

Министерство образования и науки, молодежи и спорта Украины  
Государственное высшее учебное заведение  
«Национальный горный университет»

**ПРИЛОЖЕНИЕ К РАБОТАМ ПО ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА**

г. Днепропетровск  
2011

Приложение к работам по разделу «Физика твердого тела» курса физики для студентов всех специальностей.

Сост.: И.П. Гаркуша,  
Днепропетровск: ГВУЗ «НГУ», 2011 г.

## 6.0. Приложение к работам по физике твердого тела (лабораторные работы №№ 6.1, 6.3, 6.4, 6.8, 6,62).

### Понятие о зонной теории твердых тел

Зонная теория твердых тел – это квантовая теория, описывающая движение электронов в кристалле. В связи с большой сложностью квантовой теории твердых тел далее приводятся только качественные аспекты зонной теории.

#### 1. Расщепление энергетических уровней и образование энергетических зон

Физически происхождение зонной структуры энергий электронов в кристалле связано с образованием кристалла из  $N$  отдельных атомов.

Известно, что энергия электронов в атоме квантуется. Это означает, что каждый электрон любого атома может иметь лишь дискретные (т.е. разделенные конечными промежутками) значения энергии, называемые уровнями энергии. Электрон в атоме обладает одним из разрешенных значений энергии, т.е. занимает один из дозволённых энергетических уровней.

В основном, невозбужденном состоянии атома суммарная энергия электронов имеет минимальное возможное значение. Электроны подчиняются **принципу запрета Паули**: в любой квантовой системе (атоме, молекуле, кристалле и т.д.) на каждом энергетическом уровне может находиться не более двух электронов, причем собственные моменты (спины) электронов, занимающих одновременно один и тот же уровень, должны иметь противоположные направления.

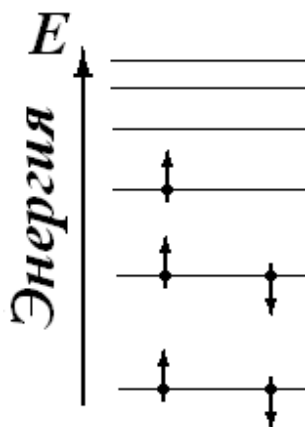


Рис. 1.

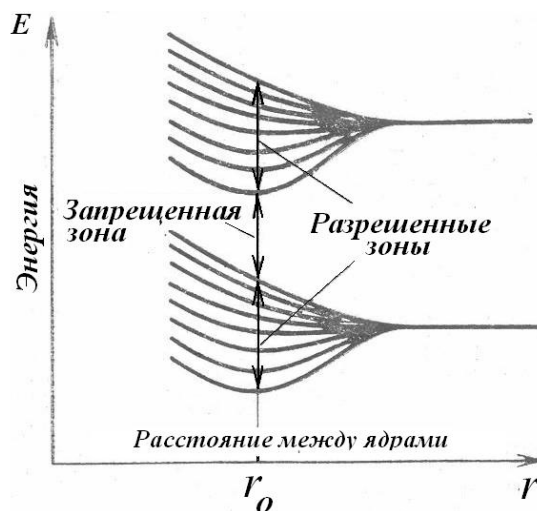


Рис. 2.

Следовательно, на самом низком уровне атома может находиться только два электрона, остальные заполняют попарно более высокие уровни. На рис.1 показано размещение электронов по уровням в основном состоянии атома, имеющего 5 электронов.

Начнем мысленно приближать атомы друг к другу. При объединении атомов в твердое тело энергетические состояния их электронов изменяются. Атомы в кристалле тесно прижаты друг к другу. В квантовой механике движение электронов описывается волновой функцией. Волновые функции наружных электронов соседних атомов перекрываются и распространяются на весь кристалл. Это приводит к тому, что валентные электроны атомов ведут себя как свободные электроны – они теперь принадлежат не отдельным атомам, а всему кристаллу.

При сближении атомов энергии соответствующих уровней внешних электронов начинают расходиться, как это показано на рис. 2.

На рис.2:  $r$  – расстояние между атомами,  $r_0$  – расстояние между атомами решетки кристалла.

Системы «разошедшихся» уровней образуют в кристалле разрешенные **энергетические зоны**.

Энергия электронов в кристалле может принимать только те значения, которые лежат внутри энергетических зон. Каждая разрешенная зона включает в себя столько близлежащих дискретных уровней, сколько атомов содержит кристалл.

Ширина зон определяется величиной связи между атомами и не зависит от числа атомов в кристалле. Ширина разрешенных зон имеет величину порядка нескольких электронвольт. Следовательно, если кристалл содержит  $10^{23}$  атомов, расстояние между соседними уровнями в зоне составляет приблизительно  $10^{-23}$  эВ. Это ничтожно малая величина.

Промежутки между разрешенными зонами представляют собой энергию, которую электроны данных веществ приобретать не могут (**запрещенные зоны**).

Величина расщепления для разных уровней не одинакова. Внутренние более близкие к ядру атома электроны ведут себя так же, как в изолированных атомах, их уровни, возмущаются меньше. Заметно расщепляются лишь уровни, занимаемые внешними валентными электронами. Более высокие свободные уровни, не занятые электронами, также подвергаются расщеплению и превращаются в энергетические зоны.

Обычно рассматривают только последние из занятых электронами зон (валентные зоны) и размещенные над ними запрещенные и разрешенные зоны.

## 2. Металлы, диэлектрики и полупроводники по зонной теории

Проводимость кристаллов определяется распределением электронов по уровням. В зависимости от степени заполнения валентной зоны электронами и ширины запрещенной зоны возможны три случая.

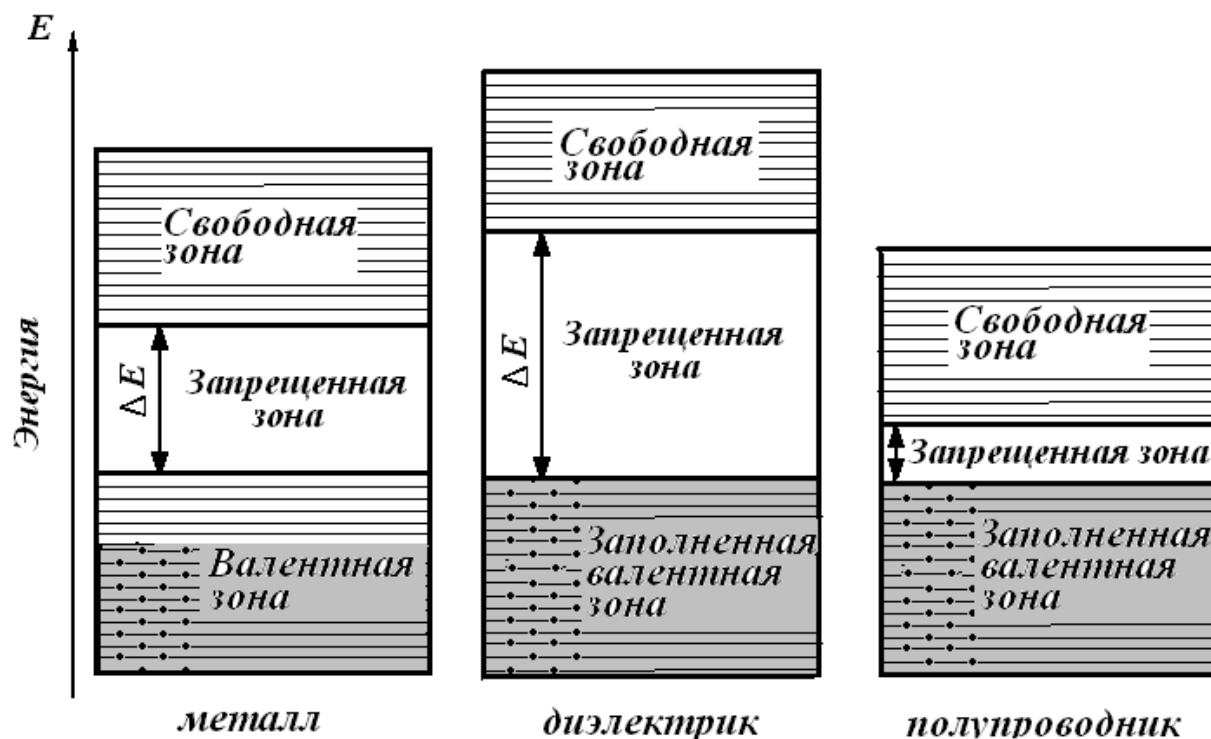


Рис. 3.

В **металлах** электроны заполняют валентную зону не полностью и в ней имеются свободные состояния. Поэтому достаточно сообщить электронам, находящимся на верхних уровнях, совсем небольшую энергию для того, чтобы перевести их на более высокие

уровни. Дополнительная энергия, вызванная действием на электроны электрического поля ( $10^{-4} - 10^{-8}$  эВ) или действием теплового движения (при комнатной температуре  $E \sim kT \approx 0,025$  эВ), оказывается гораздо большей разности энергий между соседними уровнями  $10^{-23}$  эВ и вполне достаточной для перевода электрона на более высокие уровни. Поэтому электроны могут ускоряться электрическим полем и участвовать в образовании тока. Таким образом, кристаллы с частично заполненной валентной зоной **хорошо проводят электрический ток.**

В *изоляторах (диэлектриках)* уровни валентной зоны доверху заняты электронами. Следующая – разрешенная – зона (зона проводимости) не содержит электронов. Ширина запрещенной зоны, разделяющей валентную зону и зону проводимости, велика (около 4 – 5 эВ). Для того, чтобы увеличить энергию электрона, необходимо сообщить ему количество энергии, не меньшее, чем ширина запрещенной зоны  $\Delta E$ . Электрическое поле не в состоянии сообщить электрону такую энергию, ни один из электронов не может изменить своего движения, так как нет свободных энергетических состояний в зоне. Такие кристаллы **не способны проводить электрический ток.**

Твердые тела, для энергетических диаграмм которых характерна широкая (около 4 – 5 эВ) запрещенная зона являются *изоляторами (диэлектриками)*. Так, у поваренной соли NaCl  $\Delta E \approx 6$  эВ, у алмаза  $\Delta E \approx 5,2$  эВ, у нитрида бора  $\Delta E \approx 4,6$  эВ, у  $Al_2O_3$   $\Delta E \approx 7$  эВ и т.д.

Если же запрещенная зона достаточно узкая, т.е.  $\Delta E$  невелико (порядка нескольких десятых долей электронвольта), энергия, приобретаемая электроном либо за счет теплового движения, либо в электрическом поле, создаваемом внешним источником, оказывается достаточной для того, чтобы перевести часть электронов в верхнюю свободную зону. Эти электроны будут находиться в условиях, аналогичных тем, в которых находятся валентные электроны в металле. Свободная зона окажется для них зоной проводимости. Одновременно станет возможным переход электронов валентной зоны на освободившиеся верхние уровни. Такие кристаллы называются *полупроводниками*. У типичных полупроводников  $\Delta E \leq 1$  эВ, Так, у германия  $\Delta E \approx 0,75$  эВ, у кремния  $\Delta E \approx 1,08$  эВ, у антимонида индия InSb  $\Delta E \approx 0,17$  эВ и т.д.

### 3. Собственная проводимость полупроводников

Собственными полупроводниками являются химически чистые полупроводники.

В природе полупроводники существуют в виде элементов, например, кремний Si, германий Ge, мышьяк As, селен Se, теллур Te, и химических соединений, например сульфид кадмия CdS, сульфид свинца PbS, арсенид галлия GaAs и др.

Рассмотрим для конкретности практически наиболее важный полупроводник – кремний. Атомы кремния принадлежат к IV группе периодической системы элементов Менделеева. Они имеют четыре электрона в наполовину заполненной внешней оболочке. В твердом состоянии атомы Si образуют кристаллическую решетку, в которой каждый атом связан ковалентными (парно-электронными) связями с четырьмя равноотстоящими от него соседними атомами. Условно такое взаимное расположение атомов можно представить в виде плоской структуры, изображенной на рис. 4. Кружки со знаком «+» обозначают положительно заряженные ионы кремния (т.е. ту часть атома, которая остается после удаления валентных электронов), кружки со знаком «-» обозначают валентные электроны, двойные линии – ковалентные связи.

При достаточно высокой температуре ловое движение может разорвать отдельные освободив один электрон. Покинутое электром место перестает быть нейтральным, в окрестности возникает избыточный положительный заряд  $+e$ .

Такое «пустое» место с отсутствующим электроном связи получило название «дыр-положительной квазичастицы (она изображена на рис. 4 белым кружком). Дырка ведет себя положительный заряд, который по величине заряду электрона. На место дырки может перескочить электрон одной из соседних. В результате дырка начинает также стран-вать по кристаллу, как и освободившийся трон.

Если свободный электрон встретится дыркой, они **рекомбинируют** (соединяются). Это означает, что электрон нейтрализует избыточный положительный заряд, имеющийся в окрестности дырки, и теряет свободу передвижения до тех пор, пока снова не получит от кристаллической решетки энергию, достаточную для своего освобождения. Рекомбинация приводит к **одновременному исчезновению свободного электрона и дырки**.

В полупроводнике идут одновременно два процесса: рождение попарно свободных электронов и дырок и рекомбинация, приводящая к попарному исчезновению электронов и дырок. Каждой температуре соответствует определенная равновесная концентрация электронов и дырок.

В отсутствие внешнего электрического поля электроны и дырки движутся хаотически. Если же на кристалл наложить электрическое поле, то на хаотическое движение накладывается упорядоченное движение электронов против поля и дырок – в направлении поля. Оба движения приводят к переносу заряда вдоль кристалла, т.е. к возникновению тока. Следовательно, собственная электропроводность обуславливается носителями зарядов двух знаков – отрицательными электронами и положительными дырками.

Рассмотрим, как отображается этот процесс *на схеме уровней* в зонной теории (рис. 5).

В собственном полупроводнике при абсолютном нуле температуры все уровни валентной зоны полностью заполнены электронами, а в зоне проводимости электроны отсутствуют.

Электрическое поле не может перебросить электроны из валентной зоны в зону проводимости, т.е. при  $T = 0$  К собственные полупроводники являются диэлектриками. При повышении температуры часть электронов с верхних уровней вблизи потолка валентной зоны переходит под действием теплового возбуждения на нижние уровни вблизи дна зоны проводимости (рис. 5).

В зоне проводимости появляется некоторое число электронов. При наложении на кристалл электрического поля эти электроны могут перемещаться на более высокие пустые уровни, т.е. увеличивать свою энергию и участвовать в образовании электрического тока. Поэтому свободная зона получила название зоны проводимости.

В то же время в результате тепловых забросов электронов в зону проводимости в валентной зоне появляются вакантные уровни. Электроны этой зоны

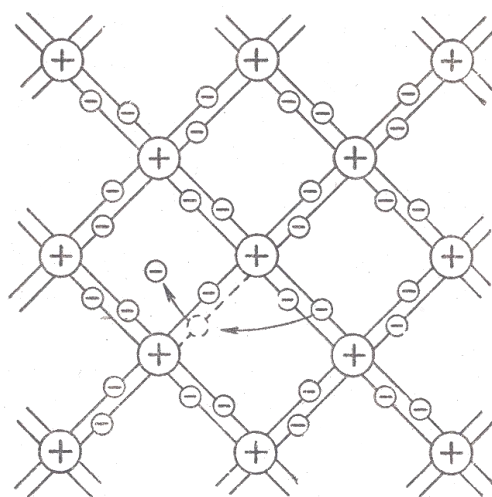


Рис. 4.

теп- пары, тро- его тель-

щим ки» – жена как равен

пар. ство- элект-

с

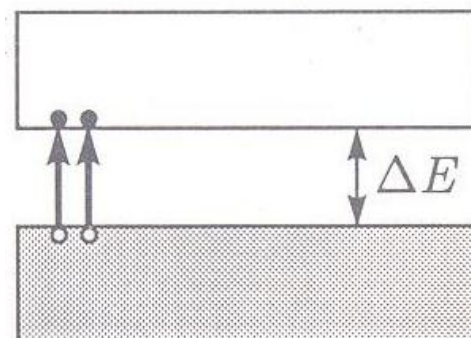


Рис. 5.

также могут изменять свою скорость (энергию) под действием внешнего поля. Во внешнем электрическом поле на освободившееся место может переместиться электрон с соседнего уровня, а вакансия появится в том месте, откуда ушел электрон, и т.д.

Проводимость собственных полупроводников, обусловленная электронами, называется **электронной проводимостью** или **проводимостью *n*-типа** (от лат. *negative* – отрицательный).

Проводимость собственных полупроводников, обусловленная квазичастицами – дырками, называется **дырочной проводимостью** или **проводимостью *p*-типа** (от лат. *positive* – положительный).

Процессу рекомбинации соответствует обратный переход электрона из зоны проводимости на один из свободных уровней валентной зоны. При этом электрон отдает энергию решетке или испускает квант электромагнитного излучения.

Подводя итоги можно сказать, что проводимость чистых полупроводников является проводимостью смешанного типа – электронно-дырочной.

#### 4. Примесная проводимость полупроводников

Этот вид проводимости возникает, если некоторые атомы данного полупроводника заменить в узлах кристаллической решетки атомами, валентность которых отличается на единицу от валентности основных атомов.

Пусть валентность примеси *на единицу больше*, чем валентность основных атомов. На рис. 6 условно изображена решетка кремния с примесью 5-валентных атомов фосфора.

Атом фосфора содержит в наружной оболочке лишний по сравнению с кремнием электрон. Для образования ковалентных связей с соседями атому фосфора достаточно четырех электронов. Следовательно, пятый валентный электрон оказывается как бы лишним и легко отщепляется от атома за счет энергии теплового движения, образуя странствующий свободный электрон.

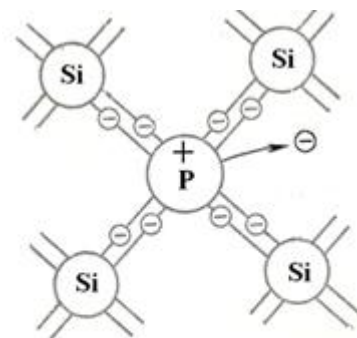


Рис. 6.

Образование свободного электрона при этом не сопровождается нарушением ковалентных связей, т.е. образованием дырки. Хотя в окрестности атома фосфора и возникает избыточный положительный заряд, но он связан с этим атомом и перемещаться по решетке не может. Благодаря этому заряду атом фосфора может захватить приближившийся к нему электрон, но связь захваченного электрона с атомом будет непрочной и легко нарушается вновь за счет тепловых колебаний решетки.

Таким образом, в полупроводнике с 5-валентной примесью имеется **только** один вид носителей тока – **электроны**. Такой полупроводник обладает **электронной проводимостью** или является **полупроводником *n*-типа**. Атомы примеси, поставляющие электроны проводимости, называются **д о н о р а м и** (т.е. отдающими электрон).

С точки зрения зонной теории этот процесс можно представить так (рис. 7)..

Атомы примеси вызывают на энергетической схеме появление небольшого количества дополнительных уровней, т.н. донорных уровней (они обозначены буквой *D* на рис. 7). Донорные уровни расположены в запрещенной зоне на малом расстоянии от дна зоны проводимости.

Поскольку энергетическое расстояние  $\Delta E_D$  мало, энергия теплового движения даже при обычных температурах оказывается достаточной для того, чтобы перевести электрон с донорного уровня в зону проводимости, и электроны уходят с них в зону проводимости.

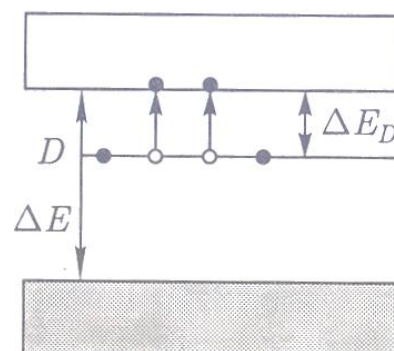


Рис. 7.

Обратный переход электрона из зоны проводимости на донорный уровень соответствует захвату свободного электрона атомом примеси.

Предположим теперь, что в решетку кремния (Si) введен примесный атом, валентность которого *на единицу меньше*, чем валентность основных атомов, например атом бора (B) с тремя валентными электронами (рис. 8).

Трех валентных электронов атома бора недостаточно для образования связей со всеми четырьмя соседями. Поэтому одна из связей окажется не укомплектованной и будет представлять собой место, способное захватить электрон. Четвертый электрон может быть захвачен от соседнего атома кремния.

На месте захваченного электрона возникает дырка. Но дырки не остаются локализованными, а перемещаются в решетке Si как свободные положительные заряды.

В то же время избыточный отрицательный заряд, который возникает вблизи атома бора, присоединившего электрон, связан с атомом бора и по решетке перемещаться не может.

Таким образом, в полупроводнике с 3-валентной примесью возникают носители тока **только** одного вида – **дырки**.

Такой полупроводник обладает **дырочной проводимостью** или является **полупроводником *p*-типа**. Атомы примеси, вызывающие возникновение дырок, называются **а к ц е п т о р а м и** (т.е. **присоединяющими электрона**).

Созданные акцепторами локальные уровни также располагаются в запрещенной зоне, но ближе к верхнему краю валентной зоны. Эти уровни свободны и заполняются электронами из валентной зоны (рис.9).

Образованию дырки отвечает переход электрона из валентной зоны на акцепторный уровень (обозначен буквой *A* на рис.9). Обратный переход соответствует разрыву одной из четырех ковалентных связей атома примеси с его соседями и рекомбинация образовавшегося при этом электрона и дырки.

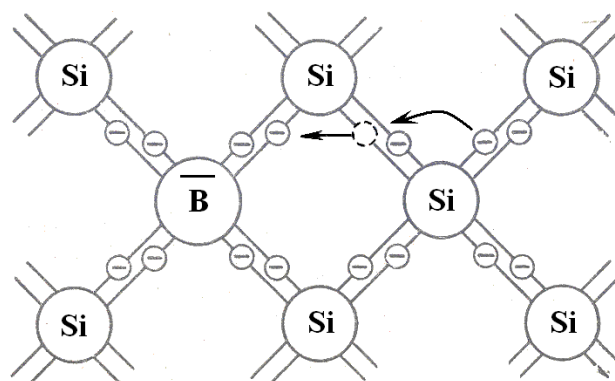


Рис. 8.

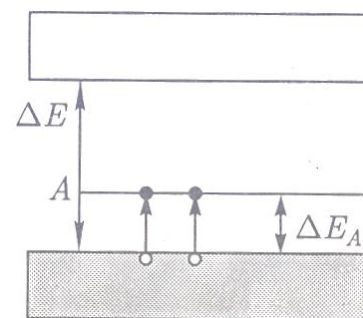


Рис. 9.

## 5. Свойства *p* – *n*-перехода.

Основная структурная ячейка огромного числа полупроводниковых приборов называется *p-n* –переходом. Рассмотрим в общих чертах физические процессы, которые происходят в *p* – *n*-переходе.

Пусть два участка полупроводника с проводимостями разного типа разделяет плоская граница (рис. 10): слева от нее расположен полупроводник *p*-типа, справа – полупроводник *n*-типа.

Ионы донорной примеси обозначены кружком со знаком «+», и ионы акцепторной примеси обозначены кружком со знаком «-». Ионы (кружки) находятся в узлах кристаллической решетки, а дырки и электроны (белые и черные точки) могут перемещаться по кристаллу.

Носители тока, концентрация которых в данном полупроводнике больше, называют *основными*, а носители, концентрация которых меньше, – *неосновными*. Концентрация основных носителей гораздо больше, чем концентрация неосновных носителей (примерно в  $10^6$  раз).



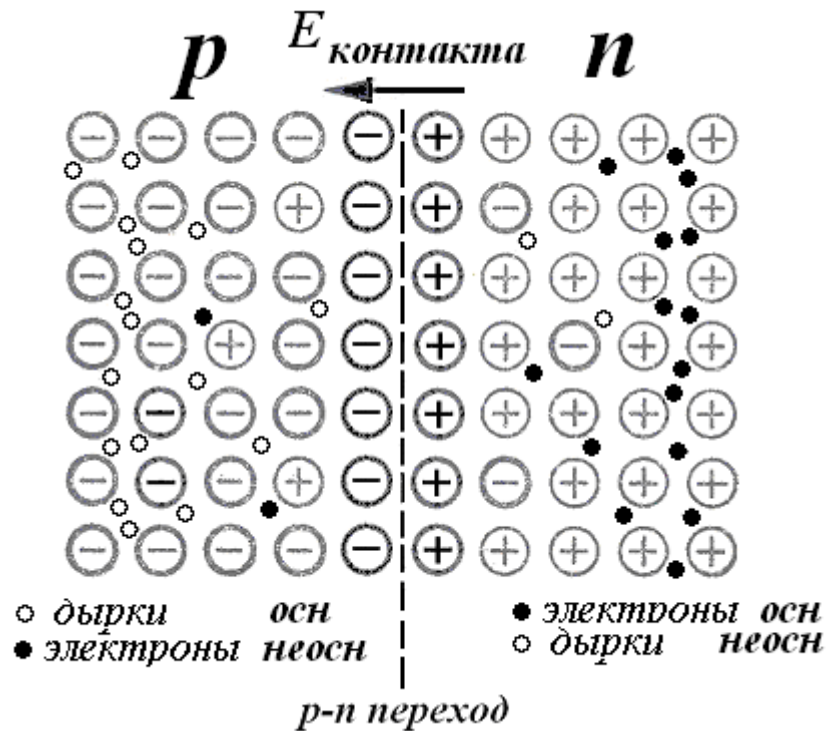


Рис. 10

В  $p$ -области основными носителями тока являются дырки. Однако, в этой области имеется также небольшое число неосновных носителей – электронов, возникших вследствие разрыва ковалентных связей за счет теплового движения атомов кристалла.

Соответственно, в  $n$ -области основные носители тока – электроны, а неосновные носители – небольшое число дырок.

Вследствие значительного различия в концентрации электронов и дырок по разные стороны от перехода **происходит диффузия** дырок из  $p$ -полупроводника, где их концентрация выше, в  $n$ -полупроводник, где концентрация дырок ниже. Электроны диффундируют в противоположном направлении – в направлении  $n \rightarrow p$ .

Диффундируя во встречных направлениях через пограничный слой, дырки и электроны **рекомбинируют** (соединяются) друг с другом. Рекомбинация приводит к исчезновению пары электрон проводимости – дырка.

**Такой встречный процесс диффузии заряженных частиц эквивалентен электрическому току  $I_{осн}$  через  $p - n$ -переход**, который течет из  $p$ -области в  $n$ -область. Этот ток основных носителей заряда называется **диффузионным**.

В  $p$ - области после ухода дырок вблизи границы раздела остаются неподвижные отрицательные ионы акцепторной примеси, заряд которых теперь не компенсируется дырками. Они образуют отрицательный пространственный заряд (рис. 10).

В  $n$ - области вследствие ухода электронов вблизи границы остаются неподвижные положительные донорные ионы, заряд которых теперь не компенсируется электронами. Они образуют положительный объемный заряд в прилегающем слое (рис. 10).

Таким образом возникает **двойной электрический слой** в  $p - n$ -переходе и **контактная разность потенциалов**. Напряженность электрического поля двойного слоя  $E_{контакта}$  направлена от  $n$ - к  $p$ - полупроводнику (рис. 10).

Контактное поле препятствует дальнейшему переходу дырок – направо, а электронов – налево, т.е. **препятствует диффузионному току основных носителей тока**.

Зато двойной электрический слой в  $p - n$ -переходе **способствует движению неосновных** носителей заряда – дырок из  $n$ -области и электронов из  $p$ -области. Такой

«дрейф» заряженных частиц через переход представляет собой электрический ток  $I_{неосн}$ , который направлен противоположно диффузионному току и называется **дрейфовым**.

В условиях термодинамического равновесия, которое устанавливается в  $p$ - $n$ -переходе, если к нему не приложена внешняя разность потенциалов, диффузионный ток  $I_{осн}$  по величине точно равен дрейфовому  $I_{неосн}$ , оба тока компенсируют друг друга и **полный ток через переход равен нулю**.

Область  $p$ - $n$ -перехода обеднена подвижными носителями заряда, т.к. здесь благодаря встречному потоку электронов и дырок происходит их интенсивная рекомбинация. По этой причине область  $p$ - $n$ -перехода обладает гораздо большим удельным сопротивлением, чем весь кристалл полупроводника, и называется **«запирающим слоем»**.

Толщина слоя  $p$ - $n$ -перехода составляет приблизительно доли микрометра, а контактная разность потенциалов – десятые доли вольта. Носители тока в состоянии преодолеть такую разность потенциалов только при температуре в десятки тысяч градусов, т.е. при обычных температурах контактный слой является запирающим.

Сопротивление запирающего слоя можно изменить с помощью внешнего электрического поля. При этом **возможны два варианта**.

**1. Приложим к кристаллу внешнее напряжение так, чтобы высокий потенциал «+» был подан на  $p$ -область, а низкий потенциал «-» был подан на  $n$ -область (режим прямого напряжения) (рис. 11).**

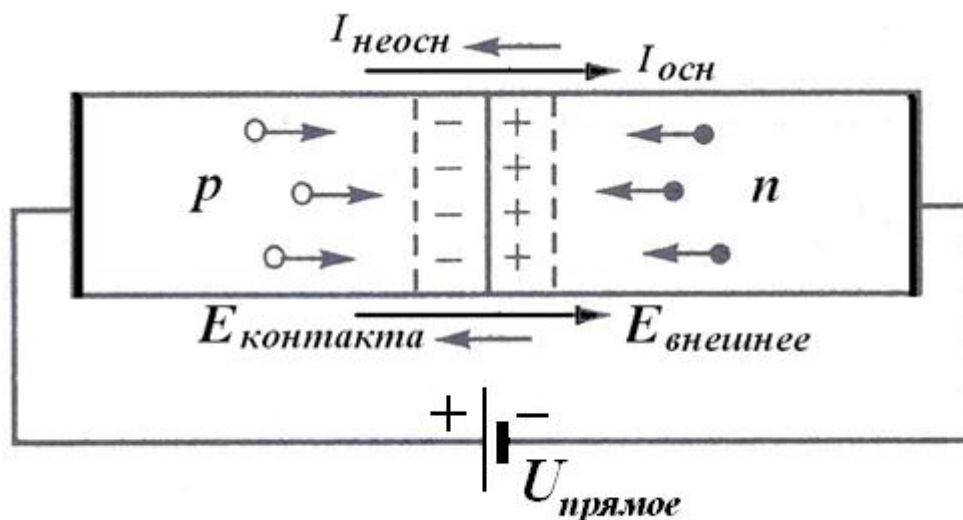


Рис. 11

Тогда внешнее электрическое поле в кристалле  $E_{внеш}$  будет направлено противоположно полю контактного запирающего слоя  $E_{конт}$ . Внешнее поле вызовет движение дырок из области  $p$ -полупроводника и электронов из области  $n$ -полупроводника к границе  $p$ - $n$ -перехода. (рис. 11).

Двигаясь навстречу, электроны и дырки рекомбинируют друг с другом, ток основных носителей возрастет. Ток же неосновных носителей останется практически без изменения. Следовательно, результирующий ток станет отличным от нуля. Понижение потенциального барьера пропорционально приложенному напряжению. При уменьшении высоты барьера ток основных носителей, а, следовательно, и результирующий ток, быстро нарастает. Таким образом в направлении от  $p$ -области к  $n$ -области  $p$ - $n$ -переход пропускает ток, сила которого **быстро нарастает** при увеличении приложенного напряжения. Это напряжение называется **прямым** (или пропускным). Расчет показывает, что с увеличением напряжения ток экспоненциально нарастает (рис. 13).

Электрическое поле «поджимает» основные носители к границе между областями, вследствие чего ширина переходного слоя, обедненного носителями, уменьшается. Соот-

ответственно уменьшается и сопротивление перехода, причем тем сильнее, чем больше напряжение.

**2. Теперь приложим к кристаллу напряжение противоположного направления, чтобы «+» был подключен к  $n$ -области, а «-» был подключен к  $p$ -области. (режим обратного или запирающего напряжения)**

Теперь направление внешнего электрического поля  $E_{внеш}$  будет совпадать с направлением контактного поля  $E_{конт}$  (рис. 12)

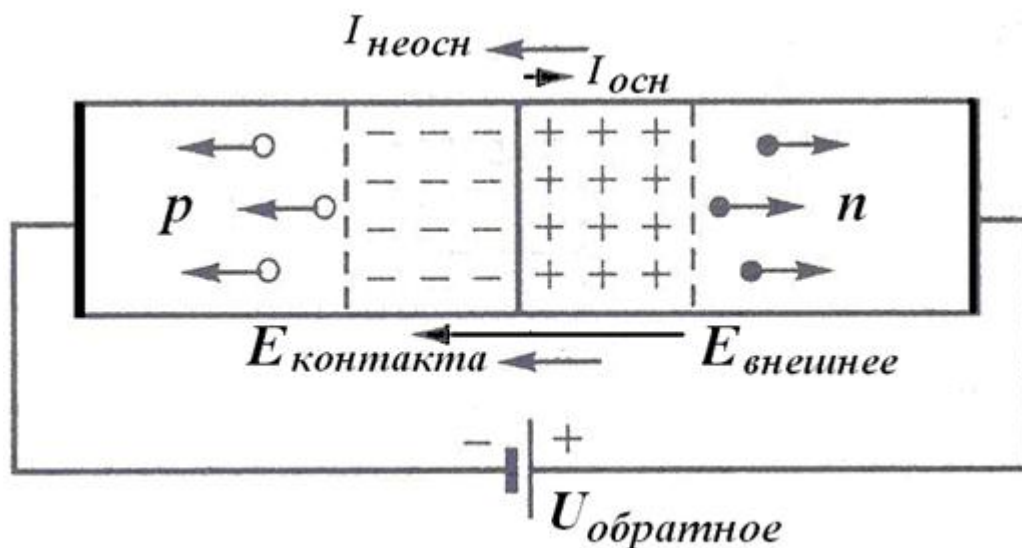


Рис. 12

В этом случае внешнее поле будет усиливать поле контактного слоя и обусловит движение электронов и дырок от границы  $p-n$ -перехода в противоположных направлениях. Поле, возникающее в кристалле при наложении обратного напряжения «оттягивает» основные носители от границы между областями, что приводит к возрастанию ширины переходного слоя, обедненного носителями. Соответственно увеличивается и сопротивление перехода. Следовательно,  $p-n$ -переход обладает в обратном направлении гораздо большим сопротивлением, чем в прямом.

В данном случае через  $p-n$ -переход протекает только небольшой ток (он называется **обратным**) целиком обусловленный неосновными носителями. Ток неосновных носителей (обратный ток) не зависит от величины контактного поля, а определяется концентрацией этих носителей, которая очень мала по сравнению с основными носителями.

Вольт-амперная характеристика  $p-n$ -перехода изображена на рис. 13.

Обратный ток быстро достигает насыщения, т.е. перестает зависеть от  $U$ . Только при очень большом обратном напряжении сила тока начинает резко возрастать, что обусловлено электрическим пробоем перехода (см. пунктир на левой ветви на рис. 13)

Направление внешнего поля, в котором расширяется запирающий слой и  $p-n$ -переход не пропускает электр тока, называется **обратным** или запирающим.

Прямой ток на несколько порядков превышает обратный ток.

При обратном смещении ток практически можно считать равным нулю, поэтому говорят, что  $p-n$ -переход обладает односторонней проводимо-

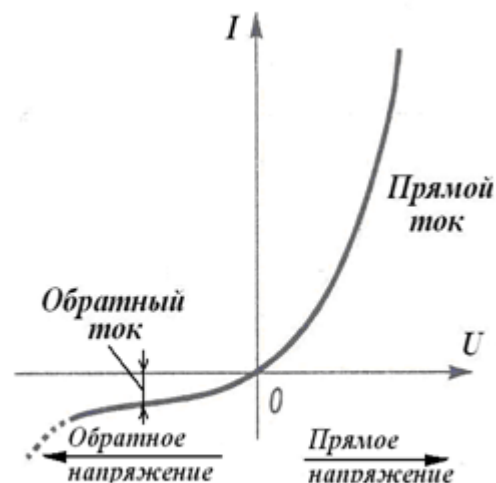


Рис.13

стью и может служить выпрямителем переменного тока.

На рис.14 показан график тока, текущего через переход, в том случае, если приложенное напряжение изменяется по закону синуса. Через  $p-n$ -переход проходит в одном направлении пульсирующий (выпрямленный) ток.

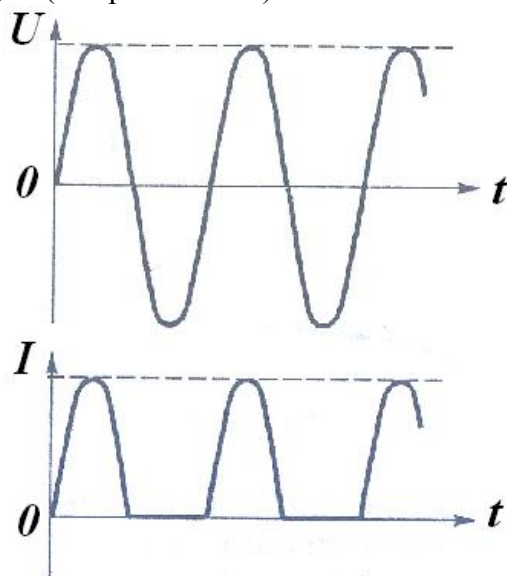


Рис. 14.

### **Контрольные вопросы**

1. Чем различаются по зонной теории полупроводники и диэлектрики? Металлы и диэлектрики?
2. Когда по зонной теории твердое тело является проводником электрического тока?
3. Чем отличаются энергетические состояния электронов в изолированном атоме и кристалле?
4. Что такое разрешенные и запрещенные зоны?
5. Как объяснить увеличение проводимости полупроводников с повышением температуры?
6. Чем обусловлена проводимость собственных полупроводников?
7. Каков механизм примесной проводимости полупроводников?
8. Поясните физические процессы, происходящие в  $p-n$ -переходе.
9. Как объяснить одностороннюю проводимость  $p-n$ -перехода?
10. Какова вольт-амперная характеристика  $p-n$ -перехода? Объясните возникновение прямого и обратного тока.
11. Какое направление в полупроводниковом диоде является прямым для тока?
12. Почему через полупроводниковый диод проходит ток (хотя и слабый) даже при запирающем напряжении?

### **Литература**

1. Кучерук И.М., Горбачук И.Т., Луцик П.П. Загальний курс фізики. К.: «Техніка», 2001. - Т.2.
2. Савельев И.В. Курс общей физики.- М.: «Наука», 1997.- Т.3.
3. Трофимова Т.И. Курс физики. М. «Академия», 2005.

Составил И.П.Гаркуша.