
POVRŠINSKE I KONTAKTNE POJAVE. HETEROSPOJEVI

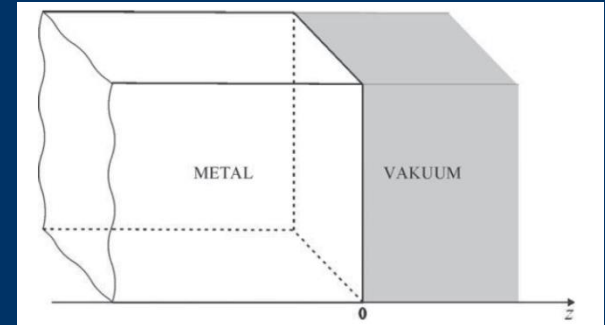
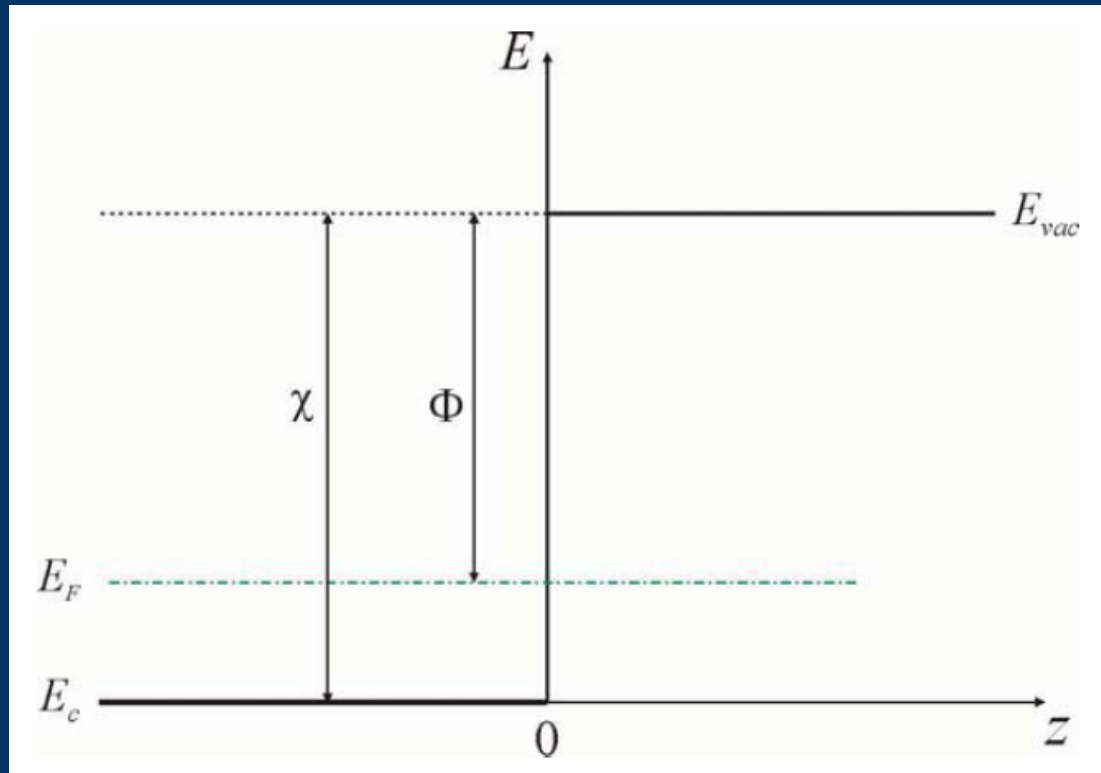
23. 12. 2021.

Definicija

- Prilikom dovođenja u kontakt dva različita čvrsta tela, u graničnom sloju dolazi do razmene nosilaca između njih i javljaju se odgovarajuće potencijalne barijere, dolazi do promena osobina materijala ne samo u okolini spoja, već i u celoj zapremini.
 - **Heterospoj** je spoj materijala čije se fizičke i hemijske osobine, kao i atomski sastav, značajno razlikuju (npr. spoj metala i poluprovodnika, ili spoj dva poluprovodnika bitno različitih hemijski sastava).
 - **Homospoj**: sa različitih strana granice su fizički, hemijski i atomski identični materijali, ili oni koji se razlikuju u zanemarljivoj meri (npr. p-n spoj kod koga se sa obe strane radi o istom poluprovodniku, samo dopiranom primesama različitog tipa čija koncentracija je zanemarljiva u odnosu na koncentraciju atoma osnovnog materijala).
-

-
- **Vakuumski nivo** energije je energija koju bi elektron imao van materijala, u vakuumu. Ovaj nivo energije je jedinstven, ne zavisi od posmatranog materijala
 - Položaj dna provodne zone posmatranog materijala u odnosu na vakuumski nivo predstavlja **elektronski afinitet**.
 - To je energija koju treba uložiti da bi se elektron sa dna provodne zone u materijalu prebacio na vakuumski nivo, tj. izveo iz materijala.
 - **Izlazni rad** je energetska razlika Fermijevog nivoa u kristalu i vakuumskog nivoa. Kod metala, izlazni rad predstavlja minimalnu energiju koja je potrebna da bi se elektron sa Fermijevog nivoa u kristalu prebacio na vakuumski nivo (na $T = 0 \text{ K}$).
-

HETEROSPOJ METAL-VAKUUM



Izlazni rad:

$$\Phi = E_{vac} - E_F$$

elektronski afinitet:

$$\chi = E_{vac} - E_c$$

- sistem nalazi u stanju termodinamike ravnoteže (TDR)
- Fermijev nivo je jedinstven

Struja termoelektronske emisije

- Gustina struje nosilaca koja protiče kroz spoj (struja elektrona koji izlaze iz metala), u slučaju termodinamičke ravnoteže:

$$\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(\vec{k})} f_{FD}(\vec{k}) \vec{v} dV_k$$

- Pošto je metal neograničen u ravni x-y, kretanje elektrona u x- i y-pravcu je slobodno, pa će komponente gustine struje J_x i J_y biti jednake nuli (podintegralne funkcije u odgovarajućim komponentama struja su neparne po k_x i k_y)
- Samo je J_z komponenta različita od 0:

$$J_z = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(\vec{k})} f_{FD}(\vec{k}) v_z dV_k$$

Struja termoelektronske emisije

- Pretpostavićemo da je zavisnost energije od talasnog vektora parabolična, sa izotropnom efektivnom masom.

$$J = |J_z| = \frac{e}{4\pi^3} \left(\frac{m^*}{\hbar} \right)^3 \int_{(\vec{v})} \frac{v_z dv_x dv_y dv_z}{e^{\left(\frac{m^* v^2}{2} - E_F \right) / k_B T} + 1}$$
$$= 2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{v_{z0}}^{\infty} \frac{v_z dv_z}{e^{\left(\frac{m^* v^2}{2} - E_F \right) / k_B T} + 1}$$

$$\frac{m^* (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2} \geq \chi$$

- x i y komponente brzine mogu imati sve vrednosti, dok je z-komponenta brzine ograničena sa donje strane, jer struju čine samo elektroni sa kinetičkom energijom većom od potencijalne barijere na spoju:

$$v_{z_{\min}} = v_{z_0} = \sqrt{\frac{2\chi}{m^*}}$$

Struja termoelektronske emisije

- Posmatrajmo razliku energija u argumentu Fermi-Dirakove funkcije:

$$\frac{m^* v^2}{2} - E_F \geq \frac{m^* v_z^2}{2} - E_F \geq \frac{m^* v_{z0}^2}{2} - E_F = \chi - E_F = \Phi$$

$$e^{\left(\frac{m^* v^2}{2} - E_F\right)/k_B T} \geq e^{\Phi/k_B T} \gg 1$$

$$\begin{aligned} J &= 2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{v_{z0}}^{\infty} e^{\left(E_F - \frac{m^* v^2}{2}\right)/k_B T} v_z dv_z \\ &= 2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 e^{\frac{E_F}{k_B T}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m^* v_x^2}{2k_B T}} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m^* v_y^2}{2k_B T}} dv_y \int_{v_{z0}}^{\infty} e^{-\frac{m^* v_z^2}{2k_B T}} v_z dv_z \end{aligned}$$

Richardson-Dushman-ova formula

- Integrali po v_x i v_y su Poisson-i integrali $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2 x^2} dx = \sqrt{\pi} / a$,

- dok integral po v_z daje: $\frac{k_B T}{m^*} e^{-m^* v_{z0}^2 / 2 k_B T} = \frac{k_B T}{m^*} e^{-\chi / k_B T}$

- Izraz za gustinu struje postaje:

$$J = \frac{4em^* \pi (k_B T)^2}{h^3} e^{-\frac{(\chi - E_F)}{k_B T}}$$

$$J = \frac{4em^* \pi (k_B T)^2}{h^3} e^{-\frac{\Phi}{k_B T}}$$

-
- Ova struja elektrona koji izlaze iz metala i idu u vakuum naziva se **struja termoelektronske emisije**
- Formula se obično zapisuje u obliku:
- važi za metale i poluprovodnike

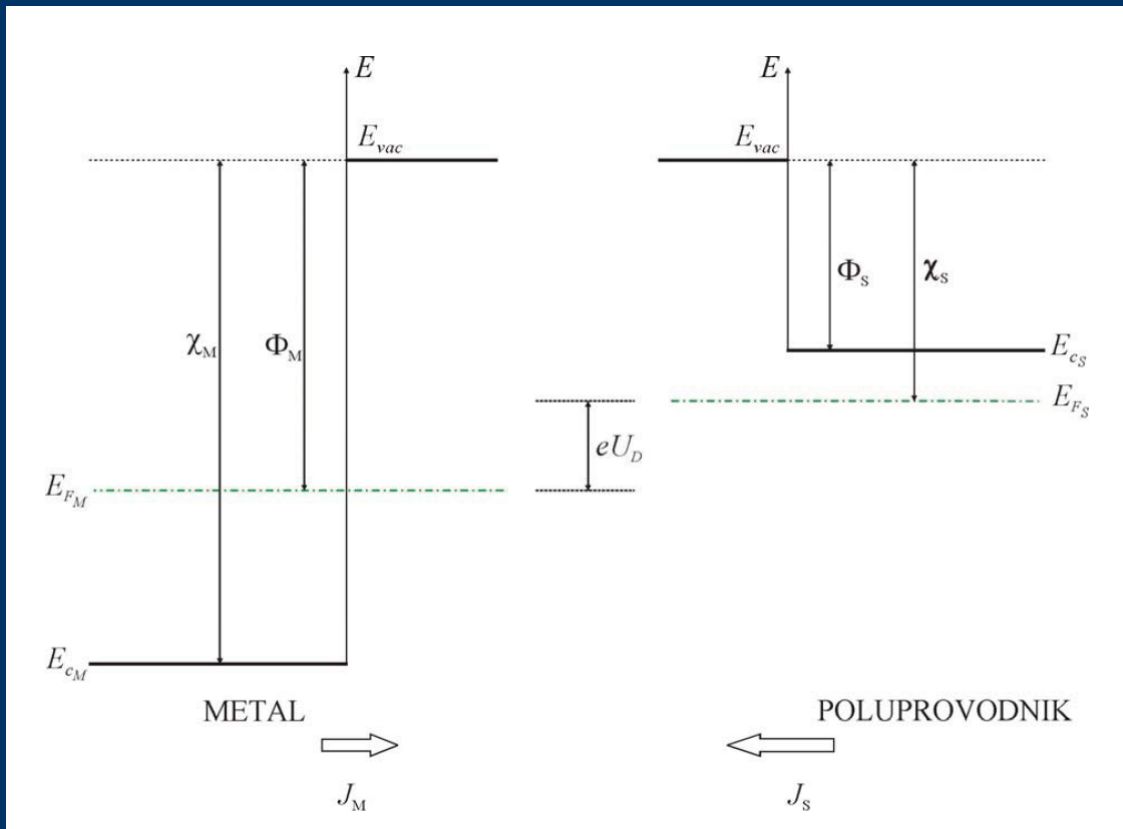
$$J = AT^2 e^{-\frac{\Phi}{k_B T}}, \quad A = \frac{4em^* \pi k_B^2}{h^3}$$

Primer

- Pošto u struji termoelektronske emisije učestvuju elektroni čija energija je daleko veća od periodične potencijalne energije kristalne rešetke, možemo smatrati da je njihova efektivna masa jednaka masi slobodnog elektrona. Onda je konstanta $A \approx 120.2 \text{ A/cm}^2\text{K}^2$
 - Uzmimo da je veličina izlaznog rada $\Phi=2.5\text{eV}$, tada dobijamo na sobnoj temperaturi ($T = 300 \text{ K}$) da je gustina struje $J = 10^{-36} \text{ A/cm}^2$, što znači da je struja termoelektronske emisije zanemarljiva.
 - Na višim temperaturama postaje značajna: $J(1500\text{K}) \approx 0.8 \text{ A/cm}^2$
 - Ova činjenica predstavlja jedan od osnova za konstruisanje elektronskih cevi.
-

HETEROSPOJ METAL-POLUPROVODNIK.

- pretpostavićemo da se radi o poluprovodniku n -tipa, kao i da je izlazni rad metala (M) veći od izlaznog rada poluprovodnika (S):



$$J_M = AT^2 e^{-\frac{\Phi_M}{k_B T}}$$

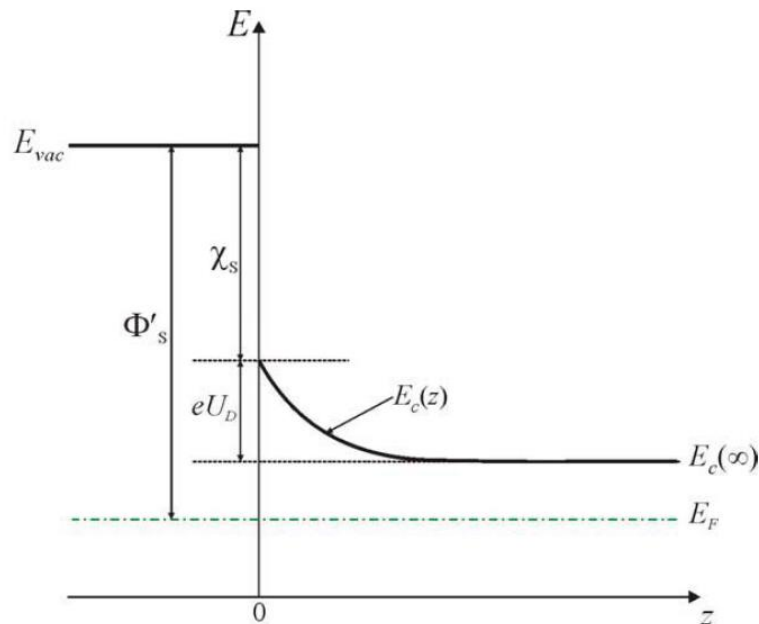
$$J_S = AT^2 e^{-\frac{\Phi_S}{k_B T}}$$

MS spoj

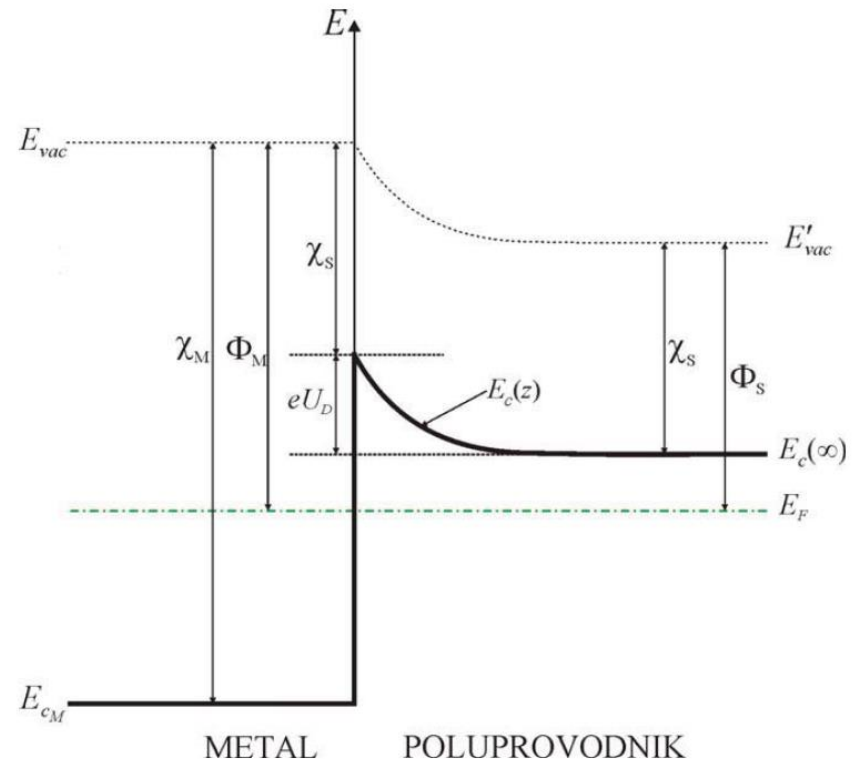
- prilikom spajanja M i S, u prelaznom procesu dolazi do efektivnog prelaska elektrona iz S u M ($J_s > J_M$).
- Međutim, kako je koncentracija e^- , n , u M veoma velika, neće se osetiti ovaj priliv e^- i možemo smatrati da je n praktično nepromenjeno, a samim tim i položaj $E_{F,M}$.
- S druge strane, S će biti osiromašen e^- u blizini spoja i ovo smanjenje koncentracije u poluprovodniku nije zanemarljivo.
- Po završetku prelaznih procesa i uspostavljanju TDR, struja kroz heterospoj će biti 0, a Fermi-jev nivo mora biti jedinstven za celu strukturu (i jednak $E_{F,M}$).
- Izlazni rad poluprovodnika na površini se povećava i izjednačava sa izlaznim radom M, čime se i postiže da je ukupna struja kroz spoj jednaka nuli ($J_s = J_M$).
- Vrednost izlaznog rada S na površini se može napisati u obliku:

$$\Phi'_S = \Phi_S + eU_D = \Phi_M$$

$$eU_D = \Phi_M - \Phi_S = (E_{vac} - E_{F_M}) - (E_{vac} - E_{F_S}) = E_{F_S} - E_{F_M} > 0$$



$$\chi_S - \Phi_S = E_{c_S} - E_{F_S} = E_c(\infty) - E_F$$



-
- Dovoljno daleko od spoja poluprovodnik je neizmenjen: koncentracija elektrona (odnosno udaljenost Fermi-jevog nivoa od dna provodne zone), elektronski afinitet, izlazni rad moraju zadržati vrednosti kao pre spajanja:

$$\chi_S - \Phi_S = E_{c_S} - E_{F_S} = E_c(\infty) - E_F$$

- dolazi do spuštanja dna provodne zone u poluprovodniku daleko od spoja za isti iznos za koji se spustio i Fermi-jev nivo.
 - da bi χ ostao konstantan, spušta se i vakuumski nivo
 - Pošto u metalu ne dolazi do značajnijih promena, gledamo samo raspodelu naelektrisanja u poluprovodniku u okolini spoja.
 - Pretpostavljamo da važi aproks. totalne nedegeneracije za pp.
-

-
- Koncentracija e^- u poluprovodniku i promena položaja dna E_c :

$$n(z) = B_c e^{\frac{E_F - E_c(z)}{k_B T}}$$

$$\delta E_c = E_c(z) - E_c(\infty)$$

- Koncentracija u funkciji promene E_c :

$$n(z) = B_c e^{\frac{[E_F - E_c(\infty)] - \delta E_c(z)}{k_B T}} = B_c e^{\frac{E_F - E_c(\infty)}{k_B T}} e^{-\frac{\delta E_c(z)}{k_B T}}$$

- Ako je poluprovodnik uniformno sa N_D i T dovoljno veliko da su sve primese jonizovane tada važi:

$$n(z) \approx N_D e^{-\frac{\delta E_c(z)}{k_B T}}$$

- Uvodimo veličinu koja se odnosi na promenu potencijala (napon) elektrostatičke barijere i koncentraciju e- u pp. izražavamo kao:

$$\delta E_c = -e\Upsilon(z)$$

$$\Upsilon(z \rightarrow \infty) = 0$$

$$n(z) = N_D e^{\frac{e\Upsilon(z)}{k_B T}}$$

- Ako je koncentracija manjinskih nosilaca (šupljina) zanemarljiva u poluprovodniku, gustina naelektrisanja se računa kao:

$$\rho(z) = e[N_D - n(z)]$$



$$\rho(z) = eN_D \left[1 - e^{\frac{e\Upsilon(z)}{k_B T}} \right]$$

- Veza između zapreminske gustine naelektrisanja i elektrostatičkog potencijala određena je Poisson-ovom jednačinom:

$$\frac{d^2 \Upsilon(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_r \epsilon_0}$$



$$\epsilon_r \epsilon_0 \frac{d^2 \Upsilon(z)}{dz^2} = -eN_D \left[1 - e^{\frac{e\Upsilon(z)}{k_B T}} \right]$$

- granični uslovi za elektrostatički potencijal:

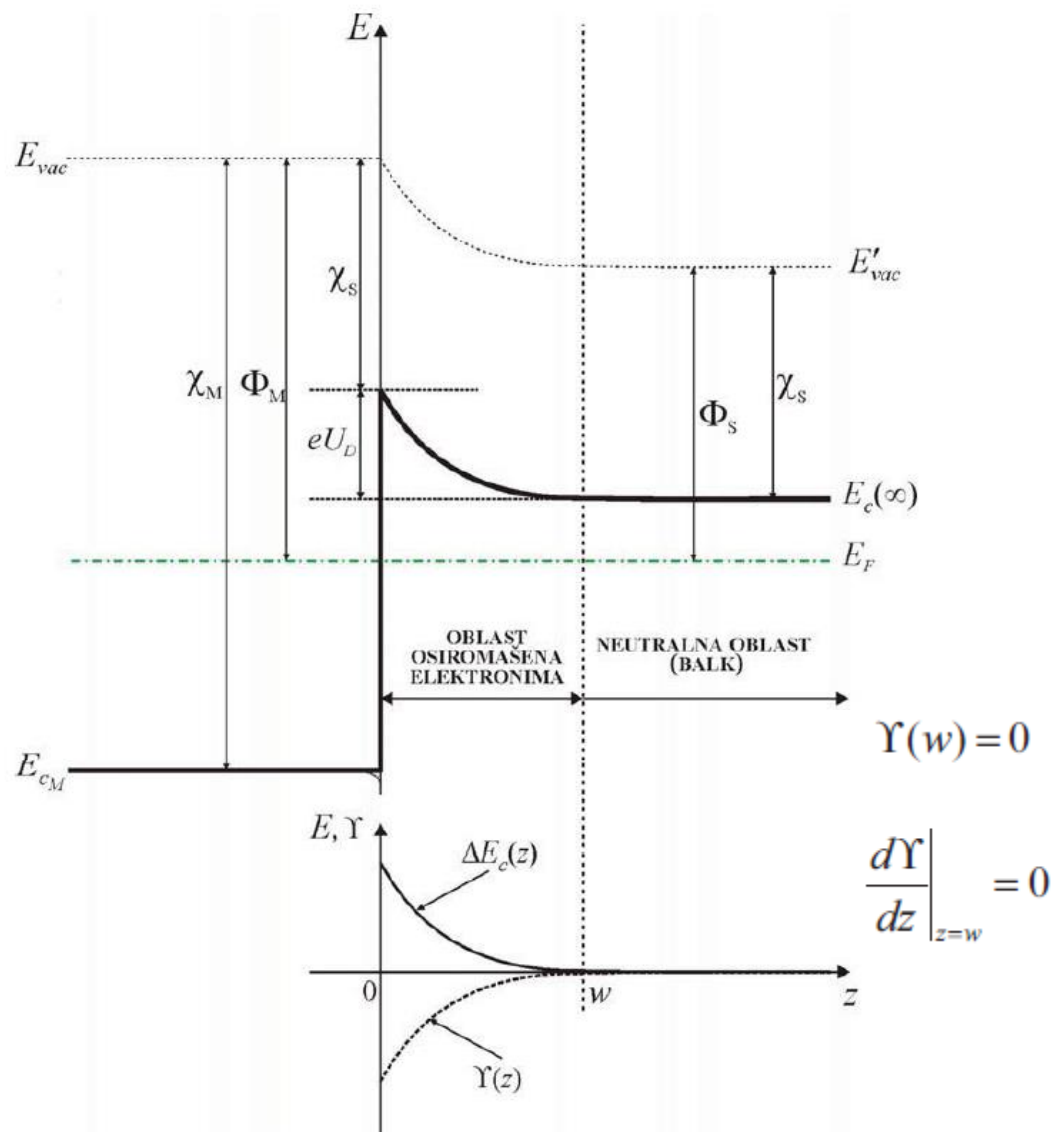
$$\Upsilon(z \rightarrow \infty) = 0$$

$$-e\Upsilon(0) = eU_D$$

- Poisson-ova jna nema analitičko rešenje u opštem slučaju
- Koristićemo poznatu **aproksimaciju totalnog osiromašenja (ATO)**
- Smatramo da postoji neka tačka udaljena od spoja za w , tako da za $z > w$ važi potpuna električna neutralnost
- Smatramo da za $z \leq w$ (**oblast prostornog naelektrisanja/ prostornog tovara**) nema preostalih slobodnih elektrona; jedino prisutno naelektrisanje su nepokretni jonizovani donori.

$$n(z) \approx N_D, \quad \Upsilon(z) = 0 \Rightarrow e^{\frac{e\Upsilon(z)}{k_B T}} = 1, \quad z > w$$

$$n(z) \approx 0, \quad e^{\frac{e\Upsilon(z)}{k_B T}} \ll 1, \quad z \leq w$$



Poisson-ova
jednačina se svodi na:

$$\frac{d^2\Upsilon(z)}{dz^2} = -\frac{eN_D}{\epsilon_r\epsilon_0}, \quad z \leq w$$

$$\Upsilon(z) = -\frac{eN_D z^2}{2\epsilon_r\epsilon_0} + Az + B, \quad z \leq w$$

$$\left. \frac{d\Upsilon}{dz} \right|_{z=w} = -\frac{eN_D w}{\epsilon_r\epsilon_0} + A = 0$$

$$\Upsilon(w) = \frac{eN_D w^2}{2\epsilon_r\epsilon_0} + B = 0$$

- Rešenje za elektrostatički potencijal u barijeri:

$$\Upsilon(z) = \begin{cases} -\frac{eN_D}{2\epsilon_r\epsilon_0}(z-w)^2, & z \leq w \\ 0, & z > w \end{cases}$$

- Određivanje širine oblasti prostornog naelektrisanja w :

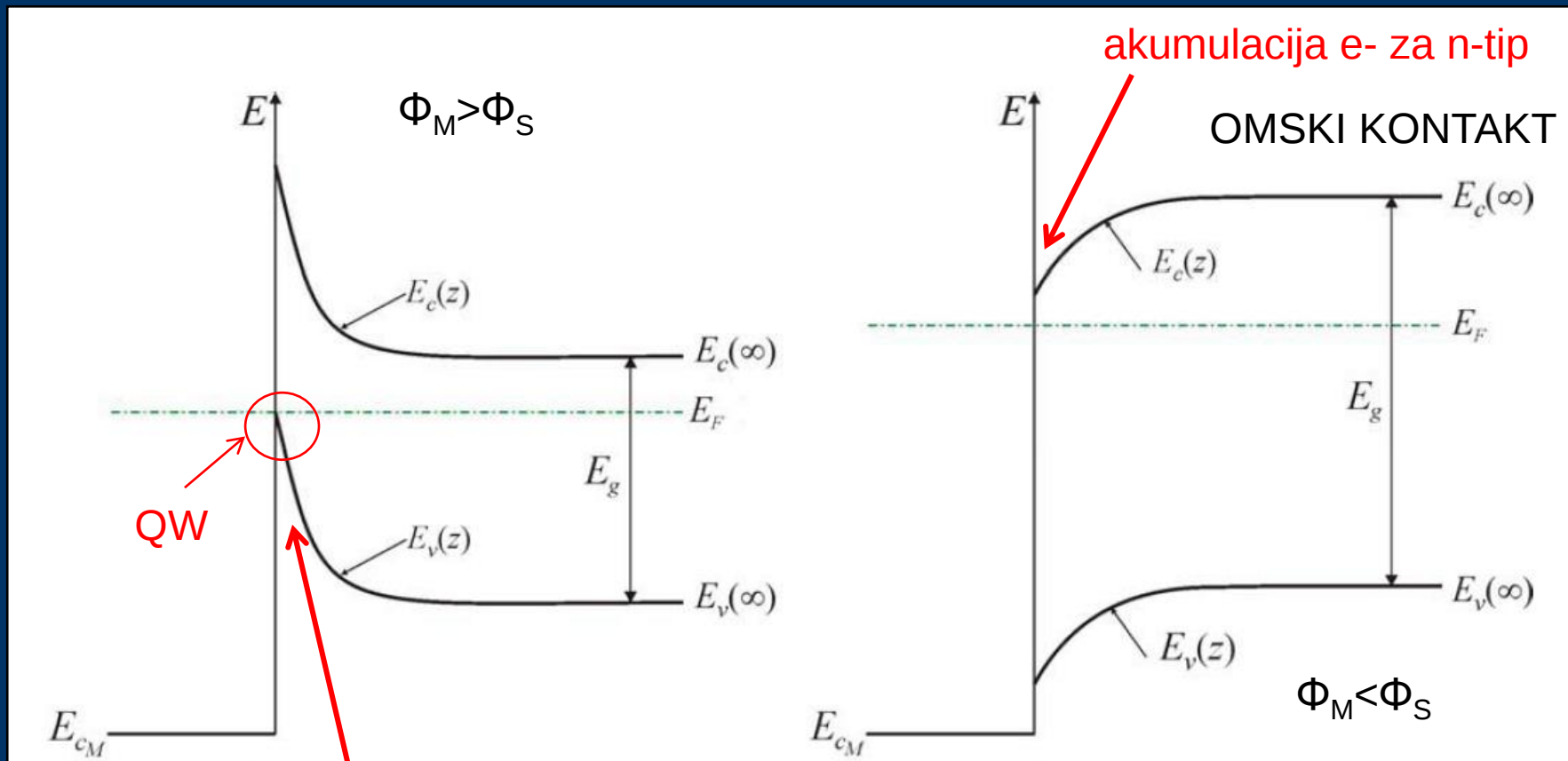
$$\Delta E_c(0) = \Phi_M - \Phi_S = eU_D = -e\Upsilon(0)$$

$$\Rightarrow \Upsilon(0) = -\frac{\Phi_M - \Phi_S}{e} < 0$$



$$w = \sqrt{\frac{2\epsilon_r\epsilon_0(\Phi_M - \Phi_S)}{e^2 N_D}}$$

-
- U oblasti prostornog naelektrisanja **koncentracija šupljina** može se zanemariti sve dok je dno valentne zone znaajno ispod Fermijevog
 - nivoa.
 - Ukoliko je razlika $\Phi_M - \Phi_S$ veoma velika i krivljenje zona izrazito,
 - može se desiti da se vrh valentne zone približi Fermi-jevom nivou toliko da **koncentracija šupljina postane veća od koncentracije elektrona** pa šupljine formiraju **inverzioni sloj** u okolini spoja.
 - Ako je Φ_M manje od Φ_S tada bi elektroni prelazili iz metala u poluprovodnik sve do uspostavljanja ravnoteže i izjednačavanja Fermi-jevog nivoa na vrednosti koja odgovara metalu.
 - Krivljenje zona je naniže, oblast poluprovodnika u okolini spoja se obogaćuje elektronima, dolazi do **akumulacije elektrona**.
-



inverzija šupljina za n-tip pp.

može i inverzija e^- za p-tip kada je $\Phi_M < \Phi_S$

HETEROSPOJ POLUPROVODNIK-POLUPROVODNIK

- Spoj dva poluprovodnika sa različitim E_g , χ , Φ
- Razmatramo samo slučaj kada su pp. različitog tipa provodnosti, prvi uniformno dopiran akceptorima koncentracije P_A drugi uniformno dopiran donorima koncentracije N_D .
- Razlika energetskega procepa ova dva poluprovodnika je $\Delta E_g = |E_{g_1} - E_{g_2}|$
- i ona se raspodeljuje na diskontinuitet provodne zone i diskontinuitet valentne zone $\Delta E_c = |E_{c_1} - E_{c_2}|$ $\Delta E_v = |E_{v_1} - E_{v_2}|$.
- Dodatna ograničenja:

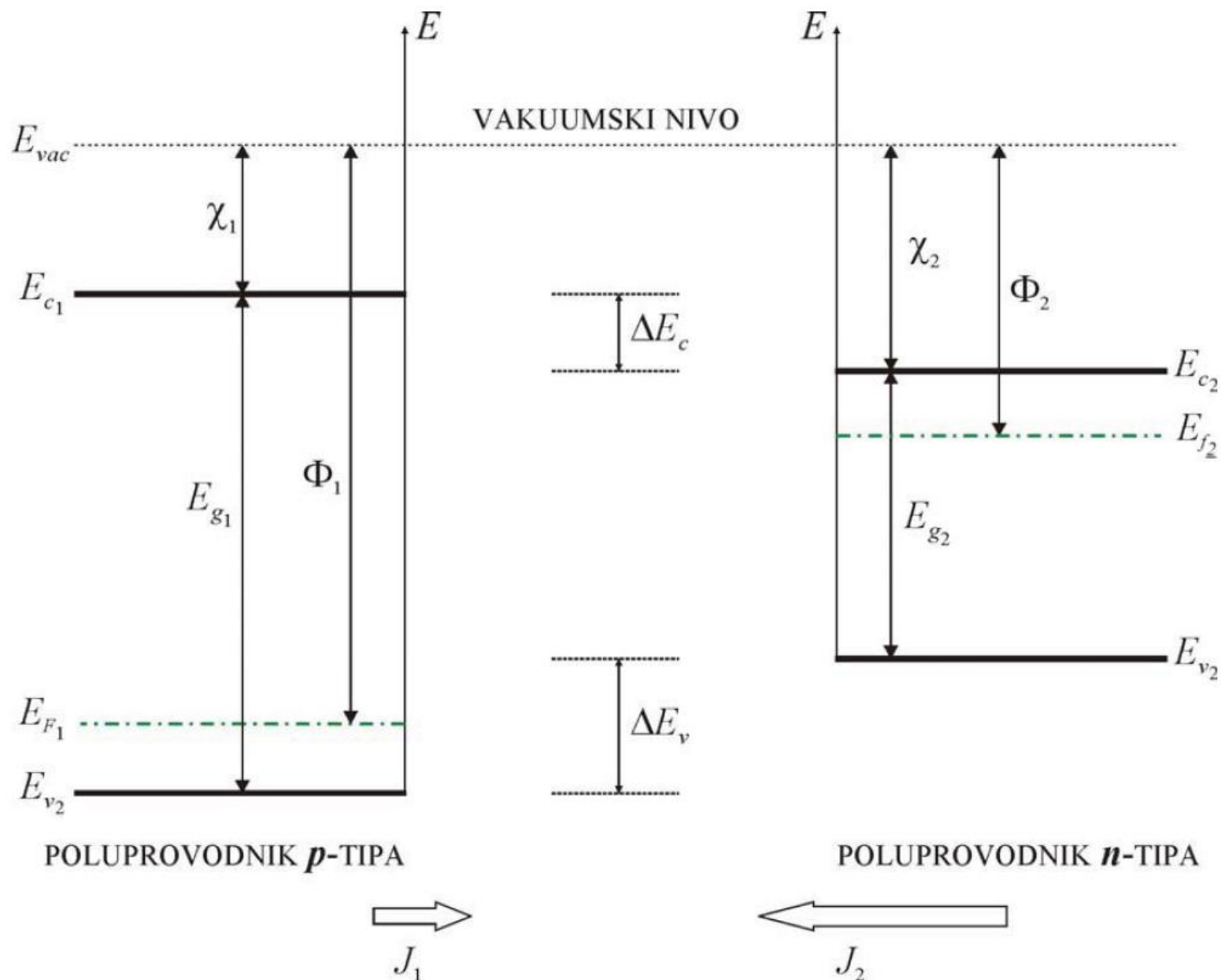
$$\chi_1 < \chi_2$$

$$\Rightarrow E_{c_1} > E_{c_2}$$

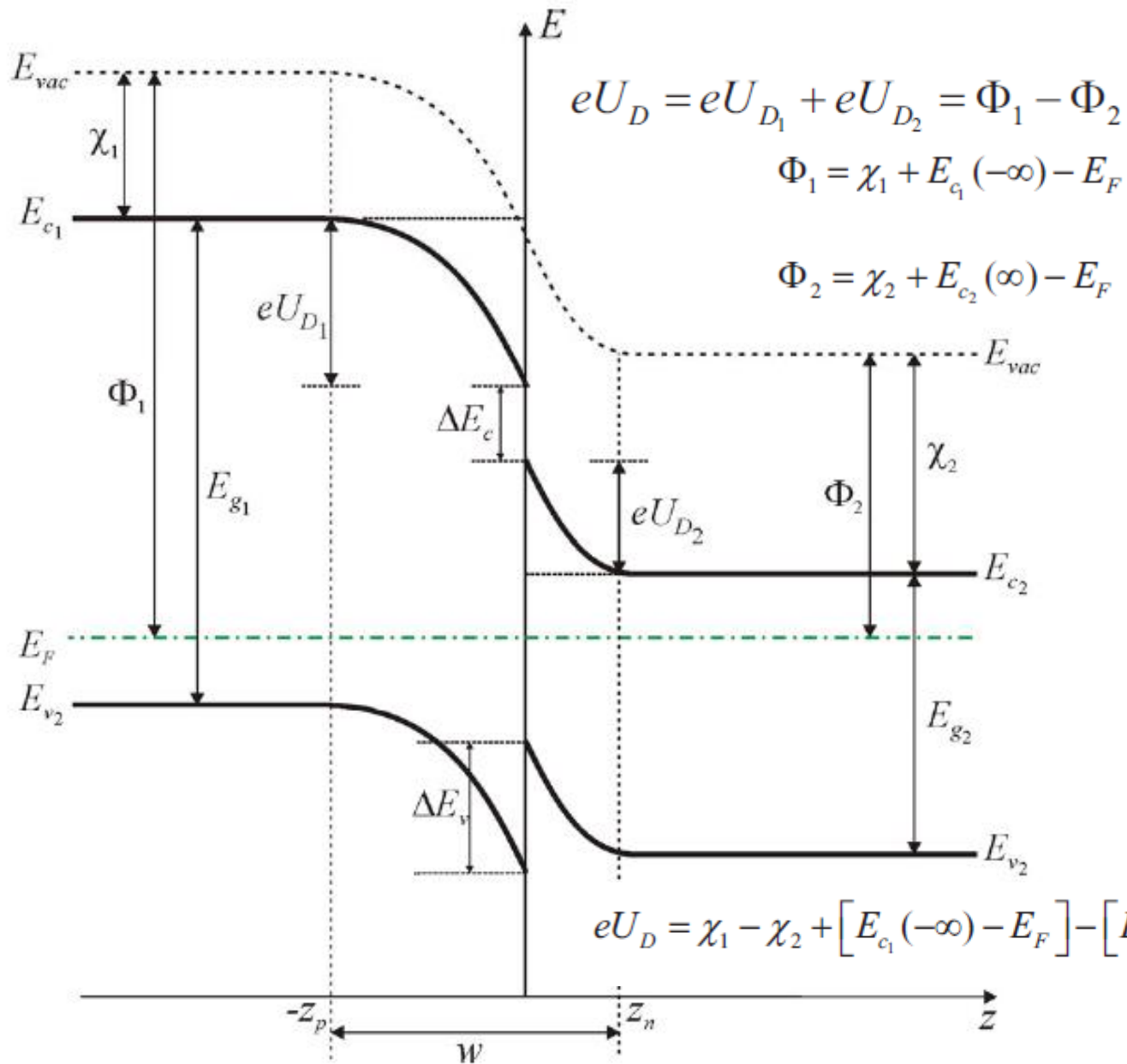
$$\chi_1 + E_{g_1} < \chi_2 + E_{g_2}$$

$$\Rightarrow E_{v_2} > E_{v_1}$$

$$\Phi_1 > \Phi_2$$



-
- Izlazni rad u poluprovodniku n -tipa je manji, pa nakon formiranja spoja elektroni efektivno prelaze iz materijala 2 u materijal 1.
 - Dolazi do obogaćivanja elektronima poluprovodnika p -tipa (tj. smanjiće se koncentracija šupljina) u okolini spoja, dok će se s druge strane poluprovodnik n -tipa oslobađati elektrona u uskom sloju u okolini granice.
 - U blizini granice poluprovodnik 1 će biti osiromašen šupljinama, a poluprovodnik 2 osiromašen elektronima.
 - Po uspostavljanju TDR Fermi-jev nivo mora biti jedinstven i njegov položaj je negde izmeu Fermi-jevih nivoa izolovanih poluprovodnika
-



$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + [E_{c_1}(-\infty) - E_F] - [E_{c_2}(\infty) - E_F]$$

$$p(-z_p) = B_{v_1} e^{\frac{[E_{c_1}(-\infty) - E_F] - E_{g1}}{k_B T}} \approx P$$

$$n(z_n) = B_{c_2} e^{\frac{E_F - E_{c_2}(\infty)}{k_B T}} \approx N_D$$



$$E_{c_1}(-\infty) - E_F = k_B T \ln \frac{P}{B_{v_1}} + E_{g1}$$

$$E_F - E_{c_2}(\infty) = k_B T \ln \frac{N_D}{B_{c_2}}$$



$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + k_B T \ln \left(\frac{PN_D}{B_{v_1} B_{c_2}} e^{\frac{E_{g1}}{k_B T}} \right)$$

$$n_i^2 = B_{v_1} B_{c_1} e^{-\frac{E_{g1}}{k_B T}},$$

$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + k_B T \ln \left(\frac{N_D P}{n_i^2} \frac{B_{c_1}}{B_{c_2}} \right)$$

$$\frac{B_{c_1}}{B_{c_2}} = \left(\frac{m_{n_1}}{m_{n_2}} \right)^{3/2}$$

$$eU_D = \chi_1 - \chi_2 + k_B T \ln \left(\frac{N_D P}{n_i^2} \right) + \frac{3}{2} \ln \frac{m_{n_1}}{m_{n_2}}$$

- gde je U_D ukupna razlika potencijala između balkovskih oblasti materijala n - i p -tipa:

$$U_D = \Upsilon(z_n) - \Upsilon(-z_p) \equiv U_{np}$$

- Poissonova jna u ATO glasi:

$$\frac{d^2 \Upsilon(z)}{dz^2} = \begin{cases} \frac{eP}{\epsilon_{r_1} \epsilon_0}, & -z_p \leq z < 0 \\ -\frac{eN_D}{\epsilon_{r_2} \epsilon_0}, & 0 < z \leq z_n \end{cases}$$

Granični uslovi za potencijal

$$\left. \frac{d\Upsilon}{dz} \right|_{z=-z_p} = 0, \quad \left. \frac{d\Upsilon}{dz} \right|_{z=z_n} = 0$$

- Integralimo jednom i primenimo granične uslove:

$$\frac{dY(z)}{dz} = \begin{cases} \frac{eP}{\varepsilon_{r_1} \varepsilon_0} (z + z_p), & -z_p \leq z < 0 \\ \frac{eN_D}{\varepsilon_{r_2} \varepsilon_0} (-z + z_n), & 0 < z \leq z_n \end{cases}$$

- Integralimo ponovo uz granične uslove

$$Y(-z_p) = 0, \quad Y(z_n) = U_D$$

$$\frac{dY(z)}{dz} = \begin{cases} \frac{eP}{\varepsilon_{r_1} \varepsilon_0} (z^2 / 2 + z_p z) + C_3, & -z_p \leq z < 0 \\ \frac{eN_D}{\varepsilon_{r_2} \varepsilon_0} (-z^2 / 2 + z_n z) + C_4, & 0 < z \leq z_n \end{cases}$$

$$Y(z) = \begin{cases} \frac{eP}{2\varepsilon_{r_1} \varepsilon_0} (z + z_p)^2, & -z_p \leq z < 0 \\ -\frac{eN_D}{2\varepsilon_{r_2} \varepsilon_0} (z - z_n)^2 + U_D, & 0 < z \leq z_n \end{cases}$$

- Sada određujemo granice oblčasti prostornog naelektrisanja:

$$\Upsilon(0^-) = \Upsilon(0^+)$$

$$D(0^-) = D(0^+)$$

$$D(z) = \varepsilon_r \varepsilon_0 K(z) = -\varepsilon_r \varepsilon_0 d\Upsilon/dz$$



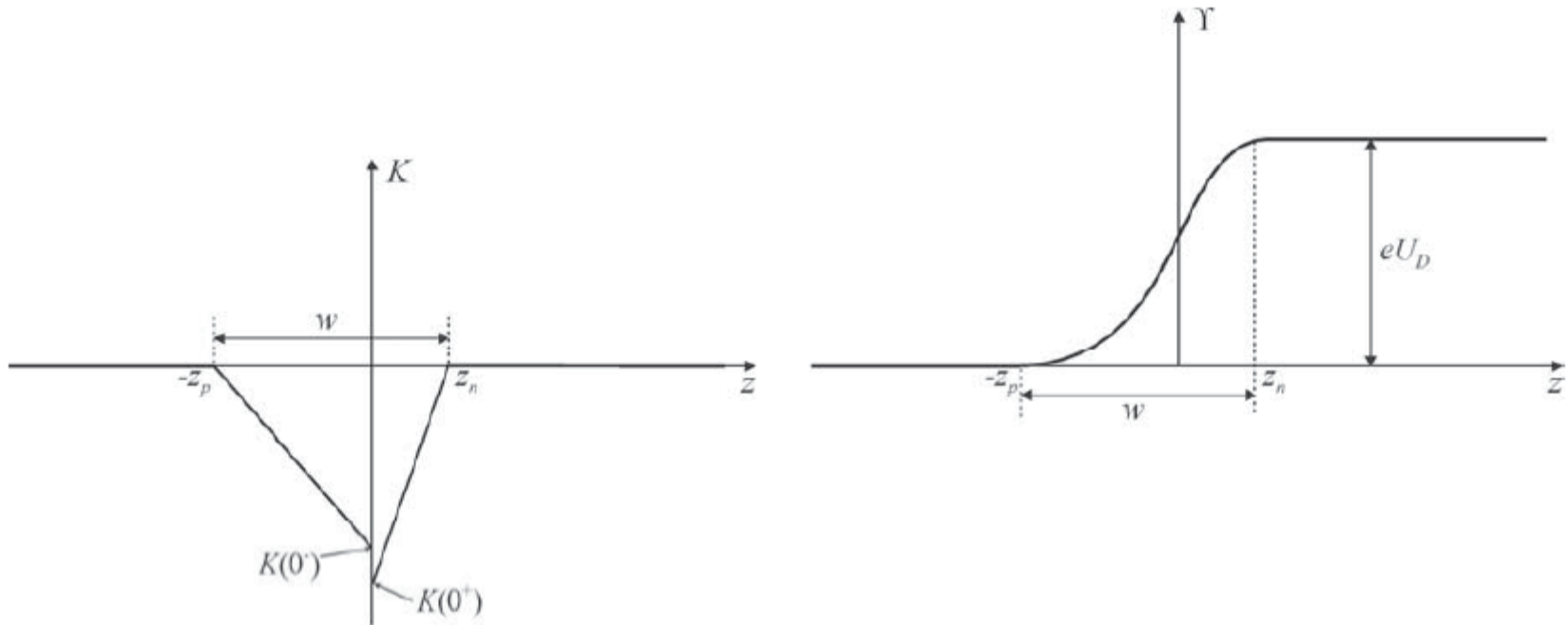
$$\frac{eP}{2\varepsilon_{r_1}\varepsilon_0}z_p^2 = -\frac{eN_D}{2\varepsilon_{r_2}\varepsilon_0}z_n^2 + U_D$$

$$Pz_p = N_D z_n$$

$$z_p = \sqrt{\frac{2U_D}{eP} \frac{1}{\frac{1}{\varepsilon_{r_1}\varepsilon_0} + \frac{P}{N_D\varepsilon_{r_2}\varepsilon_0}}}$$

$$z_n = \sqrt{\frac{2U_D}{eN_D} \frac{1}{\frac{N_D}{\varepsilon_{r_1}\varepsilon_0 P} + \frac{1}{\varepsilon_{r_2}\varepsilon_0}}}$$

- Električno polje $K(z)$ i elektrostatički potencijal:



- Diskontinuitet električnog polja na spoju je posledica različitih relativnih dielektričnih konstanti u materijalima.