

Epähomogeeniset puolijohteet

Epähomogeenisella puolijohteella tarkoitetaan yleensä puolijohtavaa materiaalia, jossa donoreiden ja akseptorien tiheys riippuu paikasta. Epähomogeeninen puolijohde voi koostua

- samasta puolijohtavasta materiaalista, ideaalisessa tapauksessa yhdestä täydellisestä kiteestä, jossa epäpuhtauksien konsentraatio vaihtelee paikasta toiseen, tai
- toisiinsa liitetyistä erilaisista puolijohdemateriaaleista. Tällaisia puolijohteita on tapana nimittää *heterorakenteiksi* (*heterostructures*).

Vaikka teemmekin tässä teoriaa ideaaliselle epähomogeeniselle puolijohteelle, jonka epäpuhtaustiheys on

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

soveltuu malli myös heterorakenteille.

Tarkastelemme siis ns. *p-n*-liitosta. Yleensäkin puolijohde on

***p*-tyyppinen** jos epäpuhtaudet sitovat valenssivyön elektroneja luoden aukkoja valenssivyölle, jolloin muodostuneet ionit ovat negatiivisesti varattuja, ts. kyseessä ovat akseptoriepäpuhtaudet,

***n*-tyyppinen** jos epäpuhtaudet luovuttavat elektroneja johtavuusvyölle, jolloin muodostuneet epäpuhtausionit ovat positiivisesti varattuja, ts. kyseessä ovat donoriepäpuhtaudet.

Oletamme, että semiklassiset liikeyhtälöt ovat voimassa eli vyöllä n olevan ja potentiaalin $\phi(x)$ kokevan elektronin (aaltopaketin) liikettä hallitsee Hamiltonin funktio

$$H_n = \mathcal{E}_n\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\right) - e\phi(x).$$

p-n-liitos tasapainossa

Tarkoituksemme on määrittää varauksenkuljettajien tiheys epähomogeenisen douppauksen aiheuttamassa sähköstaattisessa potentiaalissa $\phi(x)$.

Voimme toistaa homogeenisen puolijohteen varaustiheyksiin

$$\begin{aligned} n_c(T) &= N_c(T)e^{-(\mathcal{E}_c - \mu)/k_B T} \\ p_v(T) &= P_v(T)e^{-(\mu - \mathcal{E}_v)/k_B T} \end{aligned}$$

johtaneen laskun myös paikallisesti vaihtelevan potentiaalitin tapauksessa, jolloin tiheyksien paikkariippuvuudet ovat

$$\begin{aligned} n_c(x) &= N_c(T)e^{-(\mathcal{E}_c - e\phi(x) - \mu)/k_B T} \\ p_v(x) &= P_v(T)e^{-(\mu - \mathcal{E}_v + e\phi(x))/k_B T}. \end{aligned}$$

Hyvänä aproksimaationa voimme olettaa, että kaukana liitoskohdasta

- *p*-puolella kaikki donorit ovat ionisoituneita, ts. $n_c(\infty) = N_d$ ja
- *n*-puolella kaikki akseptorit ovat ionisoituneita, ts. $p_v(-\infty) = N_a$.

Voimme siis kirjoittaa

$$\begin{aligned} N_d = n_c(\infty) &= N_c(T)e^{-(\mathcal{E}_c - e\phi(\infty) - \mu)/k_B T} \\ N_a = p_v(-\infty) &= P_v(T)e^{-(\mu - \mathcal{E}_v + e\phi(-\infty))/k_B T}. \end{aligned}$$

Koska systeemi on termisessä tasapainossa, on kemiallinen potentiaali paikallisesti vakio. Potentiaalitin muutos kuljettaessa liitoksen yli on tällöin

$$e\phi(\infty) - e\phi(-\infty) = \mathcal{E}_c - \mathcal{E}_v + k_B T \ln \frac{N_d N_a}{N_c P_v}$$

eli

$$e\Delta\phi = E_g + k_B T \ln \frac{N_d N_a}{N_c P_v}.$$

Toinen usein käytetty tapa esittää suureita ns. *elektrokemiallisen potentiaalitin*

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

jolloin esim. varauksenkuljettajien tiheydet tulevat muotoon

$$\begin{aligned} n_c(x) &= N_c(T)e^{-(\mathcal{E}_c - \mu_e(x))/k_B T} \\ p_v(x) &= P_v(T)e^{-(\mu_e(x) - \mathcal{E}_v)/k_B T} \end{aligned}$$

ja potentiaalihiippäys muotoon

$$e\Delta\phi = \mu_e(\infty) - \mu_e(-\infty).$$

Näemme, että missä tahansa liitospuolijohteen kohdassa x varauksenkuljettajien tiheydet ovat täsmälleen samat kuin sellaisessa homogeenisessä puolijohteessa, jonka donori- ja akseptoritiheydet sekä kemiallinen potentiaali ovat $N_d(x)$, $N_a(x)$ ja $\mu_e(x)$.

Olettamuksemme epäpuhtausiltojen (liki) täydellisestä ionisaatiosta kaukan liitoskohdasta pitää paikkansa myös liitoksen läheisyydessä, sillä epäpuhtausiltojen ovat kaikkialla liki samalla etäisyydellä energia-aukon reunoista, ts. paikasta riippumatta sama terminen energia riittää ionisaatioon. Paikasta riippuva varaustiheys $\rho(x)$ on niin ollen

$$\rho(x) = e[N_d(x) - N_a(x) - n_c(x) + p_v(x)].$$

Potentiaali $\phi(x)$ ja varaustiheys $\rho(x)$ voidaan nyt ratkaista

1. ratkaisemalla ϕ Poissonin yhtälöstä

$$-\nabla^2 \phi = -\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{4\pi \rho(x)}{\epsilon},$$

2. laskemalla tiheydet

$$\begin{aligned} n_c(x) &= N_c(T)e^{-(\mathcal{E}_c - e\phi(x) - \mu)/k_B T} \\ p_v(x) &= P_v(T)e^{-(\mu - \mathcal{E}_v + e\phi(x))/k_B T} \end{aligned}$$

juuri ratkaistua potentiaalia käyttäen,

3. laskemalla uusi tiheys ja

4. toistaen edelliset kohdat.

Hieman helpommalla päästään, kun kombinoidaan lausekkeet

$$\begin{aligned} n_c(x) &= N_c(T) e^{-(\mathcal{E}_c - e\phi(x) - \mu)/k_B T} \\ p_v(x) &= P_v(T) e^{-(\mu - \mathcal{E}_v + e\phi(x))/k_B T} \end{aligned}$$

ja

$$\begin{aligned} N_d &= N_c(T) e^{-(\mathcal{E}_c - e\phi(\infty) - \mu)/k_B T} \\ N_a &= P_v(T) e^{-(\mu - \mathcal{E}_v + e\phi(-\infty))/k_B T} \end{aligned}$$

yhtälöiksi

$$\begin{aligned} n_c(x) &= N_d e^{-[\phi(\infty) - \phi(x)]/k_B T} \\ p_v(x) &= N_a e^{-[\phi(x) - \phi(-\infty)]/k_B T} \end{aligned}$$

sekä havaitaan, että kaavan

$$e\Delta\phi = E_g + k_B T \ln \frac{N_d N_a}{N_c P_v}$$

perusteella potentiaalin muutos on kertalukua $E_g \gg k_B T$. Oletetaan, että potentiaalin muutos tapahtuu välillä $-d_p \leq x \leq d_n$. Tämän alueen ulkopuolella potentiaalilla $\phi(x)$ on siis asymptoottinen arvonsa,

- n -puolella $n_c = N_d$
- p -puolella $p_v = N_a$

ja siten $\rho = 0$.

Alueen sisäpuolella reunoja lukuunottamatta potentiaali eroaa asymptoottisista arvoistaan useita $k_B T$ monikertoja, joten (reunoja lukuunottamatta)

- $n_c \ll N_d$ ja $p_v \ll N_a$
- $\rho(x) = e[N_d(x) - N_a(x)]$

eli alueessa $-d_p < x < d_n$ ei ole juuri lainkaan varauksenkuljettajia. Siksi tätä aluetta kutsutaan *eristekerrokseksi* (*depletion layer*). Poissonin yhtälö on nyt

$$\phi''(x) = \begin{cases} 0, & x > d_n \\ -\frac{4\pi N_d}{\epsilon}, & d_n > x > 0 \\ \frac{4\pi N_a}{\epsilon}, & 0 > x > -d_p \\ 0, & -d_p > x \end{cases}.$$

Yhtälön ratkaisut ovat

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi(\infty), & x > d_n \\ \phi(\infty) - \frac{2\pi N_d}{\epsilon} (x - d_n)^2, & d_n > x > 0 \\ \phi(-\infty) + \frac{2\pi N_a}{\epsilon} (x + d_p)^2, & 0 > x > -d_p \\ \phi(-\infty), & -d_p > x \end{cases}.$$

Reunaehdot (ϕ ja ϕ' jatkuvia) toteutuvat eksplisiittisesti rajoilla $x = d_n$ ja $x = -d_p$. Derivaatan ϕ' jatkuvuus pisteessä $x = 0$ johtaa ehtoon

$$N_d d_n = N_a d_p,$$

so. positiivisen varauksen ylimäärä n -puolella on sama kuin negatiivisen varauksen ylimäärä p -puolella. Funktion ϕ jatkuvuus pisteessä $x = 0$ puolestaan johtaa ehtoon

$$\frac{2\pi e}{\epsilon} (N_d d_n^2 + N_a d_p^2) = \phi(\infty) - \phi(-\infty) = \Delta\phi.$$

Etäisyyksille $d_{n,p}$ saadaan nyt lausekkeet

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

mikä voidaan myös kirjoittaa numeerisesti mukavampaan muotoon

$$d_{n,p} = 105 \left[\frac{(N_a/N_d)^{\pm 1}}{10^{-18} (N_d + N_a)} [\epsilon e \Delta\phi]_{\text{eV}} \right]^{1/2} \text{Å}.$$

Tasasuuntauksen alkeet

Tarkastellaan jännitteellistä p - n -liitosta. Määrittelemme ulkoisen potentiaalin V merkin siten, että p -puolen potentiaalin noustessa n -puolen potentiaaliin verrattuna on $V > 0$.

Tilanteessa $V = 0$

- p - n -liitoksen kohdalle syntyy $\approx 10^3 - 10^4 \text{Å}$ paksuinen varauksenkuljettajista liki tyhjä eristekerros
- eristekerroksen sähköinen vastus on siksi paljon suurempi kuin sitä ympäröivien homogeenisten alueiden, eli
- koko p - n -puolijohdetta voidaan ajatella johteiden väliin kytkettynä vastuksena.

Kun tällaista sähköistä piiriä ajetaan ulkoisella jännitteellä V , tapahtuu potentiaalin V pudotus liki kokonaisuudessaan vastuksessa.

p - n -puolijohteen tapauksessakin on oletettavissa, että myös ulkoisen jännitteen V vaikuttaessa potentiaalin $\phi(x)$ muutos tapahtuu pääosin eristekerroksessa.

Kokonaismuutos $\Delta\phi$ on nyt

$$\Delta\phi = (\Delta\phi)_0 - V,$$

missä $(\Delta\phi)_0$ on muutos jännitteettömässä tilanteessa.

Eristekerroksen paksuuden määrävän yhtälön

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

voidaan olettaa olevan voimassa jännitteellisessäkin tapauksessa kunhan potentiaalin muutos $\Delta\phi$ korjataan oikeaksi. Nähdään, että tällöin on

$$d_{n,p}(V) = d_{n,p}(0) \left[1 - \frac{V}{(\Delta\phi)_0} \right]^{1/2}.$$

Tarkastellaan hiukkasvirtatiheyksiä J_e (elektronit) ja J_h (aukot). Vastaavat varausvirtatiheydet j_e ja j_h ovat silloin

$$j_e = -eJ_e, \quad j_h = eJ_h.$$

Jännitteettömässä tapauksessa ($V = 0$) on $J_e = J_h = 0$. Jännite $V \neq 0$ ilmeisestikin rikkoo tämän symmetrian. Katsotaan esimerkkinä p - n -liitoksen yli kulkevaa aukkovirtaa J_h . Tämä koostuu kahdesta komponentista:

1. *generoiva* virta n -puolelta p -puolelle. Tässä n -puolen valenssivyöltä termisesti virittyneiden elektronien jälkeensä jättämät aukot eristekerrokseen jouduttuaan ajautuvat potentiaalin $\phi(x)$ ajamina välittömästi p -puolelle.
2. *rekombinaatio*virta p -puolelta n -puolelle. Eristekerroksessa vaikuttava potentiaali $\phi(x)$ vastustaa tätä virtaa, ainoastaan ne aukot, joiden energia on suuruusluokkaa $\Delta\phi$ voivat ylittää potentiaalikynnyksen. Tällaisten aukkojen lukumäärä on verrannollinen tekijään $e^{-e\Delta\phi/k_B T}$, ts.

$$J_h^{\text{rec}} \propto e^{-e(-e(\Delta\phi)_0 - V)/k_B T}.$$

Kun ajava jännite on $V = 0$, täytyy nettovirran hävitä, ts.

$$J_h^{\text{rec}}|_{V=0} = J_h^{\text{gen}}.$$

Voimme siis päätellä, että rekombinaatiovirta on

$$J_h^{\text{rec}} = J_h^{\text{gen}} e^{eV/k_B T}.$$

Aukkojen kokonaisvirta p -puolelta n -puolelle on siten

$$J_h = J_h^{\text{rec}} - J_h^{\text{gen}} = J_h^{\text{gen}} (e^{eV/k_B T} - 1).$$

Kokonaisvarausvirtatiheys saadaan lasketuksi huomioimalla, että

- täsmälleen sama tarkastelu pätee myös elektronivirroille lukuunottamatta sitä, että generaatio- ja rekombinaatiovirrat ovat vastakkaisuuntaiset vastaaviin aukkovirtoihin verrattuna,
- toisaalta elektronien varaus on vastakkaismerkkinen aukkojen varaukseen nähden.

Varausvirtatiheys on siten

$$j = e(J_h - J_e) = e(J_h^{\text{gen}} + J_e^{\text{gen}}) (e^{eV/k_B T} - 1).$$