune dintre electroni  $U_e$  (formula (1.13)) se poate înlocui cu suma simplă

$$\widehat{U}_e = \frac{1}{2} \sum_i^n \Omega_i(r_i). \quad (1.23)$$

Energia potențială  $\Omega_i$  a electronului  $i$  depinde numai de coordonatele lui  $r_i$  în câmpul potențial al celorlalți electroni. Însă, menționăm că  $\Omega_i$  depinde nu doar de mișcarea tuturor celorlalți electroni, dar și de mișcarea lui însuși, deoarece mișcarea lui influențează asupra comportamentului celorlalți electroni.

Întrucât mișcarea electronului dat influențează asupra valorii câmpului mediu efectiv, iar acesta din urmă determină mișcarea electronului, câmpul acesta se numește *câmp selfconsistent*, iar metoda de aproximare – *metoda câmpului selfconsistent*.

În același mod poate fi scrisă energia potențială de interacțiune a electronilor cu nucleele (formula (1.15)). Introducerea câmpului selfconsistent permite efectuarea următoarei înlocuiri:

$$\widehat{U}_{en} = -\frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{\alpha}^N \widehat{U}_{\alpha,i}(r_i, R_{\alpha}) = -\frac{1}{2} \sum_i^n U_i(r_i, R_{\alpha 0}), \quad (1.24)$$

unde  $U_i$  este câmpul mediu efectiv datorat tuturor nucleelor-ionilor. Dependența lui  $U_i$  de  $R_{\alpha 0}$  este dependența parametrică, de aceea pentru simplificarea expresiei (1.24) se poate omite parametrul  $R_{\alpha 0}$ .

Având în vedere cele relatate mai sus, ecuația lui Schrödinger poate fi scrisă în felul următor:

$$\left\{ \sum_i^n \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \Omega_i(r_i) + U_i(r_i) \right] \right\} \psi_e = E_e \psi_e. \quad (1.25)$$

Expresia din paranteză nu este altceva decât hamiltonianul electronului  $i$  și atunci ecuația Schrödinger

$$\hat{H}_e \psi_e = \left( \sum_i^n \hat{H}_i \right) \psi_e = E_e \psi_e. \quad (1.26)$$

Acum hamiltonianul nu mai conține energia de interacțiune a electronilor. În acest caz funcția de undă a sistemului de electroni poate fi reprezentată sub formă de produs al funcțiilor de undă, deci

$$\psi_e(r_1, r_2, \dots, r_n) = \psi_1(r_1) \cdot \psi_2(r_2) \cdot \dots \cdot \psi_n(r_n) = \prod \psi_i(r_i), \quad (1.27)$$

iar energia totală a sistemului de electroni este egală cu suma energiilor fiecărui electron aparte

$$E_e = E_1 + E_2 + \dots + E_n = \sum E_i. \quad (1.28)$$

Acum se poate scrie următorul sistem de ecuații Schrödinger unielectronice

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 \psi_1 &= E_1 \psi_1 \\ \hat{H}_2 \psi_2 &= E_2 \psi_2 \\ &\dots \dots \dots \\ \hat{H}_n \psi_n &= E_n \psi_n \end{aligned} \quad (1.29)$$

Din cele relatate mai sus rezultă că introducerea câmpului selfconsistent permite reducerea problemei multielectronice la o problemă unielectronică descrisă de ecuația

$$\hat{H} \psi = E \psi, \quad (1.30)$$

unde  $\hat{H}$ ,  $\psi(r)$ ,  $E$  sunt, respectiv, hamiltonianul, funcția de undă și energia totală a unui singur electron din cristal. Vom nota energia potențială a electronului în cristal ca

$$V(r) = \Omega(r) + U(r), \quad (1.31)$$

atunci ecuația lui Schrödinger va avea următoarea formă:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi = E\psi. \quad (1.32)$$

Ecuția (1.32) stă la baza teoriei benzilor de energie ale electronilor în cristal și prin rezolvarea acesteia se obține spectrul propriu discret al energiilor electronilor  $E_1, E_2, \dots, E_n$  și funcțiile proprii de undă  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ . Funcția proprie de undă  $\psi$  descrie starea electronului și determină proprietățile acestuia, iar energia  $E$  este numai o proprietate a electronului. Uneia și aceleiași energii îi pot corespunde mai multe stări, deci mai multe funcții proprii  $\psi$ . Numărul de funcții proprii, care corespund unei singure energii  $E$ , se numește *grad de degenerare*.

*Prin folosirea metodelor de aproximare (metoda adiabatică, metoda electronilor de valență și metoda câmpului selfconsistent) electronii din cristal sunt considerați drept particule care nu interacționează între ele, adică se deplasează independent una față de alta, iar ecuația Schrödinger pentru cristal se reduce la o problemă unielectronică.*

### **1.5. Spectrul energetic al electronilor (modelul Krönig -Penney)**

Pentru a avea tabloul complet al comportamentului electronilor în corpurile cristaline este necesar de a determina starea gazului electronic, deci de a determina dependența  $E = E(k)$ . Vom cerceta câmpul de potențial al cristalului, care are perioada egală cu cea a rețelei cristaline. În acest caz energia potențială trebuie să satisfacă condiția de periodicitate pentru rețeaua cu perioada  $c$  și

$$V(r) = V(r + nc), \text{ unde } n = \overline{\pm 1, \pm 2, \pm 3} \dots \quad (1.33)$$

Ecuția Schrödinger (1.32) poate fi scrisă în modul următor:

$$\Delta\psi - \frac{2m}{\hbar^2} [V(r) - E(r)] \psi = 0. \quad (1.34)$$

În cazul tridimensional funcția  $\psi(r)$  poate fi reprezentată ca produsul a trei funcții, care depind numai de o singură coordonată, adică

$$\psi(r) = \psi(x) \cdot \psi(y) \cdot \psi(z). \quad (1.35)$$

Atunci ecuația Schrödinger (1.35) poate fi scrisă pentru fiecare direcție aparte:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E(x)]\psi = 0 \quad (1.36 a)$$

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(y) - E(y)]\psi = 0 \quad (1.36 b)$$

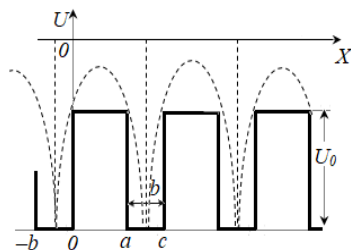
$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(z) - E(z)]\psi = 0. \quad (1.36 c)$$

Începem rezolvarea ecuației (1.36) pentru cazul unidimensional (ecuația (1.36 a), direcția  $OX$ ), considerând că atomii sunt plasați la distanța  $c$  unul de altul (Fig. 1.4).

Pentru simplificarea ecuației Schrödinger vom folosi modelul Krönig – Penney, conform căruia câmpul potențial al rețelei cristaline reprezintă niște gropi și bariere dreptunghiulare cu perioada  $c = a + b$ , unde  $a$  este lățimea gropii de potențial,  $b$  – lățimea barierei,  $U_0$  – înălțimea barierei (Fig. 1.4).

Energia potențială a electronului într-o astfel de rețea satisface condiția de periodicitate

$$V(x) = V(x + nc). \quad (1.37)$$



**Fig. 1.4.** Forma barierei de potențial în modelul Krönig – Penney.

Pentru a facilita rezolvarea vom analiza două domenii ale rețelei cristaline:

a)  $U(x) = 0$ , pentru  $0 \leq x \leq a$  sau  $nc \leq x \leq nc + a$ ;

b)  $U(x) = U_0 \geq 0$ , pentru  $a \leq x \leq c$  sau  $nc + a \leq x \leq (n+1)c$ .

Deci, forma energiei potențiale  $U(x)$  reprezintă o succesiune periodică de gropi de potențial de lățime  $a$ , unde  $U(x) = 0$  și bariere de potențial dreptunghiulare de lățime  $b$  și înălțimea  $U_0$  (Fig. 1.4). În aceste condiții, ecuația Schrödinger (1.36 a) poate fi scrisă separat pentru ambele domenii:

pentru  $0 \leq x \leq a$ , când  $U(x) = 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E(x)\psi = 0, \quad (1.38 a)$$

pentru  $a \leq x \leq c$ , când  $V(x) = U_0 \geq 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [U_0 - E(x)]\psi = 0. \quad (1.38 b)$$

Soluțiile ecuațiilor (1.38) le vom căuta sub forma funcției Bloch

$$\psi_{\mathbf{k}}(x) = U_{\mathbf{k}}(x) \exp(i \vec{k} \cdot \vec{x}), \quad (1.39)$$

apoi după un șir de transformări (luând în considerare că funcția  $\psi(x)$  trebuie să fie continuă în punctele  $x=0$  și  $x=a$ ) vom obține pentru ecuația Schrödinger următoarea expresie:

$$P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} + \cos \kappa a = \cos ka, \quad (1.40)$$

unde

$$P = \frac{mabU_0}{\hbar^2}, \quad (1.41 a)$$

$$\kappa = \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.41 b)$$

Ecuația (1.40) este o ecuație transcendentă și se rezolvă în raport cu  $\kappa a$  grafic (Fig. 1.5).

Pentru aceasta se construiește graficul expresiei, care reprezintă partea stânga a ecuației (1.40), în dependență de energie, deci  $\kappa a$  (luând în considerare (1.41 b)). Mai întâi construim graficele funcțiilor  $\cos \kappa a$  (linia 1) și  $P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a}$  (linia 2), apoi funcția sumară

$$F(\kappa a) = P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} + \cos \kappa a. \quad (1.42)$$

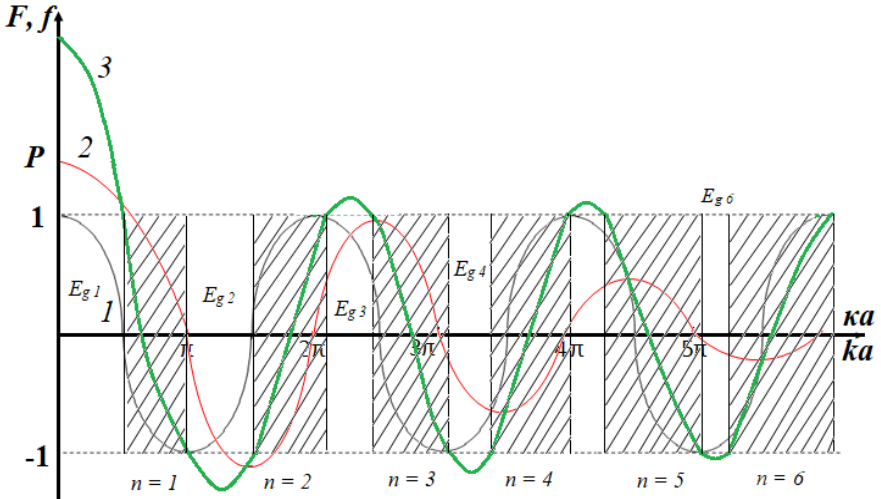


Fig. 1.5. Rezolvarea grafică a ecuației transcendente (1.40): 1 – funcția  $\cos \kappa a$ ; 2 – funcția  $P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a}$ ; 3 – funcția sumară  $F$  (1.42).

Pentru aceasta de-a lungul axei  $OX$  depunem  $\kappa a = \pi/2, \pi, 3\pi/2 \dots$  și notăm două linii orizontale pentru valorile maxime  $+1$  și  $-1$  ale funcției  $\cos \kappa a$ . Graficul funcției  $\cos \kappa a$  este reprezentat prin linia sură 1. După aceasta construim graficul funcției  $P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a}$  (linia 2, roșie):

când  $\kappa a \rightarrow 0$ ,  $\lim_{\kappa a \rightarrow 0} \left( \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} \right) = 1$  și  $P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} = P$ ; când  $\kappa a$  crește,

funcția  $P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a}$  se comportă ca o sinusoidă și intersectează axa  $\kappa a$  în punctele  $\kappa a = \pi, 2\pi, 3\pi \dots$ , însă amplitudinea ei este invers proporțională cu mărimea  $\kappa a$ , deci se micșorează. Suma acestor două funcții este rezultanta  $F(\kappa a)$  (linia 3, verde) descrisă de (1.42).

Dacă  $\cos \kappa a$  este egal cu 0, funcția  $F(\kappa a)$  coincide cu funcția  $P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a}$  și, invers, dacă  $P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} = 0$ , funcția  $F(\kappa a)$  coincide cu funcția

$\cos \kappa a$ . Amplitudinea funcției  $F(\kappa a)$  nu este o mărime constantă: pentru valori mici ale lui  $\kappa a$  ea depășește cu mult mărimea  $\pm 1$ , apoi se micșorează odată cu creșterea acestuia. De asemenea, se micșorează și lungimea intervalului  $\kappa a$ , când amplitudinea funcției  $F(\kappa a)$  depășește intervalul  $\pm 1$ . Din acest grafic se vede că funcția  $F(\kappa a)$  nu satisface ecuația (1.40) pentru orice valoare a lui  $\kappa a$ , deoarece termenul  $\cos \kappa a$  din partea dreaptă a ecuației nu poate avea valori mai mari decât  $\pm 1$ .

Domeniile argumentului  $\kappa a$ , în care funcția rezultantă  $F(\kappa a)$  are valori cuprinse în intervalul  $(-1, +1)$ , reprezintă soluțiile ecuației (1.40) și se numesc *zone (benzi) permise* (regiunile hașurate din Fig. 1.5). Regiunile nehașurate reprezintă zone interzise. Din Figura 1.5 se vede că lățimea zonei permise crește odată cu creșterea  $\kappa a$ , adică cu creșterea energiei electronului ( $\kappa$  este proporțional cu  $E^{1/2}$ , a se vedea (1.41 b), iar lățimea benzii interzise se micșorează. Cu alte cuvinte, când  $\kappa a$  crește, efectul barierelor scade, adică electronul devine liber.

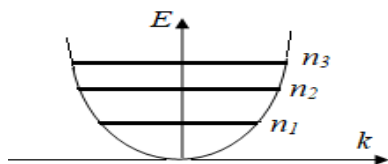
În dependență de valoarea lui  $P$  (relația (1.41 a), care caracterizează barierele de potențial ale câmpului potențial al rețelei cristaline, ecuația (1.40) poate fi rezolvată pentru următoarele trei cazuri:

a)  $P \rightarrow 0$  sau bariera de potențial  $U_0 \rightarrow 0$ . Cazul electronilor absolut liberi. În acest caz ecuația (1.40) are forma

$$\cos \kappa a = \cos ka, \quad (1.43)$$

de unde rezultă  $k = \kappa = \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}$

$$\text{sau } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.44)$$



**Fig. 1.6.** Spectrul energetic al electronilor liberi (parabola) și puternic legați (linii discrete).

Din (1.44) se vede că energia  $E$  variază continuu între 0 și  $\infty$ , deci domeniile interzise pentru electronii liberi lipsesc, iar dependența  $E(k)$  are formă de parabolă (Fig. 1.6).



b)  $P \rightarrow \infty$  sau bariera de potențial  $U_0 \rightarrow \infty$ . Cazul electronilor puternic legați.

Vom scrie ecuația (1.40) astfel:

$$\frac{\sin \kappa a}{\kappa a} + \frac{\cos \kappa a}{P} = \frac{\cos \kappa a}{P}. \quad (1.45)$$

Pentru  $P \rightarrow \infty$  vom obține  $\frac{\sin \kappa a}{\kappa a} = 0$ ,

deci

$$\sin \kappa a = 0. \quad (1.46)$$

Relația (1.46) poate avea loc dacă

$$\kappa a = n\pi, \text{ unde } n = \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots \quad (1.47)$$

Folosind (1.41 b) obținem următoarea expresie:

$$\left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} a = n\pi,$$

de unde determinăm energia electronului

$$E = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}. \quad (1.48)$$

Din (1.48) se observa că în cazul electronilor puternic legați spectrul lor energetic este discret (Fig. 1.6) și nu conține funcția periodică a potențialului. Deci, electronii se află într-o groapă de potențial cu pereți infinit de înalți; deci, avem o situație ce corespunde electronilor în atomii izolați.

c) Bariera de potențial este destul de mare, dar nu tinde spre infinit ( $P \gg I$ ,  $P \rightarrow \infty$ ), adică nu mai este valabilă aproximarea electronilor puternic legați. Acest caz este unul *intermediar (general)*, care destul de bine descrie spectrul energetic al electronilor în corpuri solide.

Dacă  $P \gg I$ , atunci în ecuația (1.45) termenii al doilea și al treilea sunt destul de mici. Rezultă că primul termen  $\frac{\sin \kappa a}{\kappa a}$  la fel este

foarte mic, dar aceasta are loc atunci când  $\kappa a$  nu diferă mult de  $n\pi$  și se poate considera că

$$\kappa a = n\pi + \delta, \quad (1.49)$$

unde  $\delta$  este un termen de corecție foarte mic,  $\delta \ll 1$ . Înlocuim (1.49) în (1.45) și obținem

$$\frac{\sin(n\pi + \delta)}{n\pi + \delta} + \frac{\cos(n\pi + \delta)}{p} = \frac{\cos \kappa a}{p}. \quad (1.50)$$

Luând în considerare că pentru  $\delta \ll 1$ , obținem:

$$\sin(n\pi + \delta) = \sin n\pi \cdot \cos \delta + \cos n\pi \cdot \sin \delta = \delta, \quad (1.51 a)$$

$$\cos(n\pi + \delta) = \cos n\pi \cdot \cos \delta - \sin n\pi \cdot \sin \delta = (-1)^n \quad (1.51 b)$$

Înlocuim (1.51) în ecuația (1.50) și obținem:

$$\frac{(-1)^n \delta}{n\pi + \delta} + \frac{(-1)^n}{p} = \frac{\cos \kappa a}{p}. \quad (1.52)$$

Rezolvăm (1.52) în raport cu  $\delta$  și ne vom limita la termenii de primul ordin

$$(-1)^n \delta + \frac{(-1)^n}{p} n\pi = \frac{\cos \kappa a}{p} n\pi, \quad (1.53)$$

de unde

$$\delta = \frac{n\pi \cos \kappa a}{(-1)^n p} - \frac{n\pi}{p} = \frac{n\pi}{p} [(-1)^n \cos \kappa a - 1]. \quad (1.54)$$

Conform (1.49)

$$\begin{aligned} \kappa a &= n\pi + \frac{n\pi}{p} [(-1)^n \cos \kappa a - 1], \\ \kappa &= \frac{n\pi}{a} \left\{ 1 + \frac{1}{p} [(-1)^n \cos \kappa a - 1] \right\}. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Luând în considerare (1.41 b),

$$\left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{n\pi}{a} \left\{ 1 + \frac{1}{p} [(-1)^n \cos \kappa a - 1] \right\}. \quad (1.56)$$

Ridicăm ecuația (1.56) la pătrat, neglijăm termenul foarte mic ce conține  $\frac{1}{p^2}$  și obținem:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \left\{ 1 + \frac{2}{P} [(-1)^n \cos ka - 1] \right\},$$

de unde determinăm energia electronilor

$$E_n(k) = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2} \left\{ \left( 1 - \frac{2}{P} \right) + \frac{(-1)^n 2 \cos ka}{P} \right\}. \quad (1.57)$$

Ecuția (1.57) reprezintă spectrul energetic al electronilor în banda energetică cu numărul  $n$ . Dacă vom nota

$$A_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2} \left( 1 - \frac{2}{P} \right) \quad (1.58 a)$$

și

$$B_n = \frac{\hbar^2 n^2}{4ma^2 P}, \quad (1.58 b)$$

atunci (1.57) va fi prezentată în forma mai compactă

$$E_n(k) = A_n + (-1)^n B_n \cos ka. \quad (1.59)$$

Energia electronilor este compusă din doi termeni:

- $A_n$  este energia electronului pe nivelul  $n$ ;
- $(-1)^n B_n \cos ka$  este un termen adițional ce reprezintă o funcție periodică a vectorului de undă  $k$  și descrie variația energiei electronului în limitele unei zone energetice, formate din nivelurile  $n$  ale tuturor atomilor.

Ne vom opri mai detaliat la analiza energiei electronilor în cristal.

I. Din (1.59) pot fi găsite valorile maxime și minime ale energiei  $E_n$ . Dacă  $n$  este un număr par, atunci  $E_n$  este maximă când  $\cos ka = +1$  și minimă – când  $\cos ka = -1$ . Deci, valorile maxime și minime ale  $E_n$  vor fi egale cu

$$E_{n \max} = A_n + B_n \quad (1.60 a)$$

$$E_{n \min} = A_n - B_n. \quad (1.60 b)$$

Rezultate analogice vom avea și pentru  $n$  impar. Acum putem determina lățimea zonelor permise și interzise. Lățimea zonei permise va fi egală cu

$$\Delta E_n = E_{n \max} - E_{n \min} = A_n + B_n - A_n + B_n = 2B_n$$

sau

$$\Delta E_n = \frac{n^2 h^2}{2ma^2 P}, \quad (1.61)$$

de unde se vede că banda permisă este cu atât mai mare cu cât numărul benzii  $n$  este mai mare.

Lățimea zonei interzise va fi egală cu

$$\Delta E_{gn} = E_{n \min} - E_{n-1 \max} = A_n - B_n - A_{n-1} - B_{n-1}$$

sau

$$\Delta E_{gn} = \frac{h^2(2n-1)}{8ma^2} - \frac{n^2 h^2}{2ma^2 P}, \quad (1.62)$$

deci, cu creșterea numărului zonei  $n$  lățimea benzii interzise se micșorează.

II. Pentru a obține toate valorile  $E_n$  este necesar de a analiza întregul interval de variație a  $ka$ , de la  $0$  până la  $2\pi$ , iar vectorul de undă  $k$  în acest caz variază între  $0$  și  $\frac{2\pi}{a}$

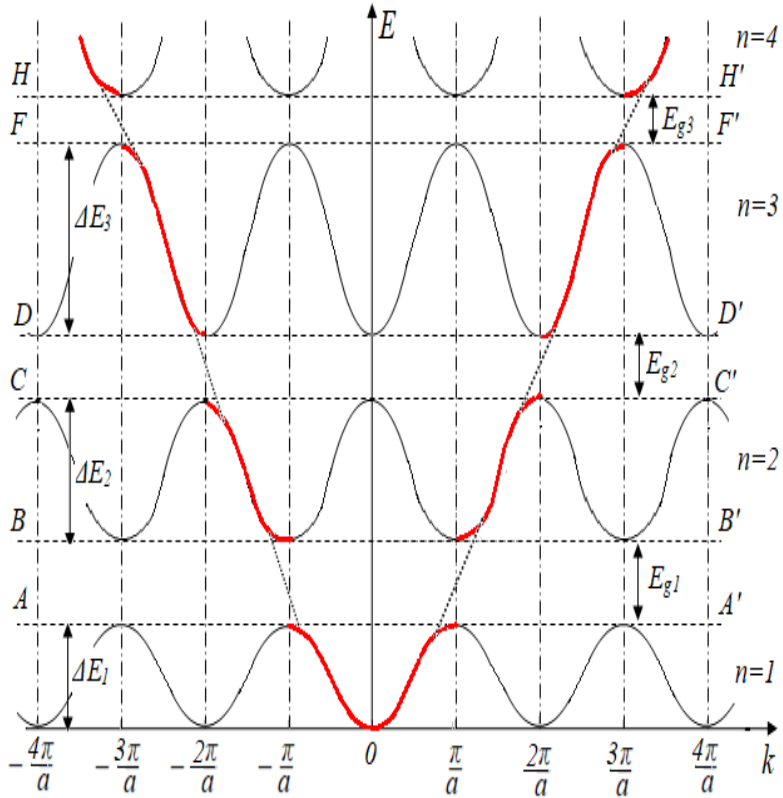
$$0 \leq k \leq 2\pi/a \quad \text{sau} \quad -\pi/a \leq k \leq \pi/a.$$

În formă generală ultima expresie poate fi scrisă

$$-n\pi/a \leq k \leq n\pi/a. \quad (1.63)$$

Analiza ecuației (1.59) arată că funcția  $E_n(k)$  are discontinuități (Fig. 1.7).

Pentru diferite valori ale lui  $n$  vom obține diferite benzi de energii permise separate de benzi de energii interzise. Pentru  $n = 1$  avem funcția periodică  $E_n(k)$ , care variază între liniile orizontale: axa  $OX$  și  $AA'$ . Pentru  $n = 2$  funcția  $E_n(k)$  variază între liniile  $BB'$  și  $CC'$  și așa mai departe. Când  $k$  variază de la  $-\pi/a$  până la  $\pi/a$ , energia  $E_n$  se schimbă de la zero până la  $E_{1 \max} = A_1 + B_1$ , ce reprezintă toate valorile de energii în prima zonă permisă. Între liniile  $AA'$  și  $BB'$  este banda interzisă. Menționăm că liniile roșii, care descriu spectrul energetic al electronilor în benzile permise, formează o parabolă.



**Fig. 1.7.** Spectrul energetic al electronilor la formarea corpului solid.

III. Intervalul care corespunde schimbării continue a  $E_n(k)$  în prima banda de energii permise formează așa-numită prima zonă a lui Brillouin. Zona lui Brillouin reprezintă cel mai mic element al spațiului energetic, care păstrează proprietățile cristalului complet. Celei de-a doua benzi de energii permise îi corespunde intervalul de energii cuprins între liniile  $BB'$  și  $CC'$ . La schimbarea lui  $k$  de la  $-\pi/a$  până la  $-\pi/a$  și de la  $\pi/a$  până la  $2\pi/a$  avem zona a doua a lui Brillouin (în Fig. 1.7 zonele Brillouin sunt reprezentate prin linii continue). Prin analogie,

pentru  $n=3$ : în intervalul  $DD' - FF'$  avem a treia zonă a lui Brillouin. Punctul în care  $k = 0$  se numește *centrul zonei Brillouin*.

În așa fel, pentru cazul unidimensional zonele Brillouin sunt reprezentate cu linii continue, căroră, pe axa vectorului de undă  $k$ , le corespund segmentele de energie  $E_n$  cvasicontinuă. În spațiul tridimensional, determinarea zonelor Brillouin este mai complicată, chiar dacă pentru rețeaua cristalină cubică prima zonă a lui Brillouin în spațiu reprezintă un cub, cu muchia egală cu  $2\pi/a$ .

*Spectrul energetic al electronilor în atomul izolat ( $P \rightarrow \infty$ ) reprezintă nivelurile energetice discrete cu energia constantă. La formarea corpului solid energia electronului se schimbă prin adăugarea unui termen, care reprezintă o funcție periodică în dependența de  $k$ . Ca rezultat, spectrul energetic reprezintă un șir de zone permise separate de zone interzise. Lățimea zonelor depinde de numărul zonei și de valoarea lui  $P$ . Spectrul energetic al electronilor liberi ( $P \rightarrow 0$ ) devine continuu.*

### **1.6. Masa efectivă a purtătorilor de sarcină în cristal**

În cristal electronul se deplasează în câmpul potențial periodic al rețelei cristaline și acest câmp influențează asupra mișcării electronului. Deci, mișcarea electronului în cristal va fi deosebită de mișcarea electronului în vid.

Vom cerceta mai întâi mișcarea electronului liber în vid. Conform Louis de Brogles, dacă electronul se mișcă ca o undă, energia cinetică a unui electron liber este egală cu

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.64)$$

Să derivăm ecuația (1.64) în raport cu vectorul de undă

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m}, \quad (1.65)$$

de unde

$$k = \frac{m}{\hbar^2} \frac{dE}{dk}. \quad (1.66)$$

Pe de altă parte, energia cinetică a unui electron liber, care se mișcă cu viteza  $v$ , este egală cu

$$E = \frac{mv^2}{2}. \quad (1.67)$$

Egalând ecuațiile (1.64) și (1.67) putem găsi viteza electronului

$$v = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{m^2}} = \frac{\hbar k}{m} \quad (1.68)$$

Înlocuind  $k$  din (1.68) cu valoarea lui din (1.66) obținem expresia pentru dependența vitezei de energie

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (1.69)$$

În cristal câmpul periodic al rețelei este rezultatul acțiunii a mai multor forțe al căror rezultată o notăm cu  $F$ . Traectoria reală a electronului în cristal nu poate fi găsită, deoarece nu este posibil de a rezolva problema acțiunii simultane a mai multor forțe asupra electronului. În acest caz se introduce noțiunea de viteză medie și accelerație medie  $w$ , care este egală cu

$$w = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\left(\frac{dE}{dk}\right)}{dt}. \quad (1.70)$$

Vectorul de undă  $k$  depinde de timp, de aceea ecuația (1.70) poate fi scrisă astfel:

$$w = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}. \quad (1.71)$$

În conformitate cu legea conservării energiei, variația energiei electronului  $dE$  în intervalul de timp  $dt$  este egală cu lucrul efectuat de forța  $F$  pe distanța  $dS$ .

$$dE = F \cdot dS = F \cdot v \cdot dt = F \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt, \quad (1.72)$$

de unde

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} F. \quad (1.73)$$

Făcând înlocuirile respective, ecuația (1.71) pentru accelerația  $w$  poate fi scrisă astfel:

$$w = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F. \quad (1.74)$$

Din comparația (1.74) cu legea a doua a lui Newton

$$w = \frac{F}{m},$$

conchidem că coeficientul  $\left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}\right)^{-1}$  are unitatea de măsură a masei.

În spațiul tridimensional ecuația (1.74) va avea următoarea formă:

$$\begin{aligned} w_x &= \frac{1}{\hbar^2} \left[ \frac{d^2 E}{dk_x^2} F_x + \frac{d^2 E}{dk_x dk_y} F_y + \frac{d^2 E}{dk_x dk_z} F_z \right] \\ w_y &= \frac{1}{\hbar^2} \left[ \frac{d^2 E}{dk_y dk_x} F_x + \frac{d^2 E}{dk_y^2} F_y + \frac{d^2 E}{dk_y dk_z} F_z \right] \\ w_z &= \frac{1}{\hbar^2} \left[ \frac{d^2 E}{dk_z dk_x} F_x + \frac{d^2 E}{dk_z dk_y} F_y + \frac{d^2 E}{dk_z^2} F_z \right]. \end{aligned} \quad (1.75)$$

Din (1.75) rezultă că proiecțiile accelerației  $w_x$ ,  $w_y$  și  $w_z$  nu coincid după direcție cu proiecțiile respective de forță  $F_x$ ,  $F_y$  și  $F_z$ . Ținând cont de legea a doua a lui Newton, sistemul de ecuații (1.75) poate fi exprimat cu ajutorul tenzorului invers de gradul doi al masei, care se numește *masa efectivă*  $m_{i,j}^*$ , adică

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk_i dk_j}, \quad (1.76)$$

unde  $i, j = x, y, z$ .

Masa efectivă a electronului poate fi exprimată și cu ajutorul matricei



$$\frac{1}{m^*} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_{xx}} & \frac{1}{m_{zy}} & \frac{1}{m_{xz}} \\ \frac{1}{m_{yx}} & \frac{1}{m_{yy}} & \frac{1}{m_{yz}} \\ \frac{1}{m_{zx}} & \frac{1}{m_{zy}} & \frac{1}{m_{zz}} \end{pmatrix}. \quad (1.77)$$

Prin *introducerea masei efective* a electronului se ia în considerare acțiunea câmpului potențial periodic al rețelei cristaline. Deci, electronul se deplasează prin cristal după cum s-ar fi deplasat un electron liber sub acțiunea aceleiași forțe, dar cu masa dată de formula (1.76). Masa efectivă are următoarele proprietăți:

a) Masa efectivă nu este o mărime ce caracterizează măsura de inerție a electronului și nu este legată de forțele gravitaționale. Deoarece  $E$  depinde de  $k$ , rezultă că masa efectivă este o mărime variabilă. Cu alte cuvinte,  $m^*$  depinde de natura materialului, deoarece fiecare material are un câmp periodic  $E(k)$  specific lui.

b) Masa efectivă este o mărime anizotropă, adică are valori diferite în diferite direcții ale spațiului vectorului de undă. Alegând corespunzător axele de coordonate, matricea (1.77) poate fi adusă la forma diagonală, în care numai termenii diagonali sunt diferiți de zero, adică

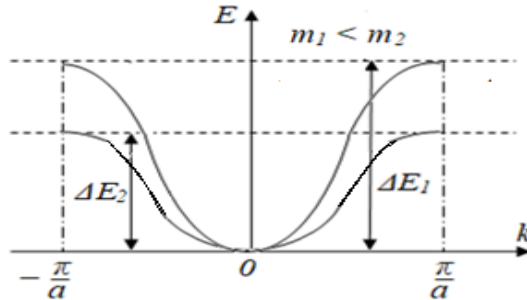
$$\frac{1}{m_1} = \frac{1}{m_{xx}}; \quad \frac{1}{m_2} = \frac{1}{m_{yy}}; \quad \frac{1}{m_3} = \frac{1}{m_{zz}}. \quad (1.78)$$

Valorile  $m_1$ ,  $m_2$ ,  $m_3$  sunt componentele principale ale masei efective.

c) Tensorul masei efective (formula (1.76)) determină gradul de schimbare a curburii suprafeței izoenergetice în punctul dat. În multe materiale suprafața izoenergetică are o formă complexă. Din această cauză componentele de bază ale masei efective se schimbă mult de la un punct la altul. În cel mai simplu caz, când suprafața izoenergetică are forma de sferă (pentru cristale de simetrie cubică), toate componentele diagonale ale tensorului masei efective sunt egale între ele, iar celelalte

componente sunt egale cu zero. În acest caz tensorul masei efective este o mărime scalară și  $m_1 = m_2 = m_3 = m^*$ .

d) Forma benzii de energie  $E(k)$  determină mărimea masei efective. Fie că avem două zone cu dependențe diferite  $E(k)$ , astfel încât zona 1 este mai „lată” decât zona 2, deci  $\Delta E_1 > \Delta E_2$  (Fig. 1.8). Aceasta înseamnă că raza de curbură a zonei 1 este mai mică decât raza de curbură a zonei 2. Prin urmare, mărimea  $\frac{d^2 E}{dk^2}$  pentru zona 1 este mai mare decât pentru zona 2 și, conform (1.76), masa efectivă a electronului în banda 1 este mai mică decât în banda 2. Rezultă că în banda de energie mai lată masă efectivă este mai mică.

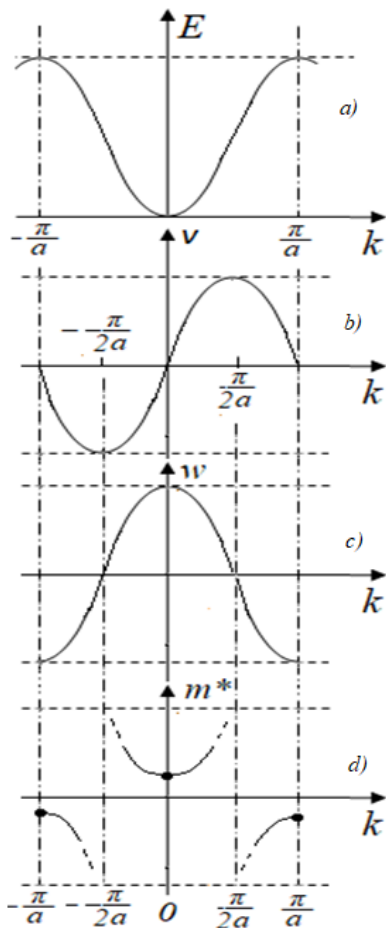


**Fig. 1.8.** Două benzi permise:  
 $\Delta E_1 > \Delta E_2$  și, respectiv,  $m_1 < m_2$ .

e) Să analizăm modul de variație a vitezei, a accelerației și a masei efective în limitele primei zone, deci când  $k$  variază între  $\pi/a$  și  $-\pi/a$ . Conform modelului Krönig – Penney, dependența energiei electronului de vectorul de undă  $k$  are următoarea formă:

$$E_n(k) = A_n + (-1)^n B_n \cos ka \quad (1.79)$$

Graficul  $E(k)$  pentru  $n = 1$  este prezentat în Figura 1.9 a.



**Fig. 1.9.** Variația energiei (a), vitezei (b), accelerației (c) și masei efective (d) în prima zonă a lui Brillouin.

Să analizăm schimbarea vitezei. Conform (1.69) și (1.79), obținem:

$$v = \frac{1}{\hbar} [ -(-1)^n B_n a \sin ka ]. \quad (1.80)$$

Din graficul  $v(k)$  (Fig. 1.9 b) rezultă: când  $k = 0$ , deci la marginea inferioară a zonei,  $\sin ka = 0$  și  $v = 0$ . Viteza va fi egală cu zero și când  $k = \pm \pi/a$ , adică la marginea superioară a zonei. La mijlocul zonei, când  $k = \pi/2a$ , viteza este maximală (Fig. 1.9 b).

Pentru accelerația  $w$  conform (1.74) obținem:

$$w = \frac{F}{\hbar^2} [ -(-1)^n B_n a^2 \cos ka ]. \quad (1.81)$$

Când  $k = 0$ ,  $\cos ka = 1$  și accelerația are mărimea maximală (Fig. 1.9 c). Când  $k = \pi/2a$ ,  $\cos ka = 0$  și accelerația  $w$  este egală cu zero. La creșterea de mai departe a lui  $k$  accelerația își schimbă semnul și devine negativă când  $k = \pm \pi/a$ . Deci, în jumătatea de jos a zonei accelerația  $w$  a electronilor este pozitivă, iar în jumătatea de sus a zonei – negativă.

Din (1.81) și (1.76) se vede că semnul accelerației determină semnul masei efective (Fig. 1.9 d). În intervalul vectorului de undă  $-\pi/2a < k < +\pi/2a$  (partea de jos a zonei energetice) masa efectivă este pozitivă, însă în partea de sus a zonei, ce corespunde intervalelor  $-\pi/a < k < -\pi/2a$  și  $\pi/2a < k < \pi/a$ , masa efectivă

devine negativă, ceea ce nu are sens. Pentru a depăși paradoxul acesta se consideră că partea de sus a zonei este populată nu de particule negative – electroni, ci de particule cu sarcină pozitivă numite *goluri*. Noțiunea de goluri a fost introdusă în anul 1925 de către Jacob Frenkel.

Dependența  $v = m^*(k)$  în punctul  $k = \pi/2a$  are o discontinuitate (Fig.1.9 d), deoarece pentru electroni masa efectivă în punctul  $k = \pi/2a$  tinde spre  $+\infty$ , iar pentru goluri – spre  $-\infty$ . De aici rezultă că toate expresiile obținute anterior sunt valabile numai pentru purtătorii de sarcină, care se află în apropierea marginilor benzii de energie.

*La introducerea noțiunii masei efective se ia în considerare forma câmpului potențial al rețelei cristaline și mărimea masei efective este determinată de forma dependenței  $E(k)$ .*

*Dacă purtătorii de sarcină se află în jumătatea de jos a benzii energetice, în acest caz vorbim despre mișcarea electronilor cu o mărime a masei efective  $m_n$ . Dacă banda energetică este populată de purtători de sarcină mai mult de jumătate, vorbim despre mișcarea golurilor cu o altă masă efectivă  $m_p$ .*

## Capitolul II. STATISTICA ELECTRONILOR ȘI A GOLURILOR ÎN SEMICONDUCTORI

### 2.1. Funcția de distribuție Fermi-Dirac

Teoria clasică a conductibilității electrice se bazează pe faptul că comportamentul electronilor liberi se supune acelorași legi ca și comportamentul particulelor gazului ideal. Din această cauză starea electronilor trebuie să fie determinată de legile statisticii lui Maxwell-Boltzmann ( $M-B$ ), ca și în cazul gazului ideal. Cu alte cuvinte, funcția de distribuție a electronilor sau a golurilor, în dependență de energie, determină probabilitatea că electronul posedă energia  $E$ . Forma acestei funcții este următoarea:

$$f_{M-B}(E) = \exp\left(-\frac{E}{k_0T}\right). \quad (2.1)$$

Însă, statistica  $M-B$  nu ia în considerare particularitățile cuantice ale gazului electronic, improprii gazului ideal, precum:

- un număr finit de stări energetice permise, care pot fi populate de electroni;

- aplicarea principiului Pauli;
- neidentificarea particulelor (electronilor).

a) În corpul solid mișcarea electronilor se supune legilor mișcării ondulatorii și este descrisă de ecuația Schrödinger. Drept consecință, energia electronului devine cuantificată, adică poate avea valori strict determinate. Conform *principiului incertitudinii* al lui Heisenberg, două stări pot fi deosebite numai atunci când fiecărei stări îi corespunde un anumit volum  $d\tau$  de *spațiu fazic hexadimensional*, care este mai mare sau egal cu  $h^3$ , deci

$$d\tau = dx \cdot dy \cdot dz \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z \geq h^3. \quad (2.2)$$

Din relația (2.2) rezultă că diferitor elemente de spațiu fazic  $d\tau$  îi corespund stări cuantice diferite numai atunci când volumul acestor

elemente nu este mai mic decât  $h^3$ . În *statistica cuantică* elementul de volum  $d\tau = h^3$  reprezintă cel mai mic volum ce poate fi ocupat de electron, iar mărimea  $h^3$  este nu altceva decât celula elementară în spațiul fazic. Dacă vom presupune că energia potențială a electronilor în orice punct al corpului solid este o mărime constantă și distribuția electronilor în volumul  $dV$  este omogenă, se poate trece de la spațiul fazic 6-dimensional la un spațiu 3-dimensional al impulsurilor. În acest caz spațiul impulsurilor poate fi divizat în celule elementare cu volumul

$$d\tau_p = \frac{h^3}{dV}. \quad (2.3)$$

Deci, prima deosebire dintre statistica cuantică și cea clasică constă în metoda de divizare a spațiului fazic în celule elementare. Se consideră că au sens fizic numai acele celule elementare al căror volum nu este mai mic decât  $h^3$  în spațiul 6-dimensional și decât  $\frac{h^3}{dV}$  în spațiul 3-dimensional. De aici rezultă că numărul de stări energetice în corpul solid este o mărime finită.

În *statistica clasică* dimensiunile celulelor elementare nu se limitează, presupunându-se că ele pot fi infinit de mici.

b) Gazul electronic în *statistica cuantică* se supune principiului Pauli, conform căruia starea de energie dată poate fi ocupată de maxim doi electroni cu spinii orientați în sens invers. Pentru *gazul clasic* nu există niciun fel de restricții și în orice stare se poate afla un număr nelimitat de particule. Mai mult chiar, este posibil cazul când toate particulele se vor „aduna” într-un singur punct al spațiului.

c) *Statistica cuantică* nu individualizează particulele, deci la schimbarea particulelor cu locul starea sistemului electronic nu se schimbă. În *statistica clasică* lucrurile stau altfel. Considerăm că avem două particule: una în stare  $A$ , iar cealaltă în stare  $B$  și acestea determină complet starea sistemului dat. La schimbarea particulelor cu locul starea sistemului se schimbă, deci sistemul trece în altă stare.

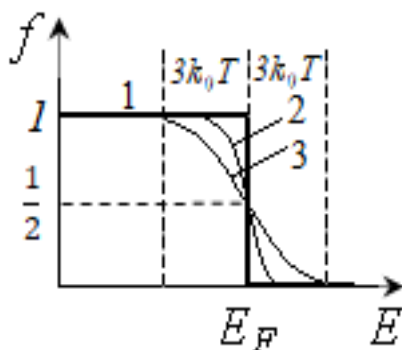
Din cele expuse rezultă că distribuția gazului electronic se deosebește de distribuția  $M-B$ . De aceea, pentru gazul electronic se

folosește statistica cuantică Fermi–Dirac ( $F-D$ ) și funcția de distribuție are următoarea formă:

$$f_{F-D}(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_0 T}}}, \quad (2.4)$$

unde:  $E$  este energia ce corespunde stării ocupate de electron,  
 $E_F$  – energia Fermi sau nivelul potențialului chimic,  
 $k_0$  – constanta Boltzmann,  
 $T$  – temperatura.

Funcția  $f(E)$  arată probabilitatea că starea energetică cu energia  $E$  este ocupată de electron. Dacă  $f(E) = 1$ , nivelul energetic cu energia  $E$  este ocupat complet, pentru  $f(E) = 0$  nivelul energetic este liber, iar dacă  $f(E) = \frac{1}{2}$ , nivelul de energie este ocupat pe jumătate, ceea ce are loc dacă  $E = E_F$ . Energia pentru care probabilitatea de ocupare a unei stări energetice este egală cu  $\frac{1}{2}$  se numește *energia Fermi*  $E_F$ . Prin



**Fig. 2.1.** Dependența funcției de distribuție  $F-D$  de temperatură.

$OK$  (linia 1), valoarea funcției  $f(E)$  depinde numai de relația dintre  $E$  și  $E_F$ . Pentru  $E < E_F$ , funcția  $f(E) = 1$ , dacă  $E > E_F$  –  $f(E) = 0$ , iar în punctul  $E = E_F$  funcția  $f(E) = \frac{1}{2}$ .

urmare, nivelul Fermi este acea energie ce trebuie comunicată sistemului pentru a mări numărul electronilor liberi cu o unitate.

Să analizăm cum variază funcția  $f(E)$  pentru diferite temperaturi. Pe axa  $OX$  a unui sistem de coordonate depunem energia  $E$ , iar pe axa  $OY$  – funcția  $f(E)$  (Fig. 2.1). Când temperatura  $T$  este foarte mică și tinde spre

În cazul în care temperatura este diferită de zero, forma funcției  $f(E)$  depinde atât de diferența dintre  $E$  și  $E_F$ , cât și de temperatură. Cu cât temperatura este mai mare ( $T_2 > T_1$ , Fig. 2.1, liniile 3 și 2, respectiv), cu atât mai mult diferă  $f(E)$  de linia 1 (pentru  $T \rightarrow 0$ ). Calculele arată că dacă diferența dintre  $E$  și  $E_F$  este mai mare decât  $\pm(2-3)k_0T$ , funcția  $f(E)$  pentru orice temperatură practic coincide cu  $f(E)$  pentru cazul când  $T \rightarrow 0$ . Într-adevăr, când diferența  $E - E_F = 3k_0T$ , funcția  $f(E) = 0,047$ , iar pentru  $E - E_F = -3k_0T$  funcția  $f(E) = 0,953$ . În intervalul de energii  $E - E_F < \pm 3k_0T$  funcția  $f(E)$  se modifică lent, intersectând linia 1 în punctul în care  $f(E) = 1/2$  (Fig. 2.1).

Deoarece golul nu este altceva decât locul care a fost părăsit de electron, probabilitatea că nivelul cu energia  $E$  va fi ocupat de un gol este:

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) = 1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_0T}}} = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_F - E}{k_0T}}}, \quad (2.5)$$

unde  $f_n(E)$  este funcția de distribuție pentru electroni,  $f_p(E)$  este funcția de distribuție pentru goluri, care indică probabilitatea că nivelul cu energia  $E$  este ocupat de goluri sau că acest nivel este lipsit de electroni. Trebuie de remarcat că statistica clasică  $M-B$  este un caz particular al statisticii cuantice  $F-D$ . Dacă energia electronilor este cu mult mai mare decât energia nivelului Fermi, adică  $E \gg E_F$ , formula (2.4) se transformă în funcția de distribuție  $M-B$  pentru statistica clasică

$$f_{M-B}(E) = \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_0T}\right). \quad (2.6)$$

Gazul electronic, care este descris de statistica  $M-B$ , se numește *gaz electronic nedegenerat*, iar cel care poate fi descris de statistica  $F-D$  se numește *gaz electronic degenerat*.

Din cele relatate mai sus putem face următoarea concluzie:

*La temperatura  $T=0K$  există o graniță strictă între nivelurile energetice ocupate și cele libere. Toate nivelurile aflate sub nivelul Fermi sunt ocupate, iar nivelurile aflate mai sus de nivelul Fermi sunt libere.*



La temperaturi diferite de  $0K$  numai la distanța de cel puțin câțiva  $k_0T$  de nivelul Fermi probabilitatea de ocupare a nivelurilor energetice este diferită de unitate sau zero. Aceasta ne arată că o parte din electroni de sub nivelul Fermi au primit o energie adăugătoare din exterior și au migrat pe nivelurile care se află deasupra nivelului Fermi.

## 2.2. Densitatea de stări energetice

Problema principală a statisticii constă în determinarea numărului de electroni, energia cărora se află într-un interval energetic stabilit. Pentru a rezolva această problemă trebuie să cunoaștem numărul de stări cuantice în acest interval energetic și probabilitatea de ocupare a acestor stări de către electroni.

Să presupunem că într-un cristal în intervalul de energii de la  $E$  până la  $E+dE$  sunt  $dz$  stări de energie. Conform principiului incertitudinii al lui Heisenberg (formula (2.2)), cel mai mic volum, care revine la o stare în spațiul fazic hexadimensional, nu poate fi mai mic decât  $h^3$ . Luând în considerare (2.3), într-o unitate de volum  $dV = dx \cdot dy \cdot dz$  numărul de stări este

$$dz = \frac{d\tau}{dV \cdot h^3} = \frac{dp_x dp_y dp_z}{h^3}. \quad (2.7)$$

Pentru a simplifica rezolvarea problemei vom folosi sistemul polar de coordonate în spațiul impulsurilor și vom determina numărul de stări din stratul sferic limitat de razele  $p$  și  $p+dp$  (Fig. 2.2).

În acest caz volumul stratului sferic al cristalului este

$$dp_x dp_y dp_z = 4\pi p^2 dp. \quad (2.8)$$

Impulsului  $p$  îi corespunde energia  $E$ , care poate fi reprezentată ca

$$E = E_c + \frac{p^2}{2m_n}, \quad (2.9)$$

unde  $m_n$  este masa efectivă a electronului,  $E_c$  – energia

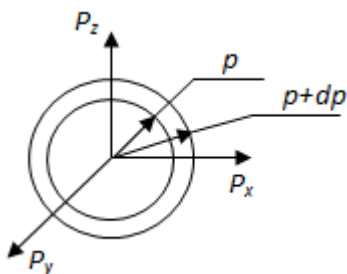


Fig. 2.2. Variația impulsului în sistemul polar.

electronului la marginea de jos a benzii de conducție. De obicei, energia electronilor liberi se socrate de la marginea de jos a benzii de conducție (sau marginea de sus a benzii de valență  $E_v$  în cazul golurilor) și pentru simplificarea calculului se consideră  $E_c = 0$ . Atunci, conform (2.9), impulsul electronului este

$$p^2 = 2m_n E, \quad (2.10)$$

iar

$$dp = m_n (2m_n)^{-\frac{1}{2}} E^{-\frac{1}{2}} dE. \quad (2.11)$$

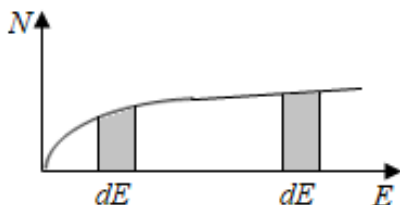
Luând în considerare (2.8), înlocuim (2.10) și (2.11) în (2.7) și obținem numărul de stări cuantice într-o unitate de volum a cristalului în intervalul de energii  $dE$

$$dz = \frac{2\pi}{h^3} (2m_n)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE. \quad (2.12)$$

Densitatea stărilor energetice se determină ca numărul de stări în intervalul de energii  $dE$  pentru o unitate de volum

$$N(E) = \frac{dz}{dE} = \frac{2\pi}{h^3} (2m_n)^{\frac{3}{2}} E^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.13)$$

Observăm că densitatea stărilor energetice este o funcție semi-pătrată de energie. Odată cu creșterea energiei, crește și densitatea stărilor energetice, graficul funcției  $N(E)$  este reprezentat în Figura 2.3.



**Fig. 2.3.** Numărul de stări în dependență de energie.

Dacă vom delimita pe axa  $E$  un interval de energie  $dE$ , atunci aria hașurată este nu altceva decât produsul  $N(E) \cdot dE$ , adică numărul

stărilor energetice. Pentru unul și același interval  $dE$  delimitat la energii diferite (Fig. 2.3) observăm că pentru energii mai mari aria hașurată este mai mare, deci și numărul stărilor energetice va fi mai mare.

*Cu creșterea energiei electronilor densitatea de stări crește, deci numărul stărilor energetice ale electronilor în același interval de energii este cu atât mai mare, cu cât mai mare este energia  $E$ . În benzile permise exterioare nivelurile energetice se află mai aproape și densitatea lor este mai mare.*

### 2.3. Criteriul de degenerare

Cum a fost menționat mai sus (paragraful 2.1), gazul electronic degenerat, care se supune statisticii cuantice  $F-D$ , devine nedegenerat și se supune statisticii clasice a lui  $M-B$ , dacă energia electronilor  $E \gg E_F$ . Se îndeplinește condiția

$$\exp\left(-\frac{E-E_F}{k_0T}\right) \gg 1. \quad (2.14)$$

Ceea ce duce la transformarea ecuației (2.4) pentru gazul electronic degenerat în (2.6) pentru gazul electronic nedegenerat. Aceasta permite stabilirea criteriului de degenerare a gazului electronic, care trebuie să reprezinte inegalitatea inversă:

$$\exp\left(\frac{E-E_F}{k_0T}\right) \ll 1, \quad (2.15)$$

sau

$$\frac{\exp\left(\frac{E}{k_0T}\right)}{\exp\left(\frac{E_F}{k_0T}\right)} \ll 1. \quad (2.16)$$

În expresia (2.16) numărătorul nu poate fi mai mic decât o unitate, deoarece energia electronilor liberi  $E$  din banda de conducție întotdeauna este pozitivă, fiindcă  $E \geq E_c$  și  $E_c = 0$ . Prin urmare, inegalitatea (2.16) poate avea loc numai dacă se îndeplinește condiția

$$\exp\left(\frac{E_F}{k_0T}\right) \gg 1. \quad (2.17)$$

Expresia (2.17) reprezintă criteriul de degenerare a gazului electronic, indicând că în cazul gazului electronic degenerat energia nivelului Fermi  $E_F$  este pozitivă, deci nivelul Fermi se află în benzile permise: banda de conducție pentru electroni sau banda de valență pentru goluri.

#### 2.4. Concentrația gazului electronic

Concentrația electronilor sau, altfel spus, numărul de electroni într-o unitate de volum, poate fi obținută reieșind din cunoașterea numărului de stări electronice  $dz$  în intervalul de energie  $dE$ , probabilității de ocupare a acestor stări determinată de funcția de distribuție  $f(E)$  și a principiului lui Pauli. Atunci concentrația electronilor este

$$dn(E) = 2f(E) dz. \quad (2.18)$$

Substituind (2.4) și (2.12) în (2.18), obținem:

$$dn(E) = 2 \frac{2\pi(2m_n)^2}{h^3} E^{\frac{3}{2}} f(E) dE. \quad (2.19)$$

Luând în considerare că în benzile permise energia electronilor se schimbă continuu, integrarea se efectuează pentru toate valorile de energie în banda de conducție, de la marginea de jos  $E_c=0$  până la infinit. Obținem:

$$n(E) = \int_0^{\infty} 2 \frac{2\pi(2m_n)^2}{h^3} E^{\frac{3}{2}} f(E) dE. \quad (2.20)$$

a) La temperatura  $0K$  concentrația  $n_0$  poate fi determinată destul de simplu. Integralul din (2.20) poate fi împărțit în două integrale cu limitele: de la  $0$  până la  $E_F$  și de la  $E_F$  până la infinit:

$$\begin{aligned}
n_0 &= 2 \frac{2\pi(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_{E_C}^{\infty} E^{\frac{1}{2}} f(E) dE = \\
&= 2 \frac{2\pi(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \left( \int_0^{E_F} E^{\frac{1}{2}} f(E) dE + \int_{E_F}^{\infty} E^{\frac{1}{2}} f(E) dE \right). \quad (2.21)
\end{aligned}$$

La temperatura  $0K$  (Fig. 2.1) funcția de distribuție  $F-D$  în prima integrală este  $f(E) = 1$ , iar în a doua  $f(E) = 0$ . În rezultat obținem:

$$n_0 = 2 \frac{2\pi(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_0^{E_F} E^{1/2} dE = 2 \frac{2\pi(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{2E_F^{3/2}}{3}$$

sau

$$n_0 = \frac{8\pi(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{3h^3} E_{F0}^{\frac{3}{2}}. \quad (2.22)$$

Din (2.22) obținem energia nivelului Fermi la  $0K$

$$E_{F0} = \left( \frac{3h^3 n_0}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{m_n}. \quad (2.23)$$

Prin urmare, purtătorii de sarcină care se supun statisticii cuantice  $F-D$  la temperatura  $0K$  pot avea energia în intervalul  $0 \dots E_{F0}$ , deoarece nivelul Fermi este ultimul nivel ocupat de electroni. Aceasta este una dintre deosebirile gazului electronic cuantic față de cel ideal clasic. Particulele, care se supun statisticii clasice, odată cu micșorarea temperaturii până la  $0K$ , își micșorează viteza până la zero, deci energia lor devine nulă și particulele pot să se strângă într-un punct, probabilitatea de ocupare a căruia este infinit de mare.

b) Vom calcula concentrația electronilor pentru gazul electronic nedegenerat. În acest caz, în formula pentru concentrație (2.20) folosim funcția de distribuție  $M-B$

$$n = \int_0^{\infty} 2 \frac{2\pi}{h^3} (2m_n)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E-E_F}{k_0T}\right) dE. \quad (2.24)$$

Vom înmulți și vom împărți partea dreaptă a ecuației (2.24) cu

$(k_0T)^{3/2}$ . Notăm prin  $x$  valoarea  $x = \frac{E}{k_0T}$  și, luând în considerare că

integralul  $\int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ , obținem:

$$n = \frac{4\pi(2m_n k_0T)^{3/2}}{h^3} \exp \frac{E_F}{k_0T} \int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{k_0T}} \left( \frac{E}{k_0T} \right)^{\frac{1}{2}} d \left( \frac{E}{k_0T} \right) =$$

$$= \frac{4\pi(2m_n k_0T)^{3/2}}{h^3} e^{\frac{E_F}{k_0T}} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}} dx = \frac{4\pi(2m_n k_0T)^{3/2}}{h^3} \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\frac{E_F}{k_0T}}. \quad (2.25)$$

Factorul din fața exponentului îl notăm prin

$$N_C = \frac{2(2\pi m_n k_0T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}, \quad (2.26)$$

care se numește *densitatea efectivă de stări energetice în banda de conducție*.

Obținem expresia generală pentru concentrația electronilor în cazul gazului electronic nedegenerat:

$$n = \frac{2(2\pi m_n k_0T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{\frac{E_F}{k_0T}} = N_C e^{\frac{E_F}{k_0T}}. \quad (2.27)$$

Menționăm că nivelul Fermi, care se află în banda interzisă, este negativ. Obținând concentrația din (2.27) se poate determina exponentul

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \frac{nh^3}{2(2\pi m_n k_0T)^{3/2}}, \quad (2.28)$$

care permite a analiza starea gazului electronic (nedegenerat sau degenerat).

Conform (2.17), gazul electronic este degenerat dacă  $\exp\left(\frac{E_F}{k_0T}\right) \gg 1$ . Analizând expresia (2.28) vedem că *gradul de*

degenerare a gazului electronic este cu atât mai mare cu cât este mai mare concentrația electronilor și cu cât este mai mică temperatura.

Se poate determina „concentrația critică”  $n_{crit}$  a purtătorilor de sarcină pentru care are loc trecerea de la gazul electronic nedegenerat la cel degenerat. Aceasta are loc atunci când se îndeplinește condiția

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = 1. \quad (2.29)$$

Vom evalua valoarea  $n_{crit}$  la temperatura 300 K, iar ca masă efectivă vom folosi masa electronului liber:

$$n_{crit} = \frac{2(2\pi m_n k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} = \frac{2(2 \cdot 3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 3 \cdot 10^2)^{\frac{3}{2}}}{(6,62 \cdot 10^{-34})^3} \approx$$

$$\approx 2 \cdot 10^{25} m^{-3} = 2 \cdot 10^{19} cm^{-3}. \quad (2.30)$$

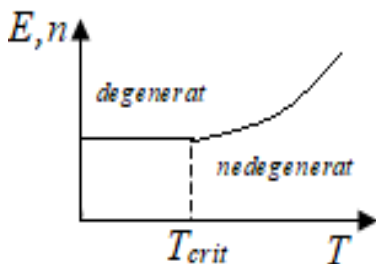
Prin urmare, dacă concentrația purtătorilor de sarcină este mai mare decât  $10^{19} cm^{-3}$ , gazul electronic este degenerat, iar dacă-i mai mică – nedegenerat.

În *semiconductori* concentrația purtătorilor de sarcină se află în intervalul  $10^{12} \div 10^{19} cm^{-3}$ , deci gazul electronic în majoritatea cazurilor este nedegenerat.

În *metale* concentrația electronilor constituie  $10^{22} cm^{-3}$  și gazul electronic este degenerat. Dacă fixăm concentrația electronilor la nivelul  $10^{22} cm^{-3}$ , din formula (2.30) se poate determina temperatura critică pentru care gazul electronic în metale devine nedegenerat,  $T_{crit} = 50000 K$ , și conchidem că gazul electronic în metale este întotdeauna degenerat.

Să analizăm mai detaliat starea nedegenerată și degenerată a gazului electronic. În banda de conducție a semiconductorilor numărul electronilor liberi este mic și energia lor se deosebește puțin de energia nivelului  $E_c=0$ , deoarece aceștia se găsesc în imediata apropiere a marginii de jos a benzii de conducție. Să presupunem că temperatura semiconductorului crește și, respectiv, energia electronilor crește.

Electronii pot trece din banda de valență în banda de conducție, concentrația electronilor liberi crește și aceștia ocupă poziții de mai de sus ale benzii de conducție. Rezultă că *energia gazului electronic nedegenerat crește odată cu creșterea temperaturii*.



**Fig. 2.4.** Deosebirea dintre stările degenerată și nedegenerată.

de mare (2 ... 4 eV). Electronii care se află pe nivelurile din mijlocul benzii ocupate nu-și pot schimba energia odată cu creșterea temperaturii, fiindcă toate nivelurile vecine sunt ocupate. Electronii de pe nivelurile superioare au posibilitatea să se ridice mai sus, dar energia lor termică crește foarte puțin față de energia nivelului Fermi (doar cu 0,026 eV la 300 K și doar cu  $\approx 0,1$  eV la  $T=1000$  K). Din această cauză variația energiei în rezultatul creșterii temperaturii este foarte mică față de energia medie a electronilor. Aceasta este insuficient pentru a schimba energia totală a gazului electronic sau concentrația electronilor (Fig. 2.4).

*Starea gazului electronic depinde de temperatură, concentrația și masa efectivă a electronilor. Gazul electronic în metale este degenerat și energia acestuia nu depinde de temperatură.*

## 2.5. Semiconductorul intrinsec

Pentru început vom introduce unele noțiuni terminologice generale ce stau la baza fizicii corpului solid. După cum s-a menționat mai sus, la creșterea temperaturii energia electronului se mărește și el poate trece din banda de valență a semiconductorului în banda de



conducție, lăsând în locul lui un gol. Acest proces se numește *generare termică*. Purtătorii liberi de sarcină, care iau naștere în rezultatul generării termice și care se găsesc în echilibru termic cu rețeaua cristalină, se numesc *purtători de echilibru*. Concomitent cu procesul de generare a electronilor are loc și procesul de *recombinare*, care constă în revenirea electronilor în banda de valență. Dacă procesele de recombinare și cele de generare au loc cu aceeași viteză, se zice că semiconductorul se află în *echilibru termic*.

Dacă electronii și golurile nu sunt generați de procese termice, dar în urma altor factori externi, cum ar fi iluminarea, iradierea cu radiație de energie mare, influența câmpului electric etc., atunci acești purtători poartă denumirea de *purtători neechilibrați*.

Semiconductorii care nu au în banda interzisă niciun fel de niveluri energetice se numesc *semiconductori intrinseci*. În acest tip de semiconductori electronii apar în banda de conducție numai în urma tranzițiilor din banda de valență.

Vom analiza acest tip de semiconductori. Astfel, prin  $n$  vom nota concentrația electronilor în banda de conducție, iar prin  $p$  – concentrația golurilor în banda de valență. Condiția de electroneutralitate pentru semiconductorul intrinsec are următoarea formă:

$$n = p. \quad (2.31)$$

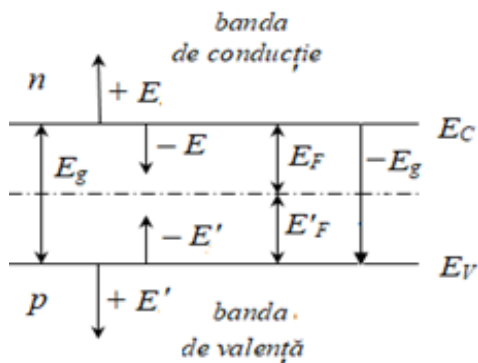


Fig. 2.5. Calculul energiei purtătorilor de sarcină în semiconductori.

Schema energetică a unui semiconductor este reprezentată în Figura 2.5. Banda de conducție este separată de banda de valență de o banda interzisă de lățime  $E_g$ . Prin convenție vom considera că electronii de la marginea inferioară a benzii de conducție  $E_C$  au energia cinetică egală cu zero și energia lor se calculează „în sus” (este pozitivă  $+E$ ) de la nivelul  $E_C$ . Analogic, vom considera că energia golurilor este egală cu zero la marginea de sus a benzii de valență  $E_V=0$  și energia lor se consideră pozitivă „în jos” de la nivelul  $E_V$ . Energia calculată de la marginile  $E_C$  și  $E_V$  în interiorul benzii interzise este negativă (de exemplu,  $-E_g$  considerată de la  $E_C$  în jos). Nivelul Fermi se află în banda interzisă la distanțele  $E_F$  și  $E'_F$  de la  $E_C$  și  $E_V$ , respectiv.

Vom determina concentrația electronilor și a golurilor într-un semiconductor nedegenerat. Concentrația electronilor în banda de conducție a semiconductorului nedegenerat este deja cunoscută (a se vedea formula (2.27)) și este egală cu

$$n = \frac{2(2\pi m_n k_0 T)^{3/2}}{h^3} e^{\frac{E_F - E_C}{k_0 T}} = N_C e^{\frac{E_F - E_C}{k_0 T}} . \quad (2.32)$$

Să determinăm concentrația golurilor în banda de valență. Pentru goluri funcția de distribuție  $F-D$  are următoarea formă (a se vedea formula (2.5)):

$$f_p = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_V}{k_0 T}}} . \quad (2.33)$$

Pentru calcularea concentrației golurilor și electronilor de la același nivel (de la nivelul  $E_C=0$ ) vom utiliza schema energetică (Fig. 2.5), conform căreia

$$E_F + E'_F = -E_g, \quad (2.34 a)$$

și 
$$E + E' = -E_g. \quad (2.34 b)$$

Atunci funcția de distribuție a golurilor din formula (2.33) poate fi prezentată în modul următor:

$$f_p(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_0T}}}. \quad (2.35)$$

Comparând (2.35) pentru goluri cu (2.4) pentru electroni constatăm că aceste expresii sunt identice. În cazul semiconductorului nedegenerat, deci pentru  $E' \gg E'_F$  și, respectiv,  $e^{\frac{E'-E'_F}{k_0T}} \gg 1$ , funcția de distribuție  $F-D$  se transformă în funcția de distribuție  $M-B$  pentru un semiconductor cu gaz electronic nedegenerat:

$$f_{M-B}(E') = \exp\left(-\frac{E-E_F}{k_0T}\right) \quad (2.36)$$

Concentrația golorilor în acest caz se determină în același mod ca în paragraful 2.4 și are aceeași formă ca și concentrația electronilor:

$$p = \frac{2(2\pi m_p k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{\frac{E'_F}{k_0T}} = N_V e^{\frac{E'_F}{k_0T}}, \quad (2.37)$$

unde factorul din fața exponentului îl notăm prin  $N_V$  – densitatea de stări energetice ale golorilor în banda de valență (prin analogie cu  $N_C$ ). Deci,

$$\frac{2(2\pi m_p k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} = N_V. \quad (2.38)$$

*Dependența poziției nivelului Fermi și a concentrației de temperatură.* Luând în considerare ecuația de electroneutralitate (2.31), egalăm (2.32) cu (2.37):

$$\frac{2(2\pi m_n k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \frac{2(2\pi m_p k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{\frac{E'_F}{k_0T}} \quad (2.39)$$

sau

$$m_n^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_F}{k_0T}} = m_p^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E'_F}{k_0T}}. \quad (2.40)$$

Înmulțim (2.40) cu  $e^{\frac{E_F}{k_0T}}$ , dar  $E'_F$  înlocuim cu valoarea lui din (2.34 a). În urma transformărilor, obținem:

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \left(\frac{m_p}{m_n}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{E_g}{2k_0T}}. \quad (2.41)$$

Logaritmand (2.41), găsim:

$$E_F = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4}k_0T \ln \frac{m_p}{m_n}. \quad (2.42 a)$$

Aceasta este expresia generală pentru nivelul Fermi în semiconductorul intrinsec, care ne arată dependența acestuia de temperatură.

Pentru a determina concentrația purtătorilor de sarcină introducem (2.41) în (2.32):

$$n_i = \frac{2(2\pi\sqrt{m_n m_p} k_0T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} e^{-\frac{E_g}{2k_0T}} = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_g}{2k_0T}} \quad (2.42 b)$$

Vom analiza expresiile (2.42).

a) Reieșind din (2.42 a), la temperatura 0 K nivelul Fermi se găsește la mijlocul benzii interzise  $E_F = -\frac{E_g}{2}$ . Dacă temperatura crește, atunci poziția nivelului Fermi depinde de raportul dintre  $m_n$  și  $m_p$ . Când

$m_n > m_p$ , logaritmul  $\ln \frac{m_p}{m_n} < 0$ ,  $|E_F|$  crește după valoarea absolută,

adică nivelul Fermi se deplasează în jos de la mijlocul benzii interzise.

Când  $m_n < m_p$ ,  $\ln \frac{m_p}{m_n} > 0$  și  $E_F$  se deplasează de la mijlocul benzii

interzise în sus. Trebuie de menționat că deplasarea nivelului Fermi odată cu creșterea temperaturii este neînsemnată. De aceea, pentru *semiconductorii intrinseci, se consideră că nivelul Fermi se află la mijlocul benzii interzise pentru orice temperatură.*

b) Să analizăm dependența concentrației purtătorilor de sarcină intrinseci de temperatură. Pentru aceasta rescriem formula (2.42 b) în forma următoare:

$$n_i = AT^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{2k_0T}}, \quad (2.43)$$

unde  $A$  este o constantă care nu depinde de temperatură

$$A = \frac{2(2\pi\sqrt{m_n m_p} k_0)^{\frac{3}{2}}}{h^3}. \quad (2.44)$$

Din (2.43) se observa că dacă temperatura  $T = 0 \text{ K}$ , concentrația  $n_i = 0$ , adică în banda de conducție nu se află niciun electron. Dacă temperatura  $T$  este diferită de zero, concentrația  $n_i$  depinde atât de temperatură, cât și de lățimea benzii interzise  $E_g$ . Cu cât  $E_g$  este mai mare, cu atât electronilor le este mai „greu” să efectueze tranziția din banda de valență în banda de conducție și concentrația lor, respectiv, va fi mai mică. Menționăm (și aceasta este important) că odată cu creșterea temperaturii concentrația crește *exponențial*.

De asemenea, din (2.43) putem determina lățimea benzii interzise  $E_g$ . Remarcăm că însăși lățimea benzii interzise depinde liniar de temperatură conform legii

$$E_g(T) = E_{g0} + \beta T, \quad (2.45)$$

unde  $E_{g0}$  este lățimea benzii interzise, extrapolată la temperatura de  $T = 0 \text{ K}$ , iar  $\beta = dE_g/dT$  – coeficientul termic de variație a benzii interzise.

Conform (2.43), concentrația depinde de temperatură atât ca  $T^{\frac{3}{2}}$ , cât și exponențial  $e^{-\frac{E_g}{2k_0T}}$ . Dependența de putere este mai slabă decât cea exponențială, de aceea factorul  $T^{\frac{3}{2}}$  poate fi transferat în partea stângă a ecuației (2.43), după care, logaritmând, obținem:

$$\ln\left(n_i T^{-\frac{3}{2}}\right) = \ln A - \frac{E_{g0}}{2k_0T} - \frac{\beta}{2k_0}. \quad (2.46)$$

Deoarece termenii  $\ln A$  și  $\beta/2k_0$  nu depind de temperatură, ecuația (2.46) are forma funcției  $y = a + bx$ , unde  $a = \ln A - \frac{\beta}{2k_0}$ ,  $b = -\frac{E_{g0}}{2k_0}$  și

$x = \frac{1}{T}$ . Dacă de-a lungul axei  $OY$  vom depune  $\ln(n_i T^{-3/2})$ , iar de-a lungul axei  $OX - 1/T$ , graficul funcției, în coordonate semilogaritmice, va fi o dreaptă (Fig. 2.6). Menționăm că înclinarea acestei drepte este determinată de lățimea benzii interzise, deci

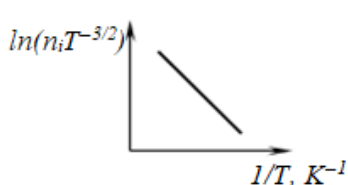


Fig. 2.6. Dependenta concentrației de temperatură.

$$\frac{\Delta \ln \left( n_i T^{-\frac{3}{2}} \right)}{\Delta \left( \frac{1}{T} \right)} = -\frac{E_{g0}}{2k_0} \quad (2.47)$$

De la logaritmul natural trecem la cel zecimal; luând în considerare că  $\lg a = 2,3 \ln a$ , obținem:

$$E_{g0} = -2 \cdot 2,3 \cdot k_0 \frac{\Delta \lg \left( n_i T^{-\frac{3}{2}} \right)}{\Delta \left( \frac{1}{T} \right)} \quad (2.48)$$

Semnul "–" indică că odată cu creșterea temperaturii mărimea  $(1/T)$  se micșorează, iar concentrația  $n$  crește exponențial.

*În semiconductorul intrinsec, concentrațiile electronilor și ale golurilor sunt egale. Nivelul Fermi la 0 K se află la mijlocul benzii interzise și odată cu creșterea temperaturii se apropie de acea zonă care are masă efectivă mai mică.*

## 2.6. Semiconductorul extrinsec și legea acțiunii maselor

Oricât de mare ar fi gradul de purificare a semiconductorului, totuși el mai conține o anumită cantitate de atomi străini, care formează niveluri energetice proprii și care poartă denumirea de *niveluri de impuritate*, sau *niveluri locale*.

Semiconductorul se numește **extrinsec**, dacă proprietățile lui electrice sunt determinate de purtătorii de sarcină proveniți din ionizarea impurităților. Aceste niveluri de impurități pot fi situate atât

în benzile permise, cât și în cele interzise, și la diferite distanțe de marginile benzilor permise  $E_C$  și  $E_V$ .

a) Impuritățile care sunt surse de electroni de conducție se numesc *donoare*. Semiconductorii care conțin impurități donoare se numesc *semiconductori extrinseci de tip-n*. Nivelurile donoare, cu energia de activare  $E_d$ , sunt situate preponderent în banda interzisă, sub marginea benzii de conducție.

b) Impuritățile care sunt surse de goluri și atrag electronii din banda de valență se numesc impurități *acceptoare*. Semiconductorii care conțin impurități acceptoare se numesc *semiconductori extrinseci de tip-p*. Nivelurile acceptoare, cu energia de activare  $E_a$ , sunt situate în banda interzisă deasupra marginii de sus a benzii de valență.

*Atomii impuritari* au o concentrație cu mult mai mică comparativ cu concentrația atomilor proprii și sunt distribuiți în semiconductor uniform. Distanța dintre acești atomi este atât de mare, încât ei nu interacționează. Nivelurile energetice ale atomilor impuritari nu se suprapun și, respectiv, nu formează o bandă de energie. Deoarece atomii impuritari nu interacționează, purtătorii de sarcină, care se găsesc pe nivelurile impuritare, sunt legați de atomii corespunzători; cu alte cuvinte, sunt localizați. Nivelurile locale pot fi ocupate numai de un singur electron și nu de doi, cum prevede principiul Pauli în benzile de energii permise. Dacă atomul impuritar este ionizat dublu (ceea ce este posibil), atunci în banda interzisă vor apărea două niveluri impuritare, deoarece energiile de ionizare vor fi diferite. Reiese că pentru electronii care se găsesc pe nivelurile locale nu este valabilă funcția de distribuție Fermi-Dirac.

Conform lui Gibbs, funcțiile de distribuție a purtătorilor de sarcină pe nivelurile locale, în general, au următoarea formă:

$$f_G = \frac{1}{1 + g e^{\frac{E_{d(a)} - E_F}{k_0 T}}}, \quad (2.49)$$

unde  $g$  este factor ce arată numărul de posibilități pentru realizarea acestei stări ( $g=1/2$  sau  $g=2$ ),  $E_{d(a)}$  este energia de ionizare a

impurităților, care se calculează de la extremitățile benzilor permise respective până la nivelul impuritar.

a) Electronii de pe nivelurile donoare pot trece în banda de conducție, dacă primesc o energie egală sau mai mare decât energia de ionizare  $E_d$  și probabilitatea că nivelul donor va fi ocupat de electroni se determină conform funcției de distribuție

$$f_{nd} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_d - E_F}{k_0 T}}} . \quad (2.50 a)$$

Atunci pe nivelurile donoare rămân goluri și funcția lor de distribuție este

$$f_{pd} = 1 - f_{nd} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_d - E_F}{k_0 T}}} = \frac{1}{1 + 2e^{\frac{E_F - E_d}{k_0 T}}} . \quad (2.50 b)$$

b) Analogic putem scrie funcțiile de distribuție pentru nivelurile acceptoare:

pentru goluri pe nivelurile acceptoare

$$f_{pa} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_F - E_a}{k_0 T}}} , \quad (2.51 a)$$

pentru electroni pe nivelurile acceptoare

$$f_{na} = \frac{1}{1 + 2e^{\frac{E_a - E_F}{k_0 T}}} . \quad (2.51 b)$$

Una dintre cele mai importante legi ale statisticii semiconductorilor este *legea acțiunii maselor*. În orice semiconductor la temperaturi  $T > 0$  sunt concomitent și electroni și goluri.

a) În cazul semiconductorului intrinsec

$$n = p = n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_g}{2k_0 T}} \quad (2.52)$$

b) În cazul semiconductorului de tip- $n$  concentrația electronilor este cu mult mai mare decât concentrația golurilor, deci



$$n \gg p. \quad (2.53)$$

În acest caz electronii poartă denumirea de *purtători de sarcină majoritari*, iar golurile – de *purtători de sarcină minoritari*.

În cazul gazului electronic negenerat concentrația electronilor este determinată de ecuația

$$n = N_C e^{\frac{E_F}{k_0 T}}. \quad (2.54)$$

c) Dacă avem un semiconductor de tip-*p*, atunci concentrația golurilor este cu mult mai mare decât concentrația electronilor

$$p \gg n, \quad (2.55)$$

și în acest caz golurile sunt *purtători de sarcină majoritari*, iar electronii – *minoritari*. Concentrația golurilor în cazul semiconductorului nedegenerat conform (2.37) și (2.34 a) este

$$p = N_V e^{\frac{E_F}{k_0 T}} = N_V e^{\frac{-E_g - E_F}{k_0 T}}. \quad (2.56)$$

Vom determina produsul concentrației electronilor și a golurilor:

$$n \cdot p = N_C e^{\frac{E_F}{k_0 T}} \cdot N_V e^{\frac{-E_g - E_F}{k_0 T}} = N_C \cdot N_V e^{\frac{-E_g}{k_0 T}}. \quad (2.57)$$

Dacă vom compara expresia (2.57) cu pătratul concentrației electronilor în semiconductorul intrinsec (formula (2.52)), vom vedea că ele sunt identice, adică

$$n p = n_i^2. \quad (2.58)$$

Expresia (2.58) este *legea acțiunii maselor*. Această lege arată că dacă concentrația unui tip de purtători de sarcină crește în banda corespunzătoare (concentrația electronilor în banda de conducție sau a golurilor în cea de valență), concentrația celuilalt tip de purtători de sarcină în cealaltă bandă trebuie să scadă astfel ca produsul concentrațiilor să rămână constant.

*Produsul concentrației electronilor și a golurilor într-un semiconductor nedegenerat nu depinde de poziția nivelului Fermi și este egal cu pătratul concentrației intrinseci.*

## 2.7. Semiconductorul extrinsec cu un singur tip de impurități

Să determinăm dependența concentrației purtătorilor de sarcină și a poziției nivelului Fermi de temperatură, într-un semiconductor ce conține numai un singur tip de impuritate monovalentă (de exemplu, donori).

Notăm:  $N_d$  este concentrația totală a impurităților donoare ce au fost introduse în semiconductor,  $E_d$  este energia de ionizare a donoarelor,  $n_d$  – concentrația electronilor pe nivelurile donoare.

Când temperatura tinde spre zero  $T \rightarrow 0$  sau este foarte joasă, electronii de pe nivelurile donoare nu pot efectua saltul în banda de conducție, deoarece energia lor este cu mult mai mică decât  $E_d$ . În acest caz, concentrația electronilor pe nivelurile locale este egală cu concentrația totală a impurităților, deci

$$n_d = N_d. \quad (2.59)$$

Electronii pot apărea în banda de conducție datorită a două tipuri de tranziții (Fig. 2.7):

*I* – de pe nivelurile donoare;

*II* – din banda de valență.

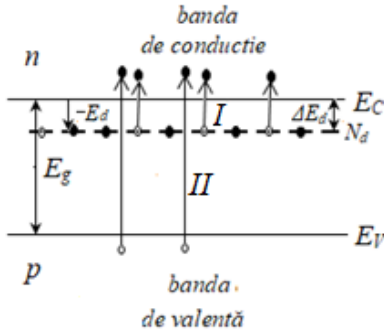
Concentrația electronilor în banda de conducție este egală cu

$$n = p_d + p, \quad (2.60)$$

unde  $p$  este concentrația golurilor în banda de valență,  $p_d$  – concentrația golurilor pe nivelurile donoare ce apar după tranzițiile electronilor în banda de conducție

$$p_d = N_d - n_d. \quad (2.61)$$

Ecuția (2.60) este *ecuația de electroneutralitate* pentru un semiconductor extrinsec cu un singur tip de impurități.



**Fig. 2.7.** Tranzițiile electronilor:  
 I – de pe nivelurile donoare;  
 II – din banda de valență.

Este evident că la temperaturi destul de joase predomină procesele de tipul I, iar la temperaturi ridicate – cele de tipul II. Pentru simplificarea problemei, întregul interval de temperaturi poate fi divizat în două regiuni: domeniul de temperaturi joase și domeniul de temperaturi ridicate.

**I. Domeniul de temperaturi joase.** În această

regiune concentrația purtătorilor de sarcină intrinseci este foarte mică și ecuația de electroneutralitate (2.60) are următoarea formă:

$$n = p_d = N_d - n_d . \quad (2.62)$$

Concentrația electronilor pe nivelurile donoare, luând în considerare funcția de distribuție Gibbs (2.50 a), este

$$n_d = N_d \cdot f_{nd} , \quad (2.63)$$

iar

$$n = N_C e^{\frac{E_F}{k_0T}} . \quad (2.64)$$

Ecuția (2.64) poate fi scrisă în felul următor:

$$N_C e^{\frac{E_F}{k_0T}} = N_d - \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_d - E_F}{k_0T}}} . \quad (2.65)$$

Să rezolvăm ecuația (2.65) în raport cu  $e^{\frac{E_F}{k_0T}}$  :

$$N_C e^{\frac{E_F}{k_0T}} + \frac{1}{2} N_C e^{\frac{E_F}{k_0T}} \cdot e^{\frac{E_d}{k_0T}} \cdot e^{-\frac{E_F}{k_0T}} = N_d + \frac{1}{2} N_d \cdot e^{\frac{E_d}{k_0T}} \cdot e^{-\frac{E_F}{k_0T}} - N_d$$

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} + \frac{1}{2}e^{\frac{E_d}{k_0T}} - \frac{1}{2} \frac{N_d}{N_C} \cdot e^{\frac{E_d}{k_0T}} e^{\frac{E_F}{k_0T}} = 0. \quad (2.66)$$

Înmulțim ecuația (2.66) cu  $e^{-\frac{E_F}{k_0T}}$  și obținem ecuația pătratică

$$e^{\frac{2E_F}{k_0T}} + \frac{1}{2}e^{\frac{E_d}{k_0T}} e^{\frac{E_F}{k_0T}} - \frac{1}{2} \frac{N_d}{N_C} e^{\frac{E_d}{k_0T}} = 0. \quad (2.67)$$

Soluția acestei ecuații este

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = -\frac{1}{4}e^{\frac{E_d}{k_0T}} \pm \sqrt{\frac{1}{16}e^{\frac{E_d}{k_0T}} + \frac{N_d}{2N_C}e^{\frac{E_d}{k_0T}}}. \quad (2.68)$$

Deoarece  $\exp\left(\frac{E_F}{k_0T}\right)$  nu poate fi negativ, se va lua în considerare numai soluția cu semnul "+" înainte de radical. Simplificăm expresia (2.68):

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \frac{1}{4}e^{\frac{E_d}{k_0T}} \left\{ \sqrt{1 + \frac{8N_d}{N_C}e^{-\frac{E_d}{k_0T}}} - 1 \right\}. \quad (2.69)$$

Din Figura 2.7 se observă că  $\Delta E_d = E_C - E_d$  și, luând în considerare că  $E_C = 0$ , obținem:

$$-E_d = \Delta E_d. \quad (2.70)$$

Menționăm că este mai convenabil de a folosi anume distanța energetică  $\Delta E_d$ , deoarece în acest caz nu se va lua în considerare semnul energiei. Substituim (2.70) în (2.69) și obținem:

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \frac{1}{4}e^{-\frac{\Delta E_d}{k_0T}} \left\{ \sqrt{1 + \frac{8N_d}{N_C}e^{\frac{\Delta E_d}{k_0T}}} - 1 \right\}. \quad (2.71)$$

Expresia (2.71) este importantă deoarece descrie dependența nivelului Fermi de temperatură în regiunea temperaturilor joase, când rolul de bază în activarea electronilor în banda de conducție îl joacă

nivelurile impuritate – donori. Însă, această ecuație este destul de complicată pentru a putea fi analizată în întregime.

Pentru simplificarea problemei vom examina două cazuri extreme:

**I a.** Temperatura este atât de joasă încât  $k_0T \ll \Delta E_d$ , ceea ce înseamnă că energia majorității electronilor de pe nivelurile donoare este destul de mică pentru a efectua tranziții în banda de conducție. Însă, datorită distribuției Maxwell-Boltzmann (distribuției după energia cinetică), totuși sunt electroni care pot trece în banda de conducție. Acest caz corespunde condiției

$$\frac{8N_d}{N_C} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0T}} \gg 1. \quad (2.72)$$

Această inegalitate se numește „*criteriul temperaturilor joase*”. Având în vedere (2.72), unitățile din ecuația (2.71) pot fi neglijate și aceasta se simplifică în felul următor:

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \frac{1}{4} e^{-\frac{\Delta E_d}{k_0T}} \left\{ \sqrt{\frac{8N_d}{N_C} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0T}}} \right\},$$

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \frac{1}{4} e^{-\frac{\Delta E_d}{k_0T}} 4e^{\frac{\Delta E_d}{2k_0T}} \sqrt{\frac{N_d}{2N_C}} = \sqrt{\frac{N_d}{2N_C}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2k_0T}}. \quad (2.73)$$

Să logaritmăm (2.73) și determinăm

$$\frac{E_F}{k_0T} = -\frac{\Delta E_d}{2k_0T} + \ln \sqrt{\frac{N_d}{2N_C}}$$

$$E_F = -\frac{\Delta E_d}{2} + \frac{k_0T}{2} \ln \frac{N_d}{2N_C}. \quad (2.74 a)$$

Această ecuație descrie dependența energiei nivelului Fermi de temperatură în intervalul de temperaturi foarte joase.

Înlocuind (2.73) în (2.64) obținem dependența concentrației electronilor de temperatură în același interval de temperaturi

$$n = N_C e^{\frac{E_F}{k_0 T}} = N_C \sqrt{\frac{N_d}{2N_C}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2k_0 T}} = \sqrt{\frac{N_d N_C}{2}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2k_0 T}}$$

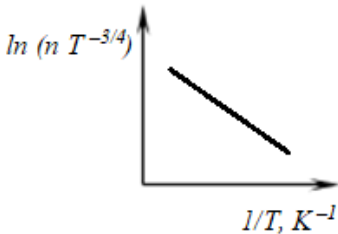
sau

$$n = \sqrt{\frac{N_d N_C}{2}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2k_0 T}} \quad (2.74 b)$$

Vom analiza expresiile (2.74). Din (2.74 b) se vede că concentrația electronilor în banda de conducție  $n$  crește odată cu micșorarea energiei de ionizare  $\Delta E_d$  și cu creșterea concentrației impurităților donoare  $N_d$ . Dacă temperatura  $T \rightarrow 0$ , concentrația electronilor este practic nulă. Ca și în cazul semiconductorului intrinsec, dependența concentrației de temperatură poate fi reprezentată sub forma

$$n = Const T^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2k_0 T}}, \quad (2.75)$$

unde  $Const$  este mărimea ce nu depinde de temperatură. Concentrația depinde de factorul  $T^{3/4}$  cu mult mai puțin decât de exponent; astfel, odată cu creșterea temperaturii, concentrația va crește după legea exponențială. Transferăm  $T^{3/4}$  în partea stângă a egalității și logarităm expresia obținută



**Fig. 2.8.** Dependența concentrației de temperatură în domeniul de temperaturi foarte joase.

$$\ln(n T^{-3/4}) = \ln C - \frac{\Delta E_d}{2k_0 T} \quad (2.76)$$

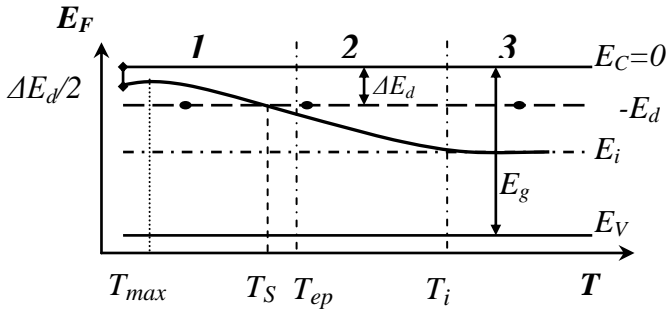
Energia de ionizare a donoarelor poate fi găsită în același mod ca și lățimea benzii interzise pentru semiconductorul intrinsec. Relația (2.76) în coordonatele semilogaritmice are forma unei drepte și energia de ionizare poate fi calculată din panta dreptei (Fig. 2.8) conform

$$\Delta E_d = -2k_0 \frac{\Delta \ln(nT^{-\frac{3}{4}})}{\Delta\left(\frac{1}{T}\right)}. \quad (2.77)$$

Analiza ecuației (2.74 a) arată că dacă temperatura  $T \rightarrow 0$ , nivelul Fermi se găsește la mijlocul intervalului dintre nivelurile  $E_C$  și  $E_d$

$$E_F = -\frac{\Delta E_d}{2}. \quad (2.78)$$

În Figura 2.9 este prezentată dependența poziției nivelului Fermi de temperatură într-un semiconductor cu un singur tip de impuritate – impuritatea donoare. Domeniului de temperaturi foarte joase îi corespunde regiunea 1.



**Fig. 2.9.** Dependența poziției nivelului Fermi de temperatură într-un semiconductor cu un singur tip de impuritate.

Atât timp cât temperatura este foarte joasă densitatea de stări electronice  $N_C$ , care este proporțională cu  $T^{3/2}$ , este mai mică decât  $N_d$  și, respectiv,  $\sqrt{\frac{N_d}{2N_C}} > 1$ . Conform (2.74 a),  $E_F$  se micșorează după valoarea absolută, adică se deplasează în sus spre nivelul  $E_C$ . Dar într-un moment dat, când temperatura atinge valoarea marcată  $T_{max}$ ,  $2N_C$  devine mai mare decât  $N_d$  și  $\ln \sqrt{\frac{N_d}{2N_C}}$  devine negativ. Din acest punct nivelul Fermi începe deplasarea de la  $E_C$  în jos. Deci, la temperatura

$T_{max}$  funcția  $E_F = f(T)$  trece printr-un maximum și această temperatura este

$$T_{max} = \left( \frac{N_d}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{h^2}{2\pi m_n k_0 T e}. \quad (2.79)$$

**I b.** Temperatura este mai ridicată și are loc inegalitatea  $k_0T \gg \Delta E_d$ , care corespunde regiunii de temperaturi când deja toți electronii de pe nivelurile donoare pot trece în banda de conducție. Atunci în expresia (2.71) al doilea termen de sub radical

$$\frac{8N_d}{N_C} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0T}} \ll 1, \quad (2.80)$$

deci, este o mărime foarte mică. Inegalitatea (2.80) este „criteriul de temperaturi mai ridicate”. Este cunoscut că radicalul  $\sqrt{1+a}$  (unde  $a \ll 1$ ) poate fi descompus în serie în modul următor:

$$\sqrt{1+a} = 1 + \frac{a}{2} - \frac{a^2}{8} + \dots \quad (2.81)$$

Ne vom limita doar la primii doi termeni din serie și vom prezenta radicalul din (2.71) în forma următoare:

$$\sqrt{1 + \frac{8N_d}{N_C} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0T}}} \approx 1 + \frac{4N_d}{N_C} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0T}}. \quad (2.82)$$

Atunci expresia (2.71) este

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \frac{1}{4} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0T}} \left( 1 + \frac{4N_d}{N_C} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0T}} - 1 \right) = \frac{N_d}{N_C}, \quad (2.83)$$

care permite a determina energia nivelului Fermi

$$E_F = k_0T \ln \frac{N_d}{N_C} \quad (2.84 a)$$

și concentrația electronilor

$$n = N_C e^{\frac{E_F}{k_0T}} = N_C \frac{N_d}{N_C} = N_d$$

$$n = N_d. \quad (2.84 b)$$



Formulele (2.84) sunt de bază pentru intervalul de temperaturi analizat. În acest interval de temperaturi  $\ln \frac{N_d}{N_C} < 0$ , deoarece  $N_C > N_d$  și

energia nivelului Fermi este negativă. În același timp,  $E_F$  crește după valoarea absolută, deci  $E_F$  continuă să se deplaseze „în jos” spre mijlocul benzii interzise (Fig. 2.9, regiunea 2). Concentrația electronilor

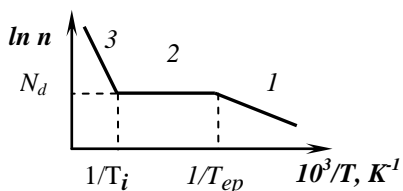


Fig. 2.10. Dependența concentrației de temperatură într-un semiconductor cu impurități.

în acest interval de temperaturi rămâne constantă (Fig. 2.10, regiunea 2) și este egală cu concentrația totală a donoare. Aceasta înseamnă că toate impuritățile pe nivelurile donoare sunt ionizate

complet, adică concentrația electronilor pe nivelurile donoare devine egală cu zero,  $n_d = 0$ . În pofida faptului că tranzițiile electronilor de pe nivelurile donoare nu sunt posibile, dar temperatura încă nu este suficientă pentru tranzițiile banda de valență – banda de conducție, concentrația electronilor  $n$  rămâne constantă. Acest interval de temperatură se numește *domeniul de „epuizare”*. Temperatura, la care se schimbă forma dependenței concentrației de temperatură: de la exponențială (regiunea 1) la o mărime constantă (regiunea 2), se numește *temperatura de epuizare*  $T_{ep}$ . Aceasta poate fi determinată egalând „criteriul temperaturilor joase” cu unitatea; astfel, obținem ecuația transcendent

$$T_{ep} = \frac{\Delta E_d / k_0}{\ln \frac{2(2\pi m_p k_0)^{3/2}}{8N_d h^3} + \frac{3}{2} \ln T_{ep}} \quad (2.85)$$

Regiunile 1 și 2 sunt domeniile de conductibilitate extrinsecă.

Pe graficul dependenței poziției nivelului Fermi de temperatură (Fig. 2.9) este un punct în care nivelul Fermi intersectează nivelul

donor  $E_d$ . Această temperatură se numește *temperatura de saturație*  $T_S$ . Temperatura de epuizare este puțin mai mare decât temperatura de saturație  $T_S$  și pe grafic îi corespunde o energie ce se găsește puțin mai jos de nivelul  $E_d$ . Aceasta se datorează faptului că energia  $E_F$  reprezintă energia medie a electronilor, deci la temperatura de epuizare deja toți electronii (inclusiv cei cu viteza mai mică decât viteza medie din distribuția  $M-B$ ) pot trece în banda de conducție.

**II. Domeniul de temperaturi ridicate.** Dacă temperatura semiconductorului continuă să crească și energia electronilor crește, ei pot ajunge din banda de valență în banda de conducție. În acest interval de temperaturi predomină tranzițiile banda de valență – banda de conducție, toți donorii sunt deja ionizați  $p_d = N_d$  și ecuația de electroneutralitate (2.60) are următoarea formă:

$$n = p + N_d \quad (2.86)$$

Din legea acțiunii maselor determinăm concentrația golurilor

$$p = \frac{n_i^2}{n} \quad (2.87)$$

și o substituim în ecuația (2.86)

$$n = \frac{n_i^2}{n} + N_d.$$

Obținem ecuația pătratică pe care o rezolvăm în raport cu  $n$

$$n^2 - N_d n - n_i^2 = 0. \quad (2.88)$$

Deoarece concentrația  $n$  întotdeauna este pozitivă, vom lua în considerare doar soluția cu semnul "+":

$$n = \frac{N_d}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \right). \quad (2.89)$$

Ca și în cazul temperaturilor joase (ecuația (2.71)), vom analiza ecuația (2.89) pentru două cazuri extreme.

**II a.** Regiunea temperaturilor mai joase din domeniul analizat, ce corespunde cazului când concentrația purtătorilor de sarcină intrinseci

este foarte mică și termenul de sub radical este cu mult mai mic decât o unitate

$$\frac{4n_i^2}{N_d^2} \ll 1. \quad (2.90)$$

Procedând similar cazului **Ib**, descompunem radicalul într-o serie (analogic cu formula (2.82)):

$$\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \approx 1 + \frac{4n_i^2}{2N_d^2} - \dots$$

și o introducem în (2.89)

$$n = \frac{N_d}{2} \left( 1 + 1 + \frac{4n_i^2}{2N_d^2} \right) = N_d \left( 1 + \frac{n_i^2}{N_d^2} \right).$$

Conform (2.90), al doilea termen din paranteză poate fi neglijat și obținem

$$n = N_d, \quad (2.91 a)$$

deci, concentrația electronilor în banda de conducție este egală cu concentrația impurităților donoare. Luând în considerare (2.64)

$$n = N_d = N_C e^{\frac{E_F}{k_0 T}},$$

determinăm energia nivelului Fermi

$$E_F = k_0 T \ln \frac{N_d}{N_C}. \quad (2.91 b)$$

După cum se observă, formulele (2.91 a,b) coincid cu cele obținute în cazul **Ib** (formulele (2.84 a,b)), adică am obținut domeniul de epuizare a impurităților.

**II b.** Să cercetăm cazul când concentrația purtătorilor intrinseci este cu mult mai mare decât concentrația donoarelor  $N_d$ , ceea ce corespunde inegalității

$$\frac{4n_i^2}{N_d^2} \gg 1. \quad (2.92)$$

În acest caz în formula (2.89) unitățile pot fi neglijate. Drept consecință obținem

$$n = \frac{N_d}{2} \cdot \frac{2n_i}{N_d} = n_i, \quad (2.93 a)$$

deci concentrația electronilor în domeniul de temperaturi foarte ridicate va fi egală cu concentrația purtătorilor de sarcină intrinseci.

Respectiv, energia nivelului Fermi determinată din egalitatea

$$N_C e^{\frac{E_F}{k_0 T}} = \sqrt{N_C N_V} e^{\frac{E_g}{2k_0 T}},$$

corespunde semiconductorului intrinsec

$$E_F = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} k_0 T \ln \frac{m_p}{m_n}. \quad (2.93 b)$$

*La temperaturi ridicate semiconductorul extrinsec trece într-un semiconductor intrinsec.*

Să comparăm Figurile 2.9 și 2.10. Nivelul Fermi coboară până la jumătatea benzii interzise ca și în semiconductorul intrinsec (regiunea 3).

În graficul dependenței concentrației de temperatură panta dreptei în acest interval de temperaturi (regiunea 3) este mai mare decât în regiunea 1, deoarece  $E_g$  este mai mare decât  $E_d$ . Temperatura de trecere de la domeniul de epuizare la cel de conductibilitate intrinsecă  $T_i$  poate fi obținută din condiția

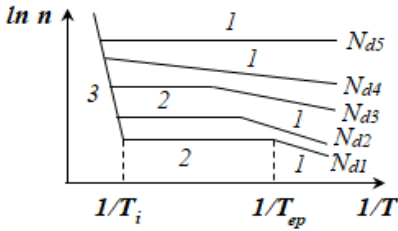
$$\frac{4n_i^2}{N_d^2} = 1 \quad (2.94)$$

sau din condiția de egalitate a nivelurilor Fermi (sau a concentrațiilor)

$$E_F = k_0 T \ln \frac{N_d}{N_C} = -\frac{\Delta E_g}{2} + \frac{3}{4} k_0 T \ln \frac{m_p}{m_n}. \quad (2.95)$$

Obținem ecuația transcendentă, din care putem determina temperatura intrinsecă

$$T_i = \frac{E_g / 2k_0}{\ln \frac{2 \cdot 2(2\pi k_0)^{3/2} (m_n m_p)^{3/4}}{h^3 N_d} - \frac{\beta}{2k_0} + \frac{3}{2} \ln T_i}. \quad (2.96)$$



**Fig. 2.11.** Dependența concentrației de temperatură în cristale cu diferită concentrație a donatorilor:

$$N_{d1} < N_{d2} < N_{d3} < N_{d4} < N_{d5}.$$

odată cu creșterea concentrației impurităților poate fi schimbată înclinarea pantei în domeniul 1 și este posibilă situația când domeniul de epuizare 2 lipsește. În acest caz are loc trecerea directă de la domeniul 1 la domeniul 3.

Dacă avem un semiconductor cu impuritatea acceptoare, atunci semiconductorul este de tip-*p*. Formulele pentru nivelul Fermi și concentrație pentru toate trei regiuni pot fi scrise analogic cu formulele (2.74), (2.84) și (2.93), luând în considerare că energia golurilor se socoate de la nivelul  $E_V$ .

1. Domeniul temperaturilor joase (conductibilitatea extrinsecă)

$$p = \sqrt{\frac{N_a N_V}{2}} e^{-\frac{\Delta E_a}{2k_0 T}} \quad (2.97 a)$$

$$E_F = -\frac{\Delta E_a}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_a}{2N_V}. \quad (2.97 b)$$

2. Domeniul de epuizare (conductibilitatea extrinsecă)

$$p = N_a, \quad (2.98 a)$$

$$E_F = k_0 T \ln \frac{N_a}{N_V}. \quad (2.98 b)$$

3. Domeniul temperaturilor ridicate (conductibilitatea intrinsecă)

$$p = n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_g}{2k_0 T}}, \quad (2.99 a)$$

Să cercetăm cazul următor. Fie că avem un set de cristale ale aceluiași material, dopate cu aceeași impuritate, fiind diferite doar concentrațiile impurităților  $N_{d1} < N_{d2} < N_{d3} < \dots$ . Odată cu creșterea concentrației  $N_d$  (Fig. 2.11) crește temperatura de epuizare  $T_{ep}$  și temperatura  $T_i$ . În același timp,

$$E_F = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4}k_0T \ln \frac{m_p}{m_n}. \quad (2.99 b)$$

*Semiconductorul care conține un singur tip de impuritate are conductibilitate extrinsecă. Când predomină purtătorii de sarcină majoritari, la temperaturi joase, concentrația lor crește exponențial, însă odată cu creșterea temperaturii ea poate deveni constantă în domeniul care se numește domeniu de epuizare.*

## **2.8. Semiconductorul cu impurități donoare și acceptoare**

Semiconductorul poate fi dopat concomitent atât cu impurități donoare, cât și acceptoare. În acest caz electronii de pe nivelurile donoare vor ocupa locurile libere – golurile de pe nivelurile acceptoare, deoarece energia lor pe nivelul acceptor va fi mai mică, iar orice particulă caută să ocupe starea cu cea mai mică energie. În așa mod are loc un proces care se numește *compensarea impurităților*. Gradul de compensare depinde de relația dintre concentrațiile donozilor  $N_d$  și acceptozilor  $N_a$ .

Considerăm că într-un semiconductor concentrația donozilor este mai mare decât concentrația acceptozilor ( $N_d > N_a$ ). Electronii de pe nivelurile donoare ocupă locurile libere de pe nivelurile acceptoare. Electronii rămași pe nivelurile donoare pot trece în banda de conducție sub acțiunea temperaturii, devenind liberi. Rezultă că după compensare semiconductorul devine un semiconductor extrinsec de tip-*n* (Fig. 2.12, a).

a) Diferența dintre  $N_d$  și  $N_a$  se numește *concentrația efectivă a donozilor*

$$N_d' = N_d - N_a \quad (2.100)$$

Semiconductorul în acest caz se numește semiconductorul compensat parțial cu *gradul de compensare*

$$k = \frac{N_a}{N_d}, \quad (2.101)$$

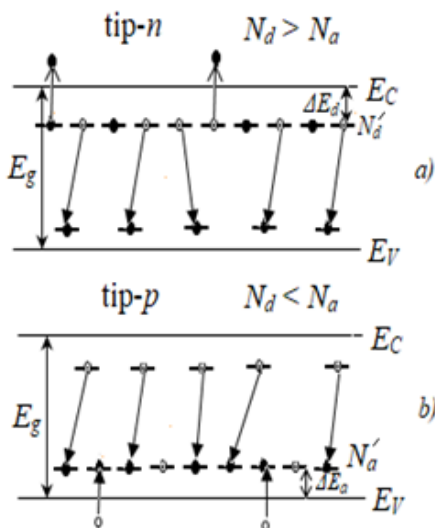


Fig. 2.12. Semiconductori cu două tipuri de impurități:

a)  $N_d > N_a$ ; b)  $N_d < N_a$ .

acceptorilor, golurile, care au rămas pe nivelurile acceptoare, pot capta electronii din banda de valență. Diferența

$$N_a' = N_a - N_d \quad (2.102)$$

poartă denumirea de *concentrație efectivă a acceptorilor*. Gradul de compensare este

$$k = \frac{N_d}{N_a}. \quad (2.103)$$

c) Dacă într-un semiconductor concentrația donrilor este aproape egală cu concentrația acceptorilor  $N_d \approx N_a$ , atunci după compensare semiconductorul extrinsec se comportă ca un semiconductor intrinsec. Acest semiconductor se numește semiconductor *compensat complet* și gradul de compensare tinde spre unitate.

care reprezintă raportul concentrațiilor impurităților. Subliniem că gradul de compensare este raportul dintre cea mai mică concentrație a impurităților și cea mai mare, de aceea întotdeauna  $k < 1$  sau  $k < 100\%$ .

b) Dacă în semiconductor predomină acceptori, atunci purtătorii majoritari vor fi golurile, iar semiconductorul va fi de tip-p parțial compensat (Fig. 2.12, b). Deoarece concentrația donrilor este mai mică decât concentrația

Vom analiza ecuația de electroneutralitate pentru un semiconductor extrinsec ce conține impurități donoare cu concentrația  $N_d$  și impurități acceptoare –  $N_a$ . La o anumită temperatură electronii pot apărea în banda de conducție datorită tranzițiilor de pe nivelurile donoare și din banda de valență. Golurile pot apărea în banda de valență datorită tranziției electronilor pe nivelurile acceptoare și în banda de conducție. Vom folosi aceleași notări ca în paragraful 2.7 și, respectiv, concentrația acceptorilor ionizați este

$$n_a = N_a - p_a, \quad (2.104)$$

unde  $p_a$  este concentrația acceptorilor neionizați. Menționăm că la temperatura  $T = 0 \text{ K}$ ,  $p_a = N_a$  numai în cazul când  $N_d = 0$ , deci dacă semiconductorul are numai un singur tip de impurități.

Ecuația de electroneutralitate pentru semiconductorul cu două tipuri de impurități (sau pentru orice semiconductor) este

$$\begin{aligned} n + n_a &= p + p_a \\ \text{sau} \quad n + (N_a - p_a) &= p + (N_d - n_d). \end{aligned} \quad (2.105)$$

Să cercetăm dependența concentrației și poziției nivelului Fermi de temperatură pentru diferite regiuni de temperatură în cazul  $N_a > N_d$ . Semiconductorul este de tip- $p$  și energia golurilor se socoate de la  $E_V = 0$ .

**I.** Domeniul temperaturilor foarte mici, când  $T \rightarrow 0$ . La această temperatură tranzițiile bandă-bandă lipsesc, ceea ce înseamnă că în ecuația (2.105) termenii  $n = 0$  și  $p = 0$ . Deoarece  $N_a > N_d$ , toți donorii de pe nivelurile donoare compensează o parte de acceptori ( $n_d = 0$ ) și ecuația de electroneutralitate va fi următoarea:

$$N_a - p_a = N_d. \quad (2.106)$$

Luând în considerare (2.51 a), concentrația golurilor pe nivelurile acceptoare este egală cu

$$p_a = N_a \cdot f_{pa} = \frac{N_a}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_F - E_a}{k_0 T}}}. \quad (2.107)$$



Înlocuim (2.107) în (2.108) și obținem

$$N_a - N_d = N_a' = \frac{N_a}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_F - E_d}{k_0 T}}}. \quad (2.108)$$

Rezolvăm (2.108) în raport cu  $e^{\frac{E_F}{k_0 T}}$ :

$$N_a' + \frac{1}{2} N_a' e^{\frac{E_F}{k_0 T}} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0 T}} = N_a',$$

sau

$$\frac{1}{2} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0 T}} e^{\frac{E_F}{k_0 T}} = \frac{N_a}{N_a'} - 1,$$

$$e^{\frac{E_F}{k_0 T}} = \frac{2N_d}{N_a'} e^{-\frac{\Delta E_d}{k_0 T}},$$

$$E_F = -\Delta E_d + k_0 T \ln \frac{2N_d}{N_a'}. \quad (2.109)$$

Deci, la temperatura  $T \rightarrow 0K$  nivelul Fermi coincide cu nivelul donor  $\Delta E_d$ .

**II.** Domeniul de temperaturi joase, dar mai mari decât  $0 K$ . Vom demonstra că semiconductorul cu două tipuri de impurități, în care predomină acceptorii, poate fi reprezentat ca un semiconductor extrinsec de tip- $p$  cu un tip de impuritate, dar cu concentrația acceptorilor egală cu  $N_a'$ . La temperaturi destul de joase sunt posibile tranzițiile electronilor pe nivelurile impuritate, deci din banda de valență pe nivelurile acceptoare, a căror concentrație după compensare este  $N_a'$ . Tranzițiile bandă-bandă încă nu sunt posibile. Ecuația de electroneutralitate (2.105) va obține următoarea formă:

$$N_a - p_a = p + N_d \quad (2.110)$$

sau

$$p = N_a' - p_a. \quad (2.111)$$

Dacă vom compara formula (2.111) cu (2.62), vom vedea că acestea sunt identice, doar că în cazul dat rezolvarea este aplicată pentru semiconductorul de tip- $p$  cu  $N_a > N_d$  și, de aceea,  $N_d$  este

înlocuit cu concentrația efectivă a acceptorilor  $N_a'$ . Rezolvarea ecuației (2.111) o vom efectua în același mod ca și (2.62) și vom obține expresia identică cu (2.71), și anume:

$$e^{\frac{E_F}{k_0T}} = \frac{1}{4} e^{-\frac{\Delta E_a}{k_0T}} \left\{ \sqrt{1 + \frac{8N_a'}{N_V} e^{\frac{\Delta E_a}{k_0T}}} - 1 \right\}. \quad (2.112)$$

Dacă vom analiza două domenii de temperaturi, divizate de criteriul de temperaturi joase

$$\frac{8N_a'}{N_V} e^{\frac{\Delta E_a}{k_0T}} = 1, \quad (2.113)$$

vom obține rezultatele următoare:

a) Domeniul de temperaturi foarte joase, când

$$\frac{8N_a'}{N_V} e^{\frac{\Delta E_a}{k_0T}} \gg 1. \quad (2.114)$$

La rezolvarea (2.112) prin analogie cu paragraful 2.7 obținem expresiile identice cu (2.97 a, b), și anume:

$$E_F = -\frac{\Delta E_a}{2} + \frac{k_0T}{2} \ln \frac{N_a'}{2N_V}, \quad (2.115 a)$$

$$p = \sqrt{\frac{N_a' N_V}{2}} e^{-\frac{\Delta E_a}{2k_0T}}, \quad (2.115 b)$$

ce corespund regiunii 1 (Fig. 2.13).

b) Domeniul de temperaturi mai ridicate, când

$$\frac{8N_a'}{N_V} e^{\frac{\Delta E_a}{k_0T}} \ll 1. \quad (2.116)$$

În acest caz la rezolvarea (2.112) obținem rezultate ce corespund domeniului de epuizare 2:

$$E_F = k_0T \ln \frac{N_a'}{N_V}, \quad (2.117 a)$$

$$p = N'_a. \quad (2.117 b)$$

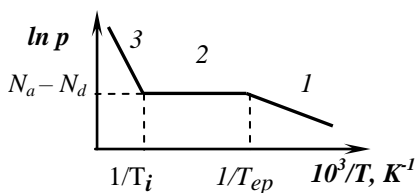


Fig. 2.13. Dependenta concentrației de temperatură.

ecuația de electroneutralitate (2.105) se transformă în

$$n + N_a = p + N_d. \quad (2.118)$$

Calculul arată că concentrația golurilor devine egală cu concentrația electronilor, situație ce corespunde semiconductorului intrinsec (regiunea 3).

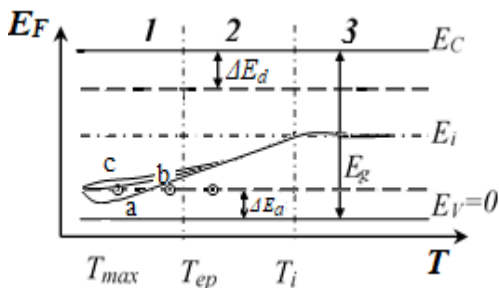


Fig. 2.14. Poziția nivelului Fermi într-un semiconductor cu două tipuri de impurități.

Menționăm că forma graficului dependenței concentrației de temperatură pentru semiconductorul cu două tipuri de impurități (Fig. 2.13) este aceeași ca și pentru semiconductorul extrinsec cu un singur tip de impuritate (Fig. 2.10).

Forma dependenței nivelului Fermi de temperatură (Fig. 2.14) diferă de cea pentru semiconductorul cu un singur tip de impuritate. Conform (2.109), la temperatura  $T=0 K$  nivelul Fermi se află pe nivelul impuritar. Comportamentul de mai departe al nivelului Fermi depinde de relația dintre  $N'_a$  și  $2N_d$ :

a)  $N_a - N_d > 2N_d$ , deci  $N_a > 3N_d$ . În acest caz  $\ln(N'_a/2N_d) > 0$  și  $E_F$  se apropie la banda de valență și atinge valoarea maximă.

b)  $N_a - N_d = 2N_d$  sau  $N_a = 3N_d$ . În acest caz  $\ln(N_a/2N_d) = 0$  și  $E_F$  rămâne pe nivelul impuritar.

c)  $N_a - N_d < 2N_d$ , deci  $N_a < 3N_d$ . În acest caz  $\ln(N_a/2N_d) < 0$  și  $E_F$  se va deplasa spre mijlocul benzii interzise.

La temperaturi mai mari, poziția nivelului Fermi odată cu creșterea temperaturii este dată de formulele (2.115 a) și (2.117 a).

*Modificând concentrația impurităților donoare și acceptoare se poate schimba tipul de conductibilitate al semiconductorului și concentrația purtătorilor de sarcină liberi, însă concentrația respectivă se consideră parțial sau complet compensată.*

## 2.9. Semiconductorul degenerat

La „începutul erei” semiconductorilor, până în anul 1958, erau folosiți mai prioritar semiconductorii nedegenerați cu concentrația purtătorilor de sarcină  $n, p \sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Însă, odată cu apariția diodelor cu efect tunel, laserilor și a dispozitivelor termoelectrice au început să fie folosiți și semiconductorii degenerați.

Semiconductorul degenerat se supune criteriului de degenerare

$$\exp(E_F/k_0T) \gg 1 \quad (2.119)$$

și este cu atât mai mult degenerat, cu cât mai mare este concentrația și cu cât mai mică este temperatura. Gazul electronic degenerat are următoarele proprietăți: gazul electronic se supune statisticii Fermi-Dirac; energia gazului electronic nu depinde de temperatură; concentrația gazului electronic este mai mare decât  $n_{crit} = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; la temperatura  $T \approx 0K$ , conform (2.22), concentrația electronilor este

$$n = \frac{8\pi}{3h^3} (2m_n)^{3/2} E_{F0}^{3/2}.$$

Vom determina concentrația electronilor într-un semiconductor la orice temperatură:

$$n = \int_0^\infty 2f_{F-D} dz = 2 \frac{2\pi(2m_n)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{E^{1/2} dE}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_0T}}} \quad (2.120)$$

Înmulțim și împărțim expresia (2.120) la  $(k_0T)^{3/2}$  și vom nota cu

$$x = \frac{E}{k_0T} \quad \text{și} \quad \eta = \frac{E_F}{k_0T}, \quad (2.121)$$

unde  $\eta$  este nivelul Fermi raportat la temperatură.

Atunci obținem:

$$n = \frac{4\pi(2m_n k_0T)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + e^{x-\eta}}. \quad (2.122)$$

$$\text{Integralul } \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + e^{x-\eta}} = \int_0^\infty x^r f_{F-D}(x, \eta) dx = \Phi_r(\eta) \quad (2.123)$$

se numește integralul Fermi, care este o funcție de  $\eta$  și soluțiile căreia sunt tabelate pentru diferite valori ale coeficientului  $r$ . În cazul dat,  $r = 1/2$ ; deci, în expresia pentru concentrație avem integralul Fermi de ordinul o doime

$$\Phi_{1/2}(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + e^{x-\eta}}. \quad (2.124)$$

Luând în considerare că

$$N_C = \frac{2(2\pi m_n k_0T)^{3/2}}{h^3}, \quad (2.125)$$

obținem formula pentru concentrația purtătorilor de sarcină pentru cazul general, independent de starea gazului electronic: degenerat sau nedegenerat:

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \Phi_{1/2}(\eta). \quad (2.126)$$

Deseori integralul Fermi se folosește sub o altă formă:

$$F_r(\eta) = \int (-\frac{\partial f_{F-D}}{\partial x}) x^r dx, \quad (2.127)$$

unde sub integral nu avem funcția de distribuție, ci derivata ei. Aceasta

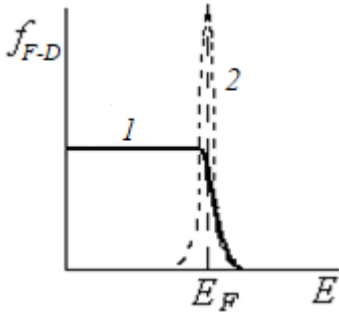


Fig. 2.15. Funcția  $F-D$  (1);  
derivata  $\frac{\partial f_{F-D}}{\partial x}$  (2).

se face cu scopul de a simplifica calculele, deoarece  $\frac{\partial f}{\partial x}$  se comportă ca funcția- $\delta$  (Fig. 2.15), derivata căreia diferă de zero numai în regiunea de variație a funcției de distribuție  $F-D$  având un maxim foarte ascuțit.

Legătura dintre integralele (2.123) și (2.127) poate fi scrisă în modul următor:

$$F_r(\eta) = r \Phi_{r-1}(\eta), \quad (2.128)$$

de unde

$$\Phi_{r-1}(\eta) = \frac{F_r(\eta)}{r}. \quad (2.129)$$

Dacă în integralul  $\Phi_{r-1}(\eta)$  mărimea  $r-1 = 1/2$ , atunci

$$r = \frac{3}{2}. \quad (2.130)$$

Atunci concentrația purtătorilor de sarcină din expresia (2.126) se transformă în

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C F_{3/2}(\eta), \quad (2.131)$$

care descrie legătura dintre concentrație, temperatură, masă efectivă și poziția nivelului Fermi.

Vom analiza (2.131) pentru cazuri extreme:

a) *Criteriul de degenerare* constă în îndeplinirea inegalității (2.119) care indică că  $E_F > 0$ . Nivelul Fermi este pozitiv, dacă el se află în benzile permise. Vom analiza la ce distanță de la marginea zonei trebuie să se afle nivelul Fermi pentru ca să se îndeplinească inegalitatea (2.119).

Calcululele arată că gazul electronic poate fi considerat degenerat dacă  $\eta > 5$ , sau  $E_F \gg 5k_0T$ . Deci, *criteriul de degenerare puternică* a gazului electronic constă în situarea nivelului Fermi în zonele permise la o depărtare mai mare decât  $5k_0T$  de marginea zonei. În acest caz integralul Fermi se simplifică în modul următor:

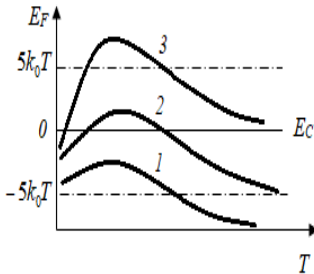
$$F_{3/2}(\eta) = \eta^{3/2}. \quad (2.132)$$

b) Gazul electronic se consideră *nedegenerat complet*, dacă nivelul Fermi se află în banda interzisă la o depărtate de marginea zonei mai mare decât  $5k_0T$ . În acest caz integralul Fermi se transformă în

$$F_{3/2}(\eta) = e^\eta. \quad (2.133)$$

c) Dacă  $E_F$  se află în intervalul  $-5k_0T < E_F < 5k_0T$ , numit domeniu de trecere, atunci pentru integralul Fermi folosim valorile tabelate.

Conform expresiei pentru criteriul de degenerare,  $\exp(E_F/k_0T)$  este proporțională cu concentrația și invers proporțională cu



**Fig. 2.16.** Poziția nivelului Fermi: 1 -  $N_{d1}$ ; 2 -  $N_{d2}$ ; 3 -  $N_{d3}$ .

temperatura. Aceasta înseamnă că gazul electronic este cu atât mai mult degenerat, cu cât mai mare este concentrația și cu cât mai mică este temperatura. În metale, gazul electronic este degenerat la orice temperatură, dar pentru semiconductori există un interval de temperaturi în care gazul electronic poate trece din starea

degenerată în starea nedegenerată. Odată cu creșterea temperaturii  $E_F$  poate intra în zona permisă la o distanță care depinde de  $N_d$ : cu cât mai mare este  $N_d$  cu atât mai mult pătrunde în zonă nivelul Fermi. De exemplu, avem un șir de probe cu concentrații deferite ale aceleiași

impurități:  $N_{d1} < N_{d2} < N_{d3} < \dots$ . În Figura 2.16 sunt prezentate dependențele nivelului Fermi de temperatură în semiconductori cu concentrația diferită a impurității  $N_d$ . În primul semiconductor ( $N_{d1}$ )  $E_F$  se află în banda interzisă; în al doilea ( $N_{d2}$ ) – odată cu creșterea temperaturii,  $E_F$  pătrunde numai „puțin” în banda de conducție; iar în al treilea ( $N_{d3}$ ) –  $E_F$  pătrunde în zona de conducție la o distanța mai mare decât  $5k_0T$ .

Este posibil ca odată cu creșterea continuă a temperaturii nivelul Fermi să iasă din banda de conducție și semiconductorul va deveni nedegenerat.

Până acum, am discutat despre nivelurile de impurități locale, pentru care concentrația atomilor de impuritate este destul de mică și în acest caz atomii de impuritate nu interacționează între ei. Însă, este posibil ca concentrația atomilor de impuritate să fie atât de mare, încât nivelurile lor energetice să se suprapună și în banda interzisă să apară o bandă energetică de impurități. Lățimea acestei benzi poate fi atât de mare, încât ea să se suprapună cu banda de conducție. În acest caz, când nivelul Fermi se situează mai jos de nivelul  $E_C$ , el se află pe nivelurile care nu sunt separate de banda de conducție și semiconductorul se consideră degenerat.

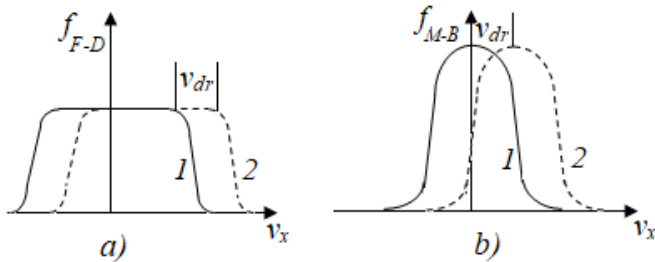
*În cazul gazului electronic degenerat, energia și concentrația purtătorilor de sarcină nu depind de temperatură. Concentrația purtătorilor de sarcină în gazul electronic degenerat este foarte mare și creșterea concentrației determinate de majorarea temperaturii este neesențială, deoarece este cu mult mai mică decât concentrația inițială.*



# Capitolul III. ÎMPRĂȘTIEREA PURTĂTORILOR DE SARCINĂ

## 3.1. Cauzele împrăștierii purtătorilor de sarcină. Mobilitatea și timpul de relaxare

Până acum au fost analizați numai purtătorii de sarcină care se găsesc în stare de echilibru termic cu rețeaua cristalină, în lipsa forțelor exterioare. Starea acestora se descrie prin funcțiile de distribuție de echilibru  $F-D$  sau  $M-B$ , graficele cărora sunt prezentate în coordonatele  $f - v$  (unde  $f$  este funcția de distribuție,  $v$  - viteza purtătorilor de sarcină), în Figura 3.1. Vom analiza cazul unidimensional pentru mișcarea electronilor de-a lungul axei  $OX$ .



**Fig. 3.1.** Distribuția electronilor după viteză pentru statistica  $F-D$  (a) și  $M-B$  (b): 1 - starea de echilibru; 2 - la aplicarea câmpului electric.

Dependențele  $f(v_x)$  sunt simetrice față de axa ordonatelor. Într-adevăr, în stare de echilibru, numărul electronilor ce se mișcă în direcții opuse este întotdeauna egal și viteza lor medie este nulă atât pentru axa  $OX$ , cât și pentru cazul tridimensional

$$\bar{v}_x = 0, \quad \bar{v} = 0.$$

Dacă sistemul se află sub acțiunea unei perturbații exterioare, de exemplu: un câmp electric sau magnetic, un gradient de temperatură

sau de concentrație, atunci sistemul nu se mai află în stare de echilibru. De exemplu, dacă cristalul se află într-un câmp electric exterior constant cu intensitatea  $\vec{\mathcal{E}}$ , atunci asupra electronului acționează forța câmpului electric  $F_{el}$  egală cu

$$\vec{F}_{el} = -e\vec{\mathcal{E}}, \quad (3.1)$$

unde semnul « $\rightarrow$ » se referă la electronii care se mișcă în direcție opusă câmpului electric. În câmpul electric  $\mathcal{E}_x$  mișcarea purtătorilor de sarcină obține un caracter orientat, dirijat de-a lungul câmpului electric. Această mișcare se numește *drift al purtătorilor de sarcină* cu viteza de drift  $v_{dr}$ .

Dacă purtătorul de sarcină s-ar fi mișcat în câmpul periodic potențial al cristalului ideal, atunci mișcarea lui s-ar deosebi de mișcarea în vid, prin faptul că masa purtătorului în cristal este masa efectivă  $m_n$  și nu masa electronului liber  $m_0$ . Să studiem mișcarea electronului într-un cristal ideal cu lungimea  $L$ . Dacă la capetele cristalului se aplică o tensiune  $U$ , atunci viteza electronului în punctul  $x$  al cristalului poate fi găsită din relația

$$\frac{m_n v_{dr}^2}{2} = e \frac{U}{L} x = e \mathcal{E}_x x, \quad (3.2)$$

de unde viteza de drift

$$v_{dr} = \sqrt{\frac{2e\mathcal{E}_x x}{m_n}}. \quad (3.3)$$

Deci, viteza electronului crește spre capătul cristalului. Astfel, cu cât mai lung este cristalul, cu atât mai mare va fi viteza electronului la capătul lui, ceea ce este nonsens și în realitate dependența aceasta nu se observă. Aceasta se datorează faptului că cristalul real se deosebește de cel ideal prin existența numeroaselor defecte, care deteriorează periodicitatea cristalului. Aceasta influențează mișcarea electronilor, care se ciocnesc de defectele rețelei cristaline și se împrăștie, își pierd

viteza și, ca rezultat, se stabilește starea staționară cu  $v_{dr}$  constantă ( $v_{dr} \approx 10^{-4}$  m/s).

La acțiunea forței câmpului electric funcțiile de distribuție devin de neechilibru. Ele sunt reprezentate în Figura 3.1 prin linii întrerupte, deplasate de-a lungul axei  $OX$  (vitezei  $v_x$ ) cu mărirea  $v_{dr}$ . În acest caz, funcțiile de distribuție nu mai sunt simetrice față de axa ordonatelor, fapt ce are loc în stare de echilibru.

Acțiunea defectelor rețelei cristaline poate fi descrisă prin acțiunea forței de rezistență  $F_r$ , care este proporțională cu viteza  $v_{dr}$

$$\vec{F}_r = -\frac{1}{\tau} m_n v_{dr}(t), \quad (3.4)$$

unde  $\frac{1}{\tau}$  este un coeficient de proporționalitate.

Ecuția de mișcare a electronului în rețeaua cristalină reală sub acțiunea forței câmpului electric va fi următoarea:

$$m_n \frac{d\vec{v}_{dr}(t)}{dt} = \vec{F}_{el} + \vec{F}_r$$

sau

$$m_n \frac{dv_{dr}(t)}{dt} = -e\bar{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} m_n v_{dr}(t) \quad (3.5)$$

Menționăm că după includerea câmpului electric mișcarea electronilor va fi o mișcare accelerată doar până la un anumit moment, când se stabilește un echilibru între forța electrică  $F_{el}$  și forța de rezistență  $F_r$ . Când aceste forțe devin egale, accelerația electronilor devine egală cu zero și  $\frac{dv_{dr}(t)}{dt} = 0$ , rezultând că viteza de drift a electronilor devine o mărime constantă și ecuația (3.5) se transformă în

$$0 = -e\varepsilon - \frac{1}{\tau} m_n v_{dr},$$

de unde

$$v_{dr} = -\frac{e\varepsilon\tau}{m_n}. \quad (3.6)$$

Viteza electronilor în câmpul electric unitar se numește *mobilitatea electronilor*, care este egală pentru electroni și goluri cu

$$\mu_n = \frac{v_{dr}}{\varepsilon} = -\frac{e\tau}{m_n} \quad \mu_p = \frac{e\tau}{m_p}, \quad (3.7)$$

respectiv. Pentru electroni mobilitatea este negativă, pentru goluri – pozitivă, moment confirmat de faptul că goliurile se mișcă după direcția câmpului electric.

Să clarificăm sensul fizic al coeficientului  $\tau$ . Considerăm că după ce viteza de drift a electronilor a atins valoarea staționară  $v_{dr\ st}$ , câmpul electric își încetează acțiunea. Din cauza ciocnirii electronilor cu defectele rețelei cristaline, viteza lor se micșorează și gazul electronic revine în starea inițială. Acest proces se numește *proces de relaxare*.

Presupunând că în formula (3.5)  $\mathcal{E} = 0$ , obținem:

$$m_n \frac{dv_{dr}(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau} v_{dr}(t) m_n \quad (3.8)$$

sau

$$\frac{dv_{dr}(t)}{v_{dr}(t)} = -\frac{dt}{\tau}.$$

Presupunem că peste un anumit interval de timp  $t$  după deconectarea câmpului electric viteza de drift a electronilor va fi  $v_{dr}(t)$ , atunci limitele de integrare sunt

$$\int_{v_{dr\ st}}^{v_{dr}(t)} \frac{dv_{dr}(t)}{v_{dr}(t)} = -\frac{1}{\tau} \int_0^t dt$$

sau

$$\ln \frac{v_{dr}(t)}{v_{dr\ st}} = -\frac{t}{\tau},$$

$$e^{-\frac{t}{\tau}} = \frac{v_{dr}(t)}{v_{dr\ st}},$$

$$v_{dr}(t) = v_{dr\ st} e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (3.9)$$

Obținem că după anularea câmpului electric viteza electronilor se micșorează exponențial cu constanta de timp  $\tau$ , care se numește *time de relaxare* și care determină timpul de revenire a sistemului în stare inițială. Timpul de relaxare depinde de modul de ciocnire a electronilor, deci de mecanismul de împrăștiere.

Să analizăm care defecte pot servi în calitate de centre de împrăștiere. De obicei, mecanismele de împrăștiere sunt divizate în două grupe.

*Prima grupă:* împrăștiere provocată de defecte macroscopice, adică crăpături (fusiuni), incluziuni, diferite tipuri de dislocații, granițele cristalelor și altele. Este clar că aceste defecte sunt diferite pentru diverse cristale și nu poate exista o teorie comună pentru acest tip de împrăștiere.

*A doua grupă:* împrăștiere provocată de defectele microscopice. De exemplu, împrăștierea datorată oscilațiilor termice ale rețelei cristaline, când odată cu creșterea temperaturii se amplifică amplitudinea oscilațiilor atomilor rețelei și probabilitatea împrăștierii devine mai mare. La fel, în calitate de centre de împrăștiere pot servi ionii de impurități sau atomii de impurități neutri. Pentru aceste mecanisme de împrăștiere există teorii respective. Este evident că în dependență de mecanismul de împrăștiere timpul de relaxare va depinde într-un anumit mod de  $E, T$  și  $n$ .

*Pentru analiza mecanismelor de împrăștiere trebuie de stabilit dependența timpului de relaxare  $\tau$ , mobilității  $\mu$  de  $E, T$  și  $n$  pentru diferite tipuri de împrăștiere.*

*Timpul de relaxare este timpul de revenire a sistemului în stare de echilibru după excitare. Prin urmare, cu cât mai mic este  $\tau$ , cu atât mai mare este împrăștierea și cu atât mai repede sistemul revine în stare de echilibru.*

### **3.2. Ecuația cinetică a lui Boltzmann**

Toate fenomenele fizice, condiționate de mișcarea orientată a purtătorilor de sarcină, sub acțiunea forțelor exterioare, se numesc *fenomene de transport* sau *fenomene cinetice*. Din grupul fenomenelor de transport fac parte conductibilitatea electrică și termică, fenomenele galvanomagnetice, termoelectrice și termomagnetice.

În prezența forțelor exterioare de perturbație, purtătorii de sarcină dintr-un sistem dat se află în condiții de neechilibru. Starea purtătorilor

de sarcină este descrisă de o funcție de distribuție de neechilibru, care depinde de energie prin intermediul vectorului de undă  $\vec{k}$ , de coordonatele punctului  $\vec{r}$  și de timpul  $t$ , deci  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ . Pentru descrierea cantitativă a fenomenelor de transport se folosește ecuația cinetică a lui Boltzmann, care descrie modificarea stării particulelor ca urmare a acțiunii asupra sistemului a diferitor factori perturbatori.

Pentru un cristal omogen ecuația lui Boltzmann poate fi scrisă în forma următoare:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -(\vec{v}, \nabla_r f) - \frac{1}{\hbar}(\vec{F}, \nabla_k f) - \int \{f(k', r', t)W(k', k) - f(k, r, t)W(k, k')\}d\Omega, \quad (3.10)$$

unde 
$$\nabla_r f = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial z},$$

și 
$$\nabla_k f = \frac{\partial f}{\partial k_x} + \frac{\partial f}{\partial k_y} + \frac{\partial f}{\partial k_z}.$$

Primii doi termeni reprezintă variația funcției de distribuție ca urmare a acțiunii forțelor care sunt determinate de câmpurile exterioare macroscopice. Vom nota acești doi termeni, care indică variația în timp a funcției de distribuție  $f$  în fiecare punct al spațiului coordonatelor  $\vec{r}$  și al vectorului de undă  $\vec{k}$ , prin  $(\frac{\partial f}{\partial t})_{c\acute{a}mp}$ . Această mărime se numește *termen de câmp al ecuației lui Boltzmann*.

Ultimii doi termeni reprezintă variația funcției de distribuție ca urmare a acțiunii forțelor interioare, care sunt determinate de câmpul rețelei cristaline reale ce conține defecte structurale (vacanțe, impurități neutre și ionizate, dislocații și altele). În rețeaua ideală lipsită de defecte structurale forța aceasta este egală cu zero. Forța interioară în fiecare punct cu coordonata  $r$  este rezultanta unui număr imens de câmpuri locale. Această forță depinde foarte mult de punctul în care se găsește purtătorul de sarcină, electronul sau golul. Datorită acestui fapt este imposibil de a evalua acțiunea forțelor interioare asupra funcției de

distribuție în baza legilor dinamicii. De aceea, pentru descrierea forțelor interioare se folosesc legi statistice.

În ecuația lui Boltzmann  $W(\vec{k}, \vec{k}')$  este probabilitatea trecerii electronului dintr-o stare cu vectorul de undă  $\vec{k}$  într-o stare cu vectorul de undă  $\vec{k}'$  într-o unitate de timp; iar  $W(\vec{k}', \vec{k})$  este probabilitatea procesului invers, al trecerii electronului din starea  $k'$  în starea  $k$ . Conform principiului reversibilității microscopice, probabilitățile tranzițiilor directe și inverse sunt egale, adică:

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k}). \quad (3.11)$$

Toate procesele de mai sus se petrec în unghiul solid  $d\Omega$ . Presupunem că la ciocnirea purtătorilor de sarcină cu defectele structurale are loc o interacțiune de scurtă durată, care nu duce la variația coordonatei  $r$ , deci  $r = r'$ , de aceea în continuare pentru simplificarea scrierii vom exclude  $r$  din formule.

În conformitate cu cele menționate mai sus, vom nota ultimii doi termeni prin  $(\frac{\partial f}{\partial t})_{cioc}$ , și, luând în considerare (3.11), obținem:

$$(\frac{\partial f}{\partial t})_{cioc} = - \int W(\vec{k}, \vec{k}') [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] d\Omega \quad (3.12)$$

Atunci ecuația lui Boltzmann va avea următoarea formă:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{c\acute{a}mp} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cioc} \quad (3.13)$$

Primul termen descrie procesele care scot sistemul din stare de echilibru în urma acțiunii forțelor exterioare, iar termenul al doilea descrie revenirea sistemului în starea de echilibru în urma ciocnirilor, deci a împrăștierii.

a) În cazul staționar  $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ , de unde

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{c\acute{a}mp} = -\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{cioc}. \quad (3.14)$$

În starea de echilibru termodinamic termenul de câmp este egal cu zero; prin urmare, și termenul de ciocnire la fel va fi egal cu zero. În conformitate cu formula (3.12), aceasta poate avea loc numai atunci când  $f(\vec{k}', r, t) = f(\vec{k}, r, t)$ , deci funcția de distribuție nu se schimbă, ceea ce corespunde egalității

$$f(\vec{k}') = f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}), \quad (3.15)$$

unde  $f_0(k)$  este funcția de distribuție de echilibru.

De obicei, forțele exterioare nu duc la o abatere mare de la funcția de distribuție de echilibru, de aceea putem exprima funcția de distribuție de neechilibru ca

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) + f_1(\vec{k}), \quad (3.16)$$

unde  $f_1(\vec{k})$  este un termen de corecție destul de mic.

b) Presupunem că în momentul  $t = 0$  asupra sistemului descris de funcția de distribuție de neechilibru au încetat să acționeze toate forțele exterioare, deci termenul de câmp din ecuația lui Boltzmann este egal cu zero:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{c\acute{a}mp} = 0 \quad (3.17)$$

În acest caz ecuația lui Boltzmann (3.13) va fi următoarea:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{cioc}, \quad (3.18)$$

ceea ce indică faptul că funcția de distribuție variază numai datorită ciocnirilor purtătorilor de sarcină cu defectele rețelei și sistemul revine în stare de echilibru peste un anumit interval de timp. Dacă variația distribuției purtătorilor de sarcină de la starea de echilibru nu este mare, se poate presupune că în absența câmpurilor exterioare viteza de variație a funcției de distribuție datorită ciocnirilor este proporțională cu



mărima abaterii funcției de distribuție de la valoarea de echilibru, adică cu  $f_1(\vec{k})$ .

$$\text{Deci,} \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cioc} = \frac{f_1(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}, \quad (3.19)$$

unde  $\tau(\vec{k})$  este timpul de relaxare, care depinde de  $\vec{k}$ . În general,  $\tau$  definește procesele de împrăștiere în prezența forțelor exterioare, însă, pentru simplificarea problemei, presupunem că timpul de relaxare nu depinde de câmpuri exterioare.

Având în vedere (3.12) și (3.16), integrala ciocnirii devine

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cioc} = - \int W(\vec{k}, \vec{k}') [f_0(\vec{k}') + f_1(\vec{k}') - f_0(\vec{k}) - f_1(\vec{k})] d\Omega$$

sau, conform (3.19),

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cioc} = - \int W(\vec{k}, \vec{k}') [f_1(\vec{k}') - f_1(\vec{k})] d\Omega = \frac{f_1(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}, \quad (3.20)$$

de unde timpul de relaxare  $\tau(\vec{k})$  este

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \int W(\vec{k}', \vec{k}) \left[ 1 - \frac{f_1(\vec{k}')}{f_1(\vec{k})} \right] d\Omega. \quad (3.21)$$

Se constată că descrierea proceselor de împrăștiere cu ajutorul timpului de relaxare este posibilă, dacă ciocnirile particulelor sunt elastice și are loc o împrăștiere cu aceeași probabilitate a purtătorilor de sarcină pe toate direcțiile. Ciocnirile se consideră elastice, dacă energia cinetică totală a particulelor, care se ciocnesc, după ciocnire nu se schimbă. În cazul ciocnirilor elastice se va modifica numai direcția lui  $\vec{k}$ , iar mărimea rămâne constantă, deci  $k' = k$ , iar  $E' = E$ .

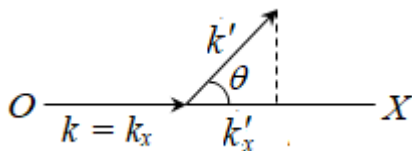


Fig. 3.2. Schimbarea direcției de mișcare a electronului la împrăștiere.

Considerăm că până la ciocnire purtătorul de sarcină având vectorul de undă  $\vec{k}$  se mișcă de-a lungul axei  $OX$  (Fig. 3.2). În urma ciocnirii el își schimbă direcția cu

unghiul  $\theta$ . Luând în considerare proiecțiile vectorului de undă pe axa  $OX$ , obținem:

a) până la ciocnire

$$k_x = k, \quad (3.22)$$

b) după ciocnire, luând în considerare că  $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ , obținem

$$k_x' = k' \cos \theta = k \cos \theta. \quad (3.23)$$

Atunci raportul

$$\frac{k_x'}{k_x} = \frac{k \cos \theta}{k} = \cos \theta. \quad (3.24)$$

Funcțiile de distribuție variază numai în dependență de vectorul de undă, de aceea se poate scrie că

$$\frac{f_1(k_x')}{f_1(k_x)} = \cos \theta$$

sau pentru toate direcțiile

$$\frac{f_1(k')}{f_1(k)} = \cos \theta. \quad (3.25)$$

La împrăștiere, purtătorul de sarcină se poate abate de la direcția inițială cu orice unghi de la 0 până la  $\pi$  și expresia finală pentru timpul de relaxare este

$$\frac{1}{\tau} = \int_0^{\pi} (W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - \cos \theta]) d\Omega. \quad (3.26)$$

*Ecuția lui Boltzmann descrie procesele de transport în semiconductori prin variația funcției de distribuție datorită acțiunii forțelor exterioare și interioare. La analiza proceselor de transport problema de bază constă în calculul funcției de distribuție de echilibru, cu ajutorul căreia pot fi determinate toate mărimile care caracterizează efectele cinetice. Deci, problema se reduce la găsirea timpului de relaxare al procesului studiat, sau, cu alte cuvinte, al mecanismului de împrăștiere.*

### 3.3. Împrăștierea pe impuritățile ionizate

Orice ion de impuritate în semiconductor provoacă în jurul său un câmp electric. Sub influența acestui câmp purtătorul de sarcină se abate de la direcția sa inițială. Purtătorul se abate cu atât mai mult cu cât mai mică este viteza sa și cu cât mai aproape de ionul de impuritate el trece.

Înainte de a obține expresia pentru  $\pi(T, N, m_n)$  vom introduce noțiunea de secțiune efectivă de împrăștiere  $\sigma$ . Considerăm că electronii liberi, a căror concentrație este  $n$ , se mișcă într-o anumită direcție cu viteza  $v_0$ . Produsul  $nv_0$  exprimă densitatea fluxului de electroni, adică numărul de electroni ce trec într-o unitate de timp printr-o unitate de secțiune. Presupunem că în calea acestor electroni într-o unitate de volum se află  $N_I$  centri identici de împrăștiere și fiecare dintre aceștia se caracterizează printr-o secțiune efectivă  $\sigma$ . Practic, acesta este spațiul din jurul ionului  $N_I$ , în care are loc împrăștierea electronilor. Numărul de electroni, care sunt împrăștiți de aceste  $N_I$  centre, într-o unitate de timp, în acest spațiu poate fi exprimat ca

$$n_1 = \sigma N_I n v_0, \quad (3.27)$$

de unde 
$$\sigma = \frac{n_1 / N_I}{n v_0}, \quad (3.28)$$

care este determinată de raportul dintre numărul de electroni împrăștiți de un singur centru într-o unitate de timp ( $n_1/N_I$ ) și densitatea totală a fluxului de electroni ( $nv_0$ ).

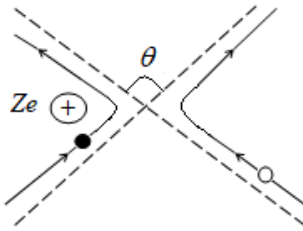
Pe de alta parte, dacă vom nota prin  $W$  probabilitatea de împrăștiere a unei singure particule într-o unitate de timp, atunci numărul de electroni împrăștiți va fi

$$n_1 = Wn. \quad (3.29)$$

Egalând (3.27) și (3.29) determinăm probabilitatea procesului de împrăștiere

$$W = \sigma N_I v_0. \quad (3.30)$$

Să analizăm mișcarea electronului în câmpul ionului pozitiv cu sarcina  $Ze$ . În rezultatul interacțiunii dintre electron și ion traiectoria



**Fig. 3.3.** Împrăștierea electronului și a golului pe ionul pozitiv.

mișcării purtătorului de sarcină se modifică. În Figura 3.3 este prezentat procesul de împrăștiere a electronului și a golului. În câmpul ionului pozitiv se mișcă un electron (un gol) și în rezultatul acțiunii forțelor de atracție (respingere) traiectoria electronului (golului) se schimbă cu un unghi  $\theta$ . Spațiul din jurul ionului în care are loc împrăștierea electronilor este descris de formula lui Rutherford

$$\sigma(\theta) = \left( \frac{Ze^2}{2\varepsilon m_n v_o^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (3.31)$$

unde  $m_n$  este masa efectivă a electronului,  $v_o$  – viteza mișcării electronului,  $\varepsilon$  – constanta dielectrică. Analiza ecuației (3.31) arată că împrăștierea purtătorilor de sarcină pe ionii de impurități este un proces anizotrop, predomină procesele de împrăștiere sub un unghi  $\theta$  mic.

Ionul se află în nodul rețelei cristaline, are masa de  $10^4$  ori mai mare decât masa electronului și este practic imobil. De aceea, se poate presupune că energia electronului și a ionului în procesul de împrăștiere nu se schimbă, deci avem un proces de ciocnire elastică. Atunci, la analiza procesului de împrăștiere putem folosi formula pentru timpul de relaxare

$$\frac{1}{\tau(k)} = \int_0^\pi W(\vec{k}, \vec{k}') (1 - \cos \theta) d\Omega. \quad (3.32)$$

Înlocuim  $W(\vec{k}, \vec{k}')$  cu ecuația (3.30) și, luând în considerare că unghiul solid  $d\Omega$  este

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta, \quad (3.33)$$

obținem

$$\frac{1}{\tau(k)} = \int_0^{\pi} v_0 \sigma(\theta) N_I (1 - \cos \theta) 2\pi \sin \theta d\theta . \quad (3.34)$$

Dacă limita de integrare de jos va fi egală cu 0, atunci pentru  $\theta$  egal cu zero, conform formulei lui Rutherford, secțiunea de împrăștiere trebuie să tindă la infinit și integrala devine divergentă. Însă, secțiunea de împrăștiere a electronilor pe ionii de impurități are o mărime finită, de aceea la determinarea lui  $\tau$  integrarea se va efectua nu de la 0, dar de la un careva unghi  $\theta_{min}$  până la  $\pi$ .

În corelație cu  $\theta_{min}$  există și o anumită valoare a distanței dintre traiectoria electronului și centrul de împrăștiere  $b_{max}$ , începând cu care are loc împrăștierea particulelor la micșorarea acesteia. Dacă ionii de impuritate sunt repartizați în cristal uniform la distanța  $d$  și concentrația lor este  $N_I$ , atunci distanța dintre ioni va fi aproximativ egală cu  $N_I^{-1/3}$ . Într-adevăr,

$$N_I \sim \frac{n_I}{V} = \frac{n_I}{d^3} ,$$

de unde

$$d = \left( \frac{n_I}{N_I} \right)^{1/3} \quad (3.35)$$

Regiunea de acțiune a unui singur ion va fi egală cu o jumătate din această distanță, deci

$$b_{max} = \frac{1}{2} d = \frac{1}{2} N_I^{-1/3} . \quad (3.36)$$

Distanței  $b_{max}$  îi corespunde unghiul  $\theta_{min}$ , care poate fi determinat din relația

$$b_{max} = \frac{Ze^2}{\varepsilon m_n v_0^2} \text{ctg} \frac{\theta_{min}}{2} ,$$

de unde

$$\text{ctg} \frac{\theta_{min}}{2} = \frac{b_{max} \varepsilon m_n v_0^2}{Ze^2} = \frac{1}{2} N_I^{-1/3} \frac{\varepsilon m_n v_0^2}{Ze^2} . \quad (3.37)$$

Cunoscând limitele de integrare se poate determina timpul de relaxare

$$\frac{1}{\tau(k)} = 2\pi v_0 N_I \left( \frac{Ze^2}{2\varepsilon m_n v_0^2} \right)^2 \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \sin \theta (1 - \cos \theta) d\theta. \quad (3.38)$$

Mai întâi vom găsi soluția integralei

$$\int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \sin \theta (1 - \cos \theta) d\theta, \quad (3.39)$$

folosind unele relații trigonometrice

$$\sin \theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}; \quad 1 - \cos \theta = 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

Atunci integrala (3.39) va fi egala cu

$$\begin{aligned} \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} d\theta &= 4 \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta = \\ &= 8 \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin \frac{\theta}{2}} d\left(\frac{\theta}{2}\right) = 8 \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} d\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned}$$

și, luând în considerare că  $\int \operatorname{ctg} x dx = \ln|\sin x|$ , obținem:

$$8 \ln \left| \sin \frac{\theta}{2} \right| \Big|_{\theta_{\min}}^{\pi} = -8 \ln \left| \sin \frac{\theta_{\min}}{2} \right| = 4 \ln \left( \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta_{\min}}{2}} \right) = 4 \ln \left( 1 + \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta_{\min}}{2} \right). \quad (3.40)$$

Atunci expresia (3.38) pentru timpul de relaxare este

$$\frac{1}{\tau_I} = \frac{2\pi N_I}{v_0^3} \left( \frac{Ze^2}{\varepsilon m_n} \right)^2 \ln \left[ 1 + \left( \frac{\varepsilon m_n v_0^2}{2N^{1/3} Ze^2} \right)^2 \right] \quad (3.41)$$

$$\tau_I = \frac{v_0^3 \varepsilon^2 m_n^2}{2\pi Z^2 e^4 N_I \ln \left[ 1 + \left( \frac{1}{2} \frac{\varepsilon m_n v_0^2}{N^{1/3} Ze^2} \right)^2 \right]}. \quad (3.42)$$

Formula (3.42) este formula lui Conwell – Weisskopf pentru timpul de relaxare în cazul împrăștierei pe impuritățile ionizate. Pentru

obținerea dependenței timpului de relaxare de temperatură vom lua în considerare că viteza

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m_n}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 3k_0T}{m_n \cdot 2}} = \sqrt{\frac{3k_0}{m_n}} T^{1/2}. \quad (3.43)$$

Atunci timpul de relaxare este

$$\tau_I = \tau_{0I} \frac{T^{3/2}}{N_I}, \quad (3.44)$$

unde

$$\tau_{0I} = \frac{(3k_0)^{3/2} \varepsilon^2 \sqrt{m_n}}{2\pi Z^2 e^4 \ln \left[ 1 + \left( \frac{\varepsilon m_n^* v_0^2}{2N^{1/3} Z e^2} \right)^2 \right]} \quad (3.45)$$

este o mărime constantă pentru materialul dat.

*În cazul împrăștiirii pe impurități ionizate  $\tau$  este proporțional cu  $T^{3/2}$  și invers proporțional cu  $N_I$ , deci împrăștierea este mai mare când temperatura este joasă, iar concentrația ionilor de impurități este mare. Într-adevăr, dacă temperatura cristalului este mare, atunci viteza termică a electronului este mare și el trece pe lângă ionul de impuritate, practic, fără a interacționa, deoarece energia cinetică a electronului este cu mult mai mare decât energia de interacțiune.*

### 3.4. Împrăștierea pe impuritățile neutre

Împrăștierea pe impuritățile neutre, deci pe atomii de impurități neionizate, este cu mult mai slabă decât împrăștierea pe impuritățile ionizate. Însă, la temperaturi joase, când atomii de impurități încă nu sunt ionizați și concentrația impurităților neutre este cu mult mai mare decât concentrația impurităților ionizate, acest mecanism de împrăștiere joacă un rol destul de esențial.

Împrăștierea electronilor pe impuritățile neutre poate fi realizată în două moduri:

- a) cu ajutorul ciocnirilor elastice directe;
- b) în urma interacțiunii de schimb între electronul liber și electronul atomului de impuritate.

Obținerea expresiei pentru timpul de relaxare în cazul acestei împrăștieri este foarte complicată. De aceea, de obicei se presupune că împrăștieria purtătorilor de sarcină pe impuritățile neutre este identică cu împrăștieria electronilor lenți pe atomii de hidrogen, care se află în mediu cu constanta dielectrică  $\varepsilon$ . În acest caz timpul de relaxare este

$$\tau_N = \frac{e^2 m^{*2}}{20 \varepsilon \hbar} \frac{1}{N_N}, \quad (3.46)$$

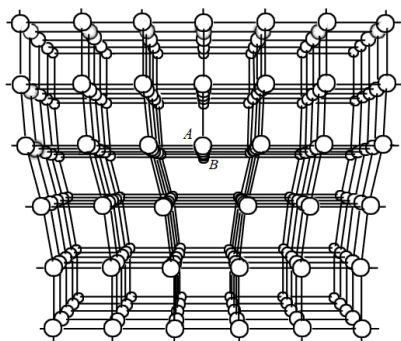
unde  $N_N$  este concentrația impurităților neutre.

În cazul împrăștierii pe impuritățile neutre timpul de relaxare nu depinde nici de energie, nici de temperatură, ci este definit numai de concentrația impurităților  $N_N$ . Împrăștieria este cu atât mai mare ( $\tau$  este mai mic) cu cât mai mare este  $N_N$ .

Însă, în semiconductori puternic dopați acest tip de împrăștierie se neglijează, deoarece chiar la temperaturi foarte joase există multe impurități ionizate.

*Calcululele arată că în semiconductori împrăștieria pe impuritățile neutre devine mai importantă decât împrăștieria pe impurități ionizate la temperaturi mai mici ca 100 K și la concentrații de impurități mai mici de  $10^{23} \text{ m}^{-3}$ .*

### 3.5. Împrăștieria pe dislocații



**Fig. 3.4.** Dislocația de margine.

Împrăștieria purtătorilor de sarcină poate avea loc și pe defectele rețelei cristaline, de exemplu, dislocații (Fig. 3.4). Defectul rețelei constă în apariția în rețeaua cristalină a unui semiplan, iar atomii ce se află la marginea acestuia au legături nesaturate (linia AB). Aceste legături nesaturate din punct de vedere electric formează o linie de acceptori. Prin urmare,



împrăștierea purtătorilor pe dislocații este determinată atât de deformarea rețelei cristaline, cât și de interacțiunea forței electrostatice a lui Coulomb cu sarcina electrică din jurul dislocațiilor.

Vom considera un semiconductor de tip-*n*. În acest caz centrii acceptori ai dislocației pot „captura” electronii de pe atomii vecini și dislocația devine o linie de sarcină negativă. Această linie de sarcină negativă determină apariția în jurul ei a unei regiuni cilindrice de sarcină spațială pozitivă, deoarece atomii care se află în vecinătate cu dislocația pot da câte un electron marginii *AB* de dislocație. Deci, fiecare dislocație poate fi considerată un cilindru încărcat electric, având raza *R*. Mărimea *R* depinde de concentrația electronilor în semiconductorul de tip-*n*. Electronii liberi, interacționând în mișcarea lor cu sarcina negativă a dislocației, sunt respinși de ultima, deci sunt împrăștiati. Această împrăștiere este anizotropă și maximă când electronul se deplasează perpendicular față de linia dislocației, și este neglijabilă când deplasarea se face de-a lungul liniei dislocației.

Conform teoriei lui Read, timpul de relaxare în cazul împrăștierii pe „cilindrii” cu raza *R* este egal

$$\tau_D = A \frac{1}{RN_D E^{1/2}} \approx A \frac{1}{RN_D} T^{-1/2}, \quad (3.47)$$

unde  $N_D$  – concentrația dislocațiilor pe o unitate de suprafață,  $E$  – energia electronilor incidenti. *Rezultă că împrăștierea pe dislocații este cu atât mai mare, cu cât mai mari sunt  $N_D$  și temperatura, iar în comparație cu alte mecanisme de împrăștiere acest tip de împrăștiere nu este suficient de sesizabil.*

În semiconductorul de tip-*p* dislocațiile nu pot „captura” electronii de pe atomii vecini, deoarece aceștia, înșiși, au lipsă de electroni. În acest caz, dislocațiile nu sunt înconjurate de o sarcină spațială și, ca urmare, *împrăștierea pe dislocații se datorează numai deformării rețelei cristaline.*

### 3.6. Împrăștierea pe defectele punctiforme

Cristalul poate conține un careva număr de defecte punctiforme proprii  $N_p$ , prin care se subînțeleg în primul rând defectele Schottky și defectele Frenkel. Defectele Frenkel apar atunci când atomul părăsește nodul rețelei cristaline și se oprește în spațiul dintre nodurile rețelei. Defectele Schottky au loc în cazul când atomul părăsind nodul rețelei se mișcă spre suprafața cristalului, unde și rămâne. Concentrația acestor defecte depinde de mai mulți factori, printre care temperatura este cea mai importantă. Dependența concentrației defectelor punctiforme de temperatură este exponențială:

$$N_p \approx \exp\left(-\frac{E_f}{k_0T}\right), \quad (3.48)$$

unde  $E_f$  – energia de formare a defectului punctiform.

În acest caz timpul de relaxare este descris de următoarea formulă empirică:

$$\tau \approx A \frac{T^{-1/2}}{N_p}. \quad (3.49)$$

Probabilitatea acestui tip de împrăștiere crește odată cu creșterea temperaturii.

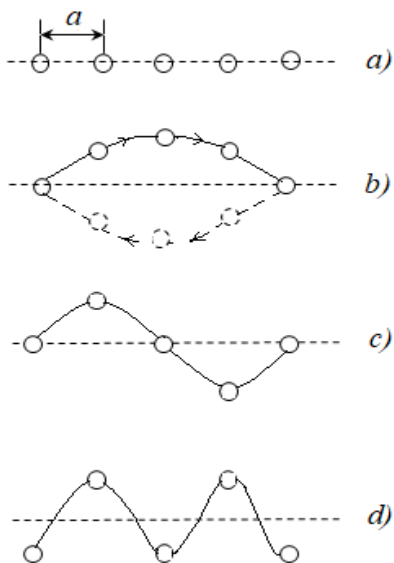
*Împrăștierea pe defectele punctiforme este cu atât mai mare, cu cât mai mare este concentrația defectelor și temperatura.*

### 3.7. Oscilațiile termice ale rețelei cristaline

Atomii care se află în nodurile rețelei cristaline efectuează oscilații termice în jurul poziției lor de echilibru și amplitudinea acestor oscilații crește odată cu creșterea temperaturii. Oscilațiile termice deteriorează periodicitatea strictă a rețelei și duc la împrăștierea purtătorilor de sarcină pe aceste imperfecțiuni. Atomii rețelei cristaline sunt puternic legați între dâșii, de aceea oscilațiile unei particule imediat sunt transmise la o altă particulă și în cristal apare o mișcare colectivă a atomilor. Caracterul mișcării acestora este foarte complex,

de aceea pentru rezolvarea problemei oscilațiilor atomilor în nodurile rețelei se folosesc diferite aproximații și modele. Unul dintre cele mai simple este modelul oscilațiilor normale ale sistemului. În acest caz, în schimbul descrierii oscilațiilor individuale ale fiecărei particule în parte, se descrie mișcarea lor colectivă în cristal. Această mișcare colectivă poartă denumirea de *oscilație normală* a rețelei. Numărul oscilațiilor normale, care pot apărea în cristal, este egal cu numărul gradului de libertate al particulelor din cristal, adică este egal cu  $3N$ , unde  $N$  este numărul de atomi în cristal. Oscilațiile normale pot fi considerate unde staționare în corpul solid.

Pentru început vom considera un model simplu care reprezintă un lanț de atomi identici și echidistanți, situați la distanța  $a$ , egală cu constanta rețelei, unul de altul. Atomii au posibilitatea de a efectua oscilații transversale, adică perpendiculare pe direcția de propagare a undelor.



**Fig. 3.5.** Undele staționare în lanț de atomi: a) – lanț cu lungimea  $L$ ; b) –  $\lambda = 2L$ ; c) –  $\lambda = L$ ; d) –  $\lambda = 2a$ .

a) Lungimea lanțului este  $L$  (Fig. 3.5,  $a$  – lanțul este în stare de echilibru).

b) Dacă capetele lanțului sunt fixate, atunci oscilației de bază, cu cea mai mare lungime de undă  $\lambda_{max}$ , îi corespunde apariția unei unde staționare cu noduri la capetele lanțului și

$$\lambda_{max} = 2L. \quad (3.50)$$

Unda staționară (Fig. 3.5, b) apare în cazul când două unde coerente cu aceeași amplitudine se propagă una spre cealaltă. Suprapunerea acestor unde se petrece de fiecare dată, când unda cade pe o suprafață perpendiculară direcției de

propagare care reflectă această undă. În cazul dat, drept suprafață reflectoare servesc capetele lanțului și întreaga lungime a lanțului constituie jumătate din lungimea de undă. Curba de sus pe desen (Fig. 3.5, *b*) este o jumătate de undă, cea de jos – cealaltă jumătate.

c) Următoarea undă staționară cu o lungime de undă mai mică va corespunde unei unde cu noduri nu doar la capetele lanțului, dar și în mijlocul lui (Fig. 3.5, *c*)

$$\lambda = L. \quad (3.51)$$

d) Este evident că unda staționară cu cea mai mică lungime de undă  $\lambda_{min}$  (Fig. 3.5, *d*), care se poate forma în acest lanț, este

$$\lambda_{min} = 2a. \quad (3.52)$$

Însă, lungimii de undă minime îi corespunde o frecvență de undă maximă  $\omega_{max}$ . Obținem:

$$\lambda = vT = v \frac{1}{f} = \frac{2\pi v}{2\pi f} = \frac{2\pi v}{\omega}, \quad (3.53)$$

unde  $v$  este viteza de propagare a undei în cristal,  $T$  – perioada oscilațiilor,  $f$  – frecvența oscilațiilor și  $\omega = 2\pi f$  – frecvența ciclică.

Rezultă că 
$$\omega = \frac{2\pi v}{\lambda} \quad (3.54)$$

și  $\omega_{max}$  este egală cu

$$\omega_{max} = \frac{2\pi v}{\lambda_{min}} = \frac{2\pi v}{2a} = \frac{\pi}{a} v. \quad (3.55)$$

Pentru caracterizarea proceselor oscilatoare este comod de a introduce noțiunea vectorului de undă  $\vec{q}$ , a cărui direcție coincide cu direcția de propagare a undei, iar modulul este egal cu

$$q = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\omega}{2\pi v} = \frac{\omega}{v}. \quad (3.56)$$

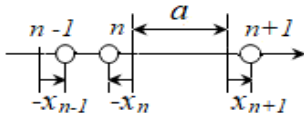
Atunci frecvența oscilațiilor termice ale rețelei cristaline este

$$\omega = vq. \quad (3.57)$$

Vom determina mărimea vectorului de undă, pentru care frecvența oscilațiilor termice într-un lanț de atomi identici devine maximală. Din (3.56) și (3.55) obținem

$$q_{\max} = \frac{\omega_{\max}}{v} = \frac{\pi v}{av} = \frac{\pi}{a}, \quad (3.58)$$

ceea ce indică limitele de variație ale vectorului de undă.



**Fig. 3.6.** Deplasarea atomilor din poziția de echilibru.

În stare de echilibru, forța rezultantă de acțiune a tuturor atomilor vecini asupra atomului  $n$  este egală cu zero. Vom analiza cazul când atomii vecini oscilează în faze opuse.

Să notăm prin  $x$  deplasarea atomului  $n$  din poziția de echilibru (Fig. 3.6) și deplasările la dreapta vor fi considerate pozitive. La deplasare arbitrară, forța  $F_n$ , ce acționează asupra atomului  $n$  este proporțională cu variația distanțelor dintre atomi în stare de echilibru

$$F_n = \beta(x_{n-1} - x_n) - \beta(x_n - x_{n+1}), \quad (3.59)$$

unde  $\beta$  este coeficientul de rigiditate. Ecuația de mișcare a atomului  $n$  cu masa  $m$  este

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = F_n = \beta(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n). \quad (3.60)$$

Soluția ecuației (3.59) o vom determina sub forma

$$x_n = X e^{i(\omega t + nqa)}, \quad (3.61)$$

unde  $X$  este amplitudinea maximă a oscilațiilor. Atunci

$$\frac{d x_n}{dt} = X e^{i(\omega t + nqa)} \cdot i\omega, \quad (3.62)$$

$$\frac{d^2 x_n}{dt^2} = X e^{i(\omega t + nqa)} \cdot (i\omega)^2. \quad (3.63)$$

Înlocuind (3.61) și (3.63) în (3.60), obținem

$$m X e^{i(\omega t + nqa)} \cdot (i\omega)^2 = \beta \left( X e^{i[\omega t + (n+1)qa]} + X e^{i[\omega t + (n-1)qa]} - 2X e^{i(\omega t + nqa)} \right) \quad (3.64)$$

sau

$$\begin{aligned} -m\omega^2 &= \beta \left( e^{iqa} + e^{-iqa} - 2 \right), \\ -m\omega^2 &= \beta \left[ \left( e^{\frac{iqu}{2}} \right)^2 - 2e^{iqa} e^{-iqa} + \left( e^{-\frac{iqu}{2}} \right)^2 \right], \\ -m\omega^2 &= \beta \left( e^{\frac{iqu}{2}} - e^{-\frac{iqu}{2}} \right)^2. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Determinăm frecvența ciclică

$$\omega = \pm \left( e^{\frac{iqu}{2}} - e^{-\frac{iqu}{2}} \right) \sqrt{\frac{\beta}{m}}. \quad (3.66)$$

Luând în considerare că funcția sinusoidală poate fi reprezentată ca

$$\sin y = \left( \frac{e^{iy} - e^{-iy}}{2} \right),$$

obținem

$$\omega = \pm 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}} \sin\left(\frac{qa}{2}\right). \quad (3.67)$$

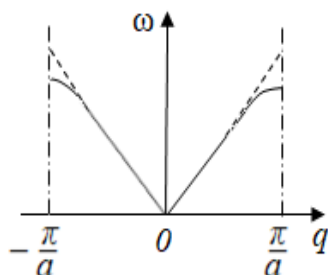


Fig. 3.7. Graficul de dispersie.

Dependența frecvenței oscilațiilor rețelei cristaline (oscilațiilor normale) de vectorul de undă conform expresiei (3.67) este prezentată în Figura 3.7. Acest grafic poartă denumirea *grafic de dispersie*. Menționăm că frecvența oscilațiilor atomului  $n$  nu depinde de numărul de ordine al atomului, ceea ce indică că toți atomii din lanț vibrează cu aceleași frecvențe. Din grafic se observă că frecvența oscilațiilor în lanțul

unidimensional al atomilor este limitată de valoarea maximă (linia continuă)

$$\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}, \quad (3.68)$$

care și definește frecvența proprie de oscilație a atomilor.

Dacă  $\lambda \gg a$ , oscilațiile de frecvențe joase ale unui lanț liniar de atomi pot fi reprezentate sub forma unei unde sonore  $\sim e^{i(\omega t + qx)}$ , în care coordonata discretă  $na$  este înlocuită cu coordonata continuă  $x$ . În acest caz, atomii vecini oscilează practic cu aceeași amplitudine și defazaj neglijabil.

Să cercetăm cazul când lanțul conține două tipuri de atomi, cu masele  $M$  și  $m$  ( $M > m$ ), situați la distanța  $a$  unul față de celălalt. În acest lanț sunt posibile două tipuri de oscilații:

a) Oscilații similare cazului când lanțul este alcătuit din atomi identici și atomii vecini oscilează *în aceeași fază*. Așa tip de oscilații au loc la propagarea undelor elastice, a căror viteză de propagare este egală cu viteza sunetului  $v_{sun}$ . Aceste oscilații includ în sine tot spectrul de oscilații acustice cu frecvențele de până la  $\sim 10^{13}$  Hz, de aceea ele poartă denumirea de *oscilații acustice* cu frecvența

$$\omega_{ac} = v_{sun} q. \quad (3.69)$$

În cazul oscilațiilor acustice atomii rețelei cristaline se mișcă sincron și în orice moment de timp deplasarea de la poziția lor de echilibru este aceeași pentru toți atomii. Distanța dintre atomi nu se schimbă, ci se deplasează numai centrul de greutate pentru fiecare pereche de atomi.

Lungimea de undă minimă în cazul lanțului cu două tipuri de atomi este

$$\lambda_{\min} = 4a, \quad (3.70)$$

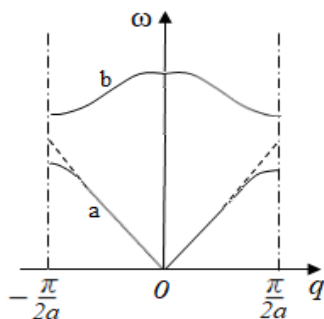
căreia îi corespunde 
$$q_{\max} = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi}{2a}. \quad (3.71)$$

Graficului de dispersie corespunde intervalului vectorului de undă  $-\frac{\pi}{2a} \leq q \leq \frac{\pi}{2a}$  (Fig. 3.8, a) la granițele căruia frecvența atinge valoarea maximă egală cu

$$\omega_{\max} = \sqrt{\frac{2\beta}{M}}. \quad (3.72)$$

Valoarea minimă a frecvenței oscilațiilor este zero și corespunde mărimilor vectorului de undă

$$q_{\min} = 0 \text{ sau } \pm \frac{n\pi}{a}. \quad (3.73)$$



**Fig. 3.8.** Graficele de dispersie în cazul oscilațiilor acustice (a) și optice (b).

b) Al doilea tip de oscilații îl obținem în cazul când atomii vecini oscilează în faze opuse. Aceste oscilații pot fi considerate oscilații a două subrețele de atomi diferiți, care vibrează una în raport cu alta. Distanța dintre atomii vecini, pentru acest fel de oscilații, se schimbă, însă centrul de greutate pentru fiecare pereche de atomi rămâne neschimbat. Dacă celula elementară a cristalului va fi formată

din ioni, atunci oscilațiile lor în antifază vor duce la schimbarea momentului dipolului electric, prin urmare – la absorbție sau emisie de radiație infraroșie. De aceea, acest tip de oscilații poartă denumirea de *oscilații optice*.

Pentru  $q = 0$  frecvența oscilațiilor optice  $\omega_{opt}$  (Fig. 3.8, b) are o valoare maximă egală cu

$$\omega_{\max} = \sqrt{2\beta \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right)}. \quad (3.74)$$

Odată cu creșterea lui  $q$  frecvența  $\omega_{opt}$  se micșorează și pentru  $q = \pm \frac{\pi}{2a}$  atinge valoarea minimă egală cu



$$\omega_{\min} = \sqrt{\frac{2\beta}{m}}. \quad (3.75)$$

Apoi  $\omega_{opt}$  crește până la valoarea inițială (pentru  $q = \pm \frac{n\pi}{a}$ ).

Subliniem că pe tot intervalul de variație a vectorului de undă frecvența oscilațiilor optice  $\omega_{opt}$  este mai mare decât  $\omega_{ac}$  și se schimbă neesențial odată cu creșterea lui  $q$ . Cea mai mare deosebire dintre mărimile  $\omega_{ac}$  și  $\omega_{opt}$  are loc când  $q=0$ . Apariția oscilațiilor optice nu se datorează doar prezenței a două tipuri de atomi în rețea. Ele pot apărea și în cazul unei rețele de atomi identici, când celula elementară a acestei rețele conține doi atomi. Oscilațiile optice în acest caz apar în rezultatul oscilațiilor a două subrețele identice.

*Deosebim două tipuri de oscilații termice ce pot apărea într-o rețea cristalină: acustice și optice. Graficele de dispersie caracterizează spectrul acestor oscilații în cristal.*

### **3.8. Spectrul oscilațiilor normale ale rețelei. Fononii**

Una dintre problemele de bază ale teoriei oscilațiilor rețelei cristaline este problema repartizării oscilațiilor normale după frecvență. Dacă lungimea lanțului de atomi este  $L$ ,  $N$  – numărul de atomi în lanț, atunci lungimea de undă ce poate apărea în acest lanț va fi

$$\lambda = \frac{2L}{n}, \quad (3.76)$$

unde  $n$  este un număr întreg care se schimbă de la 1 până la  $N-1$  și reprezintă numărul oscilațiilor normale. Numărul oscilațiilor normale pentru cazul tridimensional este

$$Z = (n)^3 = \left(\frac{2L}{\lambda}\right)^3, \quad (3.77)$$

unde  $L^3$  este volumul cristalului. Obținem

$$Z = \frac{8V}{\lambda^3}. \quad (3.78)$$

La efectuarea calculelor exacte, pentru  $Z$  se obține o valoare puțin diferită:

$$Z = \frac{4\pi V}{\lambda^3} \quad (3.79)$$

și, conform (3.53), numărul oscilațiilor normale în cristal este

$$Z = \frac{4\pi V \omega^3}{8\pi^3 v^3} = \frac{V \omega^3}{2\pi^2 v^3}. \quad (3.80)$$

Deoarece numărul maximal de oscilații normale, care pot apărea în rețeaua cristalină, este egal cu  $3N$ , atunci putem scrie

$$3N = Z_{\max} = \frac{V \omega_{\max}^3}{2\pi^2 v^3}, \quad (3.81)$$

de unde

$$\omega_{\max} = \left( \frac{6\pi^2 N v^3}{V} \right)^{1/3} = v \left( \frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} = \omega_D. \quad (3.82)$$

Frecvența maximă a oscilațiilor normale se numește *frecvența Debay*  $\omega_D$  și reprezintă un parametru destul de important pentru fiecare substanță.

Orice oscilație normală posedă energie  $E_{nor}$  și impuls  $\vec{P}$ . În teoria oscilațiilor se demonstrează că energia oscilațiilor normale ale rețelei este egală cu energia oscilatorului armonic, care are masa egală cu masa atomilor oscilanți și frecvența egală cu frecvența oscilațiilor normale. Acest tip de oscilatori se numesc *oscilatori normali*. Energia oscilației normale  $i$  cu frecvența  $\omega_i$  o vom nota cu  $E_{i\ nor}$ , iar energia oscilatorului – cu  $E_{i\ osc}$ . Atunci energia totală a oscilațiilor normale este egală cu

$$E_{nor} = \sum_{i=1}^{3N} E_{i\ osc}. \quad (3.83)$$

Energia totală a cristalului compus din  $N$  atomi care oscilează este egală cu energia a  $3N$  oscilatori armonici independenți. Este necesar a sublinia că oscilatorul normal nu are nimic comun cu atomul

real decât aceeași masă. Fiecare oscilator reprezintă o oscilație normală a rețelei, la care participă toți atomii cristalului, având frecvența  $\omega$ .

Energia oscilatorului poate fi exprimată ca

$$E_{osc} = \hbar\omega (n + 1/2), \quad (3.84)$$

unde  $n$  este un număr cuantic. Se observă că spectrul energetic al oscilatorului liniar armonic este discret, ceea ce înseamnă că energia oscilațiilor normale ale rețelei la fel va fi discretă și determinată de expresia (3.80). Energia minimală care poate fi absorbită sau emisă de către rețeaua cristalină în urma oscilațiilor termice este egală cu

$$\Delta E_f = \hbar\omega, \quad (3.85)$$

adică este energia unei cuante de căldură, care, analogic cu cuanta de lumină, se numește *fonon*.

Pe de altă parte, energia termică este

$$\Delta E_f = k_0 T. \quad (3.86)$$

Egalăm (3.85) cu (3.86) și vom numi temperatura care corespunde frecvenței Debay – *temperatura Debay*  $\theta_D$

$$k_0 \theta_D = \hbar\omega_D, \quad (3.87)$$

de unde

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_0}. \quad (3.88)$$

Particularitatea temperaturii Debay este că la această temperatură este excitat spectrul întreg de oscilații normale, inclusiv oscilațiile cu frecvența maximă  $\omega_D$ . În continuare, creșterea temperaturii va duce doar la creșterea amplitudinii oscilațiilor și nicidecum la excitarea oscilațiilor cu frecvențe noi. Se consideră că intervalul de temperaturi mai mari decât temperatura Debay este intervalul de temperaturi ridicate, și invers: intervalul temperaturilor mai mici decât  $\theta_D$  este cel de temperaturi joase. Pentru majoritatea corpurilor solide  $\theta_D$  se află în intervalul de la 100 K până la 300 K.

Fononii se supun aceleiași funcții de distribuție ca și fotonii, adică numărul mediu de fononi care au energia  $E_f = \hbar\omega$  este detriminat de funcția de distribuție a lui Boze-Einstein

$$f_{B-E}(E_f) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_0T}} - 1}. \quad (3.89)$$

a) La temperaturi joase și la îndeplinirea inegalității  $\hbar\omega \ll k_0T$ , exponentul poate fi descompus în serie

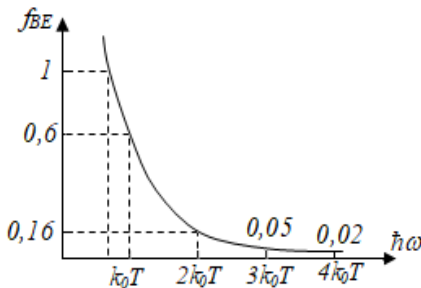
$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_0T}} = 1 + \frac{\hbar\omega}{k_0T} \quad (3.90)$$

și funcția de distribuție se transformă în

$$f_{B-E}(E_f) = \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega}{k_0T} - 1} = \left( \frac{\hbar\omega}{k_0T} \right)^{-1} = \frac{k_0T}{\hbar\omega}. \quad (3.91)$$

b) În domeniul de temperaturi ridicate, când  $\hbar\omega \gg k_0T$ , unitatea de la numitor din (3.89) se neglijează și funcția de distribuție ia forma

$$f_{B-E}(E) = e^{-\frac{\hbar\omega}{k_0T}}. \quad (3.92)$$



**Fig. 3.9.** Probabilitatea existenței fononilor cu energii exprimate în  $k_0T$ .

Vom construi graficul dependenței  $f_{B-E}(E_f)$ , deci  $f_{B-E}(\hbar\omega)$  (Fig. 3.9). Notăm pe axa X valorile lui  $\hbar\omega$  egale cu  $k_0T, 2k_0T, 3k_0T, \dots$  ș.a.m.d. De-a lungul axei Y avem funcția de distribuție. Din grafic se vede că pentru temperatura dată  $T$  probabilitatea că sunt excitate practic toate oscilațiile cu energia până la  $\hbar\omega = k_0T$  (frecvența este

mică și  $\lambda$  va fi mare) este foarte mare. De exemplu, pentru  $\hbar\omega = k_0T$

probabilitatea existenței acestor fononi este  $f_{B-E}(\hbar\omega) = 0,6$ . Odată cu creșterea frecvenței oscilațiilor rețelei cristaline probabilitatea excitării se micșorează brusc și pentru  $\hbar\omega = 2k_0T$ ,  $f_{B-E}(\hbar\omega) = 0,16$ . De aici rezultă că oscilații cu frecvențe înalte practic nu există și în spectrul oscilațiilor termice ale rețelei cristaline predomină oscilațiile cu lungimi de undă mari.

*Temperatura Debay este un parametru important al substanței, deoarece la această temperatură este excitat întregul spectru al oscilațiilor termice ale rețelei cristaline și creșterea în continuare a temperaturii duce doar la creșterea amplitudinii acestora.*

*Probabilitatea de excitare a fononilor cu energii de până la  $k_0T$  este cu mult mai mare decât probabilitatea de excitare a fononilor cu energii mai mari, ceea ce înseamnă că în spectrul oscilațiilor termice predomină oscilațiile cu lungime de undă mare.*

### **3.9. Timpul de relaxare în cazul împrăștierii pe oscilațiile termice ale rețelei**

Interacțiunea electronului cu rețeaua cristalină în timpul împrăștierii poate avea loc în două moduri:

1. Electronul la ciocnire cu rețeaua cristalină transmite o parte de energie rețelei, ceea ce înseamnă că până la ciocnire energia electronului a fost mai mare decât energia rețelei cristaline. În rezultatul acestui proces de împrăștiere, care se numește proces de *emisie*, apare un fonon cu energia  $\hbar\omega$ , respectiv energia rețelei crește.

2. La interacțiune cu rețeaua cristalină electronul primește o porțiune de energie  $\hbar\omega$  de la rețea și, drept rezultat, numărul fononilor se micșorează cu o unitate și energia rețelei se micșorează cu  $\hbar\omega$ . Acest proces se numește *absorbție*.

Prin urmare, în ambele cazuri în timpul ciocnirii electronului cu rețeaua cristalină are loc un schimb de energie și un cvasiimpuls între electron și rețea.

Procesele în urma cărora are loc apariția sau dispariția unui singur fonon se numesc *procese monofononice*. Însă, pot avea loc și procese în urma cărora se „nasc” sau „dispar” mai mulți fononi; aceste procese se numesc *procese multifononice*.

Fie că până la ciocnire electronul avea vectorul de undă  $\vec{k}$  și energia  $E(\vec{k})$ . După ciocnire vectorul de undă a electronului devine egal cu  $\vec{k}'$ , iar energia –  $E'(\vec{k}')$ . Fononul care apare sau dispare în urma ciocnirilor are energia  $\hbar\omega$  și cvasiimpulsul  $\vec{P} = \hbar\vec{q}$ . La interacțiunea electronului cu fononul se îndeplinesc două legi: legea conservării energiei și legea conservării cvasiimpulsului:

$$E'(k') = E(k) \pm \hbar\omega, \quad (3.93)$$

$$\hbar\vec{k}' = \hbar\vec{k} \pm \hbar\vec{q}, \quad (3.94)$$

sau 
$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q}, \quad (3.95)$$

unde semnul “+” este pentru cazul procesului de absorbție și semnul “–” pentru emisie.

Vom analiza două cazuri: împrăștierea pe fononii acustici și împrăștierea pe fononii optici.

*a). Împrăștierea pe fononii acustici*, când în nodurile rețelei cristaline se află atomi neutri.

Considerăm că împrăștierea este izotropă pentru cristalul cu simetrie cubică, deci suprafețele izoenergetice sunt sferice. Atunci legea conservării energiei în conformitate cu (3.93) are următoarea formă:

$$\frac{\hbar^2\vec{k}'^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m_n} \pm \hbar\omega_{ac}, \quad (3.96)$$

iar frecvența fononului acustic este egală cu

$$\omega_{ac} = v_{sun}q. \quad (3.97)$$

Înlocuim  $\omega_{ac}$  și  $k'$  din (3.95) în formula (3.96) și obținem:

$$\frac{\hbar^2(\vec{k} \pm \vec{q})^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m_n} \pm \hbar v_{sun}q, \quad (3.98)$$

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m_n} \pm \frac{2\hbar^2(\vec{k}\vec{q})}{2m_n} + \frac{\hbar^2q^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2k^2}{2m_n} \pm \hbar v_{sun}q. \quad (3.99)$$

Produsul scalar  $(\vec{k}\vec{q}) = kq \cos \theta$ , unde  $\theta$  este unghiul dintre  $\vec{k}$  și  $\vec{q}$ . Obținem:

$$\pm \frac{\hbar k \cos \theta}{m_n} + \frac{\hbar q}{2m_n} = \pm v_{sun}. \quad (3.100)$$

Rezolvăm ecuația (3.100) în raport cu  $q$ :

$$\pm 2\hbar k \cos \theta + \hbar q = \pm 2m_n v_{sun}$$

$$q = \pm \frac{2m_n v_{sun}}{\hbar} \mp 2k \cos \theta. \quad (3.101)$$

Mai întâi vom evalua și vom compara mărimile termenilor din partea dreaptă a ecuației (3.101). Considerând că energia electronului este  $E \approx k_0 T$ , determinăm raportul

$$\frac{2m_n v_{sun}}{\hbar 2k} = \frac{m_n v_{sun}}{\hbar k} = \frac{m_n v_{sun}}{P} = \frac{m_n v_{sun}}{\sqrt{2m^* E}} = \sqrt{\frac{m_n^2 v_{sun}^{*2}}{2m_n k_0 T}} = \sqrt{\frac{m_n v_{sun}^2}{2k_0 T}}. \quad (3.102)$$

Mărimea  $\frac{m_n v_{sun}^2}{2k_0}$  are unitatea de măsură a temperaturii și o vom nota cu  $T_{crit}$ . Vom evalua  $T_{crit}$  considerând că masa efectivă a electronului este egală cu masa electronului liber:

$$T_{crit} = \frac{m_0 v_{sun}^2}{2k_0} = \frac{9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg } (5 \cdot 10^3 \text{ m/s})^2}{2 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}} = 0.82 \text{ K} \approx 1 \text{ K}. \quad (3.103)$$

Obținem că raportul din ecuația (3.102) este egal cu  $\sqrt{\frac{1K}{T}}$  și este o mărime foarte mică pentru orice temperatură mai mare decât  $1K$ . Prin urmare, primul termen din partea dreaptă a ecuației (3.101) poate fi neglijat.

Rezultă că vectorul de undă al fononului este

$$q = \pm 2k \cos \theta \quad (3.104)$$

și valoarea acestuia este minimă când  $\cos \theta = 0$  și maximă când  $\cos \theta = \pm 1$ , și anume:

$$q_{\min} = 0, \quad q_{\max} = |\pm 2k|. \quad (3.105)$$

În consecință, la împrăștiere pe fononii acustici electronul nu interacționează cu toți fononii, ci doar cu acei, al căror vector de undă se află în intervalul  $q$  de la 0 până la  $\pm 2k$ .

Vom determina valoarea vectorului de undă al electronului  $k$  la temperatura camerei, luând în considerare că

$$\hbar k = P = \sqrt{2m_0 E} = \sqrt{2m_0 k_0 T},$$

de unde

$$k = \frac{\sqrt{2m_0 k_0 T}}{\hbar} \approx 8.6 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}. \quad (3.106)$$

Conform (3.105), rezultă că vectorul de undă al fononului  $q$  se schimbă de la 0 până la  $1,62 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$  sau  $\approx 2 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$ .

Energia fononului la temperatura camerei este

$$\hbar \omega_{ac} = \hbar v_{\text{sun}} q \approx 6.6 \cdot 10^{-4} \text{ eV}, \quad (3.107)$$

iar energia electronului la temperatura camerei este

$$E \approx k_0 T = 2.6 \cdot 10^{-2} \text{ eV}. \quad (3.108)$$

Comparând energia fononului cu cea a electronului observăm că  $k_0 T \gg \hbar \omega_{ac}$ ; cu alte cuvinte, energia electronului este cu mult mai mare decât energia fononului. Din acest motiv facem două concluzii:

1. La împrăștierea purtătorilor de sarcină pe fononii acustici rolul de bază îl joacă fononii cu energii cu mult mai mici decât energia electronului sau, altfel spus, predomină împrăștierea pe fononii cu o lungime de undă mare. Din paragraful 3.8 cunoaștem că în cristal predomină fononii cu lungime de undă mare, iar acum noi am demonstrat că împrăștierea are loc anume pe acest tip de fononi.

2. Dacă energia fononului este cu mult mai mică decât energia electronului  $k_0 T \gg \hbar \omega_{ac}$ , atunci în expresia (3.93) energia fononului



$\hbar\omega$  poate fi neglijată, rezultând că la împrăștiere energia electronului nu se schimbă:

$$E(k') = E(k), \quad (3.109)$$

ceea ce arată că procesul de ciocnire a electronului cu un fonon este elastic. În acest caz, pentru timpul de relaxare se poate folosi următoarea formulă:

$$\frac{1}{\tau} = \int_0^\pi W(\vec{k}', \vec{k})(1 - \cos \theta) d\Omega. \quad (3.110)$$

După cum cunoaștem, energia fononului este o valoare discretă; rezultă că și vectorul de undă  $k'$  al electronului (formula (3.95)) la fel este o valoare discretă. Prin urmare, de la integrare se poate trece la sumă:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{k'} (1 - \cos \theta) W(\vec{k}', \vec{k}) \quad (3.111)$$

Calcululele arată că, în cazul împrăștierii pe fononii acustici, pentru timpul de relaxare este valabilă următoarea expresie:

$$\tau_{ac} = \frac{9\pi}{4\sqrt{2}} \frac{\hbar^4 M v_{sun}^2}{C^2 a^3 k_0 m_n} \frac{1}{T^{3/2}}, \quad (3.112)$$

unde  $M$  este masa atomului,  $v_{sun}$  – viteza sunetului în materialul dat,  $a$  – constanta rețelei și  $C$  – constanta care are unitate de măsură a energiei și care caracterizează gradul de interacțiune a electronului cu oscilațiile rețelei.

Mărimile constante pentru materialul dat le vom nota prin coeficientul  $\tau_{0ac}$ , atunci

$$\tau_{ac} = \tau_{0ac} T^{-3/2}. \quad (3.113)$$

În cazul fononilor acustici, odată cu creșterea temperaturii timpul de relaxare se micșorează. Într-adevăr, odată cu creșterea temperaturii crește amplitudinea și frecvența oscilațiilor termice și, ca rezultat, împrăștierea crește.

În ultimul timp, pentru determinarea timpului de relaxare se folosește *teoria potențialului de deformație*, deoarece această teorie ne dă rezultate teoretice apropiate rezultatelor experimentale. În cristalul tridimensional, atomic, cu simetrie cubică, sunt două tipuri de unde elastice: longitudinale și transversale. În primul caz, direcția de propagare a undei coincide cu direcția de oscilare a atomilor din cristal. Undele transversale se propagă pe direcție perpendiculară planului de oscilare a atomilor. Astfel, în cristalul care conține  $s$  atomi în celula elementară trebuie să fie  $2s$  tipuri de unde transversale și  $s$  tipuri de unde longitudinale.

Undele transversale în corpul solid reprezintă niște unde de deformație de decalaj și în cristalul cubic ele nu duc la schimbarea volumului. Undele longitudinale sunt unde de deformație, de întindere și de comprimare, care duc la schimbarea volumului cristalului și la variația distanței dintre atomi. La comprimare are loc micșorarea constantei rețelei, la dilatare – constanta rețelei crește și, ca urmare, are loc o variație a mărimii benzii interzise. Deci, deformația care are loc în rezultatul apariției undelor longitudinale duce la o deplasare ondulatorie a marginilor benzilor de conducție și de valență. La mișcare, electronul interacționează numai cu undele longitudinale ale oscilației termice a rețelei; prin urmare, cauza de bază a împrăștierei este deformația rețelei. De aceea, această metodă poartă denumirea de *metoda potențialului de deformație*.

*b). Împrăștierea pe fononii optici* este cazul când în nodurile rețelei cristaline se află ioni. Împrăștierea electronilor pe fononii optici este mai puternică față de împrăștierea pe cei acustici. La oscilațiile optice ale rețelei cristaline ionii se mișcă în direcții opuse, ceea ce condiționează apariția unui câmp electric sub forma unei unde plane. Oscilațiile optice cu lungime de undă mare se numesc *unde de polarizare*, pe care are loc împrăștierea electronilor. Electronul interacționează cu unda de polarizare și se împrășteie. La ciocnirea electronului cu oscilațiile optice ale rețelei energia fononului optic  $\hbar\omega_{opt}$  poate fi absorbită sau emisă.

Legile conservării impulsului și a energiei au aceeași formă ca și în cazul precedent, pentru fononii acustici:

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (3.114)$$

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \pm \hbar\omega_{opt} \quad (3.115)$$

Însă, la împrăștierea electronilor pe fononi graficul de dispersie nu este liniar (Fig. 3.8, b) și energia fononului rămâne neschimbată. Înlocuim  $k'$  din (3.114) în (3.115):

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \pm \frac{2\hbar^2 kq \cos \theta}{2m_n} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \pm \hbar\omega_{opt} . \quad (3.116)$$

Vom rezolva ecuația pătrată (3.116) în raport cu  $q$ :

$$q^2 \pm 2k \cos \theta \cdot q \mp \hbar\omega_{opt} \frac{2m_n}{\hbar^2} = 0 . \quad (3.117)$$

Soluțiile ecuației (3.117) sunt:

pentru absorbția fononului

$$q_1 = -k \cos \theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \theta + \hbar\omega_{opt} \frac{2m_n}{\hbar^2}} ; \quad (3.118 a)$$

pentru emisia fononului

$$q_2 = +k \cos \theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \theta - \hbar\omega_{opt} \frac{2m_n}{\hbar^2}} . \quad (3.118 b)$$

Vom prezenta energia fononului optic sub o altă formă:

$$\hbar\omega_{opt} = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m_n} , \quad (3.119)$$

unde  $\chi$  este vectorul de undă al electronului, a cărui energie este egală cu energia fononului optic.

Din (3.119) obținem

$$\chi^2 = \hbar\omega_{opt} \frac{2m_n}{\hbar^2} , \quad (3.120)$$

expresie ce coincide cu termenul al doilea de sub radicalul ecuației (3.118). Atunci, soluțiile ecuației (3.117) sunt:

$$q_1 = -k \cos \theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \theta + \chi^2} ; \quad (3.121 a)$$

$$q_2 = +k \cos \theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \theta - \chi^2} . \quad (3.121 b)$$

Să analizăm aceste două soluții în diferite intervale de temperaturi.

a) *Intervalul de temperaturi ridicate*, când  $k_0 T \gg k_0 \theta_D$ . Este cunoscut că temperatura Debay corespunde frecvenței maxime a oscilațiilor ce pot apărea în cristal. Rezultă că în acest interval de temperaturi energia electronului este mai mare decât energia fononului optic:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \gg \hbar \omega_{opt} \quad (3.122)$$

sau, conform (3.119),

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \gg \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m_n} \text{ sau } k \gg \chi . \quad (3.123)$$

Aceasta înseamnă că sub radicalul expresiilor (3.121) al doilea termen  $\chi^2$  poate fi neglijat comparativ cu primul. Atunci obținem:

$$q_1 = -k \cos \theta \pm k \cos \theta , \quad (3.124 a)$$

$$q_2 = k \cos \theta \pm k \cos \theta . \quad (3.124 b)$$

Rezultă că, indiferent de procesul de emisie sau de absorbție,

$$q_{\min} = 0 \text{ și } q_{\max} = |\pm 2k| . \quad (3.125)$$

Comparând acest rezultat cu cazul fononilor acustici (expresia (3.105)) conchidem că în acest interval de temperaturi au loc ciocniri elastice ale electronilor cu fononii optici și pentru determinarea timpului de relaxare se poate folosi expresia (3.110).

După calcule obținem:

$$\tau_{1_{opt}} (T \gg \theta_D) = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \cdot \frac{Ma^3 (\hbar \omega_D)^2}{Z^2 e^4 m_n^{1/2} k_0^{1/2} T^{1/2}} , \quad (3.126)$$

unde  $Z$  este sarcina ionului,  $M$  – masa redusă a ionilor, care este egală

cu  $M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ . Notăm mărimea constantă prin  $\tau_{1\text{opt}}$  și obținem:

$$\tau_{1\text{opt}} \approx \tau_{01} T^{-1/2}. \quad (3.127)$$

Astfel, în regiunea de temperaturi ridicate, odată cu creșterea temperaturii timpul de relaxare se micșorează, dar, totuși, această dependență este mai slabă decât în cazul fononilor acustici.

b) *Intervalul de temperaturi joase*, când  $k_0 T \ll k_0 \theta_D$  sau  $k_0 T \ll \hbar \omega_D$ . Deoarece energia electronului este cu mult mai mică decât energia fononului, la ciocnire poate avea loc doar procesul de absorbție (ecuația (3.121 a)), în rezultatul căruia energia electronului crește, devine de același ordin cu energia fononului și se află în intervalul de la  $\hbar \omega_{\text{opt}}$  până la  $2 \hbar \omega_{\text{opt}}$ . Însă, conform condiției inițiale, în domeniul de temperaturi joase energia electronului este cu mult mai mică decât energia fononului. Aceasta condiție se va îndeplini dacă imediat după absorbție electronul va emite un fonon cu aceeași energie. De fapt, se poate considera că împrăștierea este un proces de schimb al fononilor, deci energia electronului rămâne practic neschimbată, în timp ce direcția cvasiimpulsului se schimbă. Aceasta ne permite să considerăm că la temperaturi mici, interacționând cu oscilațiile optice ale rețelei, electronul se împrășteie elastic.

Pentru a determina timpul de relaxare se poate folosi ecuația (3.110) pentru ciocnirea elastică. În rezultatul calculelor se obține expresia

$$\tau_{2\text{opt}}(T \ll \theta_D) = \frac{3\sqrt{2} M a^3 (\hbar \omega_D)^{3/2}}{4\pi Z^2 e^4 m_n^{1/2}} e^{\frac{\hbar \omega_D}{k_0 T}} \quad (3.128)$$

sau

$$\tau_{2\text{opt}} = \tau_{02\text{opt}} e^{\frac{\hbar \omega_D}{k_0 T}} = \tau_{02\text{opt}} e^{\frac{k_0 \theta_D}{k_0 T}}. \quad (3.129)$$

*La ciocnirea electronilor cu fononii, odată cu creșterea temperaturii timpul de relaxare se micșorează, iar împrăștierea crește.*

Însă, dependența timpului de relaxare de temperatură este diferită pentru oscilațiile acustice (formula (3.113)) și optice. Mai mult, în cazul oscilațiilor optice sunt diferite dependențele  $\tau(T)$  pentru regiunile de temperaturi mai mari sau mai mici decât temperatura Debay (formulele (3.127) și (3.129)).

### 3.10. Mobilitatea în prezența a câtorva mecanisme de împrăștiere

În materialele semiconductoare adesea sunt prezente concomitent câteva mecanisme de împrăștiere. Vom presupune că predominante sunt două mecanisme de împrăștiere: pe impuritățile ionizate și pe fononii acustici. În rezultatul împrăștierii, electronul trece din starea cu vectorul de undă  $\vec{k}$  în starea cu vectorul de undă  $\vec{k}'$  și probabilitatea acestui proces este  $W(\vec{k}, \vec{k}')$ . În același timp, probabilitatea împrăștierii pe impuritățile ionizate este  $W_I(\vec{k}, \vec{k}')$ , iar probabilitatea împrăștierii pe fononii acustici este  $W_{ac}(\vec{k}, \vec{k}')$ . Atunci se poate scrie că

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W_I + W_{ac}. \quad (3.130)$$

Vom înmulți (3.130) cu  $(1 - \cos \theta)$  și vom face sumarea după toate actele de împrăștiere:

$$\sum W(\vec{k}, \vec{k}')(1 - \cos \theta) = \sum W_{ac}(\vec{k}, \vec{k}')(1 - \cos \theta) + \sum W_I(\vec{k}, \vec{k}')(1 - \cos \theta). \quad (3.131)$$

Pe de altă parte, fiecare termen din (3.131) este o mărime inversă a timpului de relaxare  $\frac{1}{\tau}$  (a se vedea formula (3.26)). Acești termeni reprezintă timpul de relaxare pentru împrăștierea pe fononii acustici și pe ionii impurităților (partea dreaptă a egalității) și timpul de relaxare al procesului integru (partea stângă). De aceea, se poate scrie

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ac}} + \frac{1}{\tau_I} \quad (3.132)$$

sau

$$\tau^{-1} = \sum_i \tau_i^{-1}. \quad (3.133)$$

Din (3.133) rezultă că timpul de relaxare total este determinat de timpul de relaxare al fiecărui proces aparte, pentru care mărimea timpului de relaxare este mai mică. Mărimea timpului de relaxare depinde de temperatură și pentru fiecare tip de împrăștiere există o dependență a timpului  $\tau$  de temperatură.

De obicei, pentru determinarea mecanismului de împrăștiere se analizează nu dependența  $\tau(T)$ , ci dependența mobilității  $\mu(T)$ , deoarece mobilitatea poate fi găsită experimental destul de ușor.

Mobilitatea  $\mu$  reprezintă viteza de drift a electronului în câmpul electric unitar, sau pentru electroni

$$\mu = -\frac{e\tau}{m_n}. \quad (3.134)$$

Deoarece raportul  $\frac{e}{m_n}$  este o mărime constantă pentru semiconductorul dat, rezultă că dependența timpului de relaxare de temperatură determină dependența mobilității de temperatură, deoarece  $\mu \sim \tau$ . Atunci, conform (3.133) și (3.134), obținem:

$$\mu^{-1} = \sum_i \mu_i^{-1}. \quad (3.135)$$

Vom generaliza dependențele  $\mu(T)$  pentru diferite mecanisme de împrăștiere:

1. Împrăștierea pe impuritățile ionizate

$$\mu_I = \mu_{0I} \frac{T^{3/2}}{N_I}. \quad (3.136)$$

2. Împrăștierea pe impuritățile neutre

$$\mu_N = \mu_{0N} \frac{1}{N_N}. \quad (3.137)$$

3. Împrăștierea pe dislocații și pe defectele punctiforme

$$\mu_D = \mu_{0D} \frac{T^{-1/2}}{N_D}; \quad \mu_P = \mu_{0P} \frac{T^{-1/2}}{N_P}. \quad (3.138)$$

4. Împrăștierea pe oscilațiile acustice (fononii acustici) ale rețelei cristaline

$$\mu_{ac} = \mu_{0ac} \cdot T^{-3/2}. \quad (3.139)$$

5. Împrăștierea pe oscilațiile optice ale rețelei (pe fononii optici) depinde de domeniul de temperaturi:

a) pentru temperaturi joase ( $T \ll \theta_D$ )

$$\mu_{opt_{T \ll \theta_D}} = \mu_{0opt} e^{\frac{\hbar\omega_D}{k_0 T}} = \mu_{0opt} e^{\frac{\theta_D}{T}}, \quad (3.140)$$

b) pentru temperaturi ridicate ( $T \gg \theta_D$ )

$$\mu_{opt_{T \gg \theta_D}} = \mu_{0opt} \cdot T^{-1/2}. \quad (3.141)$$

Analizând formulele (3.136) – (3.141) putem face concluzia: aproape pentru toate mecanismele de împrăștiere mobilitatea depinde de temperatură, conform legii

$$\mu = \mu_0 \cdot T^\alpha, \quad (3.142)$$

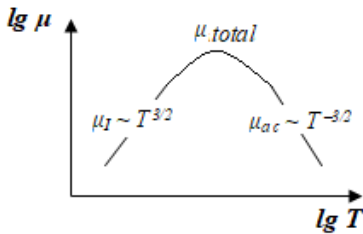
unde  $\alpha$  este coeficientul ce indică mecanismul de împrăștiere.

Ne vom întoarce la cazul cu două mecanisme de împrăștiere. În conformitate cu (3.135), (3.136) și (3.139), avem:

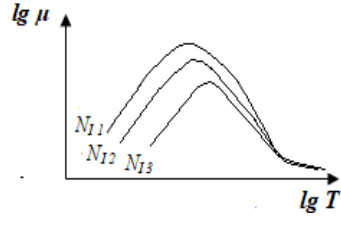
$$\mu^{-1} = \mu_l^{-1} + \mu_{ac}^{-1} = \frac{1}{\mu_{0l}} T^{-3/2} + \frac{1}{\mu_{0ac}} T^{3/2}. \quad (3.143)$$

Graficul dependenței  $\mu(T)$  în prezența acestor două mecanisme de împrăștiere este prezentat în Figura 3.10. Graficul este construit în coordonatele logaritmice, deoarece în acest mod este mai ușor de a determina coeficientul  $\alpha$ , care descrie mecanismul de împrăștiere. La temperaturi mai joase, împrăștierea pe fononi este neînsemnată și predomină împrăștierea pe impuritățile ionizate,  $\mu_l$  este proporțional cu  $T^{3/2}$ . Odată cu creșterea temperaturii crește și cota împrăștierii pe fononii acustici.





**Fig. 3.10.** Dependenta mobilității de temperatură.



**Fig. 3.11.** Dependenta mobilității de temperatură pentru  $N_{I1} < N_{I2} < N_{I3}$ .

În acest caz, dependențele  $\mu_l(T)$  și  $\mu_{ac}(T)$  se suprapun și curba analizată are maximum. Odată cu creșterea continuă a temperaturii mobilitatea se micșorează după legea  $\mu_{ac} \sim T^{-3/2}$ , deoarece predomină împrăștierea pe fononii acustici. După cum se observă din formula (3.143), mobilitatea scade odată cu creșterea concentrației impurităților  $N_I$ . Pentru semiconductorii cu diferite concentrații ale  $N_I$ , și anume  $N_{I1} < N_{I2} < N_{I3}$ , se obțin dependențele  $\mu(T)$  reprezentate în Figura 3.11. Cu cât mai mare este  $N_I$ , cu atât mai jos se află curba  $\mu(T)$ , iar maximum se deplasează în domeniul de temperaturi mai ridicate.

La temperaturi foarte joase, când concentrația atomilor de impuritate nu este mare și aceștia încă nu sunt ionizați, poate predomina împrăștierea pe atomi neutri și atunci, odată cu creșterea temperaturii, mobilitatea rămâne constantă.

*Mecanismul de împrăștiere a purtătorilor de sarcină în substanță poate fi determinat experimental, pentru aceasta este suficient de a determina coeficientul de putere în dependența mobilității de temperatură.*

## **Capitolul IV. PARTICULARITĂȚILE CONDUCTIBILITĂȚII ÎN SEMICONDUCTORI**

### **4.1. Dependența conductibilității de temperatură în semiconductori**

Dacă asupra unui conductor este aplicat un câmp electric cu intensitatea  $\vec{\mathcal{E}}$ , atunci în conductor apare un curent electric, a cărui densitate, conform legii Ohm, este egală cu

$$\vec{j} = \sigma \vec{\mathcal{E}}, \quad (4.1)$$

unde  $\sigma = 1/\rho$  este conductibilitatea electrică specifică,  $\rho$  – rezistivitatea specifică. Vom determina densitatea curentului electric, considerând că electronii se mișcă în câmp cu viteza de drift  $v_{dr}$ , care reprezintă proiecția vitezei mișcării electronilor pe direcția câmpului electric. Să delimităm imaginar în conductor un cilindru, cu aria secțiunii transversale egală cu o unitate și cu lungimea egală cu  $v_{dr}$ . Este evident că într-o unitate de timp toți electronii ce se află în interiorul acestui cilindru vor intersecta baza lui, iar densitatea curentului va fi egală cu

$$\vec{j} = env_{dr} = env_{dr} \cdot \frac{\vec{\mathcal{E}}}{\mathcal{E}} = en\mu \vec{\mathcal{E}}. \quad (4.2)$$

Comparând (4.1) și (4.2), vom obține formula

$$\sigma = en\mu, \quad (4.3)$$

care reprezintă expresia de bază pentru conductibilitate în cazul când există numai un singur tip de purtători de sarcină. În prezența a câtorva tipuri de purtători de sarcină conductibilitatea  $\sigma$  a unui semiconductor este dată de suma

$$\sigma = \sum_{\alpha} en_{\alpha}\mu_{\alpha}. \quad (4.4)$$

Pentru analiza dependenței conductibilității de temperatură în semiconductori, trebuie de luat în considerare dependența concentrației de temperatură, prezentată în Figura 2.10.

I. *Semiconductorul intrinsec.* Vom considera cazul unui semiconductor intrinsec (regiunea temperaturilor ridicate 3, Figura 2.10), care conține două tipuri de purtători de sarcină – electroni și goluri, ale căror concentrații sunt egale

$$n = p = n_i. \quad (4.5)$$

În conductibilitate participă electronii și golurile, fiecare având mobilitate proprie:

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = e n \mu_n + e p \mu_p = e n_i (\mu_n + \mu_p). \quad (4.6)$$

Conform (2.43) și (2.45), concentrația intrinsecă este

$$n_i = A T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_{g0} + \beta T}{2k_0 T}\right) = \text{Const} \cdot T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_{g0}}{2k_0 T}\right). \quad (4.7)$$

Dependența mobilității de temperatură, în caz general, are forma unei funcții exponențiale

$$\mu = \mu_0 T^\alpha, \quad (4.8)$$

unde  $\mu_0$  este partea mobilității ce depinde de parametrii substanței și nu depinde de temperatură,  $\alpha$  este exponentul ce definește mecanismul de împrăștiere.

Pentru două tipuri de purtători de sarcină conductibilitatea este

$$\sigma_i = e(\mu_{0n} + \mu_{0p}) T^{\alpha + \frac{3}{2}} e^{-\frac{E_{g0}}{2k_0 T}}, \quad (4.9)$$

sau

$$\sigma_i = \sigma_0 T^{\alpha + \frac{3}{2}} e^{-\frac{E_{g0}}{2k_0 T}}, \quad (4.10)$$

unde  $\sigma_0$  este constanta ce nu depinde de temperatură. În concluzie, conductibilitatea este cu atât mai mare, cu cât mai mică este lățimea benzii interzise, iar odată cu creșterea temperaturii ea crește după legea exponențială.

Din dependența conductibilității de temperatură poate fi determinată lățimea benzii interzise. Vom rescrie (4.10) sub o altă formă:

$$\sigma_i T^{-(\alpha + \frac{3}{2})} = \sigma_0 e^{-\frac{E_{g0}}{2k_0 T}}. \quad (4.11)$$

Să logaritmăm ultima expresie:

$$\ln \left[ \sigma_i T^{-(\alpha + \frac{3}{2})} \right] = \ln \sigma_0 - \frac{E_{g0}}{2k_0 T}. \quad (4.12)$$

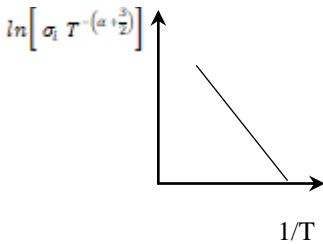


Fig. 4.1. Dependența  $\sigma_i(T)$ .

Pentru a obține  $E_{g0}$  în coordonate semilogaritmice construim graficul funcției

$$\ln \left[ \sigma_i T^{-(\alpha + \frac{3}{2})} \right] = f \left( \frac{1}{T} \right),$$

care este prezentat în Figura 4.1. Graficul reprezintă o dreaptă, a cărei pantă ne permite să determinăm  $E_{g0}$

$$\frac{E_{g0}}{2k_0} = - \frac{\Delta \ln[\sigma_i T^{-(\alpha + \frac{3}{2})}]}{\Delta \left( \frac{1}{T} \right)}. \quad (4.13)$$

În multe cazuri mecanismul de împrăștiere nu este cunoscut. Luând în considerare că dependența exponențială este cu mult mai puternică decât dependența de putere, dependența neexponențială  $\mu(T)$  poate fi neglijată.

II. *Semiconductorul extrinsec.* Vom analiza un semiconductor ce conține, de exemplu, impurități donoare. La temperaturi joase, acest semiconductor se comportă ca un semiconductor extrinsec și conductibilitatea lui este condiționată de existența impurităților.

a) Domeniul de temperaturi joase pentru care se îndeplinește criteriul

$$\frac{8N_d}{N_C} e^{\frac{\Delta E_d}{2k_0 T}} \gg 1. \quad (4.14)$$

În acest caz  $\sigma_1 = e n_1 \mu_1,$  (4.15)

concentrația pentru care o determinăm conform (2.74 b)

$$n_1 = \sqrt{\frac{N_d N_C}{2}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2k_0 T}} = Const T^{3/4} e^{-\frac{\Delta E_d}{2k_0 T}} \quad (4.16)$$

și  $\mu_1 = \mu_0 T^{\alpha_1}.$  (4.17)

Obținem:

$$\sigma_1 = Const T^{\left(\frac{3}{4} + \alpha_1\right)} e^{-\frac{\Delta E_d}{2k_0 T}}. \quad (4.18)$$

La logaritizarea ultimei expresii

$$\ln \sigma_1 T^{-\left(\frac{3}{4} + \alpha_1\right)} = \text{Const} - \frac{\Delta E_d}{2k_0 T} \quad (4.19)$$

vom obține funcția, graficul căreia în coordonatele semilogaritmice reprezintă o linie dreaptă (Fig. 4.2, regiunea 1). Din înclinarea acestei drepte poate fi determinată energia de ionizare a donozilor  $\Delta E_d$ :

$$\frac{\Delta E_d}{2k_0} = - \frac{\Delta \ln \sigma_1 \cdot T^{-\left(\frac{3}{4} + \alpha_1\right)}}{\Delta\left(\frac{1}{T}\right)}. \quad (4.20)$$

b) Domeniul de temperaturi mai mari, când se îndeplinește criteriul

$$\frac{8N_d}{N_C} e^{\frac{\Delta E_d}{k_0 T}} \ll 1, \quad (4.21)$$

care se numește *domeniul de epuizare* (Fig.4.2, regiunea 2).

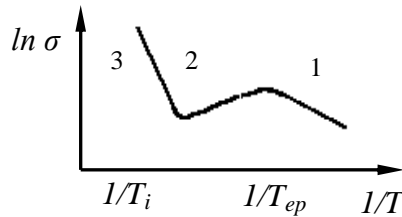


Fig. 4.2. Dependența conductibilității de temperatură.

În acest domeniu de temperaturi concentrația este constantă

$$n_2 = N_d, \quad (4.22)$$

mobilitatea este

$$\mu_2 = \mu_0 T^{\alpha_2}, \quad (4.23)$$

atunci conductibilitatea este

$$\sigma_2 = eN_d \mu_0 T^{\alpha_2}. \quad (4.24)$$

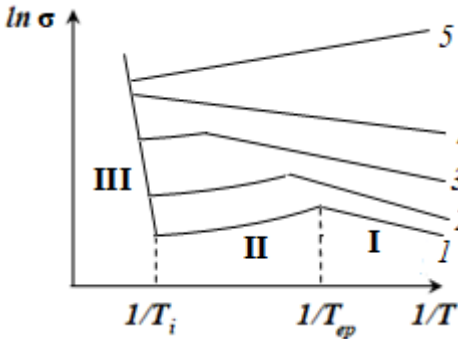
Caracterul dependenței conductibilității de temperatură repetă dependența mobilității de temperatură. De exemplu, pentru împrăștierea pe fononii acustici  $\alpha_2 = -3/2$ , odată cu creșterea temperaturii mobilitatea se micșorează, după cum este indicat în desen.

Regiunea 3 din Figura 4.2 corespunde semiconductorului intrinsec.

Dacă semiconductorul conține două tipuri de impurități, graficul dependenței conductibilității de temperatură va fi identic cu graficul din Figura 4.2, doar în domeniul de epuizare (regiunea 2) concentrația electronilor nu va fi  $N_d$ , dar, de exemplu,

$$n_2 = N_d - N_a = N_d'. \quad (4.25)$$

**III.** Să analizăm dependența  $\sigma(T)$  pentru un set de probe de același semiconductor, cu concentrație diferită a impurităților donoare  $N_{d1} < N_{d2} < N_{d3} < N_{d4} < N_{d5}$ . Odată cu creșterea concentrației  $N_d$  (Fig. 4.3)



**Fig. 4.3.** Dependenta conductibilității de temperatură în cristale cu diferită concentrație a donorilor.

conductibilitatea crește (regiunile I, II), temperaturile  $T_{ep}$  și  $T_i$  se deplasează în domeniul de temperaturi mai mari, domeniul de epuizare (regiunea II) se scurtează (curbele 1, 2, 3), iar pentru  $N_d$  destul de mare acest domeniu poate dispărea complet (curba 4). Menționăm că în cazul curbelor experimentale trecerea de la un domeniu la

altul nu este bruscă, ci lină și variația conductibilității în domeniile I și III poate să nu fie strict liniară. Odată cu creșterea  $N_d$  poate să se schimbe panta dreptei în domeniul I (curbele 3, 4) cu conductibilitatea impuritară, fapt ce poate fi legat atât de schimbarea mecanismului de împrăștiere, cât și de micșorarea energiei de ionizare a impurităților. Într-adevăr, dacă concentrația impurităților crește, distanța între atomii  $N_d$  se micșorează și între aceștia apare o interacțiune care duce la suprapunerea funcțiilor de undă ale electronilor atomilor de impuritate. În rezultat, apare probabilitatea de tranziție a electronilor din centrele donoare ocupate în centrele donoare libere. Chiar la temperaturi destul

de joase, la aplicarea unui câmp electric, este posibilă conductibilitatea pe impurități prin stări locale (conductibilitatea prin salturi)  $\sigma_{imp}$ . Mobilitatea electronilor ce se deplasează prin nivelurile de impuritate este cu mult mai mică decât mobilitatea electronilor în banda de conducție. Cu creșterea concentrației impurităților, posibilitatea formării benzii înguste de impuritate crește și conductibilitatea va fi determinată de expresia

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_{imp} = en\mu_n + en\mu_{imp}. \quad (4.26)$$

Pentru concentrațiile de impurități foarte mari, semiconductorul poate deveni degenerat și în acest caz conductibilitatea într-un interval de temperaturi poate să scadă odată cu creșterea temperaturii (curba 5), similar metalelor.

*Caracterul dependențelor conductibilității de temperatură în semiconductori este determinat, în primul rând, de dependența concentrației de temperatură, iar influența  $\mu(T)$  este esențială doar în domeniul de epuizare.*

#### **4.2. Abaterea de la legea lui Ohm în câmpurile electrice puternice**

Conform legii lui Ohm, densitatea curentului electric este proporțională cu intensitatea câmpului electric, deci

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (4.27)$$

Această proporționalitate arată că electroconductibilitatea  $\sigma$  este o mărime constantă, care nu depinde de câmpul electric. Însă, experimental s-a arătat că atunci când intensitatea câmpului electric crește până la mărimea de  $10^2 \div 10^4 \frac{V}{cm}$  expresia (4.27) nu mai este valabilă și are loc o dependență exponențială a lui  $\sigma(\vec{E})$  (Fig. 4.4). În caz general, în prezența unui singur tip de impuritate într-un semiconductor, conductibilitatea este

$$\sigma = en\mu_n. \quad (4.28)$$

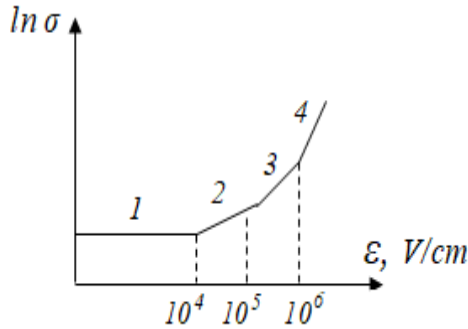


Fig. 4.4. Dependența conductibilității de mărimea câmpului electric.

Rezultă că de  $\vec{E}$  depinde fie  $\mu$ , fie  $n$ , fie ambele.

Menționăm că modulul  $v_{dr}$  reprezintă proiecția vitezei electronilor pe direcția câmpului electric, iar, datorită împrăștierii, traiectoria de mișcare a electronilor reprezintă o linie frântă. De aceea, viteza de drift este cu mult mai mică decât viteza termică a electronilor  $v_{dr} \ll v_T$  (de obicei,  $v_{dr} \approx 10^{-4} \frac{m}{s}$ ;  $v_T \approx 10^5 \frac{m}{s}$ ).

a) Pentru început să cercetăm cum depinde valoarea mobilității de intensitatea câmpului electric. Dacă pentru stabilirea stării de echilibru în semiconductorul nedegenerat este necesară o singură ciocnire, atunci mobilitatea este

$$\mu \sim \tau \sim \frac{\lambda}{v}, \tag{4.29}$$

unde  $\tau$  este timpul de relaxare,  $\lambda$  este lungimea parcursului liber,  $v$  este viteza electronului, care constă din viteza termică și cea de drift; deci, viteza în câmpul electric este

$$v = v_T + v_{dr}. \tag{4.30}$$

Când câmpul electric nu este suficient de mare  $v_{dr} \ll v_T$ , atunci viteza electronilor este determinată numai de  $v_T$ . Aceste câmpuri se numesc *câmpuri electrice slabe*. Pentru câmpurile electrice slabe  $\mu$  nu



depinde de  $\vec{\mathcal{E}}$  și se îndeplinește relația (4.27) ce corespunde segmentului  $I$  pe graficul dependenței  $\ln \sigma = f(\vec{\mathcal{E}})$  (Fig. 4.4).

Odată cu creșterea lui  $\vec{\mathcal{E}}$ , viteza de drift crește și poate atinge valori de ordinul vitezei termice. Deoarece  $v_{dr}$  depinde de  $\vec{\mathcal{E}}$ , viteza electronului de asemenea va depinde de intensitatea câmpului electric. Așa câmpuri se numesc *câmpuri electrice puternice*.

În câmpurile electrice puternice mobilitatea  $\mu$  deja depinde de  $\vec{\mathcal{E}}$  și relația (4.27) nu se mai îndeplinește. Însă, calculele arată că mobilitatea este proporțională mărimii câmpului electric în mod diferit în dependență de mecanismul de împrăștiere a purtătorilor de sarcină:

- la împrăștierea pe fononii acustici  $\mu \sim \mathcal{E}^{-1/2}$ ;
- la împrăștierea pe fononi optici  $\mu \sim \mathcal{E}^{1/2}$ ;
- la împrăștierea pe ioni de impuritate  $\mu \sim \mathcal{E}^{3/2}$ .

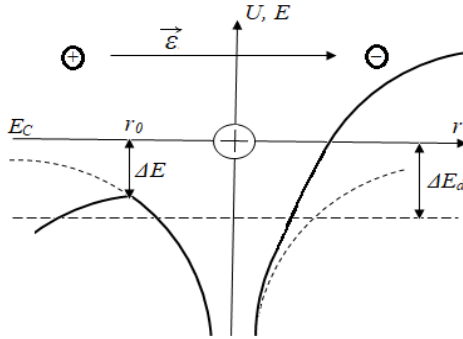
Se observa că în toate cazurile conductibilitatea are dependență de putere de  $\vec{\mathcal{E}}$ . Însă, cercetările experimentale arată că această dependență este exponențială.

b) Ținând cont de cele expuse în punctul a), deducem că anume concentrația depinde în mod exponențial de intensitatea câmpului electric.

Creșterea vitezei electronilor sub acțiunea câmpului electric este similară creșterii temperaturii gazului electronic; ca urmare, acest efect a primit denumirea de efectul electronilor „fierbinți”. Energia cinetică medie a acestor electroni este mai mare decât energia cinetică medie a atomilor rețelei cristaline.

Vom analiza cauzele ce duc la creșterea concentrației în câmpurile electrice puternice.

*I. Ionizarea termoelectronică (ionizarea Frenkel).* Considerăm că semiconductorul este extrinsec, de tip- $n$  și atomii de impuritate nu interacționează între ei. Câmpul potențial al atomului de impuritate, care este furnizor de electroni liberi în banda de conducție, are forma unei hiperbole (Fig. 4.5, liniile întrerupte).



**Fig. 4.5.** Groapa de potențial în jurul ionului de impuritate în lipsa (linii întrerupte) și în prezența câmpului electric (linii continue).

Pentru  $\vec{\mathcal{E}} = 0$  groapa de potențial a atomului va fi simetrică față de axa ordonatelor. Energia de ionizare a donoarelor este  $\Delta E_d$ , iar concentrația lor este

$$n_0 = \sqrt{\frac{N_d N_c}{2}} e^{\frac{-\Delta E_d}{2k_0 T}}. \quad (4.31)$$

Energia potențială a electronului este

$$U_0(r) = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}. \quad (4.32)$$

Dacă se aplică un câmp electric  $\vec{\mathcal{E}}$ , energia potențială a electronului se va schimba cu

$$U_{\mathcal{E}} = F_{el} r = -e \mathcal{E} r \quad (4.33)$$

La fel, se va schimba și forma gropii de potențial, care nu va mai fi simetrică față de axa ordonatelor. În direcția lui  $\vec{\mathcal{E}}$  bariera coulombiană pentru electroni va crește, în direcția opusă – se va micșora cu  $\Delta E$ . Forma barierei în dependență de  $r$  pentru un oarecare  $|r| = r_0$  va avea un maximum, situat cu  $\Delta E$  mai jos de nivelul  $E_c$ . Astfel, bariera pentru electroni se va micșora cu  $\Delta E$  și pentru concentrație vom avea expresia

$$n = \sqrt{\frac{N_d N_c}{2}} e^{\frac{-\Delta E_d + \Delta E}{2k_0 T}} = n_0 e^{\frac{\Delta E}{2k_0 T}}, \quad (4.34)$$

adică la aplicarea câmpului electric concentrația crește, deoarece  $n > n_0$ .

Bariera de potențial în prezența câmpului electric este

$$U(r) = U_0 + U_{\mathcal{E}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} - e\mathcal{E}r. \quad (4.35)$$

Pentru a găsi valoarea  $\Delta E$  este necesar a determina  $U(r)$  în punctul  $r = r_0$ , când  $U(r)$  are mărime maximă. Pentru aceasta, derivăm (4.35) în raport cu  $r$  și egalăm derivata cu zero:

$$\frac{dU(r)}{dr} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r^2} - e\mathcal{E} = 0. \quad (4.36)$$

Din (4.36) se poate determina  $r_0$

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r_0^2} = e\mathcal{E},$$

și

$$r_0 = \sqrt{\frac{Ze}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \mathcal{E}}}. \quad (4.37)$$

În punctul  $r = r_0$  energia potențială  $U(r) = \Delta E$ , deci obținem:

$$\begin{aligned} \Delta E = U(r_0) &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\sqrt{4\pi\epsilon\epsilon_0 \mathcal{E}}}{\sqrt{Ze}} - e\mathcal{E} = \\ &= \frac{e^{3/2} \sqrt{Z} \sqrt{\mathcal{E}}}{2\sqrt{\pi\epsilon\epsilon_0}} = \text{Const} \sqrt{\mathcal{E}} \end{aligned} \quad (4.38)$$

Din (4.34) rezultă că concentrația depinde de mărimea câmpului electric în următorul mod:

$$n = n_0 e^{\frac{\text{Const} \sqrt{\mathcal{E}}}{2k_0 T}}, \quad (4.39)$$

și conductibilitatea

$$\sigma \sim n \sim e^{\sqrt{\mathcal{E}}}. \quad (4.40)$$

Această teorie a fost propusă de Frenkel și se numește *ionizare termoelectronică*. Pentru câmpuri electrice mai mari de  $10^4 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$  rezultatele experimentale sunt în bună concordanță cu calculele teoretice. Pe graficul  $\ln \sigma(\mathcal{E})$  (Fig. 4.4) acestei teorii îi corespunde segmentul 2.

II. Ionizarea prin șoc. Un alt factor care poate duce la creșterea exponențială a concentrației în câmpul electric este ionizarea prin șoc (sau prin impact). În câmpul electric puternic are loc înclinarea benzilor energetice (Fig. 4.6). Dacă  $\vec{\mathcal{E}}$  este îndreptat de la stânga spre dreapta, atunci partea stângă a benzilor va fi inferior părții drepte și cu cât mai mare este  $\vec{\mathcal{E}}$  cu atât mai mare va fi înclinarea.

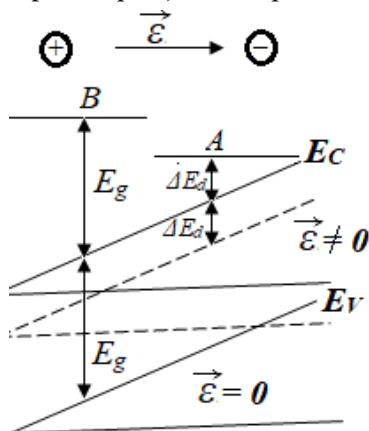


Fig. 4.6. Schema benzilor energetice în câmpuri electrice puternice.

Pe nivelul  $E_C$  electronul are energia egală cu zero. În câmpul electric electronul se accelerează, astfel încât energia lui devine suficientă pentru a ioniza atomul neutru în timpul ciocnirii. În rezultatul ciocnirii-ionizării concentrația electronilor crește.

Energia electronului este determinată de distanța până la nivelul  $E_C$ . La deplasare în câmp electric, în direcția opusă sensului  $\vec{\mathcal{E}}$  (Fig. 4.6) această distanță crește. În punctul A, energia electronului este egală cu lungimea segmentului  $\Delta E_d$ , ceea ce înseamnă că la ciocnirea acestui electron cu atomul de impuritate acesta îl poate ioniza. În punctul B, energia electronului este egală cu  $E_g$ ; prin urmare, la ciocnire electronul poate ioniza atomul propriu. Ca rezultat, în ambele cazuri apar noi electroni liberi. Pentru  $\mathcal{E} = Const$  acest proces va avea loc până când procesul de generare nu va fi echilibrat de procesul de recombinare. Intensitatea câmpului electric, pentru care are loc ionizarea prin șoc, este  $\mathcal{E}_{crit}$  și ea poate fi evaluată cu ajutorul expresiei

$$e \frac{M}{m} \mathcal{E}_{crit} \lambda = E_g, \quad (4.41)$$

unde  $M$  și  $m$  sunt masa ionului și a purtătorului de sarcină,  $\lambda$  – lungimea de parcurs liber.

De obicei,  $\mathcal{E}_{crit}$  este de ordinul  $10^5 \dots 10^6 \frac{V}{cm}$ , ceea ce în Figura 4.4 corespunde segmentului 3. Pentru semiconductorul extrinsec, în expresia (4.41),  $E_g$  va fi substituit de  $\Delta E_d$  sau  $\Delta E_a$  și  $E_{crit}$  va avea o valoare mai mică. Acest proces se numește *ionizare prin șoc la tensiuni joase*. Dacă  $\mathcal{E}$  va fi destul de mare, poate avea loc așa-numita străpungere prin avalanșă.

III. *Străpungerea electrostatică (efectul de tunel sau efectul Ziner)*. Acest efect, de asemenea, se observă în urma înclinării benzilor energetice

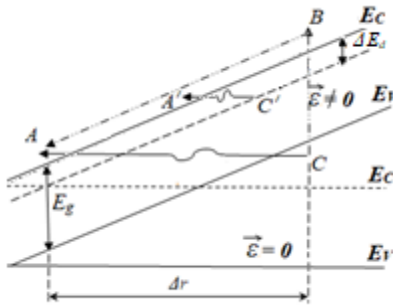


Fig. 4.7. Efectul tunel în câmpuri electrice puternice.

(Fig. 4.7). În acest caz, electronul poate „sări” peste banda interzisă, fără a-și schimba energia, din punctul  $C$  în punctul  $A$  ori invers, adică electronul tunelează. Probabilitatea efectului de tunel depinde de lățimea ( $AC$ ) și înălțimea ( $BC$ ) barierei. În cazul dat înălțimea barierei este  $BC =$

$E_g$ , iar lățimea barierei  $AC = \Delta r$  poate fi găsită din diferența energiilor potențiale ale electronului în câmpul electric  $\mathcal{E}$  și este egală

$$U(C) - U(A) = -e \mathcal{E} \Delta r. \quad (4.42)$$

Trecerea electronului din punctul  $C$  în punctul  $A$  este legată de trecerea printr-o barieră de potențial triunghiular  $CBA$ . Obținem

$$e \mathcal{E} \Delta r = E_g, \quad (4.43)$$

de unde

$$|\Delta r| = \frac{E_g}{e \mathcal{E}}. \quad (4.44)$$

Primordial, efectul de tunel are loc când electronii tunelează din banda de valență în banda de conducție, adică electronul se deplasează în direcția opusă câmpului electric  $\vec{\mathcal{E}}$ . În acest mod, are loc procesul de generare de noi electroni liberi până când acest proces nu va fi

echilibrat de procesul de recombinare. Efectul de tunel se caracterizează prin coeficientul de transparență al barierei  $D$ , care reprezintă probabilitatea de tranziție a electronului din banda de valență în cea de conducție, fără a-și schimba energia. Calculele arată că  $D \sim e^{-\frac{b}{\varepsilon}}$ , unde  $b$  este un coeficient constant. Efectul de tunel se observă în câmpurile electrice mai mari decât  $10^6 \frac{V}{cm}$ , ceea ce corespunde domeniului 4 (Fig. 4.4).

*IV. Străpungerea electrică și termică.* Străpungerea electrică apare în câmpuri electrice mai mari ca  $10^6 \frac{V}{cm}$  și este legată cu apariția unei avalanșe de purtători de sarcină în urma efectelor de ionizare prin șoc sau de tunel. În câmpul electric, energia electronului crește atât de mult, încât la ciocnirea lui cu atomul neutru el poate ioniza nu doar un singur atom, ci mai mulți. Astfel, după ciocnirea electronului cu un atom energia restantă este suficientă pentru ionizarea unui alt atom, ceea ce duce la creșterea bruscă a conductibilității. În urma acestui proces poate avea loc degajarea unei mari cantități de căldură și, ca urmare, distrugerea materialului. Efectul străpungerii electrice este un efect ireversibil.

Străpungerea termică este un efect de durată mai lungă. El apare datorită încălzirii materialului în urma trecerii curentului electric. Conform legii lui Joule-Lentz, căldura degajată este

$$Q = I^2 R t. \quad (4.45)$$

Putem afirma că străpungerea termică reprezintă un proces ciclic: dacă crește temperatura corpului, respectiv, crește concentrația purtătorilor de sarcină și, respectiv, crește conductibilitatea  $\sigma$ . La creșterea  $\sigma$ , scade rezistența materialului și în aceeași măsură crește intensitatea curentului electric, apoi, conform (4.45), crește  $Q$  și temperatura corpului. Aceste procese se repetă succesiv până la distrugerea materialului.

*V. Efectul Stark.* Concentrația purtătorilor de sarcină poate crește și în urma micșorării benzii interzise, ca rezultat al despăcării nivelurilor

energetice ale atomilor, sub influența câmpurilor electrice puternice. În urma acestui efect are loc surparea marginilor benzilor energetice, ceea ce duce la micșorarea lățimii benzii interzise. Prin urmare, se facilitează procesul de tranziție a electronului din banda de valență în banda de conducție.

În câmpurile electrice puternice, când  $v_{dr} \approx v_T$ , conductibilitatea depinde de mărimea câmpului electric după legea exponențială.

### 4.3. Efectul Gunn

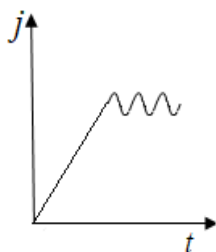


Fig. 4.8. Oscilațiile curentului electric în GaAs.

În anul 1963, Gunn obține oscilații de frecvență înaltă ale curentului electric în cristale de arsenură de galiu GaAs, când intensitatea câmpului electric atinge o anumită valoare  $E_{crit}$  (Fig. 4.8). Trebuie de remarcat faptul că cristalul GaAs era fără particularități și nu conținea nici joncțiuni  $p-n$ , nici joncțiuni metal – semiconductor. Acest efect poartă denumirea *efectul Gunn*. Timp de câțiva ani, a apărut o nouă direcție în tehnica oscilațiilor de frecvență

supraînaltă, legată direct de acest efect și, ca rezultat, a fost construit generatorul de oscilații supraînalte, numit, mai târziu, *dioda Gunn*.

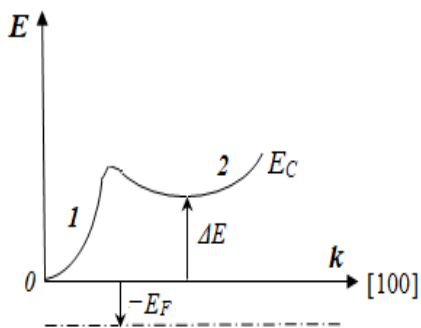


Fig. 4.9. Forma marginii benzii de conducție în GaAs.

Pentru a cerceta procesele fizice ce au loc în dioda Gunn, inițial ne vom referi la structura benzii de conducție a GaAs. În limita primei benzi Brillouin, banda de conducție are două văi: pentru  $k = 0$ , adică în centrul benzii Brillouin și pentru  $k = \frac{3\pi}{4\alpha}$  (Fig. 4.9). Lățimea benzii interzise a GaAs este  $E_g = 1,6 \text{ eV}$ ,

valea a doua este situată mai sus decât prima cu  $\Delta E = 0,35 eV$ . Curbura benzii de conducție în aceste două văi este diferită, ceea ce înseamnă că masele efective ale electronilor de asemenea vor fi diferite; mai exact,  $m_{n2} > m_{n1}$ .

Este evident că concentrațiile electronilor în aceste două văi de asemenea vor fi diferite:

pentru prima vale 
$$n_1 = N_{C1} e^{\frac{E_F}{k_0 T}}, \quad (4.46)$$

pentru a doua vale 
$$n_2 = N_{C2} e^{\frac{E_F - \Delta E}{k_0 T}}. \quad (4.47)$$

Menționăm că  $E_F$  se socoate de la  $E_C$  în jos, iar  $\Delta E$  de la  $E_C$  în sus, de aceea  $\Delta E$  are semnul „minus”. Concentrația totală a electronilor în banda de conducție este

$$n_0 = n_1 + n_2. \quad (4.48)$$

Deoarece mobilitatea purtătorilor de sarcină depinde de masa efectivă

$$\mu = \frac{e\tau}{m_n}, \quad (4.49)$$

iar  $m_{n2} > m_{n1}$ , rezultă că mobilitățile electronilor în aceste două văi vor fi diferite, și anume:  $\mu_{n1} > \mu_{n2}$ .

Astfel, conductibilitatea totală a semiconductorului este

$$\sigma_{tot} = e n_1 \mu_{n1} + e n_2 \mu_{n2}. \quad (4.50)$$

La temperatura mediului ambiant, când câmpul electric  $\mathcal{E} = 0$ , majoritatea electronilor se găsesc în prima vale. La aplicarea câmpului

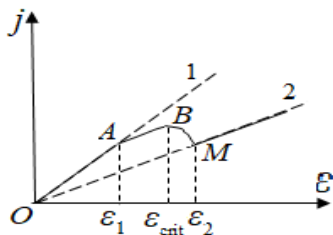


Fig. 4.10. Dependența  $j(\mathcal{E})$ .

electric, energia electronilor crește și devine suficientă pentru tranzițiile electronilor din valea I în valea a II-a, unde masa lor este mai mare, iar mobilitatea mai mică. În rezultatul acestor tranziții se schimbă concentrațiile  $n_1$ ,  $n_2$  și mobilitățile  $\mu_{n1}$  și  $\mu_{n2}$  din



formula (4.50), ceea ce duce la variația conductibilității și, respectiv, a densității curentului electric  $j$ . Din graficul dependenței densității curentului electric de mărimea câmpului electric (Fig. 4.10) se observă că există un anumit  $\mathcal{E}_{crit}$ , la care densitatea curentului electric este maximă.

a) Când  $\mathcal{E} < \mathcal{E}_{crit}$ , toți electronii se află în valea I, conductibilitatea este

$$\sigma_1 = e n_0 \mu_{n1}, \quad (4.51)$$

deoarece  $n_1 \approx n_0$  și  $n_2 \approx 0$ . În această regiune a câmpului electric segmentul  $OA$  corespunde legii Ohm și se observă dependența liniară

$$j_1 = \sigma_1 \mathcal{E}. \quad (4.52)$$

b) Când  $\mathcal{E} > \mathcal{E}_{crit}$ , se poate considera că practic toți electronii au trecut deja în valea a II-a, unde mobilitatea lor este mai mică și conductibilitatea este egală

$$\sigma_2 = e n_0 \mu_{n2}, \quad (4.53)$$

deoarece  $n_2 \approx n_0$  și  $n_1 \approx 0$ . Linia 2 (de la punctul  $M$ ) corespunde legii Ohm în această regiune

$$j_2 = \sigma_2 \mathcal{E} \quad (4.54)$$

și deoarece  $\sigma_2 < \sigma_1$ , linia 2 se află mai jos decât linia 1.

c) În vecinătate cu  $\mathcal{E}_{crit}$  este un interval de la  $\mathcal{E}_1$  până la  $\mathcal{E}_2$  când au loc tranzițiile electronilor din valea I în valea a II-a și conductibilitatea se descrie prin ecuația (4.50). Din (4.48) determinăm

$$n_1 = n_0 - n_2$$

și înlocuim în (4.50). Obținem pentru segmentul  $ABM$ :

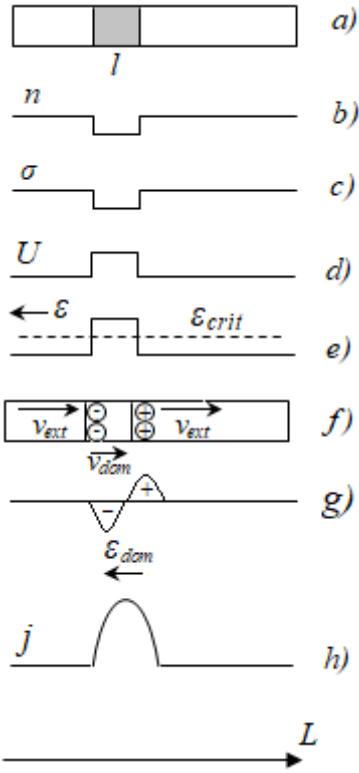
$$\begin{aligned} \sigma^* &= e n_2 \mu_2 + e (n_0 - n_2) \mu_1 \\ \sigma^* &= e n_0 \mu_1 + e n_2 (\mu_2 - \mu_1) = \sigma_1 - e n_2 (\mu_1 - \mu_2). \end{aligned} \quad (4.55)$$

Astfel, pentru intervalul dintre  $\mathcal{E}_1$  și  $\mathcal{E}_2$ , conductibilitatea se micșorează, deoarece  $\sigma^* < \sigma_1$ , cu alte cuvinte, se observă un sector  $BM$  cu rezistența negativă; respectiv, odată cu creșterea mărimii câmpului electric densitatea curentului electric se micșorează. În acest mod, pe

graficul  $j(\mathcal{E})$  se observă un salt al curentului electric, fapt asociat cu micșorarea conductibilității odată cu creșterea câmpului electric.

Pentru *GaAs* câmpul electric critic este  $\mathcal{E}_{crit} \approx 3 \cdot 10^3$  V/cm, electronii ce apar în acest câmp se numesc electroni „fierbinți” și energia lor termică corespunde temperaturii  $\sim 600$  K. În acest moment raportul concentrațiilor electronilor în cele două văi este  $\frac{n_2}{n_1} = 1,75$ , deci majoritatea electronilor deja se află în valea a doua. Putem considera că în câmpurile electrice  $\mathcal{E} > \mathcal{E}_2$  ( $\mathcal{E} > 10^4$  V/cm) expresia (4.53) este corectă, deoarece  $n_2 \approx n_0$ . Mobilitatea electronilor în aceste

două văi este  $\mu_{n1} \approx 5 \cdot 10^3$  cm<sup>2</sup>/V·s și  $\mu_{n2} \approx (100 \dots 200)$  cm<sup>2</sup>/V·s.



Cele expuse mai sus se referă la problema unui cristal omogen, adică fără fluctuații de concentrație. În realitate, însă, orice material este neomogen într-un anumit fel. Este posibil că într-un cristal cu lungimea  $L$  se va găsi un sector îngust de lungime  $l \ll L$  (Fig. 4.11, a), în care concentrația purtătorilor de sarcină va fi mai mică (Fig. 4.11, b) decât în restul probei. Respectiv, conductibilitatea  $\sigma$  a acestui sector va fi mai mică (Fig. 4.11, c), iar căderea de tensiune pe acest sector va fi mai mare (Fig. 4.11, d) față de restul probei. Ca urmare, intensitatea câmpului electric în acest sector va crește brusc, comparativ cu restul probei, unde aceasta se va micșora (Fig. 4.11, e).

Fig. 4.11. Apariția domeniului în cristal și a saltului de curent electric.

Pe grafic (Fig. 4.10) regiunii în care  $\mathcal{E} > \mathcal{E}_{crit}$  îi corespunde intervalul  $BM$  cu rezistența negativă, ceea duce la o micșorare și mai mare a conductibilității, iar  $\mathcal{E}$ , corespunzător, va crește.

În regiunea cu rezistență negativă mobilitatea purtătorilor este  $\mu_{n2}$ , ceea ce înseamnă că viteza de drift a electronilor în interiorul domeniului cu intensitatea câmpului electric înaltă  $v_{d2}(v_{dom})$  este mai mică decât viteza de drift a electronilor  $v_{d1}(v_{ext})$  în restul probei (Fig. 4.11, *f*). Astfel, electronii ce se mișcă sub acțiunea câmpului electric intră în domeniu cu viteză mai mică și se acumulează în această regiune la marginea ei stângă, deci are loc acumularea sarcinii negative. În același timp, electronii ce se mișcă anterior acestei regiuni părăsesc mai repede marginea dreaptă a acesteia și lângă această margine are loc acumularea sarcinii pozitive (Fig. 4.11, *f*). Astfel se formează o regiune, care se numește *domen*, cu marginile încărcate cu sarcini opuse. Câmpul electric în domen (Fig. 4.11, *g*) este orientat la fel ca și în afara lui, și câmpul sumar în cristal devine și mai mare. Să remarcăm că în  $GaAs$   $\mathcal{E}_{ext} = 1...2 \frac{kV}{cm}$ , iar în domen  $\mathcal{E}_{dom} = 40...100 \frac{kV}{cm}$ . Formarea domeniului va avea loc până când viteza  $v_{dom}$  în interiorul regiunii cu câmp electric înalt devine egală cu  $v_{ext}$  în afara lui, ceea ce poate fi exprimat în modul următor:

$$\mu_1 \mathcal{E}_{ext} = \mu_2 \mathcal{E}_{dom} = v_{dr} \quad (4.56)$$

Domenul poate staționa în locul de apariție dacă este ținut de forțele coulombiane de interacțiune între „perechea” de electroni și goli, care mărginesc domeniul din partea stângă și dreaptă corespunzător. Însă, dacă câmpul electric mediu se modifică și starea de echilibru dinamic se deteriorează, domeniul începe să se deplaseze de-a lungul cristalului. Sarcina domeniului este destul de mare, de aceea când el va atinge polul pozitiv al cristalului în circuit va apărea un salt de curent electric (Fig. 4.11, *h*). După ce primul domen atinge polul pozitiv al cristalului și în circuitul electric apare oscilație a curentului electric, în probă apare alt sector cu câmp electric mărit. Pe măsura

aparitiei noilor domene și deplasării lor de-a lungul cristalului au loc oscilații ale curentului electric în timp.

Vom analiza, care poate fi frecvența oscilațiilor electrice ce apar într-un cristal de lungime  $L=10\mu m$ . La aplicarea câmpului electric, domeniul se deplasează în cristal cu viteza de drift  $v_{dr} \approx 10^5 m/s$ , atunci perioada oscilațiilor Gunn va fi egală cu

$$T = \frac{L}{v_{dr}}. \quad (4.57)$$

Respectiv, frecvența oscilațiilor va fi

$$f = \frac{1}{T} = \frac{v_{dr}}{L} = \frac{10^5}{10 \cdot 10^{-6}} = 10^{10} Hz. \quad (4.58)$$

Menționăm că lungimea cristalului este o mărime finită și este problematic de a confecționa cristale cu dimensiuni mai mici. Dacă  $L$  va fi suficient de mare, în cristal pot apărea simultan câteva regiuni cu câmp electric înalt, care vor atinge polul pozitiv al probei în diferite momente de timp. În acest caz, la oscilațiile curentului electric apare un zgomot. Pentru  $L=2,5$  mm pot fi confecționate diode Gunn ce vor funcționa la frecvența de  $f \sim 10^7$  Hz, ceea ce reprezintă limita de jos a frecvențelor posibile. Însă, trebuie de remarcat că creșterea câmpului electric în domen duce la scăderea acestuia în restul probei, unde posibilitatea apariției domnelor se micșorează.

Efectul Gunn a fost observat nu doar în  $GaAs$ , dar și în alte materiale:  $InP$  ( $\mathcal{E}_{crit} \approx 6$  kV/cm),  $CdTe$  ( $\mathcal{E}_{crit} \approx 13$  kV/cm),  $ZnSe$ ,  $InAs$ , dar la momentul actual se folosesc diode ce sunt confecționate pe baza  $GaAs$ .

Forma oscilațiilor semnalului electric și, respectiv, ale domeniului cu sarcina acumulată, depinde de concentrația donozilor, care, de obicei, pentru  $GaAs$  se află în domeniul de la  $10^{15} \dots 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . În dependența de această concentrație, oscilațiile pot avea formă triunghiulară sau trapezoidală.

*Subliniem că efectul Gunn este determinat de prezența în banda de conducție a două văi cu mase efective diferite și, respectiv, și mobilități diferite ale electronilor. La tranzițiile electronilor dintr-o vale în alta se schimbă conductibilitatea și în rezultat apar oscilații ale curentului electric.*

## Capitolul V. FENOMENELE CINETICE ÎN SEMICONDUCTORI

### 5.1. Efectul Hall în semiconductorul cu un singur tip de purtători de sarcină

Efectul Hall este cel mai des exploatat dintre toate efectele galvanomagnetice, deoarece permite a determina, printr-o metodă relativ simplă, concentrația purtătorilor de sarcină în semiconductor.

Efectul Hall este un amp n galvanomagnetic care apare la acțiunea simultană a câmpurilor electric și magnetic asupra semiconductorului. Fie că de-a lungul semiconductorului se aplică un

amp electric exterior  $\vec{\mathcal{E}}_{ext}$  și, ca rezultat, prin semiconductor trece un

amp nt electric cu densitatea  $\vec{j}$ . Purtătorii de sarcină obțin viteza de drift  $\vec{v}_{dr}$  îndreptată: pentru goluri – în aceeași direcție ca și câmpul electric exterior (Fig. 5.1, a), pentru electroni – în direcție opusă (Fig. 5.1, b). Introducem semiconductorul într-un amp magnetic slab, cu vectorul inducției magnetice  $\vec{B}$  orientat perpendicular pe direcția curentului electric. Forța lui Lorentz

$$\vec{F}_L = e \left[ \vec{v}_{dr} \times \vec{B} \right] \quad (5.1)$$

acționează asupra purtătorului de sarcină în mișcare și abate direcția de deplasare a acestuia în direcție perpendiculară atât  $\vec{j}$ , cât și  $\vec{B}$ . Conform legii mâinii stângi, golurile se vor abate spre latura de sus a cristalului (Fig. 5.1, a), care se va încarcă pozitiv. Deci, o latură a eșantionului se încarcă cu sarcină negativă, iar latura opusă – cu sarcină pozitivă și apare câmpul electric, numit *câmpul electric Hall*:

$$\vec{F}_H = e\vec{\varepsilon}_H, \quad (5.2)$$

unde  $\vec{\varepsilon}_H$  – intensitatea câmpului electric Hall.

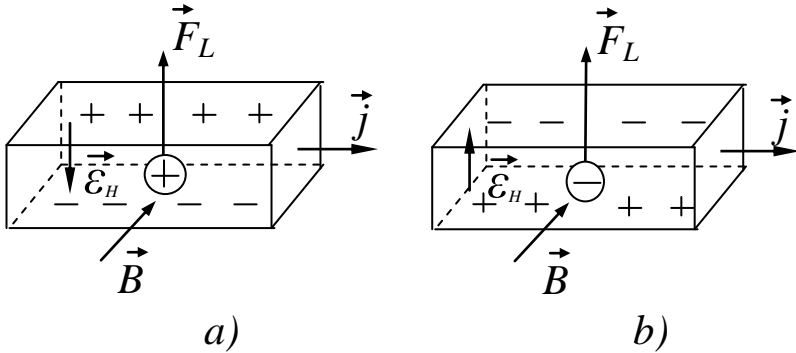


Fig. 5.1. Apariția câmpului electric Hall în semiconductori de tip-p (a) și de tip-n (b).

Menționăm că direcția câmpului  $\vec{\varepsilon}_H$  depinde de tipul de conductibilitate a semiconductorului. Unghiul dintre direcția vitezei de drift și direcția de abatere a sarcinilor electrice se numește *unghiul Hall* –  $\varphi_H$ . Acumularea sarcinii va avea loc până când forța câmpului electric Hall nu va egala forța Lorentz

$$e \left[ \vec{v}_{dr} \times \vec{B} \right] = e\vec{\varepsilon}_H, \quad (5.3)$$

unde  $\vec{\varepsilon}_H$  – intensitatea câmpului electric Hall. După cum se observă din Figura 5.1, direcția  $\vec{\varepsilon}_H$  depinde de tipul de conductibilitate a semiconductorului: pentru tipul-p –  $\vec{\varepsilon}_H$  este orientată de la fața superioară a paralelipipedului în jos; pentru tip-n – invers, de jos în sus.

Transformăm (5.3) pentru cazul semiconductorului de tip-p:

$$ev_{dr}B = e\varepsilon_H, \quad (5.4)$$

Înmulțim ambele părți ale ecuației (5.4) cu  $p$ :

$$e v_{dr} p \cdot B = e p \varepsilon_H, \quad (5.5)$$

unde  $e v_{dr} p$  este densitatea curentului electric, care este egală cu intensitatea curentului electric ce străbate o unitate de arie a secțiunii transversale a paralelipipedului:

$$e p v_{dr} = j = \frac{I}{a \cdot d}, \quad (5.6)$$

unde  $a$  este înălțimea cristalului,  $d$  – grosimea acestuia pe direcția câmpului magnetic. Diferența de potențial Hall, care apare pe direcția înălțimii cristalului, este egală cu

$$U_H = a \varepsilon_H. \quad (5.7)$$

Obținem:

$$\frac{I}{a \cdot d} B = e p \frac{U_H}{a}, \quad (5.8)$$

de unde 
$$U_H = \frac{1}{e \cdot p} \cdot \frac{I \cdot B}{d}. \quad (5.9)$$

Mărimea  $\frac{1}{e \cdot p}$  se numește *coeficientul* sau *constanta Hall*, care pentru goluri este pozitivă, iar pentru electroni – negativă, și anume:

$$R_{H p} = \frac{1}{e \cdot p} \text{ și } R_{H n} = -\frac{1}{e \cdot n}. \quad (5.10)$$

La demonstrarea formulei (5.10) nu s-a luat în considerare distribuția golurilor după viteza termică. Dacă se va lua în considerare distribuția Maxwell a golurilor după viteză, atunci formula pentru coeficientul Hall va fi:

$$R_{H p} = \frac{A_H}{e \cdot p} \text{ și } R_{H n} = -\frac{A_H}{e \cdot n} \quad (5.11)$$

unde  $A_H$  este factorul Hall, care reprezintă produsul  $A_H = A_r \cdot A_k$ , și depinde de mecanismul de împrăștiere –  $A_r$  și de anizotropia cristalului –  $A_k$ .

Pentru semiconductori monoatomici (*Si*, *Ge*), luând în considerare mecanismul de împrăștiere, factorul Hall este:

$$A_{ac} = \frac{3\pi}{8} = 1,17 - \text{împrăștierea pe fononi acustici};$$

$$A_{opt.T>\theta} = 1,11 - \text{împrăștierea pe fononi optici};$$

$$A_N = 1 - \text{împrăștierea pe impurități neutre};$$

$$A_I = 1,93 - \text{împrăștierea pe ioni de impuritate};$$

$$A_{deg.} = 1 - \text{semiconductorul degenerat}.$$

Observăm că numai în cazul împrăștierii pe ionii de impuritate valoarea  $A_H$  diferă considerabil de unu. În toate celelalte cazuri, factorul Hall tinde spre unitate,  $A_H \approx 1$ .

Deosebim două forme de mobilitate: mobilitatea de drift, ce apare în semiconductor la aplicarea doar a câmpului electric și mobilitatea Hall, ce apare în cazul când semiconductorului îi sunt aplicate atât câmpul electric, cât și câmpul magnetic.

Conductibilitatea este

$$\sigma = ep\mu_{dr} \frac{A_H}{A_H} = \frac{ep}{A_H} A_H \mu_{dr} = \frac{1}{R_H} \mu_H, \quad (5.12)$$

unde  $\mu_{dr}$  este mobilitatea de drift, iar mobilitatea Hall

$$\mu_H = A_H \mu_{dr}. \quad (5.13)$$

Din (5.13) reiese că cunoscând  $R_H$  și  $\sigma$  putem determina experimental mobilitatea Hall

$$\mu_H = R_H \cdot \sigma. \quad (5.14)$$

*Efectul Hall este un efect galvanomagnetic, care permite determinarea experimentală și simplă a concentrației purtătorilor de sarcină și a tipului de conductibilitate.*

## 5.2. Câmpuri magnetice slabe și puternice

Acțiunea câmpului magnetic asupra mișcării purtătorilor de sarcină în mare măsură depinde de mărimea acestui câmp. Trebuie de remarcat faptul că dacă pentru un semiconductor câmpul magnetic se consideră slab, pentru alt semiconductor același câmp magnetic poate fi puternic. Pentru determinarea criteriului de câmp magnetic puternic sau



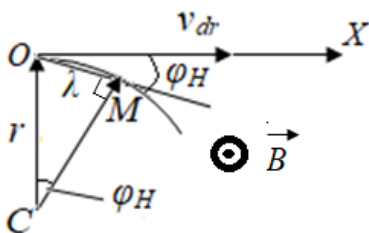


Fig. 5.2. Abaterea golului în câmp magnetic.

slab să analizăm mișcarea unui gol în câmpurile electric și magnetic reciproc perpendiculare (Fig. 5.2).

Golul se mișcă cu viteza  $v_{dr}$  de-a lungul axei X, direcția câmpului magnetic cu inducția magnetică  $B$  este perpendiculară planului desenului. Traectoria mișcării golului în câmpurile electric și

magnetic este supusă acțiunii forței Lorentz și tinde spre o orbită circulară cu raza  $r$ , situată într-un plan perpendicular direcției inducției magnetice. În cazul dat, arcul  $OM$  este traectoria golului. Dacă vom nota pe traectoria  $OM$  un segment foarte mic  $\lambda$ , care reprezintă lungimea parcursului liber, atunci unghiul dintre  $v_{dr}$  și  $OM$  este unghiul Hall  $\varphi_H$ , care este, de asemenea, egal cu unghiul de rotație al razei circumferinței.

În stare de echilibru dinamic, forța Lorentz este echilibrată de forța centripetă, și anume:

$$ev_{dr}B = \frac{m_p v_{dr}^2}{r} \rightarrow r = \frac{m_p v_{dr}}{eB} \quad (5.15)$$

Timpul în care purtătorul de sarcină efectuează o rotație completă pe orbita cu raza  $r$  este

$$t = \frac{2\pi r}{v_{dr}} = \frac{2\pi m_p v_{dr}}{v_{dr} e B} = \frac{2\pi m_p}{eB} \quad (5.16)$$

Relația dintre raza traectoriei și lungimea parcursului liber al purtătorului de sarcină pune în evidență deosebirea dintre câmp magnetic slab și cel puternic. *Câmpul magnetic se consideră slab*, dacă  $\lambda \ll r$  sau  $\tau \ll t$ , unde  $\tau$  este timpul parcursului liber, adică timpul între 2 ciocniri. Dacă câmpul magnetic este slab, atunci traectoria mișcării electronului se va abate puțin de la direcția lui inițială, deci se va abate cu un unghi mic

$$\sin \varphi_H \approx \varphi_H = \frac{\lambda}{r} = \lambda \frac{eB}{m_p v_{dr}} = \frac{\lambda}{v_{dr}} \frac{eB}{m_p} = \frac{e\tau}{m_p} B = \mu B, \quad (5.17)$$

unde  $\mu$  este mobilitatea.

Reieșind din condiția câmpului magnetic slab  $\lambda \ll r$  sau  $\frac{\lambda}{r} \ll 1$ , obținem *criteriul câmpului magnetic slab*:

$$\varphi_H = \mu B \ll 1. \quad (5.18)$$

Este evident că pentru *câmpul magnetic puternic* inegalitatea este inversă:

$$\varphi_H = \mu B \gg 1. \quad (5.19)$$

Egalitatea  $\mu B_{critic} = 1$  corespunde câmpului magnetic de trecere de la câmpul magnetic slab la câmpul magnetic puternic.

Criteriul câmpului magnetic nu depinde de materialul dat, ci doar de mobilitatea purtătorilor de sarcină. Deoarece mobilitatea depinde de temperatură, se poate întâmpla că pentru unul și același cristal, la temperaturi joase, când  $\mu$  de obicei este mare, se îndeplinește condiția (5.19), iar la temperaturi ridicate, când  $\mu$  se micșorează, se îndeplinește condiția (5.18). De exemplu, pentru germaniu:

a) la  $T=77\text{ K}$ ,  $\mu=10\text{ m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ , inducția magnetică  $B_{critic}=0,1\text{ T}$ ;

b) la  $T=300\text{ K}$ ,  $\mu=0,4\text{ m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  și  $B_{critic}=2,5\text{ T}$ .

Rezultă că la temperaturi joase câmpul magnetic, de exemplu, cu  $B=0,5\text{ T}$  ( $\mu B = 5 \gg 1$ ) este puternic, iar la temperaturi ridicate ( $\mu B = 0,2 \ll 1$ ) câmpul magnetic este slab.

Expresiile (5.18) și (5.19) se referă la câmpurile magnetice slabe și puternice din punctul de vedere al fizicii clasice. Mai există noțiunea de câmp puternic cuantic, când mărimea câmpului este atât de mare, încât are loc despicarea (cuantificarea) nivelurilor energetice, ceea ce duce la apariția nivelurilor Landau.

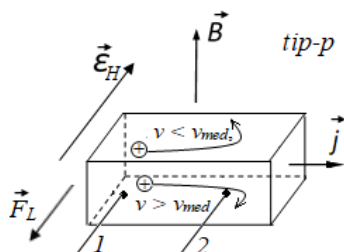
*În câmpurile magnetice slabe ( $\lambda \ll r$ ), traiectoria purtătorului de sarcină este curbată neglijabil, iar în câmpurile magnetice puternice*

traectoria se schimbă esențial și poate deveni o circumferință sau o cicloidă.

### 5.3. Efectul magnetorezistiv

Un alt efect galvanomagnetic poartă denumirea de *efect magnetorezistiv*. Acest efect constă în variația rezistivității electrice a semiconductorului, atunci când paralel sau perpendicular pe direcția curentului electric este aplicat un câmp magnetic. Corespunzător, efectul magnetorezistiv se numește longitudinal sau transversal.

Să considerăm cazul unui semiconductor cu un singur tip de purtători de sarcină, de exemplu, tip-*p*. Fie că curentul  $I$  curge de-a lungul cristalului, care are forma unui paralelipiped, în direcția abscisei  $OX$ , iar câmpul magnetic  $B$  este aplicat perpendicular pe direcția



**Fig. 5.3.** Abaterea golurilor în dependență de viteza lor.

curentului de-a lungul axei  $OZ$ . Atunci, concomitent cu apariția câmpului electric Hall, pe direcția ordonatei  $OY$  se va observa și schimbarea rezistenței, fapt ce poate fi determinat măsurând diferența de potențial de-a lungul cristalului între contactele 1 și 2 (Fig. 5.3). Conform legii Ohm, poate fi calculată rezistivitatea specifică a cristalului,

care în lipsa câmpului magnetic este  $\rho_0$ , iar în prezența acestuia –  $\rho_B$ . Menționăm că în majoritatea semiconductorilor în câmpul magnetic rezistența crește.

Să analizăm mai detaliat în ce constă esența acestui efect. La analiza efectului Hall a fost menționat că acumularea purtătorilor de sarcină are loc până când forța câmpului electric Hall nu va fi egalată de forța Lorentz, deci

$$e\vec{E}_H = e[\vec{v}_{med} \times \vec{B}]. \quad (5.20)$$

Până la stabilirea echilibrului dinamic pe direcția  $OY$  curge un curent  $j_{Hy}$ , iar când se stabilește echilibru dinamic separarea purtătorilor de sarcină nu mai are loc și  $j_{Hy} = 0$ . Acum, toți purtătorii de sarcină cu viteza medie  $v_{med}$  se vor deplasa de-a lungul probei, adică pe direcția  $OX$  fără a-și schimba traiectoria. Astfel, numărul purtătorilor de sarcină ce intersectează secțiunea transversală cristalului într-o unitate de timp nu se schimbă, respectiv nu ar trebui să se schimbe nici rezistența. Totuși, experimentul va arata că rezistența probei se schimbă.

a) Prima cauză constă în distribuția Maxwell-Boltzmann a purtătorilor după viteză: majoritatea purtătorilor de sarcină au viteză medie  $v_{med}$ , însă sunt și purtători de sarcină care au viteză mai mare sau mai mică decât viteza medie. Să numim acești purtători rapizi, dacă  $v > v_{med}$  și lenți, dacă  $v < v_{med}$ . Anume datorită acestor purtători de sarcină are loc schimbarea rezistenței cristalului, deoarece numai ei continuă să-și modifice traiectoria de mișcare după stabilirea stării de echilibru. Pentru purtătorii rapizi ( $v > v_{med}$ )  $F_L > e \varepsilon_H$  și, dacă purtătorii sunt goluri, ultimii se vor deplasa sub acțiunea forței Lorentz la dreapta. Purtătorii lenți ( $v < v_{med}$ ), pentru care  $F_L < e \varepsilon_H$ , se vor deplasa sub acțiunea forței câmpului electric Hall în sens opus (la stânga) (Fig. 5.3).

b) A doua cauză care duce la apariția efectului magnetorezistiv constă în micșorarea parcursului liber al purtătorilor pe direcția câmpului electric  $\varepsilon_x$ . Să analizăm traiectoria unui gol ce se mișcă sub acțiunea câmpului electric  $\varepsilon_x$  de-a lungul axei  $OX$  (Fig. 5.4). Drumul de parcurs liber este  $\lambda_0 = OA$ .

La aplicarea câmpului magnetic  $B$ , purtătorul își va schimba traiectoria cu unghiul  $\varphi$ , traiectoria lui este arcul  $OC = \lambda_0$ , iar proiecția parcursului liber pe direcția câmpului electric (axa  $OX$ ) se va micșora cu  $\Delta\lambda = AD$ , care este egală cu

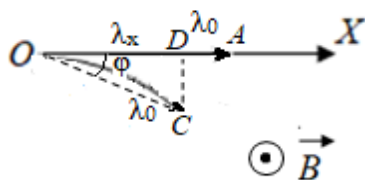


Fig. 5.4. Micșorarea parcursului liber pe direcția curentului electric.

$$\Delta\lambda = OA - OD = \lambda_0 - \lambda_0 \cos \varphi = \lambda_0 (1 - \cos \varphi) = \lambda_0 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \quad (5.21)$$

În câmpurile magnetice slabe ( $\mu B \ll l$ ) unghiul  $\varphi$  este mic și  $\sin^2 \frac{\varphi}{2}$  poate fi înlocuit cu  $\frac{\varphi^2}{4}$ . Atunci, variația relativă a drumului de parcurs este

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = \frac{2\lambda_0 \varphi^2}{4\lambda_0} = \frac{\varphi^2}{2}. \quad (5.22)$$

Luând în considerare că unghiul de abatere al purtătorului de sarcină este unghiul Hall, care este proporțional cu produsul dintre  $\mu \cdot B$  (formula (5.18)), obținem:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = \frac{\mu^2 B^2}{2}. \quad (5.23)$$

Variația rezistivității este proporțională cu variația parcursului liber  $\Delta\rho \sim \Delta\lambda$ . Într-adevăr:

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = ep\mu = ep \frac{e\tau}{m_p} = ep \frac{e}{m_p} \frac{\lambda}{v_{dr}} = \frac{e^2 p}{m_p^2 v_{dr}} \lambda. \quad (5.24)$$

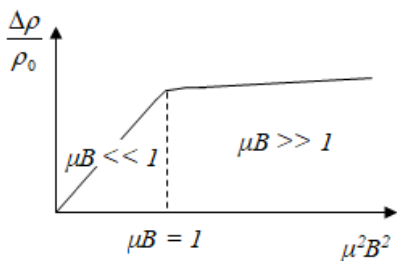
În conformitate cu (4.81) și (4.82), se poate scrie

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \approx \frac{\Delta\rho}{\rho_0} \approx \frac{\mu^2 B^2}{2}. \quad (5.25)$$

Astfel, odată cu micșorarea drumului de parcurs liber rezistivitatea crește. În rezultatul schimbării traiectoriei purtătorului de sarcină în câmp magnetic, deplasarea lui de-a lungul direcției câmpului electric suferă dificultăți și rezistența crește.

Experimental, pentru a analiza efectul magnetorezistiv se măsoară variația diferenței de potențial între contactele 1 și 2 (Fig. 5.3), deoarece

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{\rho(B) - \rho_0(0)}{\rho_0(0)} = \frac{U(B) - U_0(0)}{U_0(0)}. \quad (5.26)$$



**Fig. 5.5.** Dependența magnetorezistenței de mărimea câmpului magnetic.

și se construiește graficul  $\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = f(\mu^2 B^2)$ . În axele de coordonate corespunzătoare (Fig. 5.5), conform (5.25), în câmpurile magnetice slabe se observă o linie dreaptă. În câmpuri magnetice puternice, purtătorul de sarcină se abate într-atât, încât traiectoria lui devine o cicloidă. Ca rezultat, nu mai are loc separarea sarcinilor și, evident, magnetorezistența devine

constantă, ceea ce pe grafic este reprezentat printr-o dreaptă practic orizontală. În acest domeniu, mărimea  $\Delta\rho/\rho_0$  depinde numai de mecanismul de împrăștiere.

*În concluzie, menționăm că efectul magnetorezistiv nu depinde nici de tipul de purtători de sarcină, nici de direcția câmpului magnetic.*

#### **5.4. Efectul Hall în semiconductori cu conductibilitate mixtă**

La temperaturi destul de ridicate, în semiconductorul extrinsec, paralel cu purtătorii de sarcină majoritari, apar purtătorii de sarcină minoritari, a căror concentrație devine atât de mare, încât nu poate fi neglijată. De obicei, aceasta se observă în regiunea trecerii conductibilității de la domeniul de epuizare la domeniul cu conductibilitate intrinsecă (Fig. 5.6, între 2 și 3) și această regiune poartă denumirea de *domeniu cu conductibilitate mixtă*.

Vom analiza efectul Hall într-un semiconductor în domeniul cu conductibilitate mixtă mixtă.

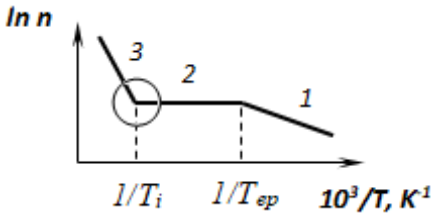


Fig. 5.6. Domeniu cu conductibilitate mixtă.

Considerăm că câmpul electric exterior  $\vec{\mathcal{E}}$  este orientat de-a lungul axei  $OX$ , iar câmpul magnetic  $\vec{B}$  – de-a lungul axei  $OZ$ . Câmpul magnetic este slab, deci se îndeplinește criteriul  $\mu B \ll l$  și unghiul Hall de abatere a electronilor și a golurilor este mic (Fig. 5.7). În

lipsa câmpului magnetic, mișcarea golurilor coincide cu direcția câmpului electric exterior  $\mathcal{E}_x$ , electronii se mișcă în sens opus. Forța Lorentz acționează asupra electronilor și asupra golurilor în aceeași direcție de-a lungul axei  $OY$  și traiectoria electronilor și a golurilor se curbează. Golurile se abat de la direcția inițială cu unghiul Hall  $\varphi_p$  formând curentul cu densitatea  $\vec{j}_p$ ; densitatea curentului electronilor  $\vec{j}_n$  formează cu axa  $OX$  unghiul Hall  $\varphi_n$ . Luând în considerare sarcina negativă a electronilor,  $\vec{j}_n$  este îndreptat în direcție opusă traiectoriei mișcării electronilor.

Densitatea curentului rezultat va fi gală cu

$$\vec{j} = \vec{j}_n + \vec{j}_p, \quad (5.27)$$

unde 
$$\vec{j}_n = \sigma_n \vec{\mathcal{E}} = en\mu_n \vec{\mathcal{E}}, \quad (5.28 a)$$

$$\vec{j}_p = \sigma_p \vec{\mathcal{E}} = ep\mu_p \vec{\mathcal{E}}. \quad (5.28 b)$$

Pe desen, vectorul densității curentului electric rezultat este reprezentat prin diagonala paralelogramului, laturile căruia sunt  $\vec{j}_p$  și  $\vec{j}_n$ .

Atunci, unghiul dintre direcția câmpului electric  $\vec{\mathcal{E}}$  și direcția curentului electric rezultant  $\vec{j}$  este unghiul Hall rezultant  $\varphi_H$ .

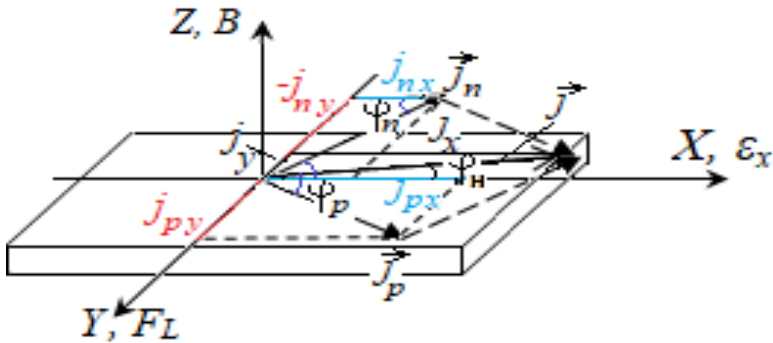


Fig. 5.7. Efectul Hall în semiconductorul cu conductibilitate mixtă.

Proiecțiile vectorului densității curentului electric rezultant  $\vec{j}$  pe axele  $OX$  și  $OY$  permit a determina acest unghi, luând în considerare că câmpul magnetic este slab:

$$\operatorname{tg} \varphi_H \approx \varphi_H = \frac{j_y}{j_x}. \quad (5.29)$$

Din Figura 5.7 vom determina  $j_y$  și  $j_x$  care reprezintă suma densităților de curent a electronilor și a gurilor pe axa  $OX$  (culoarea albastră) și pe axa  $OY$  (culoarea roșie), și anume:

$$j_x = j_{nx} + j_{px} = j_n \cos \varphi_n + j_p \cos \varphi_p \quad (5.30)$$

și 
$$j_y = j_{py} - j_{ny} = j_p \sin \varphi_p - j_n \sin \varphi_n. \quad (5.31)$$

Menționăm că câmpul magnetic este slab, de aceea se poate considera că

$$\cos \varphi_n \approx 1, \quad \cos \varphi_p \approx 1, \quad \sin \varphi_p \approx \varphi_p, \quad \sin \varphi_n \approx \varphi_n. \quad (5.32)$$

Astfel, conform (5.28), expresiile (5.30) și (5.31) se transformă în

$$j_x = j_n + j_p = en\mu_n \mathcal{E} + ep\mu_p \mathcal{E} = e \mathcal{E} (n\mu_n + p\mu_p), \quad (5.33)$$



$$\begin{aligned} j_y &= j_p \varphi_p - j_n \varphi_n = ep\mu_p \mathcal{E} \cdot \varphi_p - en\mu_n \mathcal{E} \cdot \varphi_n = \\ &= e\mathcal{E}(p\mu_p \varphi_p - n\mu_n \varphi_n). \end{aligned} \quad (5.34)$$

Luând în considerare (5.17), unghiurile Hall sunt egale cu

$$\varphi_n = \mu_n B \text{ și } \varphi_p = \mu_p B. \quad (5.35)$$

Înlocuim (5.35) în  $j_p$  și  $j_n$  din (5.34) și apoi determinăm unghiul Hall conform (5.29):

$$\varphi_H = \frac{j_y}{j_x} = \frac{e\mathcal{E}B(p\mu_p^2 - n\mu_n^2)}{e\mathcal{E}(p\mu_p + n\mu_n)} = \frac{B(p\mu_p^2 - n\mu_n^2)}{p\mu_p + n\mu_n}. \quad (5.36)$$

Pe de alta parte, unghiul Hall este

$$\varphi_H = \mu B, \quad (5.37)$$

unde, menționăm,  $\mu$  este mobilitatea de drift.

Luând în considerare (5.13) și (5.14) obținem:

$$\varphi_H = \mu B = \frac{\mu_H}{A_H} B = \frac{R_H \sigma B}{A_H}, \quad (5.38)$$

de unde coeficientul Hall este

$$R_H = \frac{\varphi_H \cdot A_H}{\sigma B} = \frac{\varphi_H A_H}{e(n\mu_n + p\mu_p)B}. \quad (5.39)$$

Înlocuim  $\varphi_H$  din (5.36) în expresia (5.39) și obținem formula generală pentru coeficientul Hall, care este valabilă pentru orice domeniu de temperaturi:

$$R_H = \frac{A_H}{e} \frac{(p\mu_p^2 - n\mu_n^2)}{(p\mu_p + n\mu_n)^2}. \quad (5.40)$$

Semnul coeficientului Hall din (5.40) depinde de corelația dintre mobilitățile și concentrațiile electronilor și ale goliurilor.

Vom analiza dependența coeficientului Hall de temperatură pentru semiconductorii cu diferite tipuri de conductibilitate.

a) Semiconductorul cu impuritate donoare (tip-n):

1. În domeniul de temperaturi joase concentrația purtătorilor de sarcină majoritari – a electronilor – este cu mult mai mare decât

concentrația golurilor ( $n \gg p$ ); astfel, ultima poate fi neglijată. Atunci, în regiunea 1 (Fig. 5.6) ecuația (5.40) se transformă în

$$R_{Hn} = -\frac{A_H}{en}, \quad (5.41)$$

iar în domeniul 2 –

$$R_{Hn} = -\frac{A_H}{eN_d}. \quad (5.42)$$

2. În domeniul cu conductibilitate mixtă este valabilă expresia (5.40), produsul  $n\mu_n^2 > p\mu_p^2$  și coeficientul Hall în această regiune de temperaturi, de asemenea, va fi negativ.

3. În regiunea 3, cu conductibilitate intrinsecă, când  $p = n = n_i$ , obținem:

$$R_H = \frac{A_H}{e} \frac{n_i(\mu_p^2 - \mu_n^2)}{n_i^2(\mu_p + \mu_n)^2} = \frac{A}{en_i} \frac{(\mu_p - \mu_n)(\mu_p + \mu_n)}{(\mu_n + \mu_p)^2}$$

sau

$$R_{Hi} = \frac{A}{en_i} \frac{\mu_p - \mu_n}{\mu_p + \mu_n}. \quad (5.43)$$

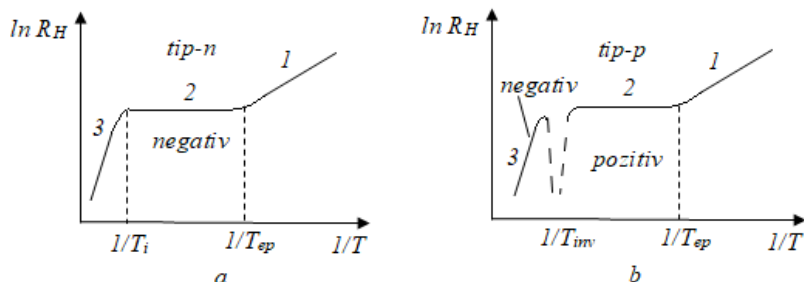


Fig. 5.8. Dependența coeficientului Hall de temperatură.

Menționăm că mobilitatea electronilor, de regulă, este mai mare decât mobilitatea golurilor; rezultă că în semiconductorul cu impuritate donoare în toate domeniile de temperaturi coeficientul Hall este negativ (Fig. 5.8, a).

b) Semiconductorul cu impuritate acceptoare (tip-p):

1. În domeniul de temperaturi joase concentrația electronilor este cu mult mai mică decât concentrația golurilor ( $p \gg n$ ) și poate fi neglijată. Atunci în regiunile 1 și 2 coeficientul Hall este egal cu

$$R_{Hp} = \frac{A_H}{ep} \text{ și } R_{Hp} = \frac{A_H}{eN_a}, \quad (5.44)$$

respectiv (Fig. 5.8 *b*). Menționăm că pentru semiconductorul de tip- $p$  în acest domeniu de temperaturi coeficientul Hall este pozitiv.

2. În domeniul cu conductibilitate mixtă concentrația electronilor începe să crească; astfel, al doilea termen din numărătorul expresiei (5.40) crește și la o anumită temperatură el devine egal cu primul  $p\mu_p^2 = n\mu_n^2$ . Apoi, al doilea termen devine mai mare decât primul și semnul coeficientului Hall se schimbă din pozitiv în negativ. Această schimbare a semnelui se numește *inversia coeficientului Hall* și pe grafic, când  $T_{inv} \approx T_i$  (Fig. 5.8, *b*), se observă micșorarea bruscă, iar apoi creșterea bruscă, cu semnul negativ, a coeficientului Hall.

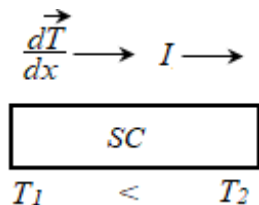
3. În continuare, la creșterea temperaturii, se aplică formula (5.43) pentru semiconductorul intrinsec. Coeficientul Hall este negativ și scade odată cu creșterea temperaturii, deoarece concentrația purtătorilor de sarcină crește.

*Dependențele coeficientului Hall de temperatură arată caracterul variației concentrației odată cu creșterea temperaturii, ceea ce permite determinarea experimentală a energiei de activare a purtătorilor de sarcină liberi.*

### **5.5. Clasificarea efectelor termoelectrice în semiconductori**

La efecte termoelectrice se referă următoarele 3 efecte:

1. Efectul Thomson
2. Efectul Seebeck sau efectul apariției tensiunii termoelectromotoare (t.e.m.)
3. Efectul Peltier.



**Fig. 5.9.** Efectul Thomson.

I. *Efectul Thomson.* Considerăm un semiconductor (SC) ale cărui capete se află la temperaturi diferite  $T_1$  și  $T_2$ , unde  $T_2 > T_1$  (Fig. 5.9). La trecerea unui curent electric  $I$  printr-un semiconductor, de-a lungul căruia există un gradient de temperatură  $\frac{dT}{dx}$ , atunci,

concomitent cu degajarea căldurii Joule-Lentz, are loc și o degajare sau absorbție suplimentară de căldură, a cărei mărime poate fi determinată cu ajutorul relației

$$Q_T = \tau I (T_2 - T_1) t, \quad (5.45)$$

unde  $Q_T$  – căldura Thomson,  $\tau$  – coeficientul Thomson,  $t$  – timpul.

Procesul de degajare sau de absorbție a căldurii depinde de relația dintre direcția curentului electric și cea a gradientului de temperatură. Dacă sensul curentului electric coincide cu sensul gradientului de temperatură, atunci  $\tau > 0$  și  $Q_T > 0$ . În caz contrar,  $\tau < 0$  și  $Q_T < 0$ , ceea ce duce la absorbția căldurii.

Vom analiza cauzele apariției efectului Thomson. Considerăm că sensul mișcării electronilor sub acțiunea câmpului electric exterior coincide cu sensul gradientului de temperatură. În acest caz, are loc deplasarea electronilor cu energie mai mică, de la capătul rece spre capătul mai cald. Ajungând la capătul mai cald, electronii absorb energia rețelei cristaline. Dacă sensul de deplasare a electronilor și sensul gradientului de temperatură nu coincid, atunci electronii mai calzi, ajungând la capătul mai rece, cedează căldura  $Q_T$  rețelei cristaline.

Menționăm că efectul Thomson are un caracter mai mult teoretic decât practic. Celelalte două efecte termoelectrice au o aplicare practică cu mult mai însemnată.

II. *Efectul Seebeck.* Considerăm doi conductori diferiți 1 și 2, care contactează în punctele A și B (Fig. 5.10). Dacă punctele A și B se

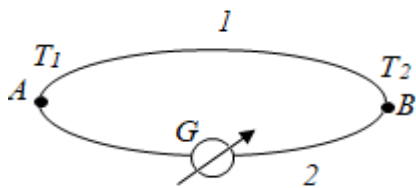


Fig. 5.10. Apariția tensiunii t.e.m.

află la temperaturi diferite, atunci în acest circuit va apărea o tensiune diferențială termoelectromotoare (t.e.m.)

$$U_{\alpha} = \alpha(T_2 - T_1) = \alpha\Delta T, \quad (5.46)$$

unde  $U_{\alpha}$  – tensiunea t.e.m.,

$\Delta T$  – diferența de temperatură,  $\alpha$  – coeficientul termoelectric diferențial.

Efectul Seebeck a fost observat pentru prima dată în metale, însă în semiconductori acest efect este cu câteva ordine mai mare. Din aceasta cauză, când este necesar de a determina coeficientul termoelectric pentru un semiconductor, se recurge la determinarea acestuia față de un metal, pentru care  $\alpha$  este foarte mic. De obicei, se folosește circuitul prezentat în Figura 5.11: semiconductorul (SC), conductorii metalici (M) și galvanometru. Capetele semiconductorului se află la temperaturile  $T_1$  și  $T_2$  ( $T_2 > T_1$ ).

Există trei cauze care duc la apariția tensiunii t.e.m., pe care le vom analiza în baza unui semiconductor extrinsec de tip-n.

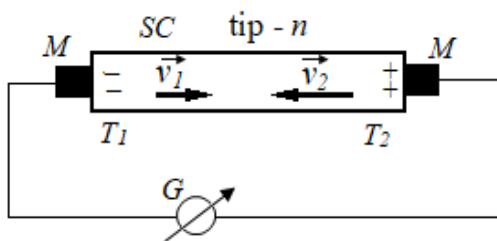


Fig. 5.11. Schema-bloc pentru observarea efectului Seebeck.

a) În semiconductori, energia purtătorilor de sarcină liberi crește odată cu creșterea temperaturii și dacă există o diferență de temperaturi de-a lungul cristalului, purtătorii de sarcină vor avea energie diferită la capetele cristalului și,

respectiv, viteză de mișcare diferită. Astfel, la capătul mai cald, purtătorii de sarcină liberi au o viteză mai mare decât cei de la capătul mai rece și se observă o distribuție neomogenă a purtătorilor de sarcină după viteză de-a lungul probei. În rezultatul difuziei apar 2 fluxuri de

electroni: unul cu viteză mai mare, de la capătul mai cald spre cel rece, altul – spre capătul mai cald, cu viteza purtătorilor mai mică. Deoarece viteza purtătorilor mai calzi este mai mare, ei ajung mai repede la capătul mai rece. Prin urmare, numărul purtătorilor de sarcină (concentrația) la capătul mai rece devine mai mare decât la capătul mai cald. În cazul semiconductorului de tip- $n$  capătul mai rece se încarcă negativ comparativ cu capătul mai cald. Dacă semiconductorul este de tip- $p$ , capătul rece se încarcă pozitiv. Procesul de acumulare a sarcinilor va avea loc până când diferența de potențial, ce apare în urma acumulării, nu va crea un flux de sarcini în direcție opusă. În acest mod, între capetele semiconductorului apare diferență de potențial, a cărei valoare o indică galvanometrul, iar semnul acesteia depinde de tipul purtătorilor de sarcină. Astfel, efectul Seebeck poate fi folosit pentru determinarea tipului de conductibilitate a semiconductorului și pentru aceasta există așa-numita *metoda sondului termic*. Dacă semiconductorul are o conductibilitate ce corespunde regiunii cu conductibilitate mixtă, spre capătul cu temperatură mai mică vor difuza și electroni și goluri. În acest caz, purtătorii de sarcină se vor compensa reciproc și mărimea tensiunii t.e.m. va fi foarte mică.

b) A doua cauză care duce la apariția tensiunii t.e.m. este legată de schimbarea poziției nivelului Fermi odată cu modificarea temperaturii. La creșterea temperaturii crește concentrația purtătorilor de sarcină liberi; prin urmare, concentrația purtătorilor mai calzi va fi mai mare. Concentrația electronilor liberi la capătul mai cald va fi mai mare decât la capătul mai rece, ceea ce mărește neomogenitatea distribuției concentrației purtătorilor de sarcină de-a lungul cristalului.

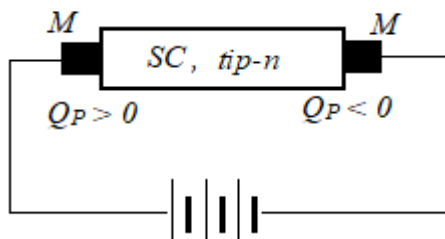
c) A treia cauză ține de efectul de antrenare a electronilor de către fononi (interacțiunea electron-fonon). Gradientul de temperatură duce la apariția unui flux de fononi, care se mișcă de la capătul cald al probei spre cel rece și care antrenează după sine purtătorii de sarcină liberi.

III. *Efectul Peltier*. La trecerea curentului printr-un circuit care constă din 2 materiale diferite, în locul de conectare a acestora, pe lângă

căldura Joule-Lentz, se va degaja sau absorbi (în dependență de direcția curentului electric) o cantitate de căldura suplimentară  $Q_P$ , care poate fi determinată conform relației

$$Q_P = \Pi I t, \quad (5.47)$$

unde  $I$  este intensitatea curentului electric ce trece prin circuit (Fig. 5.12),  $t$  – timpul,  $\Pi$  – coeficientul Peltier.



**Fig. 5.12.** Schema-bloc pentru observarea efectului Peltier.

Este cunoscută următoarea legătură între coeficientul Peltier și coeficientul termoelectric:

$$\Pi = \alpha T, \quad (5.48)$$

unde  $T = \frac{T_1 + T_2}{2}$  este temperatura medie între capetele semiconductorului în efectul Seebeck.

Efectul Peltier apare în rezultatul diferenței energiilor medii ale electronilor de conducție în metalul și în semiconductorul din care este compus circuitul. Degajarea sau absorbția căldurii, ce are loc în locul de contact  $M$ - $SC$ , depinde de tipul de conductibilitate a semiconductorului și de sensul curentului electric.

Să analizăm diagrama energetică a contactului  $M$ - $SC$  nedegenerat de tip- $n$ . După stabilirea stării de echilibru și a diferenței de potențial de contact  $\Phi_c$ , nivelurile Fermi în ambele materiale se vor egala și vor fi situate la același nivel energetic (Fig. 5.13).

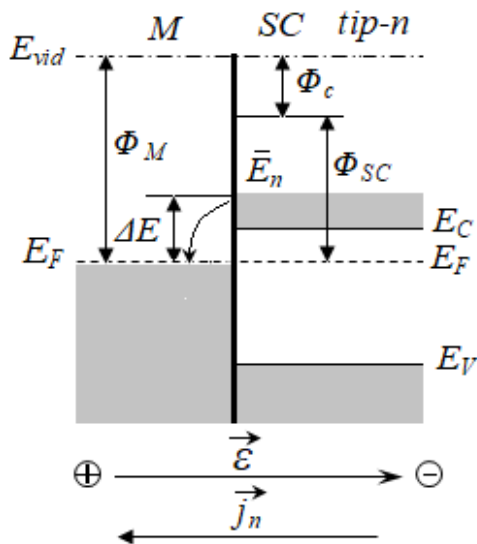


Fig. 5.13. Degajarea energiei  $\Delta E$  la contactul M-SC (efectul Peltier).

În conductibilitatea metalelor participă doar electronii care sunt situați nemijlocit în apropierea nivelului Fermi și energia lor medie, practic, este egală cu energia nivelului Fermi  $E_F$ . Să notăm energia medie a electronilor de conducție în semiconductor prin  $\bar{E}_n$ . Să remarcăm că  $\bar{E}_n$  nu este egală cu energia medie termică a electronilor, deoarece cota-parte a electronilor rapizi, în formarea curentului

electric, este mai mare decât a celor lenți. Calculele au arătat că pentru semiconductorul nedegenerat

$$\bar{E}_n = (r + 2)k_0T, \quad (5.49)$$

unde  $r$  este exponent în dependența parcursului liber de energie

$$\lambda = \text{Const } E^r. \quad (5.50)$$

Exponentul  $r$  depinde de mecanismul de împrăștiere a purtătorilor de sarcină și poate obține valori din intervalul  $0 \leq r \leq 2$ :

$r = 0$  – împrăștiere pe fononii acustici;

$r = 1$  – împrăștiere pe fononii optici;

$r = 2$  – împrăștiere pe ionii de impurități.

În cazul semiconductorului nedegenerat, electronii de conducție sunt situați pe niveluri energetice care se află cu  $\Delta E$  mai sus decât nivelul Fermi, care la contactul M-SC este comun pentru metal și semiconductor. Dacă curentul electric este orientat astfel încât electronii trec din semiconductor în metal (Fig. 5.13), atunci aceștia, trecând în metal, duc cu



sine un exces de energie  $\Delta E$ , deoarece în metal ei se vor situa în apropierea nivelului Fermi. Luând în considerare că energia se socoate de la nivelul  $E_C$ , mărimea acestui exces de energie este

$$\Delta E = \bar{E}_n + (-E_F) . \quad (5.51)$$

Pe de altă parte, energia  $\Delta E$  este căldura Peltier  $Q_p$ . La trecerea unui singur electron din semiconductor în metal conform (5.47) și (5.48) căldura Peltier este

$$Q_p = \Delta E = \Pi I t = \Pi \cdot \frac{e}{t} \cdot t = \Pi \cdot e = \alpha \cdot T \cdot e .$$

Dacă vom introduce această expresie și (5.49) în (5.51), vom obține

$$\alpha T e = (r + 2)k_0 T - E_F . \quad (5.52)$$

Nivelul Fermi se poate determina din relația

$$n = N_C e^{\frac{E_F}{k_0 T}} , \quad (5.53)$$

de unde

$$-E_F = k_0 T \ln \frac{N_C}{n} . \quad (5.54)$$

Înlocuim (5.54) în (5.52)

$$\alpha T e = (r + 2)k_0 T + (r + 2)k_0 T$$

sau

$$\alpha = \frac{k_0}{e} \left\{ (r + 2) + \ln \frac{N_C}{n} \right\} . \quad (5.55)$$

Luând în considerare sarcina negativă a electronilor și cea pozitivă a gurilor obținem:

a) pentru semiconductorul de tip-*n*

$$\alpha_n = -\frac{k_0}{e} \left\{ (r + 2) + \ln \frac{N_C}{n} \right\} ; \quad (5.56 a)$$

b) pentru semiconductorul de tip-*p*

$$\alpha_p = \frac{k_0}{e} \left\{ (r + 2) + \ln \frac{N_V}{p} \right\} . \quad (5.56 b)$$

Expresiile (5.56) reprezintă formula lui Pisarenko, care descrie dependența coeficientului termoelectric de temperatură în

semiconductorii extrinseci. Valoarea lui  $\alpha$  poate atinge valori de  $\frac{mV}{K}$  pentru semiconductori și de  $\frac{\mu V}{K}$  pentru metale.

În semiconductorii cu conductibilitate mixtă coeficientul termoelectric este

$$\alpha = \frac{\alpha_p \mu_p p + \alpha_n \mu_n n}{\mu_p p + \mu_n n} \quad (5.57)$$

Deoarece  $\alpha_n$  și  $\alpha_p$  au semne diferite, existența a doua tipuri de purtători de sarcină duce la micșorarea mărimii  $\alpha$ . Pentru semiconductorul intrinsec ( $n = p = n_i$ ) obținem

$$\alpha_i = \frac{\alpha_p \mu_p + \alpha_n \mu_n}{\mu_n + \mu_p} \quad (5.58)$$

Din (5.58) rezultă că cu cât valorile mobilității electronilor și a golurilor diferă mai puțin, cu atât mai apropiate vor fi valorile  $\alpha_n$  și  $\alpha_p$ , ceea ce înseamnă că  $\alpha_i$  totală va tinde spre zero.

Dependențele  $\alpha_n(T)$  și  $\alpha_p(T)$  sunt reprezentate în Figura 5.14.

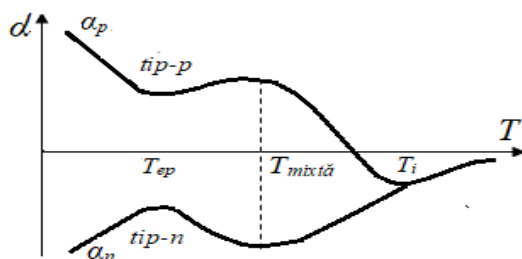


Fig. 5.14. Dependențele  $\alpha_n$  și  $\alpha_p$  de temperatură.

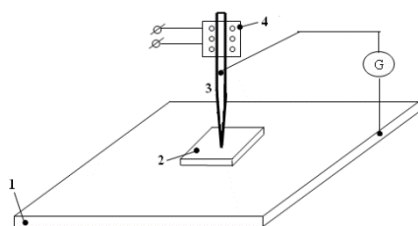
Pentru semiconductorul de tip-n coeficientul  $\alpha_n$  este negativ și odată cu creșterea temperaturii se micșorează după valoarea absolută. În regiunea de epuizare, când  $n = const$ ,  $\alpha_n$  crește puțin datorită creșterii  $N_C$ . Începând cu temperatura  $T_{mixta}$ , când are loc apariția celui de-al doilea tip de purtători de sarcină,  $\alpha_n$  iarăși se micșorează și în semiconductorul intrinsec tinde spre zero.

Pentru semiconductorul de tip- $p$ , coeficientul  $\alpha_p > 0$ , însă la temperaturile de trecere la conductibilitatea intrinsecă  $\alpha_p$  își schimbă semnul și devine negativ, deoarece ca regulă  $\mu_n > \mu_p$ . În domeniul cu conductibilitate intrinsecă curbele se suprapun.

IV. *Determinarea tipului de conductibilitate cu ajutorul termosondei.* Conform efectului termoelectric Seebeck, dacă de-a lungul unei probe există un gradient de temperatură, atunci pe aceeași direcție, de-a lungul probei, apare diferență de potențial și polaritatea acestei diferențe de potențial depinde de tipul de conductibilitate a semiconductorului.

Cea mai simplă metodă de determinare a tipului de conductibilitate a semiconductorului se bazează pe metoda de determinare a polarității tensiunii t.e.m. cu ajutorul unei sonde termice.

Schema instalației pentru determinarea tipului de conductibilitate



**Fig. 5.15.** Metoda termosondei.

este reprezentată în Figura 5.15. Pe o placă metalică masivă 1, care se consideră rece, se instalează proba 2. Sonda termică 3 reprezintă o bară de metal cu capătul ascuțit, care se încălzește cu ajutorul unui cuptor din spirală 4.

Galvanometrul cu poziția „0” în mijlocul scării este conectat într-un circuit cu sonda termică și suportul pentru probă. Între capătul rece și cel cald ale semiconductorului apare o diferență de potențial, a cărei polaritate se înregistrează cu galvanometrul. De obicei, sonda caldă este conectată la borna „+” a galvanometrului, iar suportul rece – la borna „-”.

Dacă la o astfel de conectare săgeata galvanometrului se abate la dreapta (sonda caldă se încarcă pozitiv), atunci conductibilitatea semiconductorului este de tip- $n$ , dacă la stânga (sonda termică se încarcă negativ) – de tip- $p$ .

*Efectul Thomson apare ca rezultat al lucrului mecanic efectuat de câmpul termoelectric pentru deplasarea sarcinilor la trecerea curentului. Acest efect nu a găsit o aplicație practică, însă poate fi folosit pentru determinarea tipului de conductibilitate a semiconductorului.*

*Efectele termoelectrice (Seebeck, Peltier) pot apărea doar într-un circuit care este format din cel puțin două substanțe diferite. Aceste efecte sunt asociate atât cu conversia energiei termice în energie electrică, cât și cu conversia energiei curentului electric în frig, de aceea ele au obținut utilizare, pe scară largă, în confecționarea: termocuplurilor, termoelectrogeneratoarelor, dispozitivelor de răcire, convertoarelor termoelectrice.*

### **5.6. Efecte termomagnetice în semiconductori**

Dacă un semiconductor, de-a lungul căruia există un gradient de temperatură, este introdus într-un câmp magnetic perpendicular acestui gradient, atunci în semiconductor poate apărea sau o tensiune electromotoare, sau un nou gradient de temperatură, îndreptate sau de-a lungul, sau perpendicular primului gradient de temperatură. Aceste efecte se numesc *efecte termomagnetice*, dintre care evidențiem doar patru:

1. Efectul Nernst–Etingshauzen transversal
2. Efectul Nernst–Etingshauzen longitudinal
3. Efectul Righa–Leduc
4. Efectul Maggi–Righa–Leduc.

Să analizăm fiecare efect aparte.

#### **I. Efectul Nernst–Etingshauzen transversal (NET)**

*a) Descrierea efectului.* Dacă de-a lungul unui semiconductor există un gradient de temperatură  $dT/dx$  (Fig. 5.16) și pe direcție perpendiculară acestui gradient este aplicat un câmp magnetic  $B_z$ , atunci pe o treia direcție, perpendiculară atât pe  $dT/dx$ , cât și pe  $B_z$ , apare un câmp electric transversal egal cu

$$\mathcal{E}_y = Q^\perp \frac{dT}{dx} B_z, \quad (5.59)$$

unde  $Q^\perp$  este coeficientul *NET*.

Experimental se demonstrează că mărimea acestui efect, pentru diferite materiale, se poate deosebi cu câteva ordine. Semnul efectului nu depinde de tipul de conductibilitate și poate avea, în dependență de temperatură, pentru una și aceeași probă atât semn pozitiv, cât și negativ. Vom arăta că semnul efectului *NET* este condiționat de mecanismul de împrăștiere a purtătorilor de sarcină.

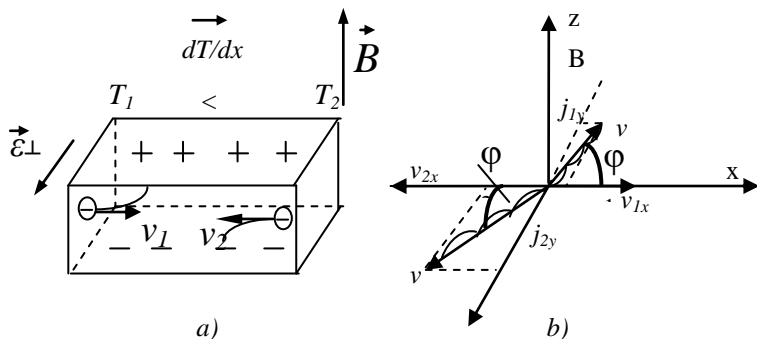
Să analizăm un semiconductor de tip-*n*, de-a lungul căruia în direcția axei *OX* este aplicat un gradient de temperatură (Fig. 5.16 *a*). Datorită acestui gradient, în semiconductor se începe difuzia electronilor mai calzi cu viteza  $v_{2x0}$  de la capătul cu temperatura  $T_2$  spre capătul mai rece, și invers – a electronilor mai reci cu viteza  $v_{1x0}$ , de la capătul cu temperatura  $T_1$  spre capătul cald.

Este evident că aceste viteze nu sunt egale,  $v_{2x0} > v_{1x0}$ . În stare de echilibru dinamic, în direcția gradientului de temperatură lipsește curentul, deci

$$j_x = -(en_1v_{1x0} - en_2v_{2x0}) = 0, \quad (5.60)$$

unde  $n_2$  și  $n_1$  sunt concentrațiile electronilor mai calzi și mai reci, respectiv. Rezultă că fluxurile electronilor în direcții opuse sunt egale și se poate presupune că difuzia electronilor are loc cu o anumită concentrație medie și viteză medie  $\bar{v}_x$

$$en_2v_{2x0} = en_1v_{1x0} = e\bar{n}\bar{v}_x. \quad (5.61)$$



**Fig. 5.16.** Apariția câmpului electric *NET*.

La aplicarea în direcția axei  $OZ$  a câmpului magnetic  $B_z$ , de-a lungul axei  $OY$  acționează forța Lorentz

$$\vec{F}_L = \pm e \left[ \vec{v}, \vec{B} \right], \quad (5.62)$$

și, conform regulii mâinii stângi, ținând cont de sarcina negativă a electronilor, observăm că electronii „reci” se vor abate în direcția opusă axei  $OY$ , iar cei „calzi” în direcția axei  $OY$ . Deoarece vitezele electronilor nu sunt egale, razele de curbură ale traiectoriilor electronilor „calzi” și „reci” vor fi diferite; corespunzător, se vor deosebi și unghiurile de deviere ale electronilor ( $\varphi_2, \varphi_1$ ) de la traiectoria inițială. În rezultat, fluxurile de electroni spre fețele laterale ale probei, perpendiculare axei  $OY$ , vor fi diferite și pe direcția  $OY$  va apărea un curent electric (Fig. 5.16 *b*)

$$j_y = -j_{1y} + j_{2y} = -(en_1 v_{1y} - en_2 v_{2y}) = en_2 v_{2x} \operatorname{tg} \varphi_2 - en_1 v_{1x} \operatorname{tg} \varphi_1. \quad (5.63)$$

În câmpurile magnetice slabe, unghiul Hall este mic, de aceea

$$\operatorname{tg} \varphi_1 \approx \varphi_1 \text{ și } \operatorname{tg} \varphi_2 \approx \varphi_2, \quad (5.64)$$

și densitatea curentului, ținând cont de (5.61) și (5.63), este

$$j_y = en_2 v_{2x} \varphi_2 - en_1 v_{1x} \varphi_1 = e \bar{n} \bar{v}_x (\varphi_2 - \varphi_1). \quad (5.65)$$

După cum rezultă din (5.65), sensul curentului  $j_y$  depinde de valorile unghiurilor Hall,  $\varphi_1$  și  $\varphi_2$ . Dacă  $\varphi_2 > \varphi_1$ , curentul  $j_y$  este orientat în direcția axei  $OY$ , dacă  $\varphi_1 > \varphi_2$  – în direcție opusă. Curentul duce la separarea sarcinilor pe fețele laterale ale probei și la apariția câmpului electric  $NET \mathcal{E}_y$ . Acumularea sarcinilor va avea loc până când forța câmpului electric  $NET$  nu se va egala cu forța Lorentz și între fețele laterale ale probei se va stabili o diferență de potențial  $NET$ . Este evident că

$$\mathcal{E}_y \sim -j_y \sim e \bar{n} \bar{v}_x (\varphi_1 - \varphi_2). \quad (5.66)$$

Deoarece unghiul Hall este egal cu

$$\varphi = \mu B, \quad (5.67)$$

iar mobilitatea este

$$\mu = \frac{e\tau}{m}, \quad (5.68)$$

obținem

$$\mathcal{E}_y \sim e^2 \bar{n} \bar{v}_x \frac{B}{m} (\tau_1 - \tau_2), \quad (5.69)$$

unde timpul de relaxare este

$$\tau = \lambda/v. \quad (5.70)$$

Din (5.69) rezultă că semnul câmpului electric *NET* nu depinde de tipul purtătorilor de sarcină, deoarece conține  $e^2$ . În cazul legii parabolice a dispersiei, timpul de relaxare variază în dependență de energie, pentru diferite mecanisme de împrăștiere, doar conform legii exponențiale. De aceea, parcursul liber poate fi reprezentat în următoarea formă:

$$\lambda = \lambda_0(T) E^r = \text{Const } E^r, \quad (5.71)$$

unde  $\lambda_0(T)$  și  $r$  sunt determinate de mecanismul de împrăștiere a purtătorilor de sarcină:

$r = 0$  – pentru fononii acustici;

$r = 1$  – pentru fononii optici când  $T > \theta_D$ ;

$r = 1/2$  – pentru fononii optici când  $T < \theta_D$  sau pentru impuritățile neutre;

$r = 2$  – pentru impuritățile ionizate.

Introducând (5.70) în (5.69), ținând cont de (5.71), pentru cazul izotermic, obținem:

$$\mathcal{E}_y \sim e^2 \bar{n} \bar{v}_x \frac{B}{m} \lambda_0 \left( \frac{E_1^r}{v_1} - \frac{E_2^r}{v_2} \right) \sim e^2 \bar{n} \bar{v}_x \frac{B}{m} \lambda_0 \left[ \frac{(mv_1^2/2)^r}{v_1} - \frac{(mv_2^2/2)^r}{v_2} \right],$$

sau

$$\mathcal{E}_y \sim \text{Const} (v_1^{2r-1} - v_2^{2r-1}). \quad (5.72)$$

În dependența de exponentul  $r$ , abaterea în câmpul magnetic poate fi mai puternică fie pentru electronii „calzi”, fie pentru cei „reci”.

Dacă  $r = 0$  ( $r < 1/2$ ), ce are loc în cazul împrăștierii pe fononii acustici, câmpul electric *NET* conform (5.72) este pozitiv:

$$\mathcal{E}_y \sim \text{Const} (v_1^{-1} - v_2^{-1}) > 0 \quad (5.73)$$

și este îndreptat în sensul axei *OY*.

Dacă  $r > 1/2$  (împrăștieria pe fononii optici și împrăștieria pe impuritățile ionizate), câmpul electric *NET* este negativ.

În cazul când  $r = 1/2$ , electronii „calzi” și cei „reci”, în fiecare element de volum al probei, formează câmpuri electrice, care se compensează reciproc și complet.

b) *Influența câmpului magnetic.* Odată cu creșterea mărimii câmpului magnetic, valoarea câmpului electric *NET* crește conform (5.59). Însă, la atingerea câmpurilor magnetice puternice ( $\mu B \gg 1$ ) efectul *NET* se micșorează, fapt condiționat de forma cicloidă a traiectoriei electronului, corespunzător, dependența parcursului liber de energie (formula (5.71)) este mai slabă.

Dependențele  $\mathcal{E}_y(B)$  în câmpurile magnetice slabe și puternice sunt următoarele:

$$\mathcal{E}_y = \left(\frac{1}{2} - r\right) a r \frac{k_0}{e} \frac{dT}{dx} \mu B_Z, \text{ pentru } \mu B \ll 1 \quad (5.74 a)$$

și 
$$\mathcal{E}_y = \left(\frac{1}{2} - r\right) c r \frac{k_0}{e} \frac{dT}{dx} (\mu B_Z)^{-1}, \text{ pentru } \mu B \gg 1, \quad (5.74 b)$$

unde  $a_r$  și  $c_r$  sunt parametri ce depind de mecanismul de împrăștierie. Din analiza expresiilor (5.74) reiese:

– funcția  $\mathcal{E}_y(B)$  trebuie să aibă cel puțin un maxim la  $\mu B \approx 1$ , ce

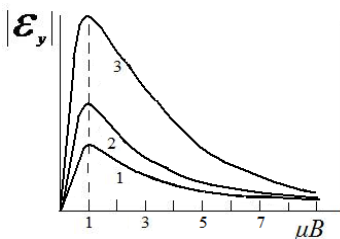


Fig. 5.17. Curbele  $\mathcal{E}_y(\mu B)$  pentru:  $r = 0$  (1);  $r = 1$  (2);  $r = 2$  (3).

este reprezentat în Figura 5.17;

– dacă cunoaștem mecanismul de împrăștierie al purtătorilor de sarcină ( $r$ ), se poate determina mobilitatea lor, și invers: dacă cunoaștem valoarea mobilității – se poate determina mecanismul de împrăștierie.



c) *Dependența efectului NET de temperatură.* Caracterul dependenței efectului *NET* de temperatură este influențat de spectrul energetic al purtătorilor de sarcină în semiconductor, dar, după cum a fost menționat mai sus, în primul rând, este determinat de mecanismul de împrăștiere. De aceea, acest efect se folosește pe larg pentru determinarea mecanismului de împrăștiere. În același timp, efectul *NET* este foarte sensibil la apariția purtătorilor de sarcină minoritari și în domeniul de temperaturi cu conductibilitatea mixtă  $\mathcal{E}_y$  este negativ. De aceea, pentru obținerea rezultatelor exacte, trebuie să cunoaștem tipul de conductibilitate (impuritară, mixtă sau intrinsecă) ce are loc în domeniul dat de temperaturi.

## II. Efectul Nernst–Etingshauzen longitudinal (*NEL*)

a) *Descrierea efectului.* Efectul *NEL* sau variația tensiunii termoelectrice în câmp magnetic constă în următoarele: la introducerea unui semiconductor, de-a lungul căruia există un gradient de temperatură  $dT/dx$ , într-un câmp magnetic transversal  $B_z$  pe direcția gradientului de temperatură, pe lângă câmpul termoelectric (efectul Seebeck), mai apare un câmp electric suplimentar  $\mathcal{E}_x$ , care fie că mărește, fie că micșorează tensiunea t.e.m. inițială. Se preferă descrierea mărimii efectului *NEL* prin așa-numitul câmp electric redus:

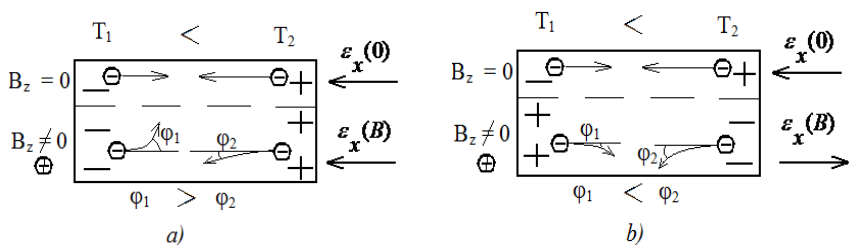
$$\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_x(B) - \mathcal{E}_x(0) = [\alpha(B) - \alpha(0)] \frac{dT}{dx} = Q^{\text{II}} \frac{dT}{dx} B_z^2, \quad (5.75)$$

unde  $\mathcal{E}_x(0)$  – câmp termoelectric inițial, când  $B_z = 0$ ,  $\mathcal{E}_x(B)$  – câmp electric, când  $B_z \neq 0$ ,  $\alpha(B)$  și  $\alpha(0)$  – coeficienți termoelectrice în prezența și, respectiv, absența câmpului magnetic,  $Q^{\text{II}}$  – coeficientul efectului *NEL*.

Semnul efectului *NEL* depinde de tipul de purtători de sarcină, însă un rol foarte important joacă și mecanismul de împrăștiere. Câmpul magnetic, deviind electronii sau golurile de la traiectoria inițială, influențează în același mod atât asupra mișcării electronilor, cât și a golurilor. Însă, semnul efectului este diferit pentru purtătorii de sarcină negativi și pozitivi. Fie că avem un semiconductor de tip-*n*.

Când  $B_z = 0$ , câmpul termoelectric  $\mathcal{E}_x(0)$  este determinat numai de diferența vitezelor electronilor „calzi” și „reci” (Fig. 5.18, partea de sus a cristalului). Când  $B_z \neq 0$ , vitezele electronilor pe direcția axei  $OX$  se micșorează, deoarece purtătorii de sarcină deviază sub acțiunea forței Lorentz cu unghiurile  $\varphi_1$  și  $\varphi_2$ . Aceste unghiuri, după cum a fost arătat în cazul efectului *NET*, depind de timpul de relaxare și, prin urmare, de mecanismul de împrăștiere.

Dacă  $r < 1/2$ , în cazul împrăștierii pe fononii acustici, timpul de parcurs liber este mai mare pentru electronii „reci”, care sub acțiunea forței Lorentz se deplasează spre capătul cald. În rezultat, devierea lor va fi mai mare decât a electronilor „calzi”, care se deplasează în direcție opusă (Fig. 5.18 a). Apare câmpul electric  $\mathcal{E}_x(B)$ , direcția căruia coincide cu câmpul termoelectric inițial și câmpul electric rezultat se mărește. Dacă  $r > 1/2$ , electronii „calzi” vor devia mai puternic decât electronii „reci”. Câmpul electric  $\mathcal{E}_x(B)$  va fi îndreptat în direcție opusă câmpului termoelectric inițial, ceea ce duce la micșorarea câmpului electric rezultat (Fig. 5.18 b).



**Fig. 5.18.** Efectul termoelectric (partea de sus a cristalului) și orientarea câmpului *NEL* pentru diferite mecanisme de împrăștiere: a)  $r < 1/2$ ; b)  $r > 1/2$ .

Conform celor expuse mai sus, putem conchide că pentru  $r < 1/2$  câmpul *NEL*  $\mathcal{E}_x$  se mărește și se consideră pozitiv, iar pentru  $r > 1/2$  –  $\mathcal{E}_x$  se micșorează și se consideră negativ. Dacă  $r = 1/2$ , unghiurile de deviere ale electronilor „reci” și ale celor „calzi” vor fi aceleași  $\varphi_1 = \varphi_2$

și câmpul termoelectric nu se va schimba în prezența câmpului magnetic.

b) *Influența câmpului magnetic.* Dependențele  $\mathcal{E}_x(B)$  în câmpurile magnetice slabe și puternice sunt următoarele:

pentru  $\mu B \ll 1$

$$\mathcal{E}_x = (1 - 2r)(b_r - \frac{a_r^2}{2}) \frac{k_0}{e} \frac{dT}{dx} (\mu B_z)^2 = Const (\mu B)^2 \frac{dT}{dx}; \quad (5.76 a)$$

pentru  $\mu B \gg 1$

$$\mathcal{E}_x = (\frac{1}{2} - r) \frac{k_0}{e} \frac{dT}{dx} = Const \frac{dT}{dx}, \quad (5.76 b)$$

unde  $a_r$  și  $b_r$  sunt parametri ce depind de mecanismul de împrăștiere.

Rezultă că în câmpurile magnetice slabe  $\mathcal{E}_x$  depinde de mărimea

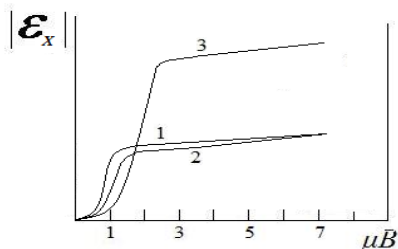


Fig. 5.19. Curbele  $\mathcal{E}_x$  ( $\mu B$ ) pentru:

$r=0$  (1);  $r=1$  (2);  $r=2$  (3).

câmpului magnetic după legea parabolică, iar în câmpurile magnetice puternice – tinde spre saturație (Fig. 5.19). După cum reiese din (5.76 b), în câmpurile magnetice puternice efectul *NEL* permite determinarea parametrului  $r$  și, corespunzător, a mecanismului de împrăștiere, nemijlocit din

datele experimentale.

c) *Dependența efectului NEL de temperatură.* Pentru a determina caracterul dependenței efectului *NEL* de temperatură trebuie de analizat formulele (5.76).

În domeniul de temperaturi cu conductibilitate extrinsecă, în cazul câmpurilor magnetice slabe, dependența  $\mathcal{E}_x(T)$  repetă dependența mobilității de temperatură, dar cu o înclinare dublă ( $\mathcal{E}_x \sim (\mu B)^2$ ). Caracterul efectului termomagnetic longitudinal se micșorează esențial, dacă odată cu creșterea temperaturii în conductibilitate participă două tipuri de purtători de sarcină, fapt determinat, în primul rând, de

micșorarea efectului termoelectric Seebeck. În acest caz, datorită gradientului de temperatură, are loc difuzia bipolară și curentul electric practic lipsește. Câmpul termoelectric apare numai în cazul când concentrațiile electronilor și golurilor și mobilitățile lor se deosebesc. Rezultă că în semiconductorii cu conductibilitate intrinsecă efectul *NEL* nu se observă.

### III. Efectul Righi-Leduc

Dacă un semiconductorul de-a lungul căruia este un gradient de temperatură  $\frac{dT}{dx}$ , ( $T_2 > T_1$ ), se află într-un câmp magnetic  $B_y$ , orientat în sens opus axei *OY* (Fig. 5.20), atunci perpendicular gradientului sus-

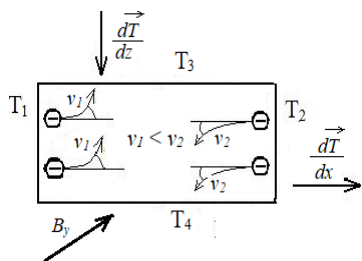


Fig. 5.20. Efectul Righi – Leduc.

numit și direcției câmpului magnetic apare un alt gradient de temperatură egal cu

$$\frac{dT}{dz} = S \frac{dT}{dx} B_y, \quad (5.77)$$

unde *S* este coeficientul Righi – Leduc. Sensul efectului constă în următoarele: sub acțiunea

forței Lorentz purtătorii de sarcină se abat spre fețe opuse, pe direcție perpendiculară atât gradientului de temperatură  $\frac{dT}{dx}$ , cât și câmpului magnetic  $B_y$ .

Purtătorii mai rapizi ( $v_2 > v_1$ ) se deplasează de la capătul cald spre cel rece și, abătându-se sub acțiunea forței Lorentz spre latura, de exemplu, de jos a paralelipipedului, cedează o parte din excesul de energie rețelei cristaline și temperatura acesteia devine  $T_4$ . Purtătorii lenți, care se deplasează de la capătul rece spre cel cald, abătându-se sub acțiunea forței Lorentz spre latura opusă, primesc de la rețea o parte de energie și temperatura acesteia scade până la  $T_3$ . În rezultat, pe direcția axei *OZ* perpendiculară direcției de deplasare a purtătorilor de sarcină apare încă un gradient de temperatură.

#### IV. Efectul Maggi-Righi-Leduc

Acest efect se bazează pe variația termoconductibilității în câmp magnetic. De-a lungul cristalului, pe direcția axei  $OX$  există un gradient de temperatură ( $T_2 > T_1$ ), iar pe direcție perpendiculară este aplicat câmpul magnetic  $B_y$  (Fig. 5.21).

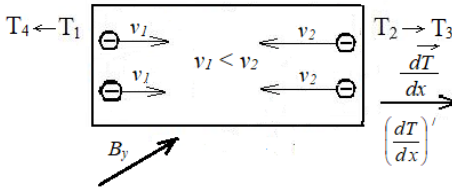


Fig. 5.21. Efectul Maggi – Righi – Leduc.

iar pe direcție perpendiculară este aplicat câmpul magnetic  $B_y$  (Fig. 5.21).

Efectul analizat constă în apariția gradientului de temperatură suplimentar

$\left(\frac{dT}{dx}\right)'$ , care este coliniar cu

gradientul de temperatură inițial  $\frac{dT}{dx}$ . Acest efect este identic cu

schimbarea rezistenței în câmpul magnetic (efectul magnetorezistiv), însă în cazul dat variază termoconductibilitatea  $\Lambda$ , și anume:

$$\frac{\Delta\Lambda}{\Lambda_0} = \frac{\Lambda(B) - \Lambda(0)}{\Lambda(0)}. \quad (5.78)$$

Trebuie de subliniat că nu toți electronii care se deplasează de la capătul mai cald spre cel rece au aceeași viteză medie  $v_{med}$ . Datorită distribuției Maxwell-Boltzmann, o parte de electroni au viteza  $v_2 > v_{med}$ , iar altă parte  $v_1 < v_{med}$ . Starea de echilibru, când  $F_L = F_{NET}$ , se îndeplinește numai pentru electronii cu viteza  $v_{med}$ , alți electroni se abat de la direcția  $OX$ . În rezultat, nu toți electronii ce formează t.e.m. ajung la capetele paralelipipedului. În rezultat, temperaturile  $T_2$  și  $T_1$  se schimbă și devin  $T_3$  și  $T_4$  respectiv, iar gradientul inițial  $\frac{dT}{dx}$  fie că se mărește, fie că se micșorează.

*Efectele termomagnetice apar în semiconductori la aplicarea combinațiilor diferite ale sensurilor gradientului de temperatură și ale*

*câmpului magnetic. În rezultat, în cristal apare fie un câmp electric, fie un gradient de temperatură suplimentar.*

*În cristalele cu mobilitate mare a purtătorilor de sarcină, efectele termomagnetice sunt mai complexe și mai semnificative, deoarece pentru aceste cristale mai ușor pot fi realizate experimental condițiile câmpurilor magnetice slabe și puternice.*

## *Bibliografie*

1. Nicolaescu I., Canțer V.G., Tighineanu I.M. *Fizica corpului solid*. Partea 2. Chișinău, 1991. 262 p.
2. Nicolaescu I. *Introducere în fizica corpului solid*. Pitești, 1997. 516 p.
3. Nicorici A., Nicorici V., Nedeoglo D. *Culegere de probleme la fizica semiconductoarelor*. Chișinău: CEP USM, 2010. 101 p.
4. Kireev P.S. *Fizica semiconductorilor*. București: Editura Științifică și Enciclopedică, 1977. 792 p.
5. Ансельм А.И. *Введение в теорию полупроводников*. Москва: Высшая школа, 1978. 615 с.
6. Аскеров Б.М. *Электронные явления переноса в полупроводниках*. Москва: Наука, 1977. 672 с.
7. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. *Физика полупроводников*. Москва: Наука, 1977. 672 с.
8. Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П. и др. *Сборник задач по физике полупроводников*. Москва: Просвещение, 1988. 110 с.
9. Блейкмор Дж. *Статистика электронов в полупроводниках*. Москва: Мир, 1964. 392 с.
10. Брандт Н.Б., Чудинов С.М. *Электроны и фононы в металлах*. Москва: Изд-во МГУ, 1990. 335 с.
11. Епифанов Г.И. *Физика твердого тела*. Москва: Высшая школа, 1977. 288 с.
12. Орешкин П.Г. *Физика полупроводников и диэлектриков*. Москва: Высшая школа, 1977. 448 с.
13. Петровский И.И. *Электронная теория полупроводников*. Минск: Высшая школа, 1964. 219 с.
14. Серова Ф.Г., Янкина А.А. *Сборник задач по теоретической физике*. Москва: Просвещение, 1988. 192 с.
15. Смит Р. *Полупроводники*. Москва: Мир, 1982. 558 с.
16. Шалимова К.В. *Физика полупроводников*. Москва: Энергия, 1984. 426 с.

Valentina NICORICI, Andrei NICORICI

## **Teoria electronică a corpului solid**

*Note de curs*

---

---

Redactare – *Ariadna Strungaru*  
Asistență computerizată – *Maria Bondari*

Bun de tipar 30.03.2022. Formatul 60 x 84 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>  
Coli de tipar 11,0. Coli editoriale 7,0.  
Comanda 102. Tirajul 50 ex.

Centrul Editorial-Poligrafic al USM  
Str. Al. Mateevici, 60, Chișinău, MD 2009