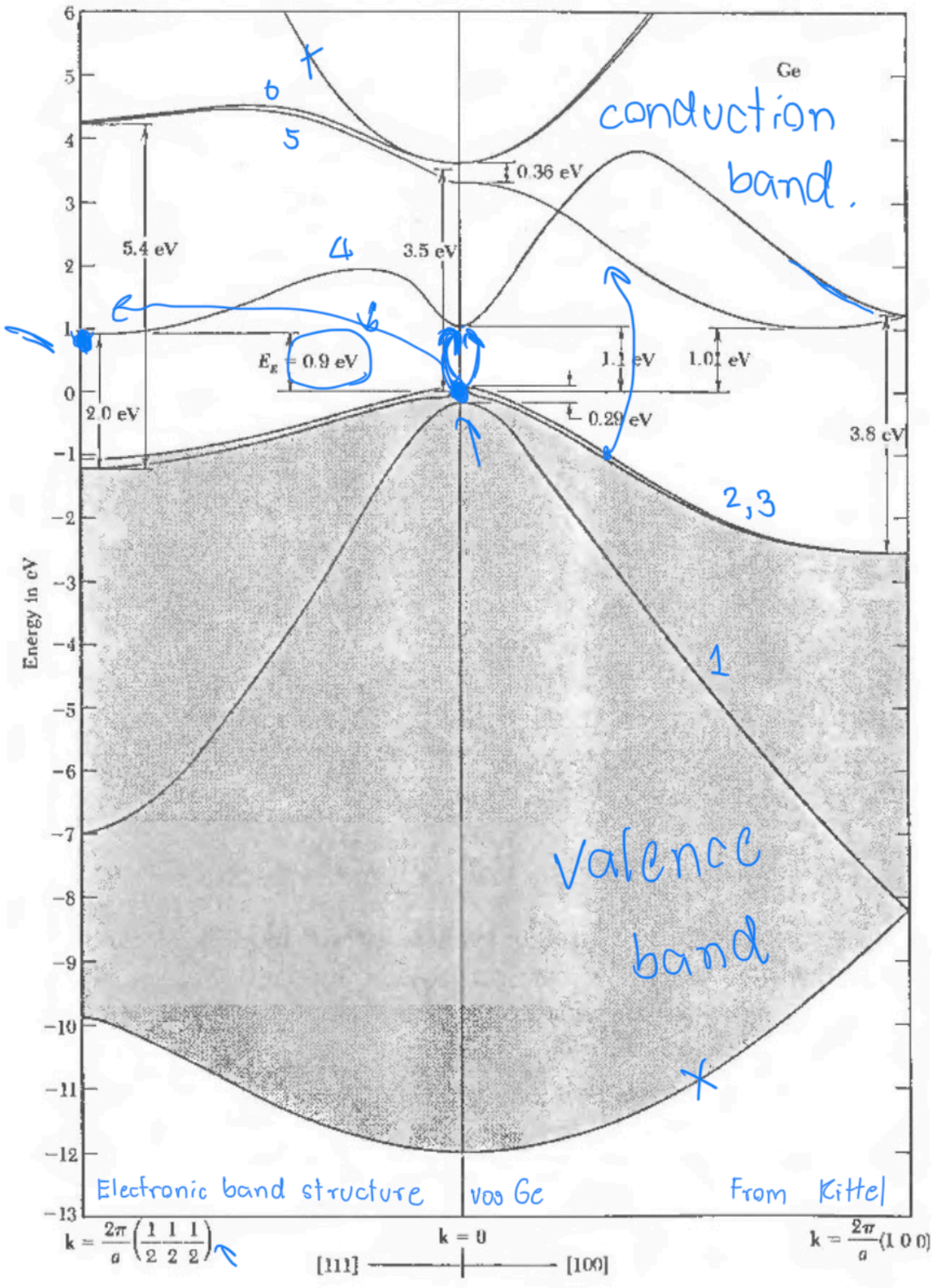
Lecture 8

Semiconductors



จาก band structure ของสาร เราสามารถแบ่งประเภทของสารได้ ตามขนาดของ energy gap ดังนี้

1. metals (conductors) ไม่มี energy gap

2. insulators energy gap มีค่ามาก $\gg k$

3. semiconductors มี energy gap แต่ energy gap มีขนาด $\sim k_B T$

$1\ eV \rightarrow \sim 11{,}600\ K$

$e^{-E_g/k_B T}$ ถ้า $E_g = 1eV$

$T \sim 300\ K.$

ตัวอย่างของ semiconductors.

เป็นสารใน กลุ่ม IV ; Si, Ge, Sn, ~~C~~

III - V ; InSb, GaAs

II - VI ; ZnS, CdS

IV - IV : SiC

ประเภทของ band gaps.

1. direct band gap. ที่จุดต่ำสุดของ conduction band อยู่ตรงกับจุดสูงสุดของ valence band.

ตัวอย่าง InSb α Sn

2. Indirect band gap: จุดต่ำสุดของ conduction band อยู่ที่ k-point ที่ต่างไปจากจุดสูงสุดของ valence band.

พิจารณา conservation law ↓ phonon-

dominated โดย phonon → $\vec{k} = \vec{k}_c + \vec{K}$ ↓ phonon ↓ assisted transitio

$\vec{k}$ ↗ photon

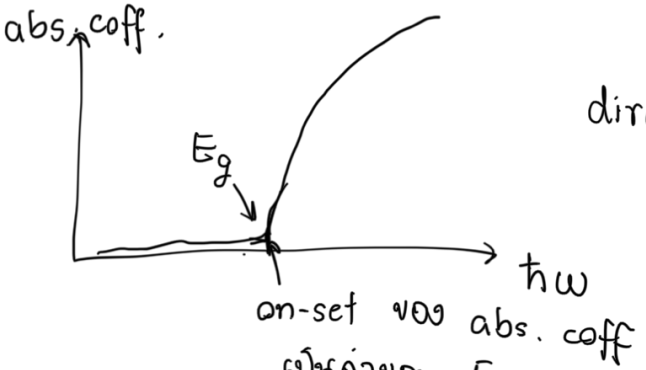
$\vec{k}_c$ ↑ ผลต่างของ k ใน conduction และ valence band.

dominated โดย photon → $\hbar\omega = E_g + \hbar\Omega$

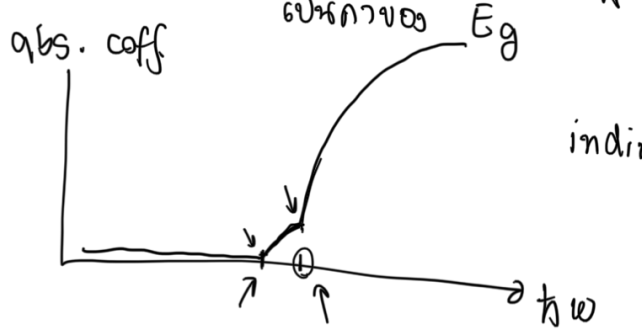
$\hbar\omega$ ↗ photon

$\hbar\Omega$ ↑ phonon

จากการทดลองเราสามารถหา E_g จาก optical absorbt ซึ่ง absorbtion coefficient.



direct band gap.



indirect band gap

Equation of motion ของ $\bar{e}$ ใน semiconductors.

จาก dispersion relation : $\omega(k)$

หา group velocity ของ $\bar{e}$

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$ ในหนึ่งมิติ

และ $E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = E/\hbar$

$$\vec{v}_g = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E(k)$$

พิจารณา

$$\frac{\delta E}{\delta t} = F v_g$$

$$\Rightarrow \quad \delta E = F v_g \delta t$$

แต่

$$\delta E = \left(\frac{dE}{dk}\right)\delta k.$$

$$\Rightarrow \quad F v_g \delta t = \left(\frac{dE}{dk}\right)\delta k.$$

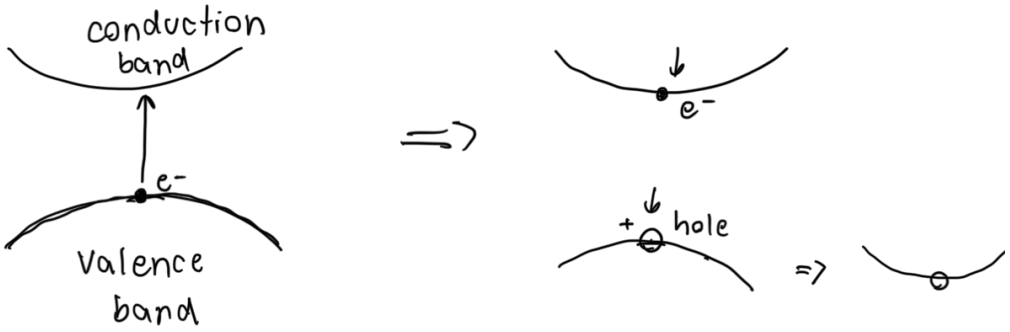
$$\Rightarrow \quad F \cdot \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}\delta t = \frac{dE}{dk}\delta k$$

$$\Rightarrow \quad F = \hbar\frac{dk}{dt} \quad ; \hbar\vec{k} = \vec{p}$$

ใน 3 มิติ

$$\boxed{\vec{F} = \hbar\frac{d\vec{k}}{dt}.}$$

Effective mass & holes.



ใน semiconductor จะมี charge carriers ได้ 2 ชนิด คือ e^- $(-e)$ และ hole $(+e)$

สมบัติของ holes เมื่อเทียบกับ e^-

1. Momentum : $\vec{k}_h = -\vec{k}_e$

เนื่องจาก holes เกิดจาก e^- ที่โดน excited ออกไปจาก valence band. จากกฎการอนุรักษ์โมเมนตัม

ถ้า e^- มี $\vec{k}_e$ hole ที่เหลืออยู่ใน valence band ก็จะมี $-\vec{k}_e$ $\Rightarrow$ $\vec{k}_h = -\vec{k}_e$

2. $E_h(\vec{k}_h) = -E_e(\vec{k}_e)$

มาจากกฎการอนุรักษ์พลังงาน.

3. $\vec{V}_h = \vec{V}_e$; $\nabla_k E_h(k_h) = \nabla_k E_e(k_e)$

4. $m_h = -m_e$

effective mass จะแปรผันแบบผกผันกับ curvature of energy band. เนื่องจาก band ของ holes จะ up-side down (กลับหัว) เมื่อเทียบกับ bands ของ e^-

5. Equation of motion

$$\hbar \frac{d\vec{k}_h}{dt} = F \qquad \frac{d\vec{k}_e}{dt} \rightarrow \frac{d\vec{k}_h}{dt}$$

$$-e \rightarrow +e$$

$$\vec{V}_e \rightarrow \vec{V}_h$$

Effective mass

พิจารณา free electron

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad ; \; m : \text{มวลของ } e^-$$

$$\frac{d^2E}{} = \frac{\hbar^2}{}$$

$$\frac{dk^2}{} \qquad m$$

$$\Rightarrow \quad m = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2}$$

หาค่า effective mass จาก band structure ใน 3D.

$$\boxed{\frac{1}{m^*}\bigg|_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2}\cdot\frac{d^2E(\vec{k})}{dk_\mu dk_\nu}} \quad \text{(tensor)}$$

โดยที่ μ, ν แทน x, y, z.

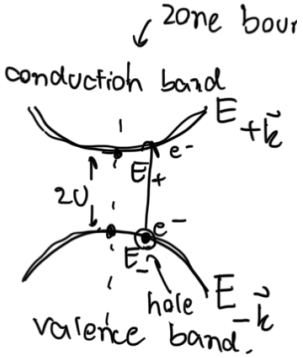
สำหรับ equation of motion,

$$\frac{dV_\mu}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2E(k)}{dk_\mu dt} = \left(\frac{1}{\hbar}\frac{d^2E(k)}{dk_\mu dk_\nu}\right)\left(\frac{dk_\nu}{dt}\right)$$

$$\downarrow = \frac{F}{\hbar}$$

$$= \frac{\hbar}{m^*}\bigg|_{\mu\nu}\cdot\frac{\vec{F}_\nu}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{dV_\mu}{dt} = \frac{1}{m^*}\bigg|_{\mu\nu}\vec{F}_\nu}$$



ตัวอย่าง m^* ใน 1D lattice.

พิจารณา energy ของ upper band.

พิจารณา effective mass ของ e^-.

$$E_{+\tilde{k}} = E_+ + \frac{\hbar^2\tilde{k}^2}{2m_e}\left[1 + \frac{2\pi}{U}\right]$$

$$\boxed{m_e^* = \frac{m_e}{2\pi/U + 1}}$$

effective mass ของ hole

$$E_{-\tilde{k}} = E_- + \frac{\hbar^2\tilde{k}^2}{2m_e}\left[1 - \frac{2\lambda}{U}\right]$$

$$m_n^* = -m_e^* = \frac{-m_e}{1-\frac{2\lambda}{U}} = \frac{m_e}{\frac{2\lambda}{U} - 1}.$$

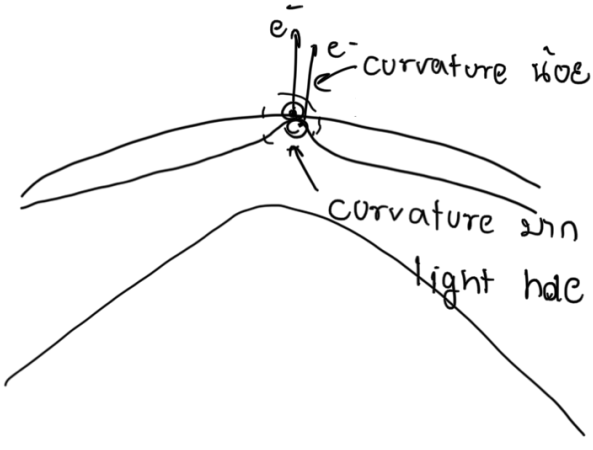
$U < \lambda \Rightarrow \frac{2\lambda}{U} > 1.$

m_e^* m_n^* มีค่าเป็นบวก. และ in general effective mass มีค่าเป็นลบได้ ขึ้นอยู่กับ curvature ของ energy ใน conduction band.

m^* มีค่ามาก m^* มีค่าน้อย.

โดยทั่วไป 4f e^- มี band energy ที่มี curvature น้อย $\Rightarrow$ e^- มี m^* มาก (หนัก)

$\Rightarrow$ heavy fermions



การวัด effective mass ใช้ cyclotron,

free e^- เคลื่อนที่ใน $\vec{B}$

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = \pm e\vec{v} \times \vec{B}$$

$$\Rightarrow \quad \omega_c = \frac{eB}{m}$$

e^- ใน band structure

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}$$

- Intrinsic charge carrier : thermal excitations ของ $\bar{e}$ ที่ทำให้เกิด free e^- หรือ holes
- extrinsic charge carrier : impurity เนื่องจากการ dop ธาตุในหมู่ III หรือ V

Intrinsic charge carrier concentration.

จาก Fermi-Dirac distribution function

$$f_e = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT} + 1}$$

ที่ $T \neq 0$

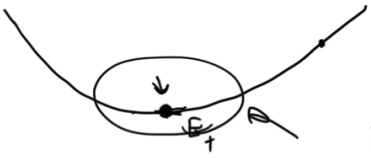
ให้ $E \sim \mu$ $\quad E - \mu \approx k_BT \Rightarrow e^-$ ส่วนใหญ่ที่ถูก excited

พิจารณา กรณีที่ $E - \mu \gg k_BT$ ← ยังมี $\bar{e}$ บางส่วนที่ถูก excited ไปอยู่ใน conduction band.

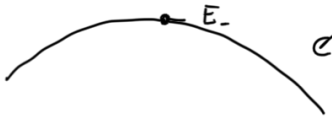
$$\Rightarrow \quad E - \mu / k_BT \gg 1$$

$$\Rightarrow \quad f_e \sim e^{-(E-\mu)/k_BT} = e^{(\mu-E)/k_BT}$$

ต้องหา density of state ← ต้องรู้ dispersion relation สำหรับ e^- ใน conduction band ใกล้ขอบจุดต่ำสุด



$$E_{+k} = E_+ + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$



$$E_{-k} = E_- - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$$

$$D_e(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E - E_+)^{1/2} \quad ; \text{ ต่อ } V$$

$$n = \int_{E_+}^{\infty} D_e(E) f_e(E)\, dE$$

n = จำนวนของ e^- ต่อ V = concentration ของ e^- ใน conduction band

$$= \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\mu/k_BT} \int_{E_+}^{\infty} (E - E_+)^{1/2} e^{-E/k_BT}$$

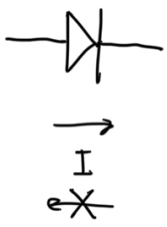
อ่าน lecture note

จนถึงเรื่อง p-n junction.

p-n junction

- การเชื่อมต่อกัน ระหว่าง p-type กับ n-type semiconductor

↳ diode



n-type semiconductor.

impurity เป็น Group V ในตารางธาตุ

ให้ e^- (donors)

(... electrons)

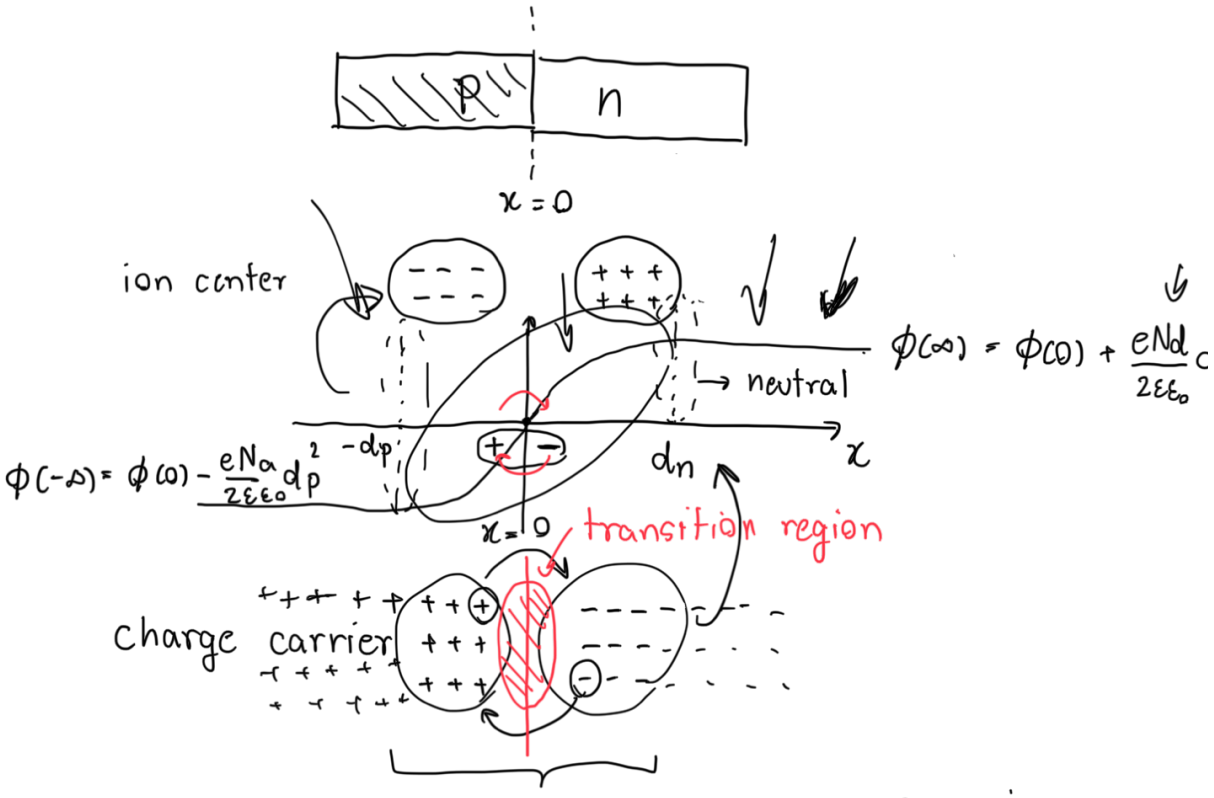
ion center จะมีประจุ + ✓

P-type semiconductor

impurity เป็น Group III

รับ e^- (acceptors)

ion center จะมีประจุ − ✓



depletion zone เป็น บริเวณที่มี ประจุบวก (เยอะกับ ประจุลบ (layer) หา concentration ของ charge carrier. sharp transition ที่ $x = 0$ (ใช้ในช่วง transition region)

n-type

$$N_d(x) = \begin{cases} N_d, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

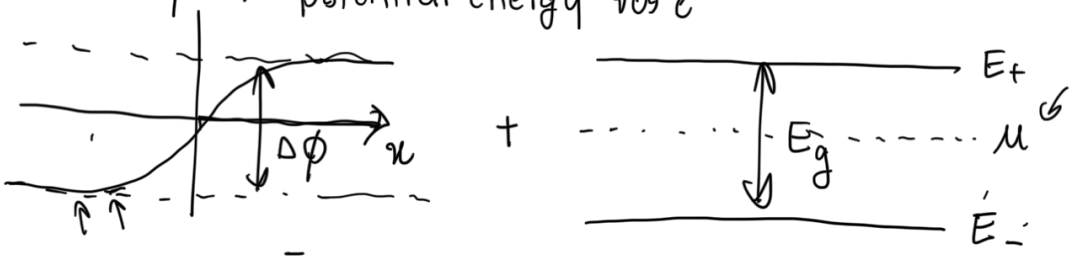
และ

$$N_a(x) = \begin{cases} 0, & x > 0 \\ N_a & x < 0 \end{cases}$$

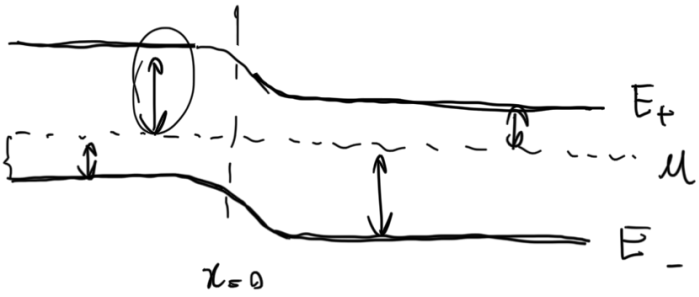
ผลของ electric potential จาก p-n junction

(1.) conduction กับ valence bands shift แต่ chemical potential ไม่เปลี่ยน (μ คงที่)

$\phi \rightarrow$ potential energy ของ e^-



จากมุมมอง e^- : potential energy เท่ากับ $-e\phi$



หา charge carrier

สำหรับ e^- : $n(x) = n_0 e^{-(E_+ - e\phi(x) - \mu)/k_BT}$

สำหรับ hole : $p(x) = p_0 e^{-(\mu - E_- + e\phi(x))/k_BT}$

โดยที่ n_0 และ p_0 เขียนได้ว่า

$$n_0 = 2\left(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \qquad p_0 = 2\left(\frac{m_h k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

ถ้า depletion region มีขนาดเล็กมากๆ ($10^2 - 10^4$ Å)

พิจารณา $n(x)$ และ $p(x)$ ที่ $x \rightarrow \infty$ และ $x \rightarrow -\infty$

$$n(\infty) = N_d = n_0 e^{-(E_+ - e\phi(\infty) - \mu)/k_BT} \quad \text{---(1}$$

$$p(-\infty) = N_a = p_0 e^{-(\mu - E_- + e\phi(-\infty))/k_BT} \quad \text{---(2}$$

$-E_0$

(1) x (2)

$$N_a N_a = n_0 p_0 e^{(-\overbrace{E_+ + E_-}^{0} + e\phi(\infty) - e\phi(-\infty))/k_BT}$$

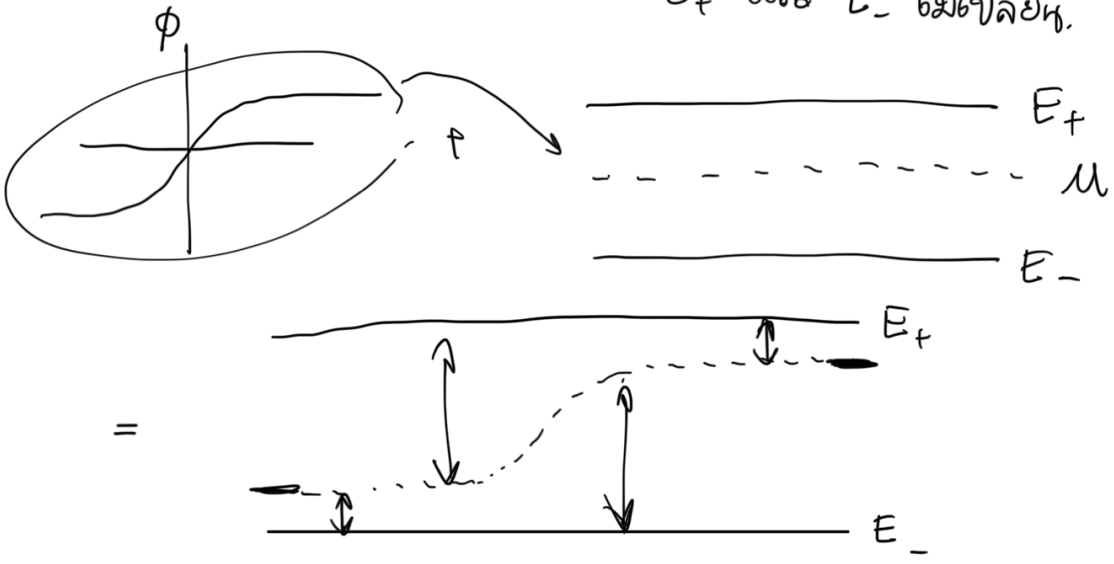
$$= e\Delta\phi$$

$$\frac{N_a N_a}{n_0 p_0} = e^{(-E_g + e\Delta\phi)/k_BT}$$

$$\boxed{e\Delta\phi = E_g + k_B T \log\left(\frac{N_a N_a}{n_0 p_0}\right)}$$

2. electric potentail จะไป shift chemical potentic

$\Rightarrow \mu$ เปลี่ยน ขณะ E_+ ขณะ E_- ไม่เปลี่ยน.



effective chemical potential

$$\mu_e(x) = \mu + e\phi(x)$$

ขอบเขตของ E_+, E_-

$$E_\pm = E_\pm - e\phi(x)$$

charge carrier concentration.

$$n(x) = n_0 e^{-(E_+ - \mu_e(x))/k_BT}$$

$$p(x) = p_0 e^{-(\mu_e(x) - E_-)/k_BT}$$

$$\Rightarrow \quad e\Delta\phi = \mu_e(\infty) - \mu_e(-\infty)$$

ต้องการหา electric potential ภายใน depletion zone.

✓ เรารู้ charge concentration (ion centers)

สามารถใช้ Poisson's equation

$$-\nabla^2\phi = -\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{\rho(x)}{\varepsilon\varepsilon_0}$$

รู้ว่า n-type มี ion center เป็นประจุ +

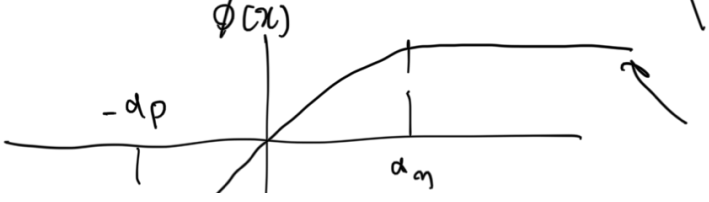
$$\rho(x) = eN_d$$

p-type มี ion center เป็นประจุ −

$$\rho(x) = -eN_a$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\phi}{dx^2} = \begin{cases} 0 & x > d_n \\ -\frac{eN_d}{\varepsilon\varepsilon_0} & 0 < x < d_n \\ +\frac{eN_a}{\varepsilon\varepsilon_0} & -d_p < x < 0 \\ 0 & x < -d_p \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \phi(x) = \begin{cases} \phi(\infty) & x > d_n \\ \phi(\infty) - \frac{eN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0}(x - d_n)^2 & 0 < x < d_n \\ \phi(-\infty) + \frac{eN_a}{2\varepsilon\varepsilon_0}(x + d_p)^2 & -d_p < x < 0 \\ \phi(-\infty) & x < -d_p \end{cases}$$



Apply boundary condition ที่ $x = 0$

ϕ และ $d\phi/dx$ ต้อง continuous.

$$\Rightarrow \boxed{N_a d_n = N_a d_p}$$ จาก continuity ของ $d\phi/dx$.

$\Rightarrow$ ความกว้างของ depletion zone ในฝั่ง p-type (n-type) จะแปรผันแบบผกผันกับ N_a (N_d)

$$d_n = \frac{N_a d_p}{N_d}$$

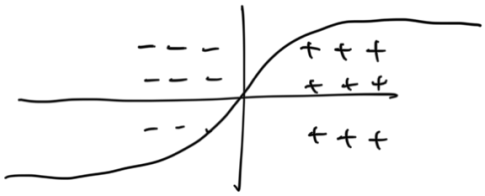
จาก continuity ของ ϕ ที่ $x = 0$

$$\boxed{\left(\frac{e}{2\varepsilon\varepsilon_0}\right)\left(N_a d_n^2 + N_a d_p^2\right) = \phi(A) - \phi(-A)}$$

$$= \Delta\phi.$$

แก้สมการหา d_n กับ d_p

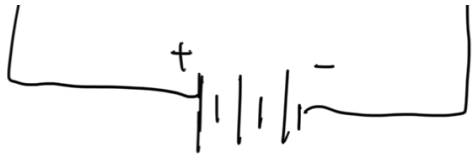
$$d_{n,p} = \left[\frac{(N_a/N_d)^{\pm 1}}{N_d + N_a} \cdot \frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{e}\Delta\phi\right]^{1/2}$$



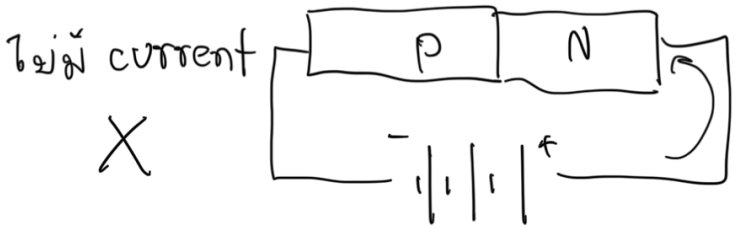
$V > 0$

forward bias.

มี current ✓



depletion region เล็กลง



ไม่มี current ✗

$V < 0$ backward bias

depletion region ใหญ่ขึ้น

หา จำนวนเฉลี่ยของ donors และ accepter.

ใน donors จะมี e^- ได้ 2 states

- ไม่มี e^-
- มี e^- 1 ตัว ($\uparrow$ หรือ $\downarrow$)

$$\langle n_d \rangle = \frac{\sum N_j e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}{\sum e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}$$

$$\langle n_d \rangle = \frac{0 + 1e^{-\beta(E_d - \mu)} + 1e^{-\beta(E_d - \mu)}}{e^{-\beta(0 - \mu 0)} + e^{-\beta(E_d - \mu)} + e^{-\beta(E_d}}$$

$$= \frac{2e^{-\beta(E_d - \mu)}}{1 + 2e^{-\beta(E_d - \mu)}}$$

2 จำนวนของ degeneracy.