

10. Puolijohde

Metallit, puolijohde ja useat eristeet ovat kiteisiä kiinteitä aineita, joilla on säännönmukainen jaksollinen atomijärjestys ja elektronien energioiden kaistarakenne. Puhtaiden puolijohdeiden valenssikaista on täysin miehitty ja johtavuuskaista taas miehittämätön hyvin alhaisissa lämpötiloissa. Niiden valenssielektronien lukumäärä on siis parillinen ja sidokset kovalenttisia.

Puhtaat puolijohdeet ovat siis eristeitä alhaisissa lämpötiloissa, mutta tavallisissa lämpötiloissa ne tulevat johtaviksi **elektronien virittyessä termisesti valenssikaistalta johtavuuskaistalle**. Siten puolijohdeiksi voidaankin määrittellä ne eristeet, joiden kaistarakko E_g on pienempi kuin $\sim 0.1 \dots 2$ eV.

Termisen virityksen lisäksi voidaan varauksenkuljettajia generoida puolijohdeisiin valolla eli optisilla virityksillä tai seostaineilla (engl. dopant, doping).

Alkuainepuolijohdeita ovat pääasiassa ryhmän IV aineet Si, Ge (ja C), ja **binäärisiä yhdistepuolijohdeita** III-V-, II-VI- ja IV-IV-yhdisteet. **Ternäärisissä** ja **kvaternäärisissä** yhdisteissä on kolme tai neljä seoskomponenttia.

10.1. Itseispuolijohde

Itseispuolijohdeiksi (engl. intrinsic semiconductor) sanotaan sellaisia puolijohdeita, joiden **varauksenkuljettajat syntyvät termisessä virityksessä kaistaraon yli** valenssikaistasta johtavuuskaistalle. Varauksenkuljettajina toimivat tällöin sekä johtavuuskaistalle siirtyneet elektronit että valenssikaistalle syntyneet aukot. Tällöin elektroni- ja aukkokonsentraatioille (eli -tiheyksille) pätee $n = p = n_i$. Johtavuudeksi tulee nyt

$$\sigma = ne^2\tau_e / m_e + pe^2\tau_h / m_h, \quad (10.1)$$

missä massat ovat varauksenkuljettajien efektiivisiä massoja **Johtavuus riippuu erittäin voimakkaasti lämpötilasta**, koska elektronien ja aukkojen tiheydet n ja p riippuvat siitä.

Itseispuolijohdeiden **Fermi-energia on kaistaraon puolivälissä** ja **elektronit noudattavat Fermi-Dirac-jakautumaa**. **Jakautuman "häntää" johtavuuskaistassa voidaan approksimoida Boltzmannin jakautumalla:**

$$f_n(E) = 1 / [1 + \exp[(E-E_F)/k_B T]] \quad (10.2)$$

$$\approx \exp[-(E-E_F)/k_B T]. \quad (10.3)$$

Sama approksimaatio voidaan tehdä aukkojen jakautumafunktiolle valenssikaistassa,

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) = 1 / [1 + \exp[(E_F-E)/k_B T]] \quad (10.4)$$

$$\approx \exp[-(E_F-E)/k_B T]. \quad (10.5)$$

Elektroni- ja aukkokonsentraatioiden lämpötilariippuvuuksia voidaan nyt arvioida (olettamalla tilatiheydet vakioiksi):

Tarkempaan tulokseen päästään approksimoimalla elektronien tilatiheyttä vapaaelektronimallilla johtavuuskaistan alareunasta alkaen, yhtälö (6.12):

$$N_n(E) = V/2\pi^2 (2m/\hbar^2)^{3/2} (E - E_C)^{1/2} \quad (10.6)$$

ja aukkojen tilatiheyttä vastaavasti

$$N_p(E) = V/2\pi^2 (2m/\hbar^2)^{3/2} (E_V - E)^{1/2}. \quad (10.8)$$

Nyt saadaan varauksenkuljettajien konsentraatioiden lämpötilariippuvuudeksi:

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = \frac{1}{2} \pi^{1/2}$$

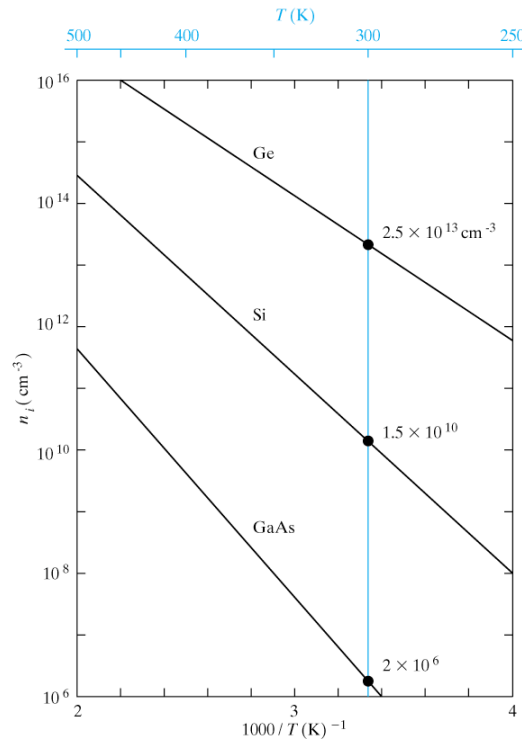
Edellä saaduista varaustiheyksistä saadaan edelleen

$$np = 4 (k_B T / 2\pi\hbar^2)^3 (m_e m_h)^{3/2} \exp[-(E_C - E_V)/k_B T] \quad (10.16)$$

Tätä sanotaan usein *massavaikutuksen laiksi*. Koska itseispuolijohteen varaustiheydet ovat siis yhtäsuuret

$$n_i (= p_i) = (N_c N_v)^{1/2} e^{-E_g/2kT}. \quad (10.17)$$

Fermi-energia voidaan myös ratkaista varaustiheyksien lausekkeista:



Siis, kun $T = 0$ tai $m_e = m_h$, niin

$$E_F = (E_v + E_c) / 2. \quad (10.19)$$

Yleensä *itseispuolijohteissa* myös muulloin $E_F \approx (E_v + E_c) / 2$.

Itseisjohtavuuden lausekkeessa (10.1)

$$\sigma_i = n_i e^2 \tau_e / m_e + p_i e^2 \tau_h / m_h$$

relaksaatioajan ja massan osuutta johtavuuden lausekkeessa

$$\mu_c = e\tau / m$$

sanotaan *liikkuvuudeksi*, koska (6.36)

$$\mathbf{v} = \pm e\tau/m \mathbf{E}.$$

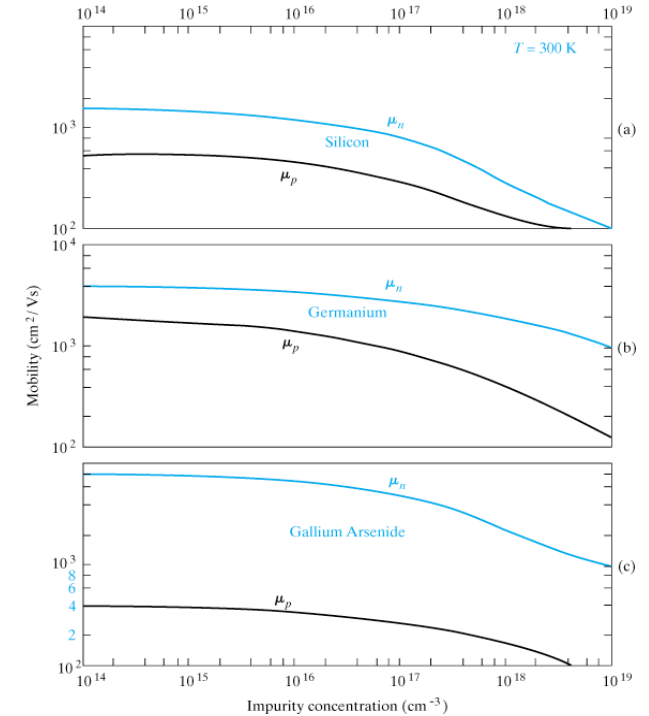
Siten siis

$$\sigma_i = n_i e \mu_e + p_i e \mu_h. \quad (10.20)$$

Koska liikkuvuuden lämpötilariippuvuus on pieni verrattuna varaustiheyksien eksponentiaaliseen riippuvuuteen, voidaan edellä olleen perusteella kirjoittaa

$$\sigma_i = A' T^{3/2} e^{-E_g/2kT} \approx A e^{-E_g/2kT}. \quad (10.21)$$

Siten puolijohteen johtavuuden lämpötilariippuvuudesta voidaan laskea sen kaistaraon suuruus. Toisaalta kaistarako riippuu hieman lämpötilasta.



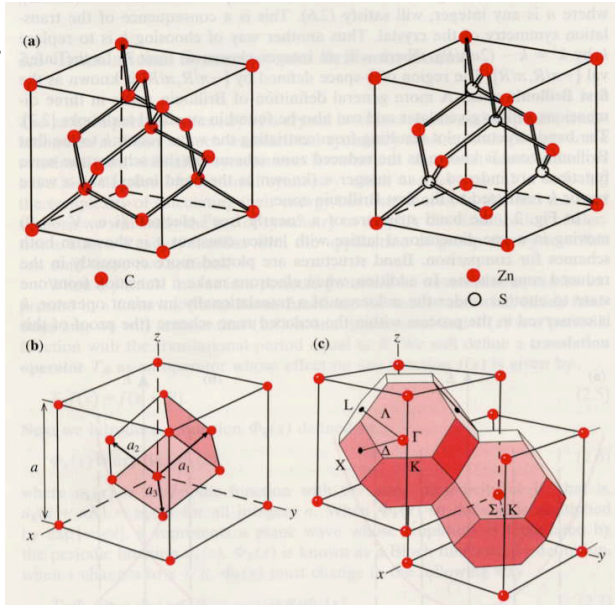
10.2. Puolijohdeiden kaistarakenteet

Puolijohdemateriaalien tavallisin kiderakenne on *timanttihila* (engl. diamond lattice) ja sen johdannainen sinkkivälkerakenne (engl. zinblende structure). Timanttihila saadaan asettamalla päällekkäin kaksi fcc-hilaa siten, että toinen on siirretty vektorin

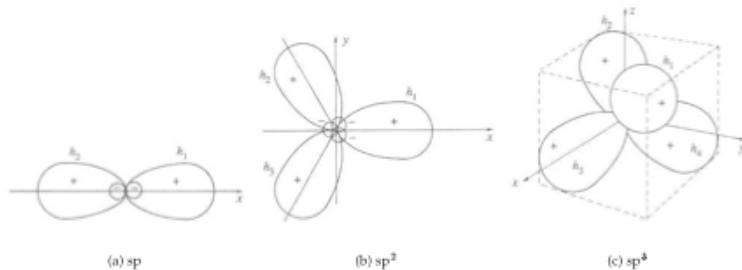
$$(\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c}) / 4$$

verran ensimmäisen suhteen.

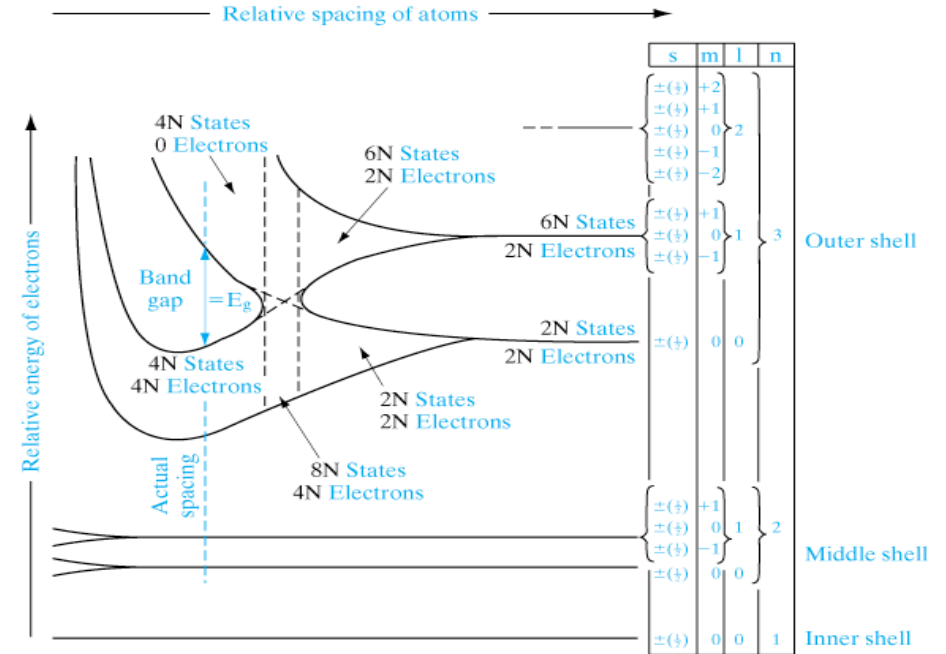
Sinkkivälke- eli *sfaleriittirakenne* saadaan, kun em. fcc-hilat ovat eri alkuaineita.



Alkuainepuolijohdeilla on timanttirakenne ja binäärisillä yhdistepuolijohdeilla taas tavallisimmin sinkkivälkerakenne. Joillakin II–VI-yhdistepuolijohdeilla on kuitenkin tavallisimmin *wurtsiittirakenne*. Useat yhdisteet voivat esiintyä molempina rakenteina. *Timantti- ja sen johdannaisrakenteiden muodostuminen perustuu sp^3 -hybridisaatioon.*



Siten kiteen atomien välisten sidosten voidaan ajatella muodostuvan ensimmäisessä vaiheessa *atomiorbitaalien lineaarisena kombinaationa* (engl. Linear Combination of Atomic Orbitals, *LCAO*).



Miehitetyt valenssikaistat ovat luonteeltaan sitovia (engl. bonding) ja miehittämättömät johtavuuskaistat taas "hajottavia" (egl. antibonding)

Timanttikiteen tyhjän hilan mallin kaistat (Fig. 2.9) ja laskettu piin (Si) kaistarakenne (Fig. 2.10).

Kaistarako on *suora* (engl. direct), jos valenssikaistan maksimi ja johtavuuskaistan minimi ovat samassa käänteisavaruuden pisteessä, tavallisesti Γ -pisteessä. Alkuainepuolijohteilla pii (Si) ja germanium (Ge) on *epäsuora kaistarako*.

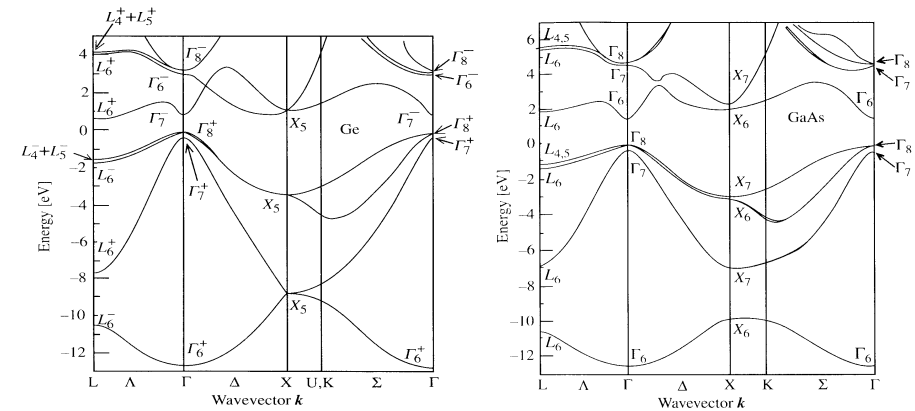
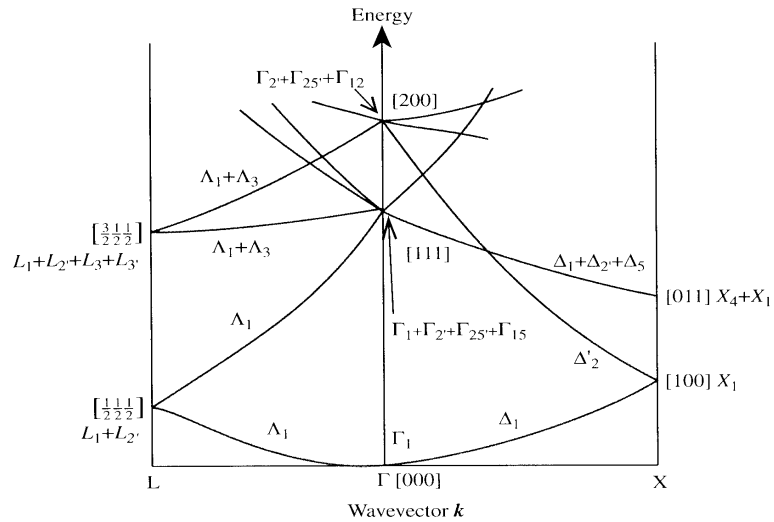


Fig. 2.9. Band structure of nearly free electrons for a diamond-type crystal in the reduced zone scheme

Yhdistepuolijohteiden kaistaraon suuruutta ja laatua voidaan "virittää" seossuhteella.

Kaistarako voidaan mitata suoraan myös optisella absorptiolla.

Complex dielectric function of GaAs

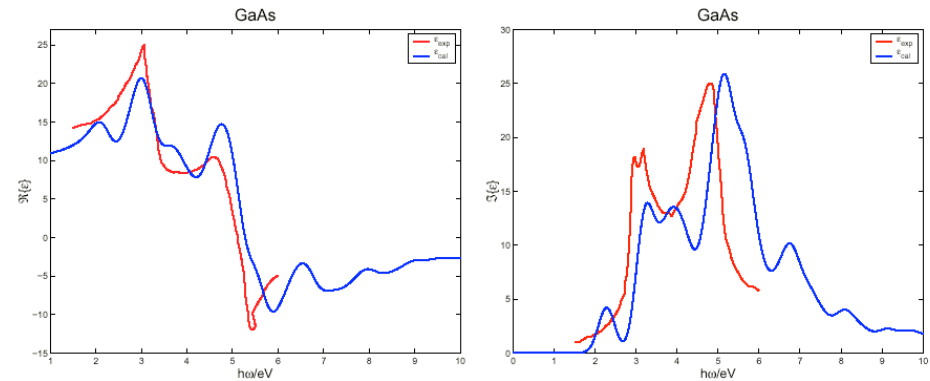
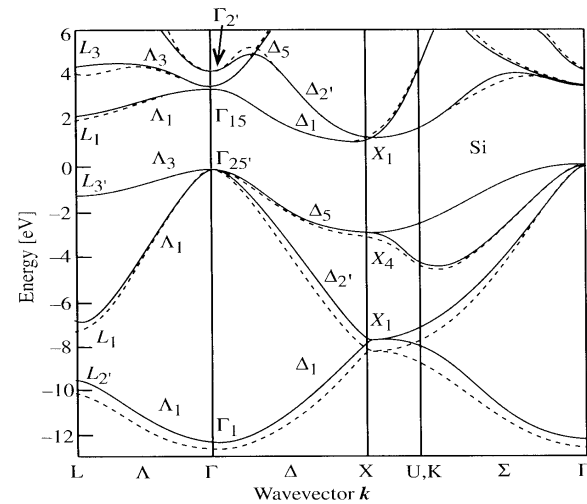


Fig. 2.10. Electronic band structure of Si calculated by the pseudopotential technique. The solid and the dotted lines represent calculations with a **nonlocal** and a **local pseudopotential**, respectively. [Ref. 2.8, p. 81]

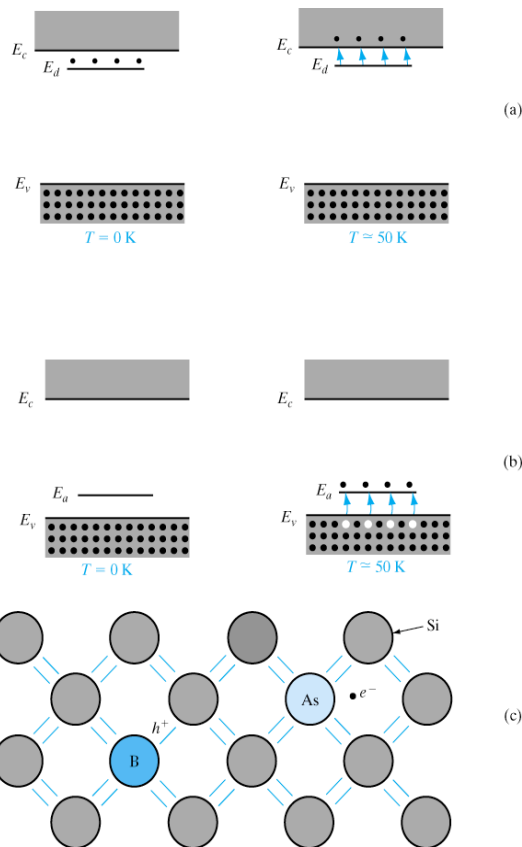
10.3. Seostepuolijohteet

Seostamalla puolijohteita sopivasti vierailta alkuaineilla niihin saadaan halutut varauksenkuljettajakonsentraatiot.

Kun germaniumia, joka on IV ryhmän alkuaine *seostetaan* (engl. doping) V ryhmän alkuaineella, esim. As, siten, että As korvaa joitakin Si atomeja, jää As atomien viidennet valenssielektronit löyhästi sidotuiksi (~ 0.05 eV) ja siten helposti vapautuviksi varauksenkuljettajiksi. Tällöin sanotaan As-atomeja elektronien luovuttajiksi eli *donoreiksi* (engl. donor).

Vastaavalla tavalla seostamalla piitä III ryhmän alkuaineella, esim. boorilla B, jää sidoksista puuttumaan yksi elektroni jokaista seoste- eli *epäpuhtausatomia* kohti. Tällainen seosteatomi, ns. *akseptori* (engl. acceptor) voi nyt ottaa naapurinsa elektronin luovuttaen siten *aukon* naapurilleen ja varauksenkuljettajaksi.

Seostamalla aikaansaadut varauksenkuljettajat vapautuvat jo alhaisissa lämpötiloissa, jolloin lämpötilariippuvuutta ei juurikaan esiinny esim. huoneenlämpötilassa.



Donorin viidennen elektronin "orbitaali" on vetyatomin s-orbitaalin kaltainen, jota voidaan karkeasti tarkastella Bohrin atomimallin avulla. Tällöin elektronin massa korvataan efektiivisellä massalla m^* ja Coulombin vuorovaikutuksessa otetaan huomioon väliaineen permittiivisyys ϵ_r . Tällöin

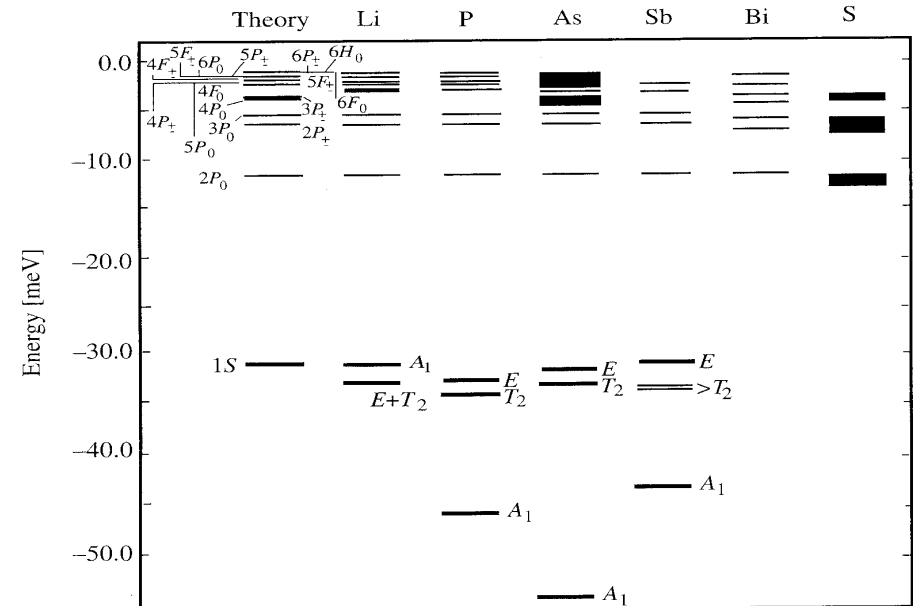
$$E = - m^*e^4 / 2K^2, \quad (10.23)$$

missä

$$K = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r \hbar.$$

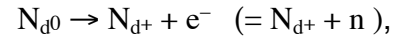
Kun arvioidaan donoritilan energiaa Ge:ssä Bohrin mallin avulla:

Tyypillisesti epäpuhtausilojen energiat ovat 0.01 – 0.05 eV johdavuuskaistan alareunasta tai valenssikaistan yläreunasta.



10.4. Seostuksen vaikutus Fermi-tasoon

Donorien N_d "ionisoitumisreaktio" on



ja donorien kokonaismäärä tai konsentraatio on

$$N_d = N_{d0} + N_{d+}.$$

Tarkastellaan tilannetta, jossa $N_d \gg n_i$. Tällöin, jos donorit ovat merkittävästi ionisoituneet, niin

$$n \approx N_{d+}. \quad (10.24)$$

Edelleen, yhtälön (10.3) mukaan

$$N_{d0} = N_d f_n(E_d) \approx N_d \exp[-(E_d - E_F)/k_B T]. \quad (10.3)$$

Nyt $n \approx N_{d+} = N_d - N_{d0}$

Jos puolijohhteeseen on seostettu sekä donoreita että akseptoreita, rekombinaationopeus kasvaa ja tapahtuu ns. *kompensaatio*. Tällöin suurempi seostuksista N_d ja N_a määrää puolijohhteen tyypin. Jos esim. $N_d > N_a$, niin puolijohde on n-tyyppinen ja $n \approx N_d - N_a$. Vähemmistövarauksenkuljettajien konsentraatio saadaan relaatiosta $np = n_i^2$.

10.5. Varauksenkuljettajien liikkuvuus puolijohhteessa

Elektronien liikkuvuus μ_e antaa johtavuuden osuuden

$$\sigma_c = ne\mu_e. \tag{10.33}$$

Jos varauksenkuljettajien merkki ja konsentraatiomääritetään Hall-kokeella, joka antaa Hall-vakion $R_H = 1 / ne$, on liikkuvuus

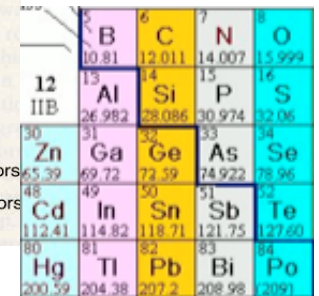
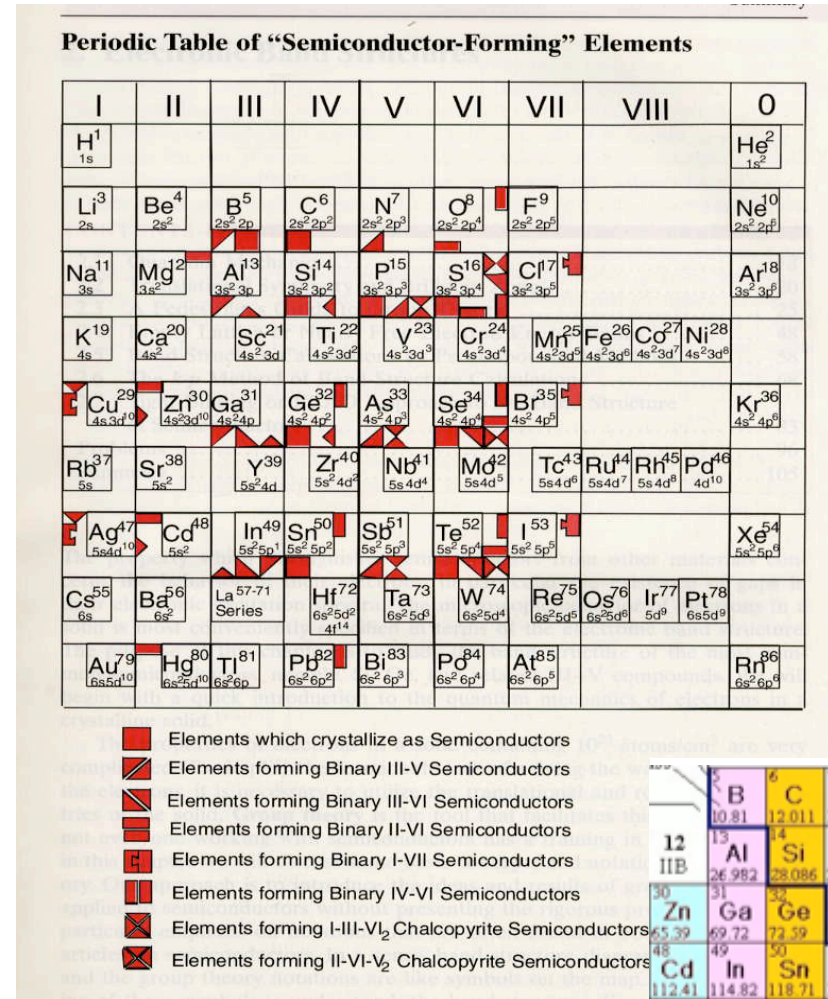
$$\mu_e = R_H \sigma_c \tag{10.34}$$

Johtavuus voidaan määrittää helpoimmin suoraan resistiivisyyksmittauksella.

Lievästi seostetuilla puolijohhteilla

10.6. Yhdistepuolijohhteet

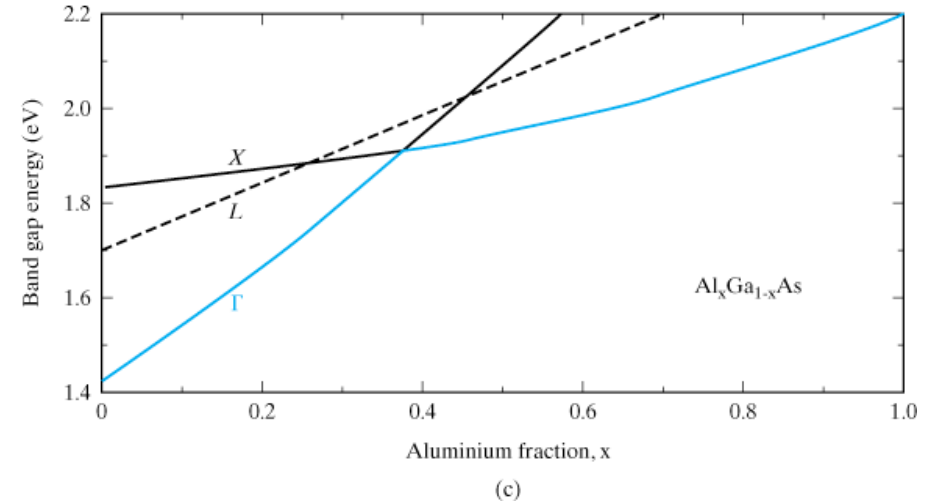
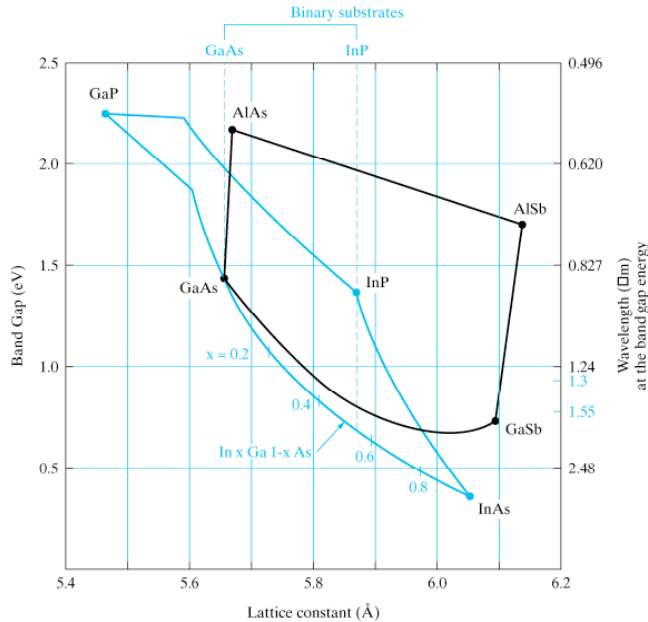
Alkuainepuolijohhteita ovat pääasiassa ryhmän IV aineet Si, Ge (ja C). *Binäärisiä yhdistepuolijohhteita* ovat ns. III-V-, II-VI- ja IV-IV-yhdisteet. *Ternäärisissä* ja *kvaternäärisissä* yhdisteissä on vastaavsti 3 ja 4 komponenttia.



Yhdistepuoliyohteiden seossuhteiden valinnalla voidaan "säätää" puoliyohteiden ominaisuuksia. Yhdistepuoliyohteiden atomien sidos on pääasiassa luonteeltaan kovalenttinen, mutta tavallisesti siinä on myös ionisidoksen luonnetta.

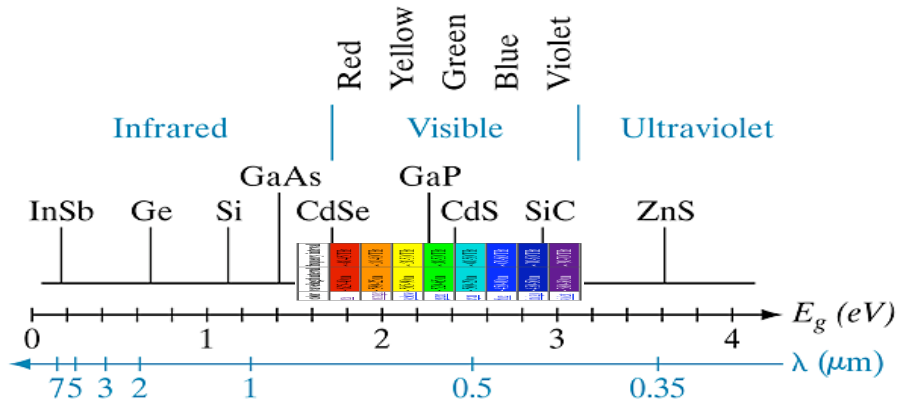
Valitsemalla yhdisteiden seossuhteet sopivasti saadaan esim. kerroksellisten rakenteiden jännitykset ja niiden aiheuttamat hilavirheet minimoituksi, esim. $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ / InP .

Samoin kaistarako voidaan "virittää" halutuksi.



10.7. Amorfiset puoliyohteet

10.8. Uusia puoliyohdemateriaaleja



10.9. pn-liitos

Pn-liitos on tärkein toiminnallinen osa monissa puolijohdekomponenteissa

Liitoksessa muodostuu potentiaalivalli (engl. barrier) qV_0 tai liitospotentiaali (engl. contact potential) varauksenkuljettajille, kun p- ja n-osien Fermi-tasot asettuvat samaan potentiaaliin.

Vallin voidaan sanoa syntyvän liitoksen läpi tapahtuvan varauksenkuljettajien diffuusion aiheuttaman varausepätasapainon seurauksena, sillä varausepätasapaino muodostaa varausepätasapainoa vastustavan potentiaalin V_0 .

Diodi

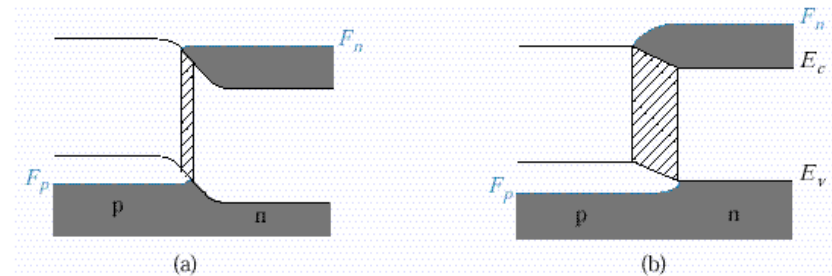
Em. liitosilmöiden seurauksena pn-liitoksen virta-jänniteominaiskäyrä on eksponenttikäyrä

$$I = I_0 (e^{qV/kT} - 1)$$

Tästä on seurauksena tasasuuntaava ominaisuus.

Valoa emittöiva diodi, LED

Voimakkaasti myötäsuuntaan kytketyssä pn-liitoksessa voidaan saada aikaan runsas elektröni-aukkoparien rekombinaatio ja valon (IR, näkyvä, UV) emissio.



Aurinkokennon toiminta on tavallaan käänteinen: biasoimattomaan liitokseen valon absorptio synnyttämät eh-parit, joutuvat vastakkaisille puolille liitosta saaden aikaan jännitteen tai virran, riippuen diodin kytkennästä.

10.10. Puolijohdelaser

LASER

(Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) on ilmiö tai laite, joka/jonka tuottaa ja vahvistaa voimakkaan yhdensuuntaisen ja monokromaattisen valosädekimpun

Laservalon ominaisuudet:

- koherenssi
- monokromaattisuus
- yhdensuuntaisuus
- suuri tehotiheys

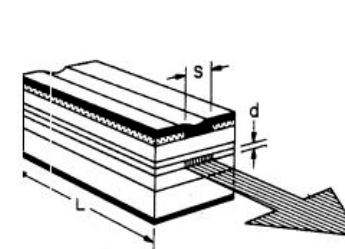
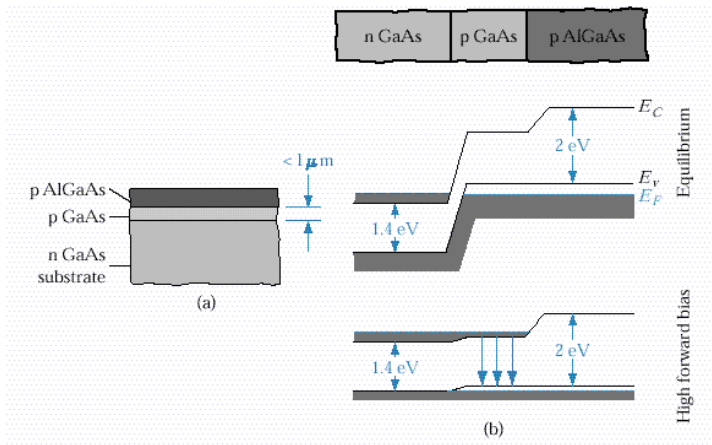
Stimuloitu emissio

Puolijohde- eli diodilaserit ovat tärkeimpiä nykypäivän elektronikan kannalta. Niitä käytetään massiivisesti tiedon tallennuksessa, lukemisessa ja siirtämisessä sekä viihde-elektronikassa. Yleensä ne ovat kooltaan varsin pieniä, tyypillisesti luokkaa $0.1 \times 0.1 \times 0.3 \text{ mm}^3$. Niitä on helppo moduloida yksinkertaisen pumppausmenetelmän kautta.

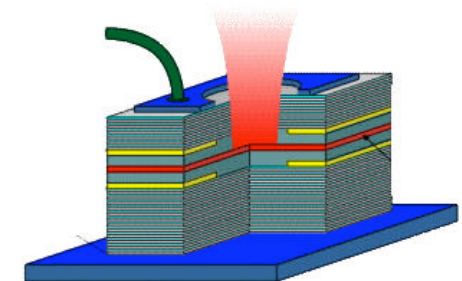
Puolijohdeessa syntyvää elektronien ja aukkojen rekombinaatio- säteilyä voidaan käyttää lasertoiminnassa, kunhan viritysmekanismi (pumppaus) saadaan tehokkaasti toteutetuksi. Elektroneja ja aukkoja on tuotettava paljon samalle alueelle. Tämä saadaan toteutetuksi pn-liitoksella tai kvanttikaivolla.

Heteroliitos-rakenne, jossa rajoitetaan varauksen-kuljettajien rekombinaatio- aluetta.

Vielä tehokkaammin rajoittaminen voidaan toteuttaa kvanttikaivorakenteella (engl. quantum well, QW).



Traditional edge-emitter



Novel surface-emitter

11. Sähkömagnetismin perusteita

Magnetismi on osa sähkömagneettisia ilmiöitä, joiden havaitseminen ja vaikutukset liittyvät sähkövarauksiin ja virtoihin kohdistuviin voimavaikutuksiin. Sen vuoksi **käytetäänkin tarkoitukseen sopivia sähkö- ja magneettikenttäkäsitteitä** tai vastaavia vuontiheyksiä.

Sähköisten varausten kaltaisia **magneettisia monopoleja ei ole havaittu**. Siksi *Maxwellin yhtälöt*, joihin on koottu sähkö–magnetismin peruslait ovat tuossa suhteessa epäsymmetriset:

$$\oint \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A} = \int \rho \, d\mathbf{r} = Q$$

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} = 0$$

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\boldsymbol{\ell} = -\frac{d}{dt} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A}$$

$$\oint \mathbf{H} \cdot d\boldsymbol{\ell} = \int \left(\mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) \cdot d\mathbf{A}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

Kahta ensimmäistä voidaan sanoa Gaussin laeiksi, kolmatta Faradayn laiksi ja neljättä Ampere–Maxwellin laiksi.

Vasemman puolimmäiset ovat ns. integraalimuodossa ja oikeanpuolimmaisat taas differentiaalimuodossa.

Magneettiset dipolit eivät voi sähköisten dipolien tapaan muodostua kahdesta monopolista, vaan esimerkiksi sähkövirroista Amperen lain mukaan tai ne voivat liittyä hiukkasten spineihin.

Kentän ja aineen vuorovaikutus perustuu elektronien, atomisydänten ja ytimien magneettisiin dipolimomentteihin, joiden vuorostaan voidaan katsoa liittyvän varattujen hiukkasten kierto- ja pyörimisliikkeisiin. Näiden ilmiöiden perusteella voidaan tehdä aineiden magneettisten ominaisuuksien alkuperän luokittelua, ks. kirjan kuva 11.1.

Magneetikentässä olevan aineen *magnetoituman* M ja vuontiheyden B suhteen avulla määritellään *magneettinen susceptiivisuus*

$$\chi = \mu_0 M / B$$

Aineet voidaan jakaa kentän vaikutuksesta magnetoituviin ja itsestään eli spontaanisti magnetoituviin ja magnetismin ilmenemismuodot vastaavasti *kenttämagnetismiin* ja luontaiseen *järjestysmagnetismiin*, ks. vielä kirjan kuva 11.1.

Kenttämagnetismi jakautuu vielä *diamagnetismiin*, joka aiheutuu kentän indusoimista dipoleista ($\chi < 0$), ja *paramagnetismiin*, joka aiheutuu taas aineen permanenttien dipolien orientoitumisesta ($\chi > 0$). Molemmista näissä voidaan vielä erottaa ulkoelektronien ja atomisydänten luonteeltaan erilaiset osuudet.

Järjestysmagnetismi voi olla joko *ferromagnetismia* tai *antiferromagnetismia* riippuen siitä, onko alkeisdipolien spontaani järjestys yhtenäistä vai vuorottelevaa. *Ferrimagnetismissä* järjestynyt tila muodostuu kahden tai useamman eri tyyppisen dipolin muodostamana. Spontaanisti magnetoituvat aineet ovat riittävän korkeissa lämpötiloissa paramagneettisia.

Pohjimmiltaan magnetismi on "kvantti-ilmiö", mutta sille voidaan usein esittää klassillisia malleja.

11.1. Diamagnetismi

Varausten liikkeisiin sähkövirroiksi indusoitu diamagnetismi pyrkii Lenzin lain mukaisesti pienentämään ulkoista kenttää, jolloin $\chi < 0$. Tämä ilmiö on läsnä kaikissa aineissa. Johdeelektronien osuutta sanotaan *Landau-diamagnetismiksi* ja atomisydänten osuutta *Larmor-diamagnetismiksi*.

Johdeelektronien osuus on yleensä paljon pienempi ja vähämerkityksellinen. On syytä muistaa kuitenkin jo aikaisemmin tarkasteltu de Haas–van Alphen-ilmiö.

11.2. Atomaariset magneettiset momentit: Paramagnetismi

Paramagneettisten aineiden susceptiivisuus on tyypillisesti kentästä riippumaton tavallisilla kentänvoimakkuuksilla ($B < 1.5$ T), ellei lämpötila ole kovin alhainen. Sama tuloshan saatiin kappaleessa 6.3.4 johde-elektronien Pauli-paramagnetismille, joka ei riipu oleellisesti lämpötilastakaan.