

ЕФЕКТИВНА МАСА НА ЗАРЕДЕНИТЕ ЧАСТИЦИ В КРИСТАЛА

Анализът на движението на електроните в периодичното поле на кристала определя енергетическия спектър на електроните, който представлява квазинепрекъснати зони, разделени със забранени зони.

Зависимостта на енергията на електроните от вълновия вектор $E(k)$ в различните енергетични зони и по различните кристалографски направления на кристала се нарича зонна структура или дисперсионен закон.

От гледна точка на зонната структура на твърдите тела разликата между диелектрици, полупроводници и метали е само в ширината на забранената зона.

Компонентите на тензора на обратната ефективна маса на носителите на заряд дават детайлна информация за зонната структура на полупроводниците и това са коефициентите на пропорционалност между силата, която действа на носителите и тяхното ускорение.

1. Движение на електрон в кристала под действие на външно електрично поле.

Когато кристал е поставен във външно електрично поле с постоянен интензитет E , насочен по направление на оста x , на електрона, намиращ се в периодичното поле на кристала, ще му действа външна сила $F = -eE$. Приема се, че силата F е достатъчно малка и не може да осигури преход на електрона през забранена зона с ширина E_g между две разрешени зони:

$$Fa \ll E_g,$$

където a е константата на кристалната решетка.

Тогава потенциалната енергия на електрона във външно електрично поле с интензитет E ще се определи от координатата x :

$$U(r) = -eEx.$$

Уравнението на Шредингер може да се запише така:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + (V(r) + U(r)) \right] \psi(r) = E' \psi(r).$$

Ако приемем, че в областта на всеки атом, потенциалът на външното поле практически не се изменя, т.е. $U(r) = U = const$, то се получава уравнение, подобно на това за стационарния случай:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(r) = (E' - U) \psi(r) = E \psi(r)$$

където E е енергията на електрона без прилагане на външно електрично поле. Следователно енергията на електрона в кристала при прилагане на външно електрично поле е:

$$E' = E + U(r).$$

Тогава, като се замени изразът за E в ур.8 от тема 2, се получава:

$$E' = E_a + C + 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) - eEx. \quad (1)$$

Графиката на зависимостта на положението на енергетичните зони от координатите, която следва от уравнението, е показана на фигурата 1 като б). Тази

зонната структура може да се разглежда като наклонени зони под действието на външното поле. Ширината на зоната при външно електрично поле за всяко x остава непроменена, както при липса на външно поле (стационарен случай). За горното и долното ниво на зоната се получава съответно:

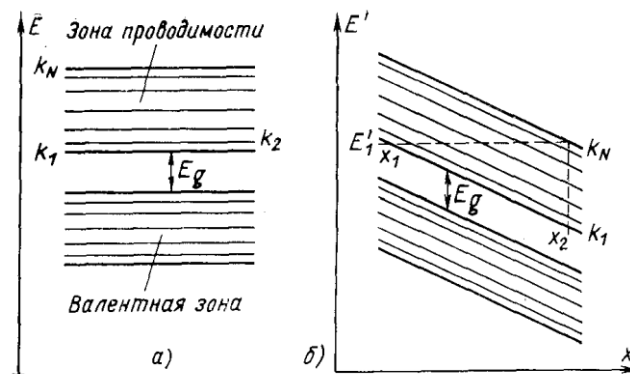
$$E_{\max} = E_a + C + 6A - eEx,$$

$$E_{\min} = E_a + C - 6A - eEx.$$

Следователно за простата кубична решетка ширината на енергетичната зона е:

$$E_{\max} - E_{\min} = 12A,$$

не зависи от x и съвпада с ширината за стационарния случай.



Фигура 1.

В отсъствие на външно електрично поле, електрон, намиращ се на определено енергетично ниво има вълнов вектор с определена стойност, например k_2 , показано на фигура 1 а). Това означава, че в стационарния случай електронът се премества по дължината на кристала на произволно разстояние, като има постоянна стойност на квазиимпулса и вълновия вектор. При движението на електрона в кристала под действието на силите на външното електрично поле съгласно закона за запазване на енергията пълната енергия на електрона остава постоянна, но се изменя съотношението между потенциалната и кинетичната енергия:

$$E' = E + U = const.$$

На фигура 1 б) състоянията с определена стойност на пълната енергия E'_1 са показани с пунктирна линия, успоредна на абсисата. В този случай, електрон с пълна енергия E'_1 при движението си в кристала ще преминава от едно енергетично ниво в друго в зоната, в резултат на което ще се изменя неговият вълнов вектор от k_1 до k_N , квазиимпулса от p_1 до p_N . При това енергията на електрона $E(k)$ се изменя от E_{\min} до E_{\max} . Както се вижда от фигура 1 б) електронът се премества не по целия кристал, а само в област $\Delta x = x_2 - x_1$:

$$\Delta x = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{eE} = \frac{12A}{eE}. \quad (2)$$

Следователно във външно еднородно електрично поле енергетичните зони на идеалния кристал се наклоняват, като или си издигат, ако $U > 0$, или се снижават, ако $U < 0$. При това става преразпределение на електроните, т.к. те се движат в някаква област Δx , чиято ширина е обратно пропорционална на интензитета на електричното поле. При това движение, електронът преминава на различни енергетични нива в зоната и се изменят неговият вълнов вектор и квазиимпулс с времето.

Средната скорост на електрона в кристала е функция на времето чрез импулса $p = \hbar k$ и се определя като производната на енергията по квазиимпулса:

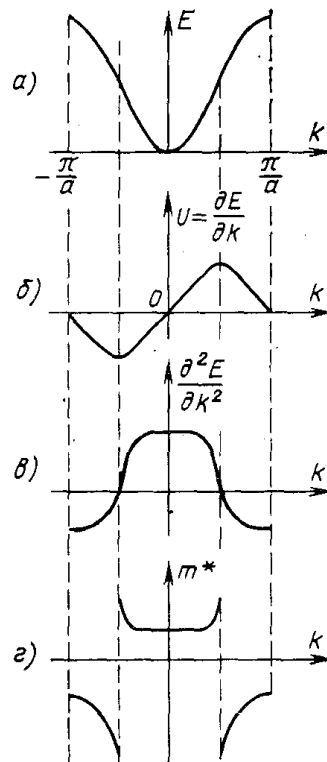
$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{dp}. \quad (3)$$

От ур. 3 следва, че средната скорост на електрона зависи както от големината, така и от направлението на вълновия вектор или квазиимпулса.

Зависимостите на енергията E и скоростта v на движение на електрона от вълновия вектор за проста кубична решетка при едномерно движение са показани на фигура 2 а) и 2 б) и се записват така:

$$E = -2A \cos ka, \quad (4)$$

$$v = \frac{2aA}{\hbar} \sin ka. \quad (5)$$



Фигура 2. Зависимост на енергията E (а), скоростта v (б), величината $\partial^2 E / \partial k^2$ (в) и ефективната маса m^* (г) от вълновия вектор k за кубична кристална решетка.

От фигурата се вижда, че в края на зоната ($k = \pm\pi/a$), енергията $E(k)$ има екстремални стойности, т.е. $grad_k E(k) = 0$. Следователно в точките с екстремална енергия в горния и долния край на зоната, скоростта на електрона е нула. В определени точки, вътре в зоната на Брилуен, електронът има най-голяма скорост. Средната квантовомеханична

скорост на електрона в кристала по цялата енергетична зона при отсъствие на външно електрично поле е нула:

$$\langle v \rangle = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} v(k) dk = \frac{2aA}{\hbar} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \sin kadk = 0.$$

Да разгледаме случая, когато на електрона в кристала действа външна сила F . Нека енергията на електрона в енергетичната зона, в която се движи е $E(k)$, а скоростта му е v . Тогава съгласно закона за запазване на енергията при едномерно движение скоростта, с която се изменя енергията на частицата, е равна на работата за единица време:

$$\frac{dE}{dt} = Fv.$$

т.к. енергията на електрона в кристала е функция на времето чрез импулса $p = \hbar k$:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dp} \frac{dp}{dt}$$

и като се отчете ур. 3, се получава:

$$\frac{dp}{dt} = F \quad (6)$$

Това уравнение по форма съвпада с уравнението на движение на Нютон.

При движение на електрона в кристал, на който е приложено външно поле, ще му действа както външна сила F , така и сила $F_{кр}$, обусловена от действието на периодичното поле на кристалната решетка:

$$\frac{dp}{dt} = F_{кр} + F.$$

Следователно, ако структурата на кристалната решетка е идеална, то нейното потенциално поле $V(r)$ е строго периодично. В периодичното поле на кристалната решетка електронът се движи по дължината на целия кристал с постоянен квазиимпулс и постоянна енергия. В този случай електронът се движи в кристала, като остава на едно и също енергетично ниво. Т.к. квазиимпулсът е $p = p_0 = const$, а от тук и $k = const$, то от ур. 5 се получава, че ускорението е нула. Това означава, че в периодичното поле на кристалната решетка електронът се движи без ускорение, т.е. електронът се движи като свободна частица, без съпротивление и без да се разсейва.

Ако кристал с идеална структура се постави във външно електрично поле, то от ур. 6 следва, че движението на електрона ще е подобно на движение на свободна частица под действието на външна сила F . В този случай електронът се премества в ограничена област от кристала Δx (ур. 2), в енергетичната зона преминава от едно ниво на друго и пълната му енергия не се изменя.

Нека външната сила не зависи от времето. Тогава движението на електрона в r -пространството се описва с уравнение:

$$p(t) = p_0 + Ft$$

и траекторията на движение ще е права линия, насочена по направлението на външната сила.

2. Ефективна маса

Нека свободен електрон с маса m се намира в еднородно електрично поле с интензитет E . На електрона действа сила: $F = -eE$, под действието на която той получава ускорение:

$$a = -\frac{1}{m}F = -\frac{1}{m}eE,$$

което е насочено, както и външната сила, против полето E .

За ускорението на електрон в кристала, който се намира във външно електрично поле, което му действа със сила F , получихме:

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{\partial v}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} F \quad (7)$$

или в тензорен вид:

$$a_i = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \cdot F_j,$$

като векторът на ускорението a в този случай не съвпада с направлението на вектора на силата F .

Съвкупността от величини, свързващи двата вектора a и F , се нарича обратна ефективна маса и в тримерния случай се дефинира като:

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (8)$$

Обратната ефективна маса е тензор от втори ранг с компоненти m_{ij}^{-1} .

От ур. 8 следва, че за разлика от движението на свободния електрон във вакуум с постоянна маса m , то електроните в твърдите тела имат променлива маса m^* , т.к. втората производна на E зависи от изкривяването на изоенергетичните повърхности в дадена околност на k . Тензорът е симетричен и при подходящ избор на координатната система, може да се приведе в диагонален вид, когато отлични от нула са само членовете по главния диагонал:

$$\frac{1}{m_1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2}, \quad \frac{1}{m_2} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2}, \quad \frac{1}{m_3} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2}.$$

В общия случай енергията на електрона в малка област, близка до k_0 , в която енергията има екстремум, се получава като:

- $E(k)$ се разлага в ред на Тейлор,
- $E(k)$ има екстремум в k_0 и $\partial E / \partial k = 0$,
- изразът се ограничава до членовете на реда от втори порядък,
- използва се диагоналният вид на тензора на обратната ефективна маса:

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2(k_x - k_{0x})^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2(k_y - k_{0y})^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2(k_z - k_{0z})^2}{2m_3}.$$

В p -пространството на импулса, изразът е:

$$E(p) = E(p_0) + \frac{(p_x - p_{0x})^2}{2m_1} + \frac{(p_y - p_{0y})^2}{2m_2} + \frac{(p_z - p_{0z})^2}{2m_3}. \quad (9)$$

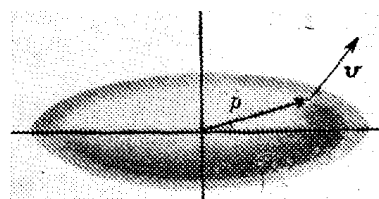
От ур. 9 следва, че изоенергетичната повърхност $E(p) - E(p_0) = const$ в област близка до екстремума на енергията е елпсоид, а m_1, m_2, m_3 са ефективните маси по направление на главните оси на елпсоидалната повърхност на енергиите. Ефективните маси определят полуосите a, b, c на елпсоида:

$$\begin{aligned} a^2 &= 2m_1[E(p) - E(p_0)], \\ b^2 &= 2m_2[E(p) - E(p_0)], \\ c^2 &= 2m_3[E(p) - E(p_0)]. \end{aligned} \quad (10)$$

Компонентите на скоростта могат да се запишат така, като се използва ур. 3 и ур. 9:

$$v_i = \frac{dE}{dp_i} = \frac{p_i - p_{0i}}{m_i}.$$

Т.к. скоростта е градиент на енергията от квазиимпулса, то скоростта е насочена по нормалата на изоенергетичната повърхност. За елпсоидалните изоенергетични повърхности в общия случай направленията на вектора на скоростта и на вектора на импулса не съвпадат. Те съвпадат само по направление на осите на елпсоида.



Ако означим $E(p) = E$ и $E(p_0) = E_0$, то:

$$\begin{aligned} p_i - p_{0i} &= \sqrt{2m_i(E - E_0)}, \\ v_i &= \frac{p_i - p_{0i}}{m_i} = \sqrt{\frac{2(E - E_0)}{m_i}}. \end{aligned} \quad (11)$$

От ур.11 следва, че при една и съща енергия, скоростта по направление на осите на елпсоида е обратно пропорционална на корена от съответната компонента на ефективната маса. Но съгласно уравнения (10) компонентите на ефективната маса определят големината на полуосите на елпсоида. Затова колкото по-силно е изтеглен елпсоида, т.е. колкото по-голяма е m_i , толкова по-малка е скоростта на движение в това направление.

Ако симетрията на кристала е такава, че двете оси на елпсоида са равни, то и компонентите на ефективните маси са равни: $m_1 = m_2$. В този случай изоенергетичната повърхност се описва с уравнение на ротационен елпсоид с ос на въртене по направление z . Затова масата m_3 се нарича надлъжна ефективна маса и се означава с m_l . Масите $m_1 = m_2$ се наричат напречна ефективна маса и се означава с m_t .

Ако $m_1 < m_3$, то елипсоидът е изтеглен по направление на оста на въртене и при това той е толкова по-силно изтеглен, колкото по-голямо е отношението на ефективните маси m_3 / m_1 .

Ако $m_1 > m_3$, то елипсоидът е сплескан по направление на оста на въртене.

За кристал с кубична симетрия всички главни оси са еквивалентни. Затова $m_1 = m_2 = m_3 = m^*$ и тензорът на ефективната маса се изразява в скалар (тензор от нулев ранг). В този случай изоенергетичната повърхност е сфера и се описва с уравнението:

$$E(p) = E(p_0) + \frac{p^2}{2m^*} = const.$$

Ефективната маса в случай на кубична кристална решетка се записва така:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}. \quad (12)$$

Следователно ефективната маса на носителите на заряд е обратно пропорционална на кривината на изоенергетичната повърхност в k - или p -пространството. Тогава, ако електронът се намира в област близка до минимума на енергията, т.е. близко до дъното на проводимата зона може да се запише:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} > 0 \quad \text{и} \quad m^* = const > 0, \quad (13)$$

т.е. електроните се държат като отрицателно заредени частици с положителна маса.

При това от ур. 7 и ур. 12 се получава:

$$F = m^* a, \quad (14)$$

т.е. ускорението е насочено по направление на външната сила и обратно на интензитета на външното електрично поле E (като отрицателно заредена частица) - $a = -\frac{1}{m} eE$.

Като се има в предвид, че $a = dv/dt$ и $F = dp/dt$, то за квазиимпулса на на електрона в кубичния кристал се получава:

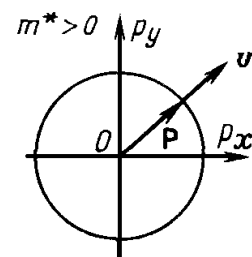
$$p = m^* v,$$

т.е. скоростта съвпада по направление с квазиимпулса.

Следователно под действие на външно електрично поле движението на електрона, намиращ се на дъното на енергетичната зона на кубичен кристал е подобно на движението на свободна частица с маса m^* .

От ур. 14 следва, че електронът се ускорява в кристала само под действието на външната сила. Действието на периодичното поле на кристалната решетка се изразява в това, че при прилагане на външна сила движението на електрона се определя не от неговата реална маса m , а от ефективната му маса m^* .

Ако електронът се намира в област, близка до максимума на енергията, т.е. близко до върха на валентната зона, може да се запише:



$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} < 0 \quad \text{и} \quad m^* = \text{const} < 0, \quad (15)$$

т.е. скоростта е насочена в направление, обратно на квазиимпулса. От ур. (7) и ур. (15) следва, че направлението на ускорението на електрона, намиращ се на върха на валентната зона, е обратно насочен на външната сила:

$$a = -\frac{F}{m^*}.$$

В еднородно електрично поле на електрона действа сила:

$$F = -eE$$

и затова за електрон, намиращ се на върха на валентната зона, с маса $m^* < 0$, ускорението, създадено от външно електрично поле е:

$$a = \frac{-|e|E}{-|m^*|} = \frac{eE}{m^*},$$

т.е. ускорението е насочено по направление на полето E .

Такъв носител на заряд, намиращ се в близост до върха на валентната зона се държи като частица с положителен заряд и отрицателна ефективна маса. Този носител на заряд се нарича дупка.

Както се вижда на фигура 2 в) и 2 г), с отдалечаване от краищата на зоната, зависимостта $E(k)$ не е квадратична. В точките на огъване $k = \pm\pi/2a$ на кривата $E(k)$ се получава:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = 0 \quad \text{и} \quad m^* \rightarrow \infty.$$

От тук следва, че използването на ур. 6 за описание на движението на носителите на заряд в кристала под действие на външно поле, е възможно само за носителите на заряд, намиращи се близко до върха и дъното на енергетичната зона.

Най-важни за описание на физичните процеси в твърдите тела са два случая на запълване на енергетичната зона.

I. Почти свободна от електрони зона

В този случай броят на електроните n в зоната е много по-малък от броя на възможните квантови състояния:

$$n \ll 2N.$$

Електроните се стремят да заемат най-ниските енергетични нива и се разполагат близо до дъното на зоната. При това $m_n^* = \text{const} > 0$.

II. Почти запълнена с електрони зона

В този случай броят на свободните квантови състояния е много малък. Свободните състояния се намират във върхната област на зоната, т.е. дупките се разполагат на върха на зоната, където енергията им е минимална. Следователно енергията на дупките се отчита в направление,

противоположно на това, в което се отчита енергията на електрона. При това $m_p^* = const < 0$.

При абсолютната нула валентната зона на полупроводниците е изцяло запълнена, а зоната на проводимост – изцяло свободна. При повишаване на температурата неголям брой електрони преминават от валентната зона в зоната на проводимост за сметка на топлинното възбуждане. При това се наблюдават двата случая на запълване на зони: малък брой електрони на дъното на зоната на проводимост и дупки на върха на валентната зона. Т.к. ширината на зоната на проводимост е по-голяма от ширината на валентната зона, а големината на ефективната маса е обратно пропорционална на ширината на енергетичната зона, то ефективната маса на дупките е по-голяма от тази на електроните:

$$m_p^* > m_n^*.$$

Следователно електрическите носители на заряд дупка и електрон, се различават не само по знака на своя електричен заряд, но и по големината на ефективните си маси.

3. Метод на ефективната маса

Когато на електроните в кристалната решетка освен периодичния потенциал на решетката $V(r)$ действа и външно поле с потенциал $U(r)$, уравнението на Шрьодингер се записва така:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + U(r) \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (16)$$

Точното решение на това уравнение е затруднено от това, че потенциалът $V(r)$ е неизвестен. Направените разглеждания показаха, че уравнението на движение на електрон в периодичното поле на кристалната решетка при наличие на външно поле е аналогично на класическото уравнение на движение на свободен електрон, ако неговата маса m се замени в общия случай с тензора на ефективната маса m^* .

Уравнението на Шрьодингер за свободен електрон е:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_0(r) = E\psi_0(r). \quad (17)$$

Тогава за уравнението на Шрьодингер за електрон в кристала може да се запише аналогично:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi(r) = E\psi(r). \quad (18)$$

Уравнението на Шрьодингер за електрон в кристална решетка с периодичен потенциал $V(r)$ е:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad (19)$$

4.1. Донорни примеси

Разглеждаме кристална решетка на силиций (Si), в единия от възлите на която атомът на Si е заместен с атом на арсен (As), имащ пет валентни електрона. Четири от тези 5 електрона ще участват в образуването на ковалентни връзки с най-близките четири съседни Si атома. Петият електрон не образува двойка електрони (валентна връзка) и ще взаимодейства с голям брой Si атома. Следователно този електрон ще се окаже много слабо свързан с йона на арсена (As^+) чрез кулонова сила на електростатично взаимодействие. Това положение е подобно на състоянието на електрон във водороден атом. При намирането на електростатичния потенциал на взаимодействие в този случай обаче, трябва да се отчетат следните две допълнителни условия:

- Електронът се намира не само в електростатичното поле на As^+ , но и в периодичното поле на кристалната решетка на Si. Затова при описание на движението на електрона трябва да се използва не масата на свободен електрон m , а неговата ефективна маса m^* .
- Взаимодействието на електрона с положителния йон на арсена As^+ със заряд Ze , където $Z=1$ е валентността на арсена, става в твърдо тяло с диелектрична проницаемост ϵ , която трябва да се отчете в израза за потенциална енергия на взаимодействие:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r}, \quad (20)$$

където ϵ_0 е диелектричната проницаемост във вакуум.

Уравнение 20 е в сила само за макроскопични точкови заряди. Следователно то ще е вярно за нашия случай само, ако разстоянието между взаимодействащите си зарядите е достатъчно голямо, т.е. орбитата на примесния електрон трябва да обхваща достатъчен брой възли на кристалната решетка.

Като се вземат в предвид тези две условия, уравнението на Шрьодингер за петия валентен електрон на арсена, неучастващ в образуването на ковалентна връзка, съгласно ур. (17) ще е:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \right] \psi_a = E_n \psi_a.$$

Уравнението се решава аналогично на това за водородния атом и за собствените стойности на енергията на електрона на донорния примесен атом се получава:

$$E_n = E_c - \frac{m^* Z^2 e^4}{8\hbar^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2} \frac{1}{n^2},$$

като енергията на електрона се отчита от дъното на зоната на проводимост E_c , а n е квантовото число, определящо различните нива на възбуждане на донорния примес. Ако умножим и разделим втория член на масата m , то формулата може да се запише и така:

$$E_n = E_c - \frac{mZ^2 e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \left(\frac{m^*}{m} \right) \frac{1}{\varepsilon^2 n^2}.$$

Като се заместят числените стойности на e, m, ε_0, h и енергията се изрази в електронволти, то се получава:

$$E_n = E_c - \frac{13,52Z^2}{\varepsilon^2} \left(\frac{m^*}{m} \right) \frac{1}{n^2} = E_c - \frac{E_d}{n^2} \quad (21)$$

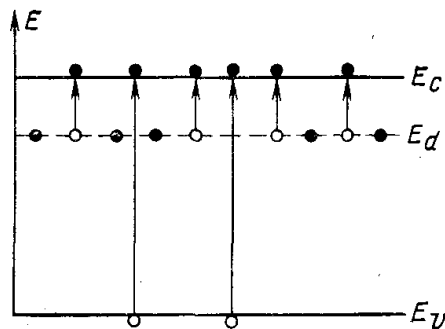
където:

$$E_d = \frac{13,52Z^2}{\varepsilon^2} \left(\frac{m^*}{m} \right) \quad (22)$$

е енергията на основното състояние на атома на донорния примес ($n = 1$);

13,52 е стойността на енергията на йонизирания водороден атом в eV.

От уравнение 21 следва, че енергетичното ниво на донорен примес в основно състояние ($n = 1$), лежи в забранената зона на полупроводника и е отместено с енергия E_d под дъното на зоната на проводимост E_c .



Според уравнение 22, енергията на йонизация на донорния примес E_d :

- зависи от ε^2 и е ε^2 пъти по-малка от енергията на йонизация на водородния атом,
- зависи от Z^2 и енергетичното ниво на двукратно йонизиран донорен примес ($Z = 2$) е разположено в забранената зона под нивото на еднократно йонизиран примес ($Z = 1$) на същия атом.

Ако предположим, че $m^* = 0,25m$, то за Ge, за който $\varepsilon = 15,8$, за 5 валентни примесни атоми, енергията на йонизация E_d е от порядъка на 0,01 eV, а за Si, за който $\varepsilon = 11,8$, $E_d \approx 0,02$. Тези пресметнати стойности добре съвпадат с експериментално получените.

4.2. Акцепторни примеси

Разглеждаме кристална решетка на силиций (Si), в единия от възлите на която атомът на Si е заместен с атом на бор (B), имащ три валентни електрона. В този случай не стига един електрон на атома на B, за да образува валентна връзка с един от четирите най-близко разположени до акцепторния примес Si атома. Незавършената връзка - дупка, има поведение на положително заредена частица, което и обезпечава

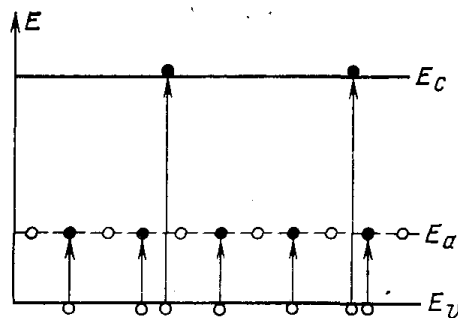
електронеутралността на кристала. Решението на задачата е аналогично на това за движението на електрон в кулоновото поле на положителен йон и за собствените стойности на енергията се получава:

$$E_p = E_v + \frac{m^* Z^2 e^4}{8h^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2 n^2} = E_v + \frac{E_a}{n^2} \quad (23)$$

където:

$$E_a = \frac{13,52 Z^2}{\epsilon^2} \left(\frac{m^*}{m} \right), \quad (24)$$

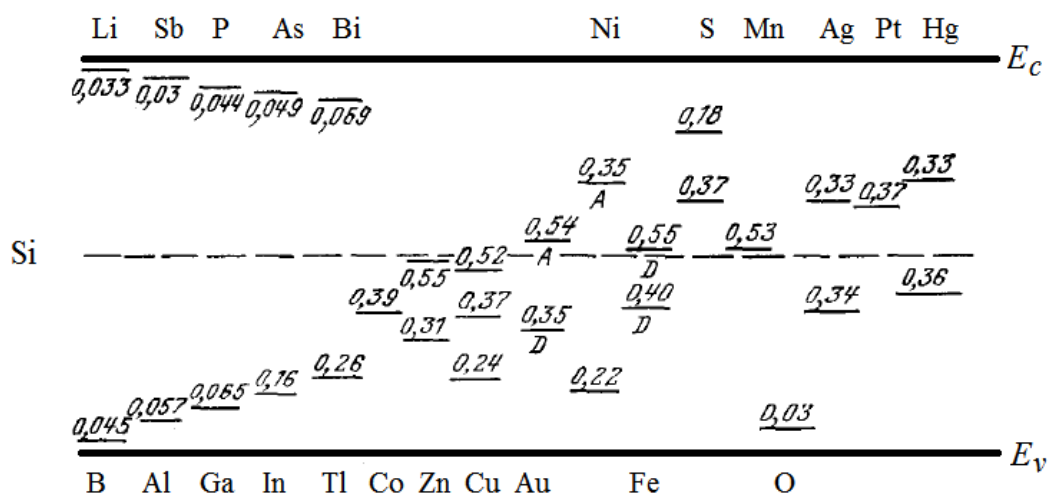
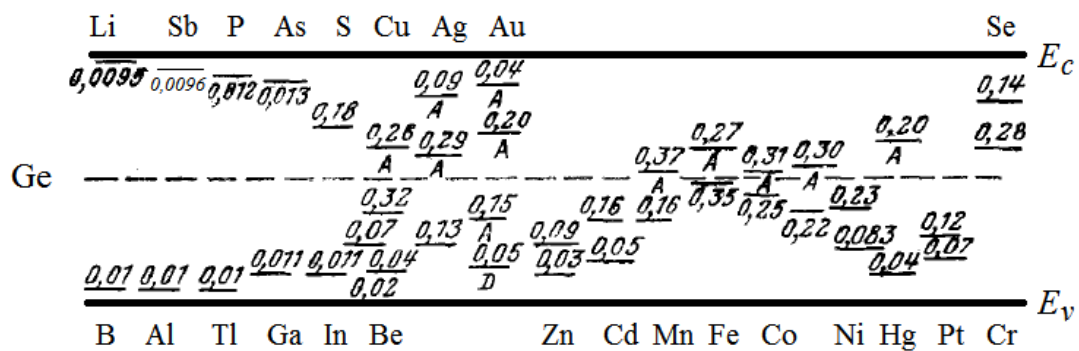
т.е. енергетичното ниво на акцепторния примес в основно състояние ($n = 1$) се намира в забранената зона на полупроводника и е отместено с енергия E_a над върха на валентната зона E_v . Според пресмятанията при $m^* = 0,25m$ за Ge, $E_a \approx 0,01$ eV, а за Si, $E_a \approx 0,02$ eV. Тези пресметнати стойности добре съвпадат с експериментално получените.



Донорните и акцепторните примеси на атомите на елементите от V и III групи на Менделеевата таблица вкарани в ковалентните прости полупроводници като Ge и Si, образуват т.н. „плитки“ енергетични нива с относително малки стойности на енергиите E_a и E_d , които много добре се описват с водородоподобния модел. Енергията на йонизация на тези примеси е обратно пропорционална на ϵ^2 и е пропорционална на Z^2 и на ефективната маса на носителите на заряд.

Примесите на атомите на елементите от I, II, VI и VIII групи на Менделеевата таблица, вкарани в полупроводниците, образуват т.н. „дълбоки“ енергетични нива, които имат по-големи стойности на енергиите E_a и E_d . Тези елементи могат да се вкарат в решетката на полупроводника като примесни атоми (донорни D или акцепторни A), еднократно заредени йони (D^1 или A^1) и двукратно заредени йони (D^2 или A^2). Освен това един и същ примесен атом може да образува както донорни, така и акцепторни нива.

На фигурите са показани измерените стойности на йонизационните енергии на различни примеси в германия (Ge) и силиция (Si).



Примесните енергетични нива, разположени над средата на забранената зона, изобразена с пунктирна права линия, са донорни нива. Донорните нива, разположени под средата на забранената зона, са отбелязани с буква *D*. Енергията на йонизация на донорните примеси E_d се отчита от дъното на зоната на проводимост E_c .

Примесните енергетични нива, разположени под средата на забранената зона, изобразена с пунктирна права линия, са акцепторни нива. Акцепторните нива, разположени над средата на забранената зона, са отбелязани с буква *A*. Енергията на йонизация на акцепторните примеси E_a се отчита от върха на валентната зона E_v .