

GĘSTOŚĆ PRĄDU CAŁKOWITEGO W PÓŁPRZEWODNIKU NIJEDNORODNYM ZE ZMIENNĄ PRZERWĄ ENERGETYCZNĄ W OBECNOŚCI NOŚNIKÓW NADMIAROWYCH I GRADIENTU TEMPERATURY

S. Sikorski, T. Piotrowski

Instytut Technologii Elektronowej,
Al. Lotników 32/46, 02-668 Warszawa

ABSTRACT

Theoretical investigation of excess current carrier transport in the semiconductor with an inhomogeneous distribution of impurities as well as the band-gap enabled to reveal physical phenomena in the presence of the temperature gradient.

For this reason the equation for the total current density J should be obtained where the excess current carriers density is revealed. This circumstance requires a suitable form of transport equations. The first condition is to fulfil the quasi-neutrality principle. So the transformation of the equations to obtain the Shockley's form and also application of Shockley's potentials V is needed.

The results finally obtained showed that the assumptions rightly describe the phenomena of thermophotovoltaicity.

The consideration of the equation determining the total current density J gives a complete view of phenomena appearing in semiconductor fulfilling the present above assumptions

The formula for J has six members:

- 1) The ohmic component proportional to the difference of active Shockley's potential V and built-in field,
- 2) The Dember component determined by gradient of quantity proportional to the gradient of mobility and to quantity depending on photoconductivity $\Delta\sigma$,

- 3) The bulk photovoltaic effect due to built-in field
- 4) The bulk photovoltaic effect connected with the gradient of the ratio of both mobilities,
- 5) The thermo-photovoltaic effect being a cross between thermoelectrical effect and photoconductivity giving thermo-photovoltaic effect.

The three last phenomena are proportional to Δp e.g. to the photoconductivity.

- 6) This last component as normal Seebeck effect, occurs in the state of equilibrium independently on photoconductivity. The formula determining the total current density enables to determine quantitatively the contribution of cited components.

GĘSTOŚĆ PRĄDU CAŁKOWITEGO

Celem pracy jest znalezienie w przypadku stacjonarnym wyrażenia na gęstość prądu całkowitego J w półprzewodniku, w którym przerwa energetyczna E_G , domieszkowanie oraz temperatura T są funkcjami współrzędnych danego punktu w objętości półprzewodnika. Przyjmujemy obecność nośników nadmiarowych.

Zakładamy ponadto, że zmiany powyższych parametrów na odcinku rzędu drogi Debye'a są dostatecznie małe i spełnione są założenia przyjęte w [1] (op. cit. Eq.(2.1) and (2.2)). Dzięki tym założeniom można zaniedbać ładunek przestrzenny i pułapkowanie na centrach rekombinacji i przyjąć zasadę quasi-neutralności

$$p - n - N_D^- + N_D^+ = 0 \quad (1)$$

we wszystkich punktach rozważanej próbki.

W powyższym równaniu występują koncentracje n i p , które wskutek fotoprzewodnictwa lub wstrzykiwania różnią się od koncentracji równowagowych p_0 i n_0 .

W przypadku zmiennej temperatury T należy określić ściśle co rozumiemy jako koncentracje równowagowe. W niniejszej pracy przyjęto,

że są to koncentracje odpowiadające danej temperaturze przy założeniu, że poziomy quasi fermiowskie E_{fn} dla elektronów i E_{fp} dla dziur schodzą się do jednego poziomu E_{f0}

$$E_{fn} = E_{fp} = E_{f0} \quad (2)$$

skąd wynika że koncentracje n_0 i p_0 spełniają zależność słuszną dla półprzewodnika niezdegenerowanego :

$$n_0 p_0 = n_i^2, \quad (3)$$

gdzie n_i - koncentracja samoistna .

Koncentracje równowagowe spełniają także zasadę quasi neutralności

$$p_0 - n_0 - N_A^- + N_D^+ = 0 \quad (4)$$

Odejmując stronami równanie (4) od (1) możemy otrzymać zależność

$$n - n_0 = p - p_0 = \Delta p, \quad (5)$$

gdzie Δp zgodnie z powyższymi uwagami przyjmujemy jako koncentrację nośników nadmiarowych . Realizację postawionego zadania należy rozpocząć od zastosowania wzorów na gęstości prądów elektronowego J_n i dziurowego J_p , na tyle ogólnych , że są one słuszne przy przyjętych założeniach. Zgodnie z wynikami szeregu prac Marshaka i Vliet ujętych w pracy [2] po wykonaniu na ich podstawie obliczeń podanych w pracy [3] otrzymano:

$$J_n = \frac{\sigma_n}{q} \left(\text{grad } E_{fn} - \frac{E_{fn} - E_c}{k_B T} \text{grad } k_B T + \alpha_n \text{grad } k_B T \right), \quad (6)$$

$$J_p = \frac{\sigma_p}{q} \left(\text{grad } E_{fp} - \frac{E_v - E_{fp}}{k_B T} \text{grad } k_B T - \alpha_p \text{grad } k_B T \right) \quad (7)$$

gdzie σ_n, σ_p - konduktywność elektronów i dziur

E_{fn}, E_{fp} - poziomy quasifermiowskie elektronów i dziur

E_c, E_v - krawędzie pasma przewodnictwa i podstawowego

k_B - stała Boltzmanna

α_n, α_p - współczynniki termoelektryczne elektronów i dziur

W przypadku rozpraszania fononowego $\alpha_n = \alpha_p = 2$.

Szereg prób właściwego ujęcia wykazał, że podobnie jak w pracy [1] najbardziej celowe jest wprowadzenie potencjału shockleyowskiego V [4] mierzonego w voltach, a odpowiadającego tzw. samoistnemu poziomowi E_{fi} energii Fermiego

$$V = -\frac{1}{q} E_{fi} = -\frac{k_B T}{q} \left(\frac{E_v + E_c}{2} + \frac{1}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} \right), \quad (7A)$$

gdzie E_v , E_c - krawędzie pasma podstawowego i przewodnictwa
 N_v , N_c - koncentracje efektywne gęstości stanów w paśmie podstawowym i przewodnictwa.

Celowe jest w tym przypadku proste przekształcenie wzorów (5) i (6):

$$J_n = \frac{\sigma_n}{q} \left[\text{grad } E_{fi} + \text{grad} (E_{fn} - E_{fi}) - \frac{E_{fn} - E_{fi}}{k_B T} \text{grad } k_B T + \alpha_n \text{grad } k_B T \right] \quad (8)$$

$$J_p = \frac{\sigma_p}{q} \left[\text{grad } E_{fi} - \text{grad} (E_{fi} - E_{fp}) + \frac{E_v - E_{fp}}{k_B T} \text{grad } k_B T - \alpha_p \text{grad } k_B T \right] \quad (9)$$

W półprzewodniku niezdegenerowanym koncentracje nośników podlegają statystyce Boltzmanna, więc różnice energii możemy wyrazić poprzez znane zależności

$$E_{fn} - E_{fi} = k_B T \ln \frac{n}{n_i}, \quad \frac{E_{fn} - E_c}{k_B T} = \ln \frac{n}{N_c} \quad (10)$$

w przypadku elektronów, oraz

$$E_{fn} - E_{fp} = k_B T \ln \frac{P}{n_i}, \quad \frac{E_v - E_{fp}}{k_B T} = \ln \frac{P}{N_v} \quad (11)$$

w przypadku dziur.

Dzięki tym zależnościom, stosując potencjał shockleyowski określony wzorem (7A), otrzymujemy po odpowiednich przekształceniach wzory:

$$J_n = -\sigma_n \text{grad } V + \mu_n k_B T \text{grad } n - \sigma_n \frac{k_B T}{q} \text{grad } \ln n_i + \sigma_n \left(\alpha_n - \ln \frac{n_i}{N_c} \right) \text{grad } \frac{k_B T}{q} \quad (12)$$

$$J_n = -\sigma_p \text{grad } V - \mu_p k_B T \text{grad } p + \sigma_p \frac{k_B T}{q} \text{grad } \ln n_i - \sigma_p \left(\alpha_p - \ln \frac{n_i}{N_V} \right) \text{grad } \frac{k_B T}{q}, \quad (13)$$

Wzory powyższe są typu shockleyowskiego, bowiem zawierają koncentracje n i p zamiast potencjałów fermiowskich, co umożliwia wprowadzenie zasady quasi-neutralności wyrażonej wzorem (5), z której wynika:

$$n = n_0 + \Delta p, \quad p = p_0 + \Delta p \quad (14)$$

oraz

$$\sigma_n = \sigma_{n0} + \Delta \sigma_n = \sigma_{n0} + q \mu_n \Delta p, \quad \sigma_p = \sigma_{p0} + \Delta \sigma_p = \sigma_{p0} + q \mu_p \Delta p \quad (15)$$

gdzie μ_n , μ_p - ruchliwości elektronów i dziur

σ_{n0} , σ_{p0} - konduktywności równowagowe elektronów i dziur

$\Delta \sigma_n$, $\Delta \sigma_p$ - przyrosty konduktywności elektronów i dziur

Korzystając ze wzorów (12) i (13) możemy znaleźć wstępne wyrażenie na gęstość J prądu całkowitego biorąc sumę tych wzorów, co daje w wyniku wyrażenie:

$$\begin{aligned} J = & -\sigma \text{grad } (V - V_0 + \varphi_0) - q (\mu_n + \mu_p) \Delta p \text{grad } (V_0 - \varphi_0) + \\ & + (\mu_n - \mu_p) k_B T (\text{grad } \Delta p - \text{grad } \ln n_i) + \\ & + q \left[\mu_n \left(\alpha_n - \ln \frac{n_i}{N_C} \right) - \mu_p \left(\alpha_p - \ln \frac{n_i}{N_V} \right) \right] \Delta p \text{grad } \frac{k_B T}{q} + \\ & + \left[\sigma_{n0} \left(\alpha_n - \ln \frac{n_0}{N_C} \right) - \sigma_{p0} \left(\alpha_p - \ln \frac{p_0}{N_V} \right) \right] \text{grad } \frac{k_B T}{q}. \end{aligned}$$

gdzie V_0 jest potencjałem określonym wzorem (7A) w przypadku stanu równowagi, natomiast φ_0 określa wspólny dla elektronów i dziur równowagowy potencjał Fermiego.

Dalsze przekształcenia prowadzą do takiej postaci wzoru (16), która pozwala wyodrębnić i określić poszczególne składowe oraz ich sens fizyczny.

$$\begin{aligned}
 J = & -\sigma \text{grad}(V - V_0 + \varphi_0) + \sigma \text{grad} \left(\frac{\mu_n - \mu_p}{\mu_n + \mu_p} \frac{k_B T}{q} \ln \frac{\sigma}{\sigma_0} \right) - \\
 & \qquad \qquad \qquad \langle 1 \rangle \qquad \qquad \qquad \langle 2 \rangle \\
 & - 2 q \mu_0 \Delta p \text{grad}(V_0 - \varphi_0) - \\
 & \qquad \qquad \qquad \langle 3 \rangle \\
 & - \frac{\sigma}{\sigma_0} \left[2 F_\Delta \left(\frac{\Delta \sigma}{\sigma_0} \right) - \frac{q(\mu_n - \mu_p)(n_0 - p_0)}{\sigma} \right] k_B T \frac{\mu_n \mu_p}{\mu_n + \mu_p} \Delta p \text{grad} \ln \frac{\mu_n}{\mu_p} \\
 & \qquad \qquad \qquad \langle 4 \rangle \\
 & + q \left[\mu_n \left(\alpha_n - \ln \frac{n_0}{N_C} \right) - \mu_p \left(\alpha_p - \ln \frac{p_0}{N_V} \right) + 2 \mu_0 \ln \frac{n_0}{n_i} - \right. \\
 & \qquad \qquad \qquad \langle 5 \rangle \\
 & \left. - \frac{\sigma}{\sigma_0} F_\Delta \left(\frac{\Delta \sigma}{\sigma_0} \right) (\mu_n - \mu_p) \right] \Delta p \text{grad} \frac{k_B T}{q} + \\
 & + \left[\sigma_{n0} \left(\alpha_n - \ln \frac{n_0}{N_C} \right) - \sigma_{p0} \left(\alpha_p - \ln \frac{p_0}{N_V} \right) \right] \text{grad} \frac{k_B T}{q} \\
 & \qquad \qquad \qquad \langle 6 \rangle
 \end{aligned}$$

Składnik (1) jest iloczynem σ przez czynnik potencjalny, składnik (2) jest związany ze zjawiskiem Dembera jest także iloczynem σ przez czynnik potencjalny.

Składnik (3) jest proporcjonalny do Δp (określającego np. fotoprzewodnictwo) i do $\text{grad}(V_0 - \varphi_0)$, które możemy uznać za pole wewnętrzne (wbudowane), jest to więc objętościowy efekt fotowoltaiczny.

Składnik (4) jest proporcjonalny do Δp i $\text{grad} \ln(\mu_n/\mu_p)$. Można zauważyć analogię do składnika (3) z tym, że rolę pola wewnętrznego gra tutaj gradient wynikający ze zmieniającego się stosunku μ_n/μ_p , co występuje wyraźnie gdy mamy zmienną przerwę energetyczną.

Składnik (5) ma charakter analogiczny gdzie zamiast pola wewnętrznego występuje $\text{grad } T$. Można go określić jako efekt termofotowoltaiczny.

Składnik (6) nie wiąże się z występowaniem fotoprzewodnictwa. Jest to termoelektryczny efekt Seebecka.

W przypadku płytki prostopadłościowej przedstawionej na rys.1, gdy parametry materiału zależą tylko od jednej współrzędnej x , wzór (17) przyjmie prostszą postać, z której można otrzymać zależność potencjału Ψ , który jest wielkością mierzoną w przypadku, gdy koncentracja Δp w pobliżu elektrod jest równa zero co wymaga prostego dowodu, którego tutaj nie przedstawiamy. Wprowadzamy więc definicję:

$$\Psi = V - V_0 + \varphi_0 + \frac{\mu_n - \mu_p}{\mu_n + \mu_p} \frac{k_B T}{q} \ln \frac{\sigma}{\sigma_0} \quad (18)$$

Dla analizy efektów woltaicznych najdogodniej rozpatrywać próbkę rozwartą, gdy $J = 0$.

Korzystając z definicji (18) można ze wzoru (17) wyprowadzić zależność $\text{grad } \Psi$ od x .

Dla prostego zilustrowania i określenia rzędu wielkości poszczególnych efektów założymy, że $\Delta p \ll n_0 + p_0$ oraz $\Delta \sigma \ll \sigma_0$. Z tych założeń wynika $\sigma \approx \sigma_0$ oraz $F_\Delta \approx 1$ i wzór na pochodną Ψ otrzyma postać:

$$\begin{aligned}
\frac{d\Psi}{dx} &= -2 q \mu_0 \frac{d}{dx} \frac{(V_0 - \varphi_0)}{\Delta p} - \\
&< 1 > \\
&- \left[2 - \frac{q(\mu_n - \mu_p)(n_0 - p_0)}{\sigma} \right] k_B T \frac{\mu_n \mu_p}{\mu_n + \mu_p} \left(\frac{d}{dx} \ln \frac{\mu_n}{\mu_p} \right) \Delta p + \\
&< 2 > \\
+ q \left[\mu_n \left(2 - \ln \frac{n_0}{N_C} \right) - \mu_p \left(2 - \ln \frac{p_0}{N_V} \right) + 2 \mu_0 \ln \frac{n_0}{n_i} - (\mu_n - \mu_p) \right] \frac{d}{dx} \left(\frac{k_B T}{q} \right) \\
&< 3 > \\
+ \left[\sigma_{n0} \left(2 - \ln \frac{n_0}{N_C} \right) - \sigma_{p0} \left(2 - \ln \frac{p_0}{N_V} \right) \right] \frac{d}{dx} \frac{k_B T}{q} \quad (19) \\
&< 4 >
\end{aligned}$$

gdzie przyjęto $\alpha_n = \alpha_p = 2$.

Składnik (1) określa pole objętościowego efektu fotowoltaicznego, składnik (2) pole związane ze zmiennością stosunku μ_n/μ_p , składnik (3) pole efektu termofotoelektrycznego, składnik (4) to klasyczny efekt termoelektryczny.

Dla ilustracji liczbowej przyjęto próbkę o długości 1 cm, wykonaną ze stopu germanu z krzemem o zmiennym składzie. Dla $x = 0$ przyjęto 100% Ge. Dla $x = 1$ cm przyjęto 100% Si. Założono liniowy przebieg przerwy energetycznej i liniowy przebieg temperatury. Z tych założeń wyprowadzono zależność zmiany mas efektywnych oraz zmiany ruchliwości elektronów i dziur. Przyjęto następujące dane liczbowe: szerokość przerwy energetycznej od 0,67 eV dla Ge oraz 1,1 eV dla Si, zmianę koncentracji elektronów od $1 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$ (german typu n 1 Ωcm) do $5 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$ (krzem typu n 10 Ωcm), zmiany temperatury od 300 K do 350 K dla wariantu A i od 350 K do 300 K dla wariantu B,

ruchliwości elektronów dla Ge - 3800 i 2960 cm^2/Vs , 1820 i 1270 cm^2/Vs dla dziur, odpowiednio dla 300 i 350 K oraz dla krzemu 1300 i 1000 cm^2/Vs dla elektronów i 470 i 400 cm^2/Vs dla dziur odpowiednio dla 300 i 350 K, $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, masy efektywne dla germanu $m_e = m_0 \cdot 0,55$; $m_h = m_0 \cdot 0,37$ dla krzemu $m_e = m_0 \cdot 1,1$ i $m_h = m_0 \cdot 0,59$ [5].

Wartości obliczeniowe dla poszczególnych składników wzoru (19) oznaczonych cyframi od <1> do <4>

przedstawiono na rys. 2A dla wariantu A i na rys. 3 dla wariantu B. Przyjęto $\Delta p = 1 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$. Piąty wykres na każdym z rysunków jest sumarycznym polem elektrycznym występującym w próbce o długości $L = 10 \text{ mm}$.

Praca częściowo finansowana przez Komitet Badań Naukowych, grant no. 8 T11B 027

LITERATURA

1. S. Sikorski, The Transport of Excess Current Carriers in an Inhomogeneous Semiconductor with Position Dependent Band Gap Semicond. Sci. Technol. 13, 18 (1998)
2. A. M. Marshak, K. M. Vliet, Electrical Current and Carrier Density in Degenerate Material with Nonuniform Band Structure, Proc. IEEE 72 148 (1984)
3. S. Sikorski. A Thermodynamical Approach to the Laws of Current and Thermal Energy Transport in Semiconductors. Electron Technology 31(2), 227 (1998)
4. W. Shockley, The Theory of p-n Junction in Semiconductors and p-n Junction Transistors. Bell Syst. Tech. J., 28, 435 (1949)
5. Wolf H. F.: Silicon Semiconductor Data, Pergamon Press, Oxford, (1969)