

Βιβλιογραφία

- S. M. Sze, “Semiconductor Devices, Physics and Technology”
Wiley, NY, 1985
- B. G. Streetman, S. Banerjee, “Solid State Electronic Devices”
Prentice Hall, UK, 2000
- S. O. Kasap, “Principles of Electronic Materials and Devices”
McGraw Hill, NY, 2002
- P. S. Kireev, “Semiconductor Physics”, Mir, Moscow, 1978
- Ε. Ν. Οικονόμου, «Φυσική Στερεάς Κατάστασης», ΠΕΚ / ΙΤΕ
Τόμος Α (1997), σ.394-458. Τόμος Β (2003), σ. 171-192

ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΣΥΜΠΑΓΩΝ ΗΜΙΑΓΩΓΩΝ

ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΖΩΝΕΣ: Ζώνη αγωγιμότητας και ηλεκτρόνια
Ζώνη σθένους και οπές, Άμεσο-Έμμεσο Ενεργειακό Χάσμα,
Ενεργός μάζα ($m_t, m_l, m_{lh}, m_{hh}, m_{soh}$)
Πυκνότητα καταστάσεων
Ενεργός μάζα πυκν. καταστάσεων

ΟΜΟΓΕΝΕΙΣ ΗΜΙΑΜΙΑΓΩΓΟΙ

ΕΝΔΟΓΕΝΕΙΣ: Στάθμη Fermi, Συγκεντρώσεις φορέων: n, p
ΕΞΩΓΕΝΕΙΣ: Δότες – Αποδέκτες, Ενδοχασματικές
καταστάσεις, Στάθμη Fermi-Συγκεντρώσεις φορέων

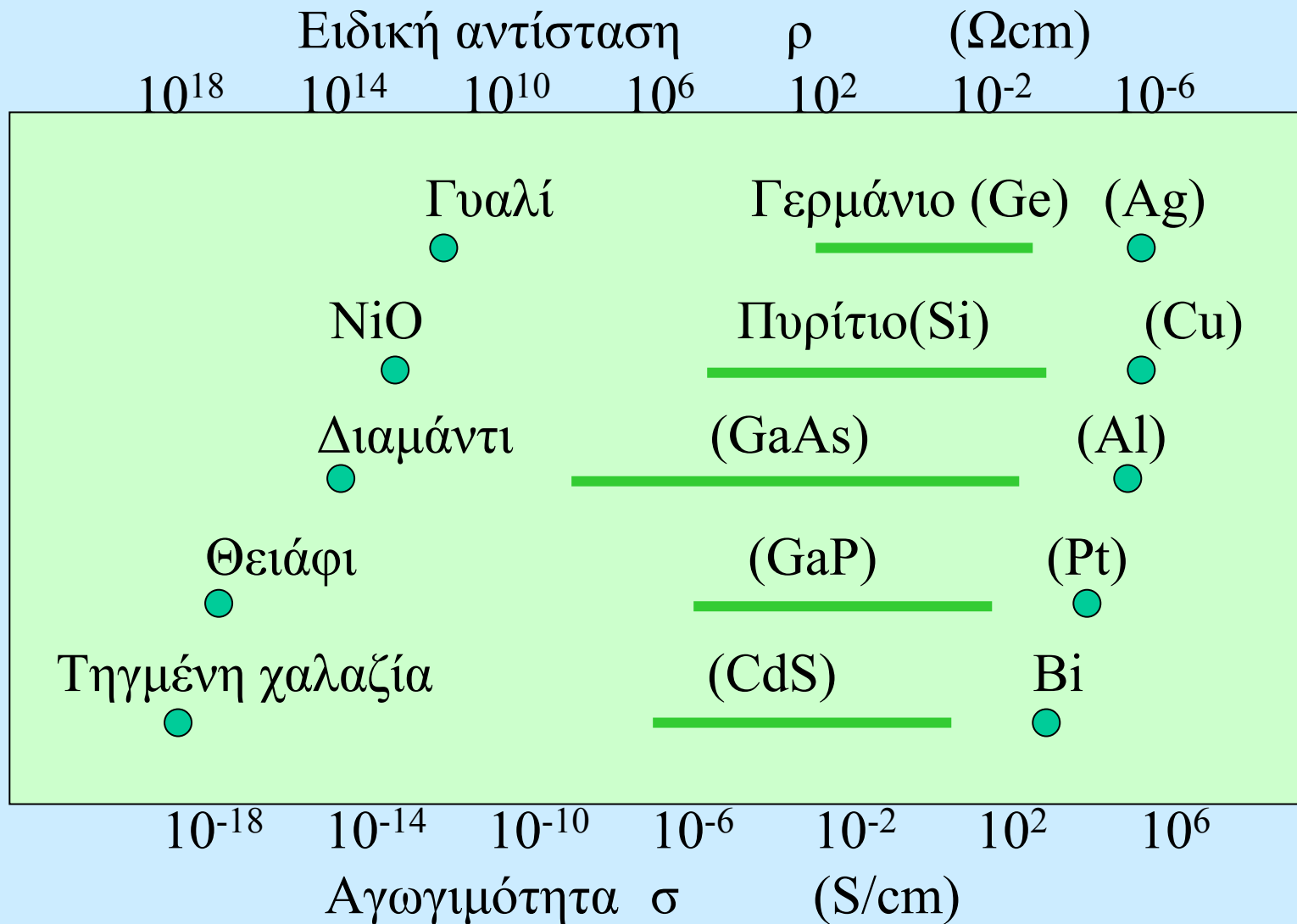
ΜΗ-ΟΜΟΓΕΝΕΙΣ ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ

Σε θερμοδυναμική ισορροπία (στάθμη Fermi)
Χωρική εξάρτηση των ενεργειακών ζωνών
Ευθυγράμμιση ενεργειακών ζωνών

Κατάταξη Υλικών ανάλογα με τις ηλεκτρικές τους ιδιότητες

Υλικά	Ειδ. Αντίσταση $\rho(\Omega\text{cm})$	Αγωγιμότητα $\sigma(\text{S/cm})$
Μονωτές	$10^{18} - 10^8$	$10^{-18} - 10^{-8}$
Ημιαγωγοί	$10^8 - 10^{-3}$	$10^{-8} - 10^3$
Αγωγοί	$10^{-3} - 10^{-8}$	$10^3 - 10^8$

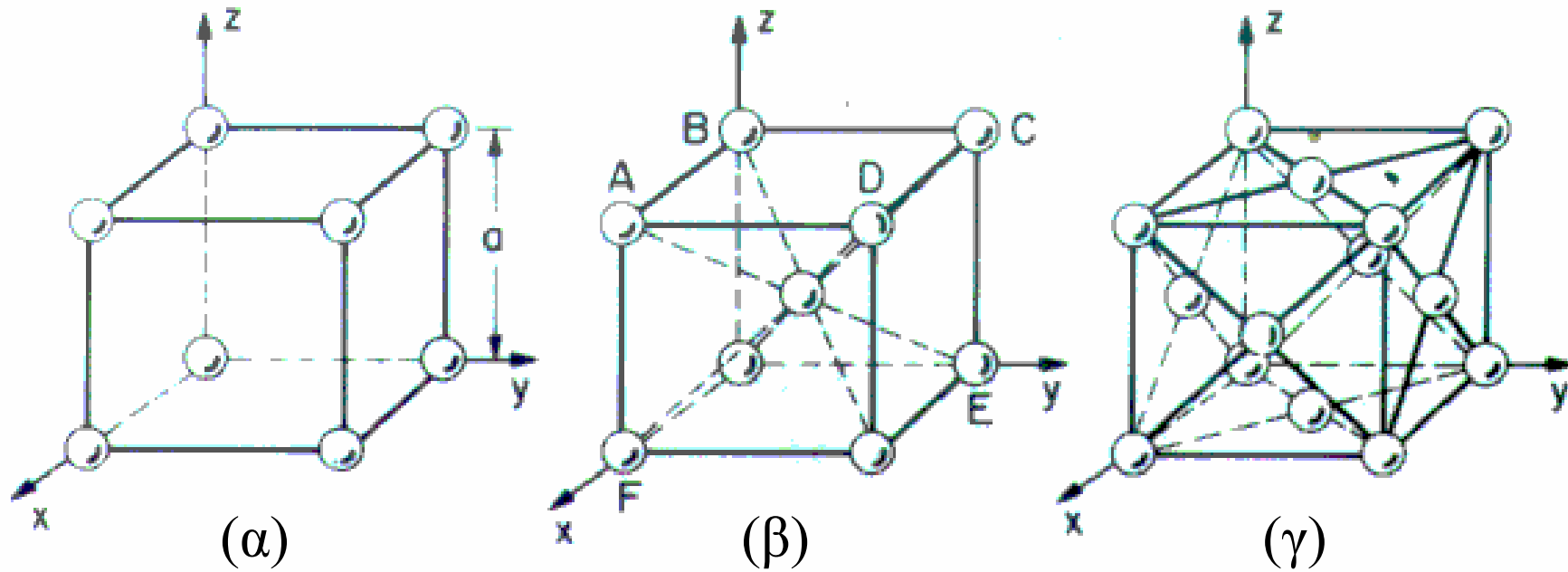
Τυπικές αγωγιμότητας διαφόρων υλικών (μονωτών, ημιαγωγών, αγωγών)



Η «περιοχή» των ημιαγωγών στον Περιοδικό Πίνακα

Περίοδος	Στήλη II	III	IV	V	VI
2		B	C	N	
3	Mg	Al	Si	P	S
4	Zn	Ga	Ge	As	Se
5	Cd	In	Sn	Sb	Te
6	Hg		Pb		

Μοναδιαίες Κυψελίδες τριών Κυβικών Κρυσταλλικών Συστημάτων

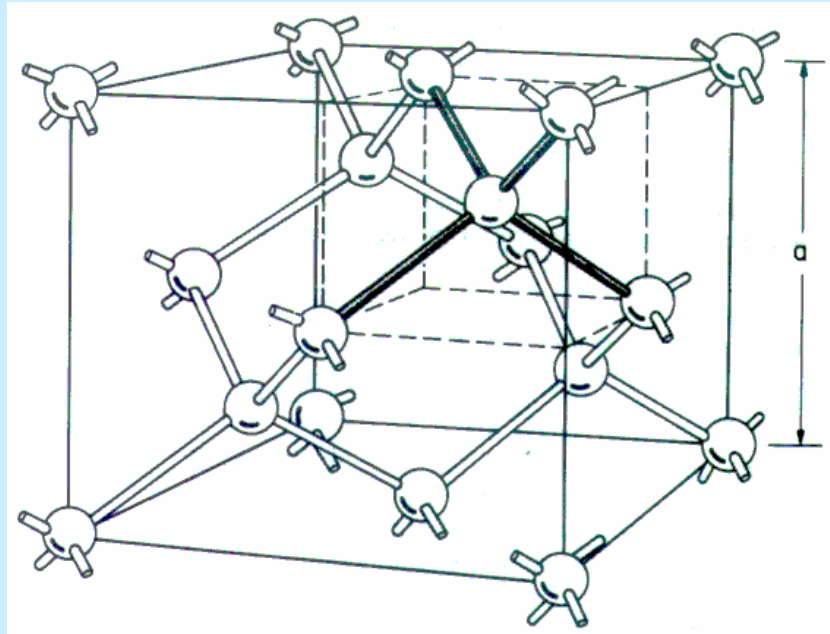


(α) Απλό Κυβικό (SC=Simple Cubic)

(β) Χωροκεντρωμένο Κυβικό (BCC=Body Centered Cubic)

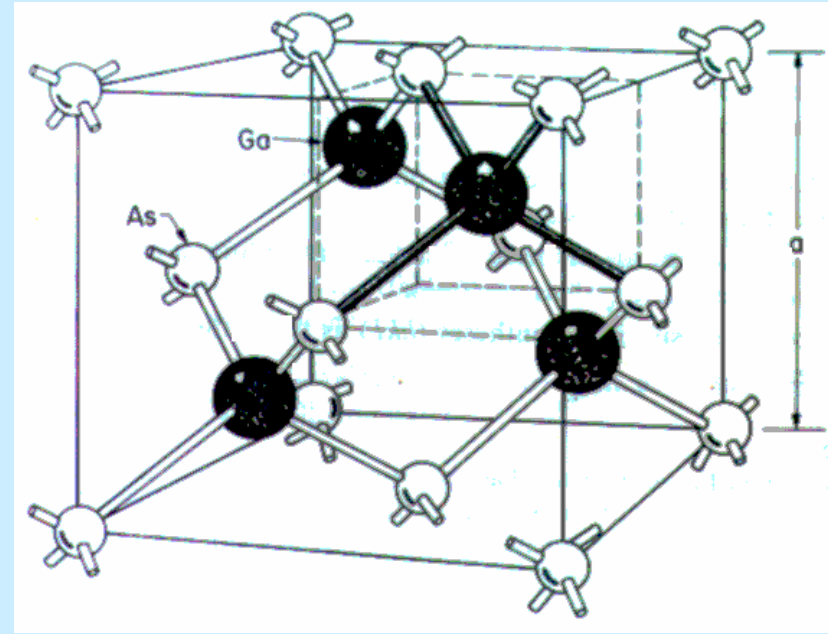
(γ) Εδροκεντρωμένο Κυβικό (FCC=Face Centered Cubic)

Η συνηθέστερες δομές
για τα περισσότερα ημιαγώγιμα υλικά



Δομή
Αδάμαντα :
FCC + Βάση

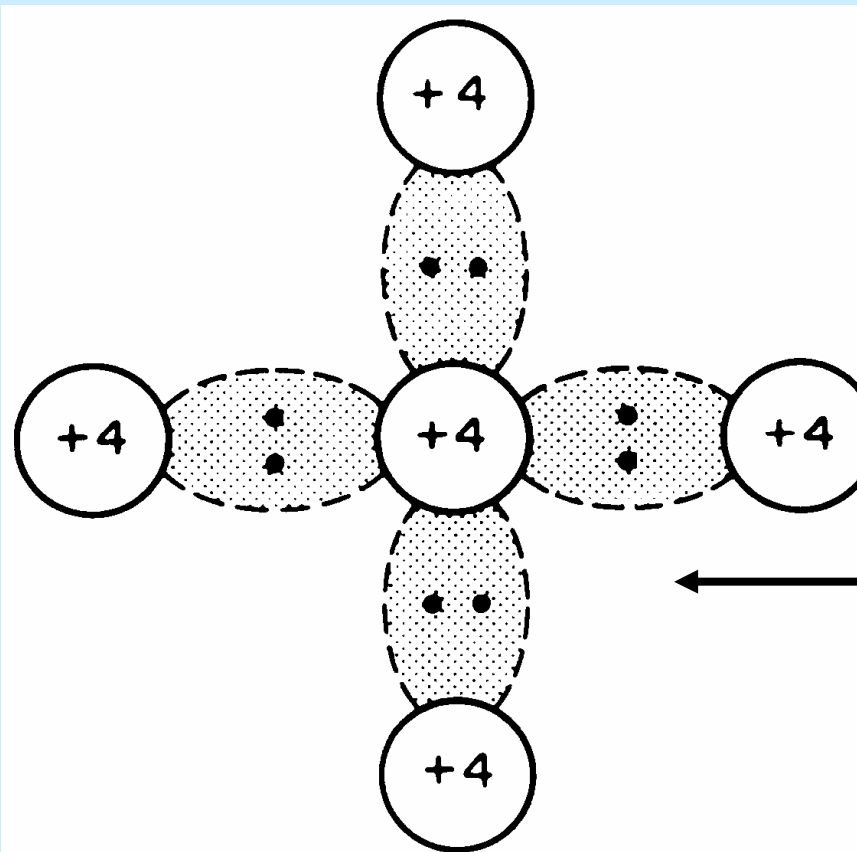
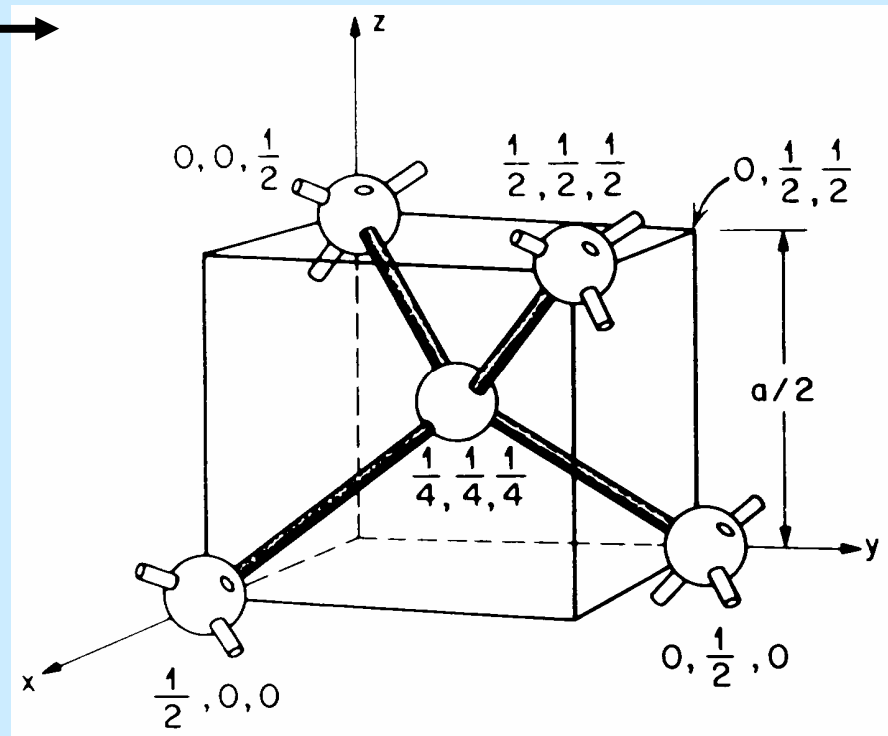
Βάση: Si (0, 0, 0)
Si ($\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$)



Δομή
Θειούχου Ψευδαργύρου :
FCC + Βάση

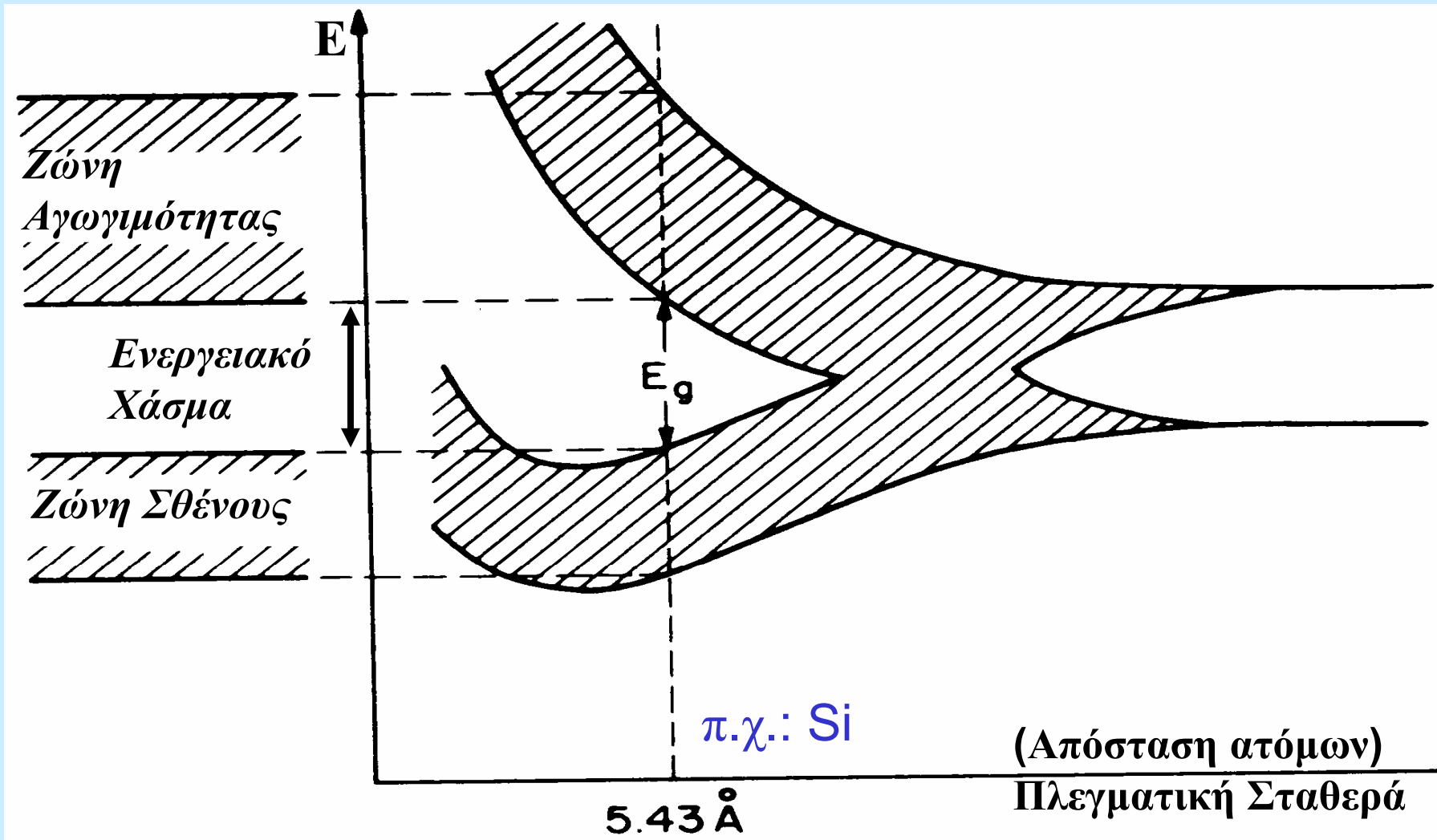
Βάση: As (0, 0, 0)
Ga ($\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$) ⁷

Το βασικό τετράεδρο
της Δομής Αδάμαντα
(κάθε άτομο + οι τέσσερεις
πλησιέστεροι γείτονες)



και η σχηματική του
αναπαράσταση
στο επίπεδο

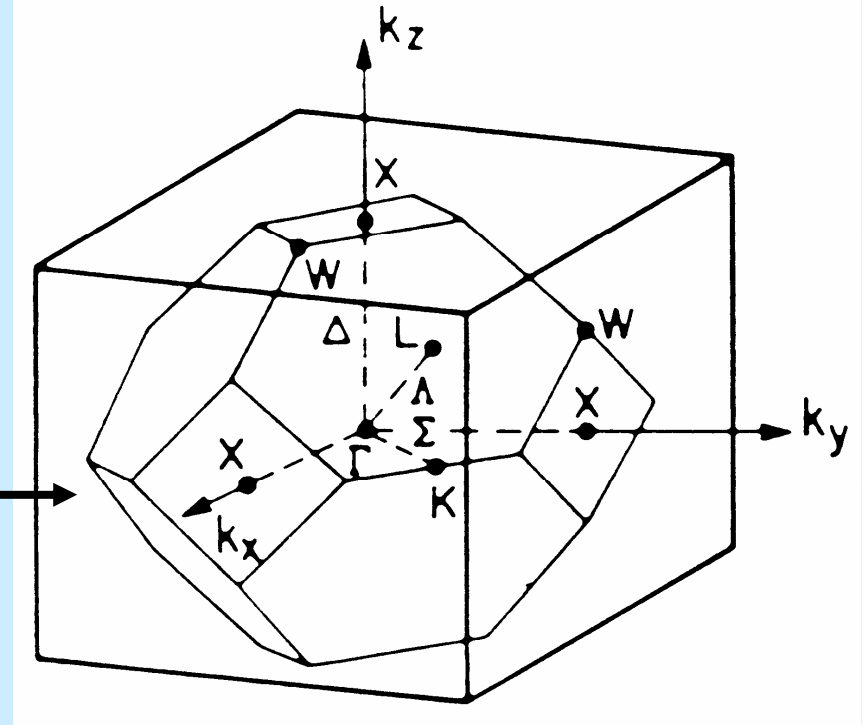
Συνέπειες, στην κίνηση των ηλεκτρονίων,
της αλληλεπίδρασης των ατομικών τροχιακών,
σε περιβάλλον συμπυκνωμένης ύλης



Συνέπειες της κρυσταλλικής
περιοδικότητας στην
Κίνηση των ηλεκτρονίων,



(1^η ZB)
του FCC



Εξάρτηση της ενέργειας, E ,
των ηλεκτρονίων Σθένους και Αγωγιμότητας,
(Δεσμικών και Ελευθέρων), από τον προσανατολισμό
Της κρυσταλλικής ορμής \mathbf{k} , κατά μήκος χαρακτηριστικών
αξόνων του αντιστρόφου Χώρου, στο εσωτερικό της
πρώτης Ζώνης Brillouin (1^η ZB) :

Σχέσεις Διασποράς

$$E_V = E_V(\mathbf{k}), \quad E_C = E_C(\mathbf{k}),$$



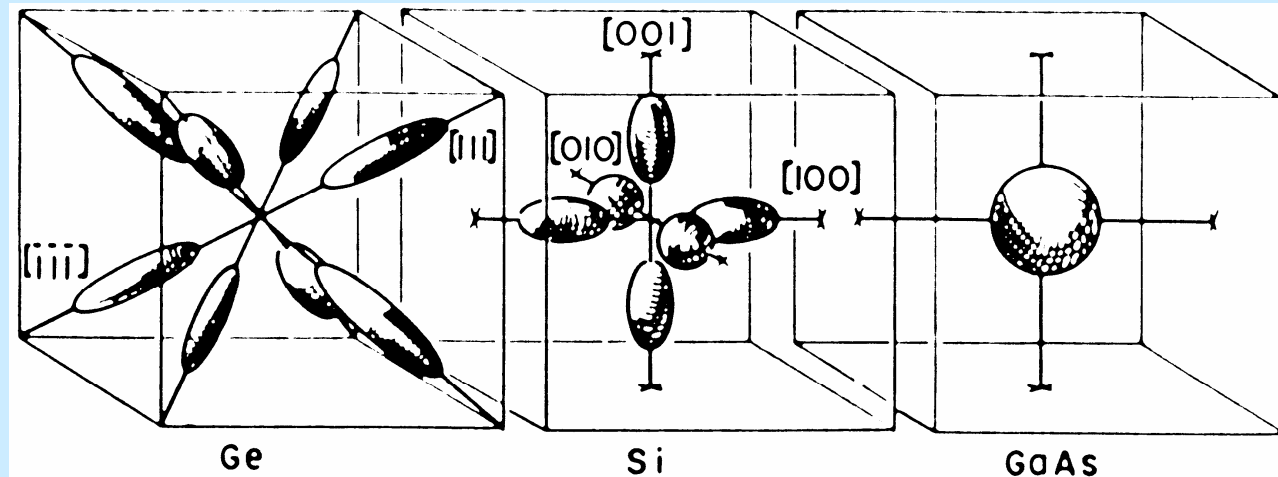
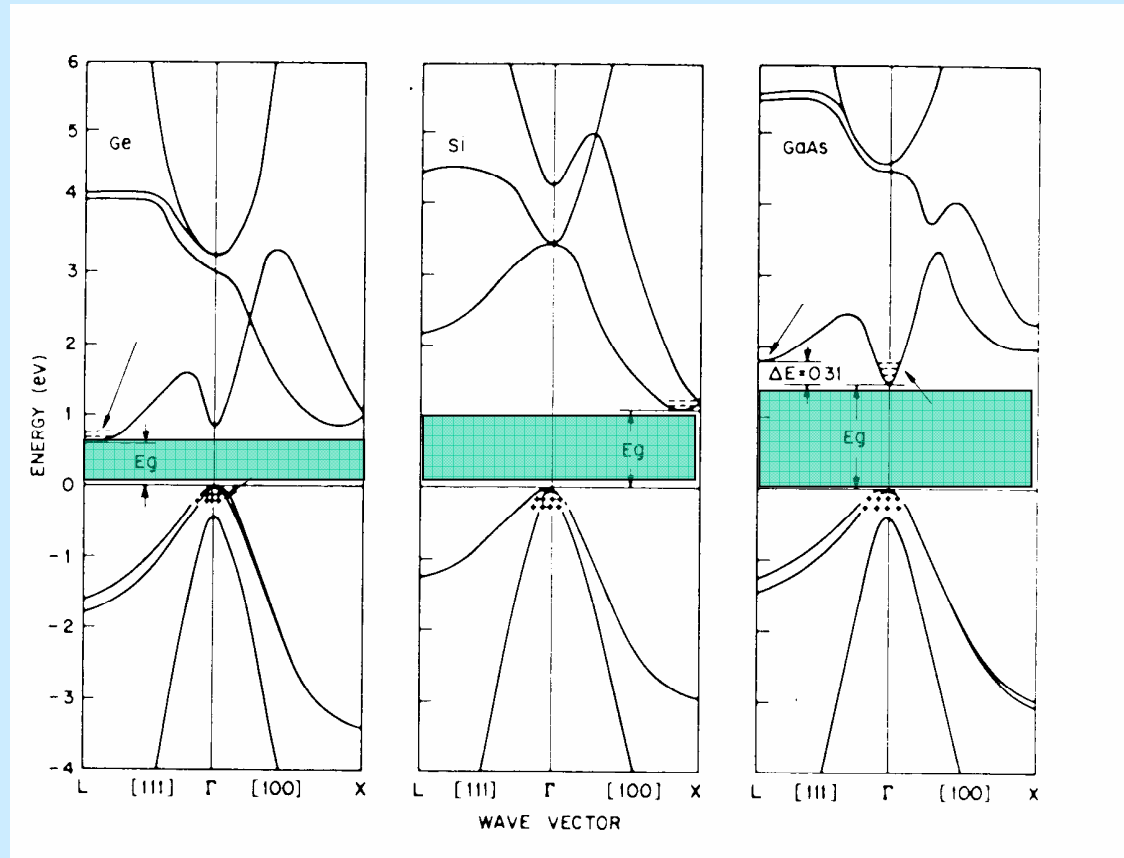
Γενικά Χαρακτηριστικά των Σχέσεων Διασποράς:

- 1) Οι σχέσεις: $E_V = E_V(\mathbf{k})$, $E_C = E_C(\mathbf{k})$,
παρουσιάζουν ακρότατα σε σημεία-, ή κατά-
μήκος-διευθύνσεων-, υψηλής συμμετρίας
- 2) Η υψηλότερη πλήρως κατηλλημένη ζώνη (Z. Σθένους)
παρουσιάζει ακρότατο: $E_{V,\max} = E_V(\mathbf{k}=0)$,
- 3) Η αμέσως επόμενη (ενεργειακά), μετά την Z. Σθένους,
(Ζώνη Αγωγιμότητας) μπορεί να έχει ελάχιστο
είτε $E_C = E_C(\mathbf{k}=0)$: Άμεσο ενεργειακό χάσμα
είτε $E_C = E_C(\mathbf{k} \neq 0)$: Έμμεσο ενεργειακό χάσμα

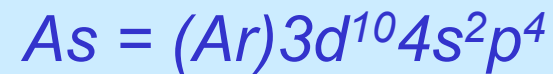
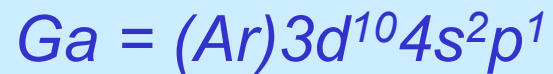
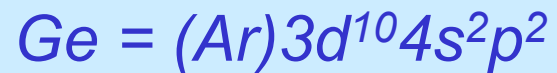
Παραδείγματα: Σχέσεων Διασποράς

Ενεργειακών Χασμάτων

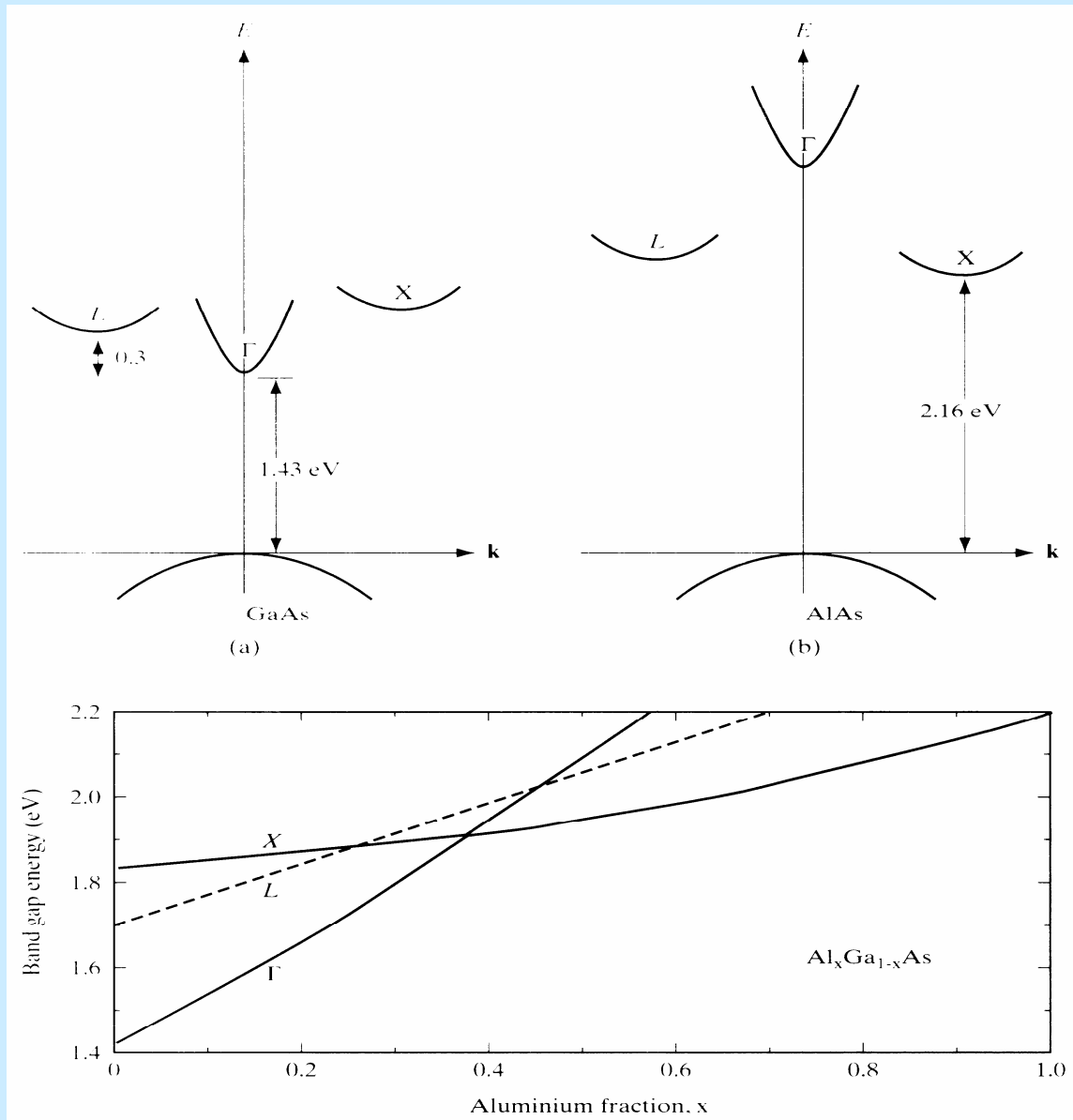
Ισοενεργιακών Επιφανειών στον αντίστροφο χώρο



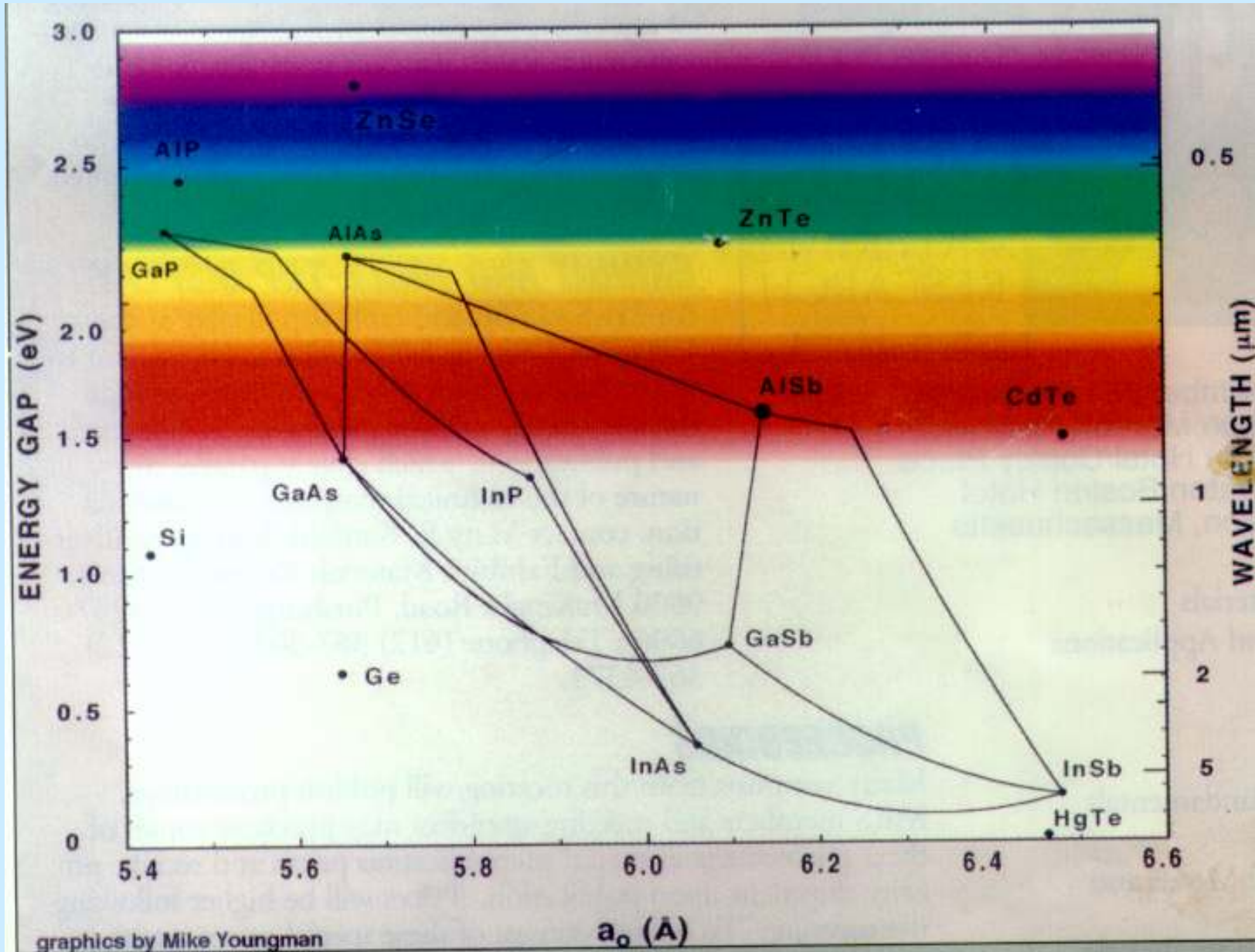
*Ηλεκτρονιακή Ατομική Δομή τριών χαρακτηριστικών
Ημιαγώγιμων υλικών*



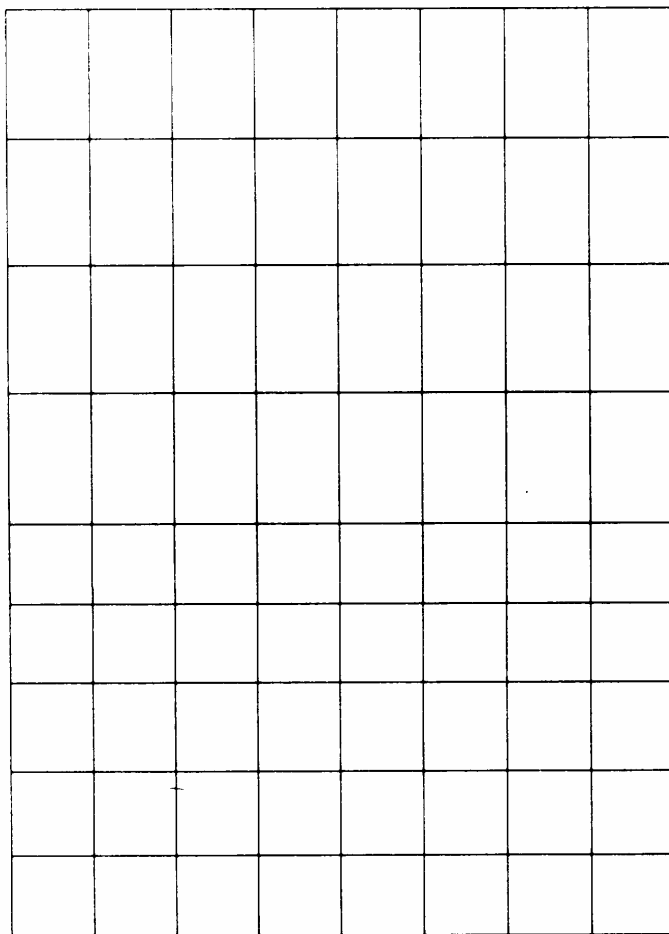
Επιλογή Ενεργειακού Χάσματος Τύπου και Μεγέθους



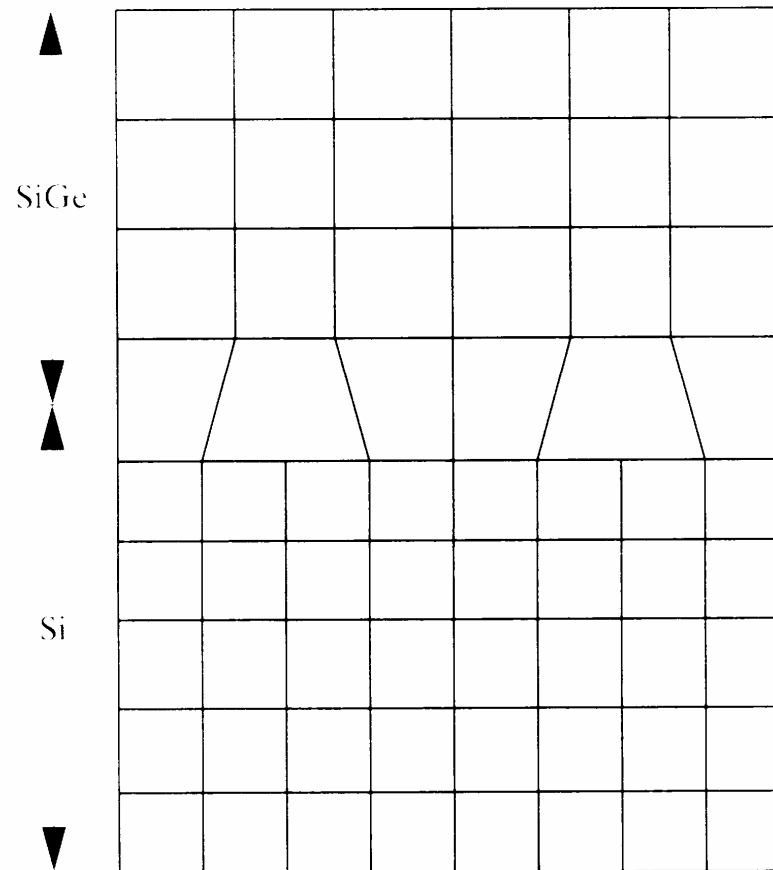
Σχέση Πλεγμ. Σταθεράς και Ενεργειακού Χάσματος



Προσαρμογή Πλεγματικών Σταθερών

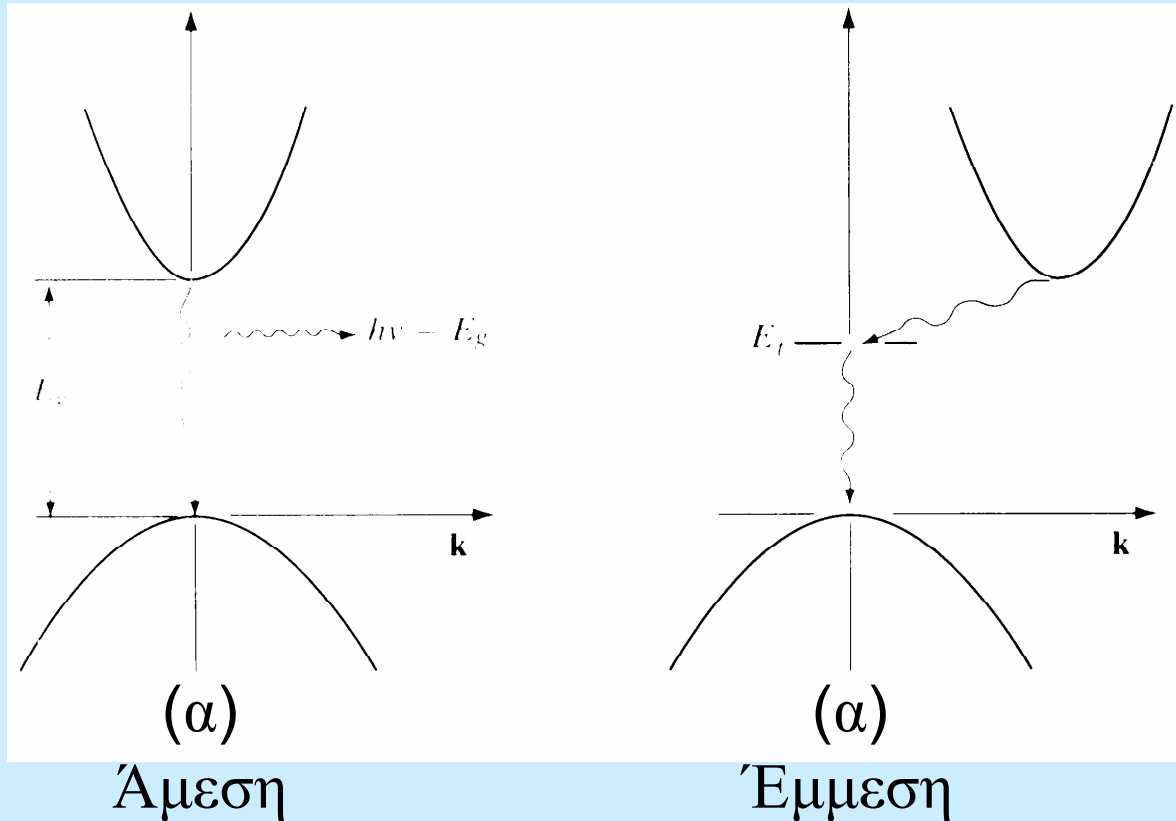


$t < t_c$



$t > t_c$

Προσδιορισμός της τιμής E_g (Energy gap=ενεργειακό χάσμα)
και του είδους $E_{g,d}$, $E_{g,ind}$ του ενεργειακού χάσματος
 (d=direct=άμεσο, ind=indirect=έμμεσο)
 ΜΕ ΟΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΥΣ (ΦΑΣΜ/ΠΙΑ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ)

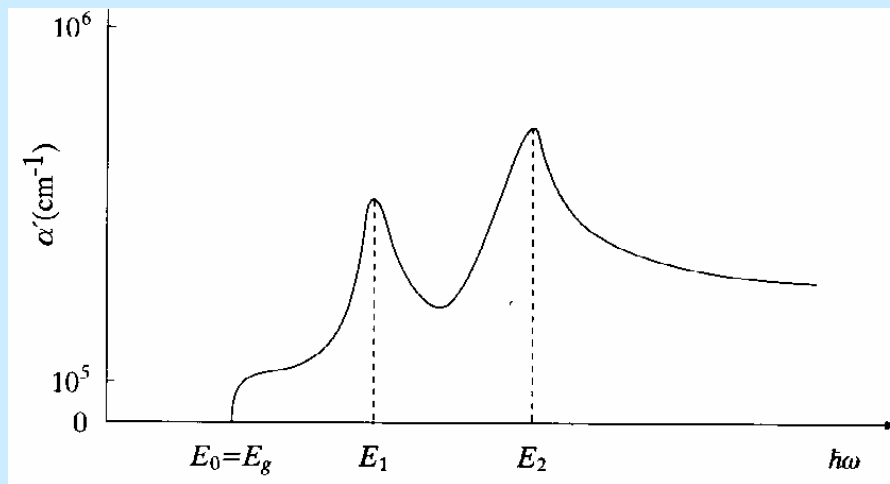


Οπτικές διαζωνιακές μεταβάσεις:

Απορρόφηση \Rightarrow Διέγερση
 Αποδιέγερση \Rightarrow Εκπομπή¹⁷

Υπολογισμός της «σταθεράς» οπτικής απορρόφηση: α συναρτήσει της ενέργειας του προσπίπτοντος φωτονίου

$$\alpha \propto (\hbar\omega - E_{g,d})^{1/2}, \hbar\omega \geq E_{g,d} \quad \alpha \propto (\hbar\omega - E_{g,ind})^2, \hbar\omega \geq E_{g,ind}$$

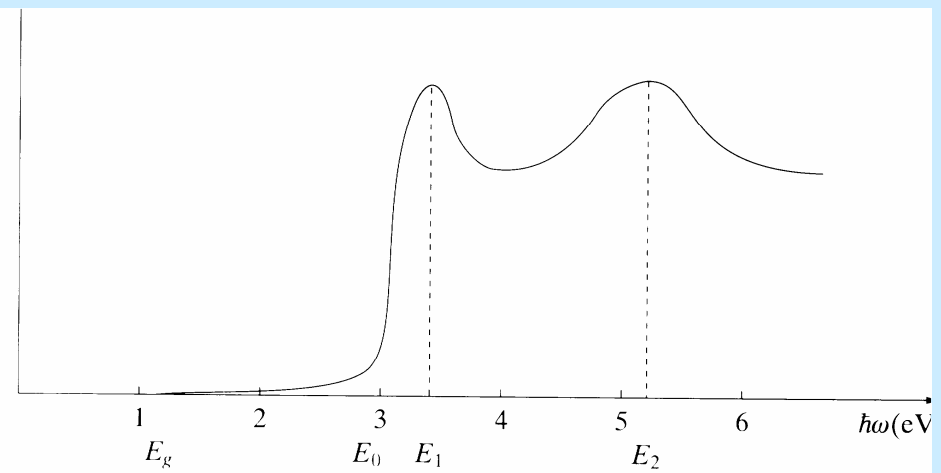


Άμεσο χάσμα (π.χ. GaAs)

$$E_0 = E_{g,d} \approx 1.4 \text{ eV}$$

$$E_1 \approx 3 \text{ eV}$$

$$E_2 \approx 5 \text{ eV}$$



Έμμεσο χάσμα (π.χ. Si)

$$E_0 = E_{g,ind} \approx 1.1 \text{ eV}$$

$$E_1 \approx 3.3 \text{ eV}$$

$$E_2 \approx 5 \text{ eV}$$

Ενεργειακή Συμπεριφορά των ηλεκτρονίων
κοντά στο ελάχιστο της Ζώνης Αγωγιμότητας

$$E_c(k_x, k_y, k_z) = E_c(k_{x0}, k_{y0}, k_{z0}) + \frac{1}{1!} \left(\vec{\nabla}_{\vec{k}} E_c(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}_0} \right) \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) \\ + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 E_c}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j})$$

Αλλά, στο ακρότατο: $\nabla_{\vec{k}} E_c(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}_0} = 0$

Και,

όταν οι άξονες k_x, k_y, k_z συμπίπτουν με άξονες συμμετρίας της ζώνης Brillouin : $\frac{\partial^2 E_c}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\vec{k}_0} = 0$, για $i \neq j$

Άρα:

$$E_c(k_x, k_y, k_z) = E_c(k_{x0}, k_{y0}, k_{z0}) + \frac{1}{2!} \sum_i \frac{\partial^2 E_c}{\partial k_i^2} \Big|_{\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})^2$$

Αν ορίσουμε τον τανυστή ενεργού μάζας ηλεκτρονίου ως :

$$\left(\frac{1}{m^*(\vec{k}_0)} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_c}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\vec{k}_0}$$

Όταν οι άξονες k_x, k_y, k_z συμπίπτουν με άξονες συμμετρίας της ζώνης Brillouin: (όλα τα μη διαγώνια στοιχεία μηδενίζονται)

$$\left(\frac{1}{m^*(\vec{k}_0)} \right)_{\substack{xx \\ yy \\ zz}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_c}{\partial k_x^2} \Big|_{\vec{k}_0}$$

Οπότε, η διαφορά ενέργειας, ως προς το ακρότατο, γράφεται:

$$E_c(\vec{k}) - E_c(\vec{k}_0) = \frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial^2 E_c}{\partial k_i^2} \Big|_{\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})^2 = \sum_{i=x,y,z} \frac{\hbar^2 (k_i - k_{0i})^2}{2m_{e,i}^*}$$

ΔΗΛΑΔΗ: τα ηλεκτρόνια που διεγείρονται κοντά στο ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας συμπεριφέρονται ως ελεύθερα ηλεκτρόνια ($E = p^2/2m^*$), αλλά με «ενεργό μάζα» $m^* \neq m_0$, όπου m_0 η μάζα του ελεύθερου ηλεκτρονίου

Συγκεκριμένα (βλ. Διαφάνεια 18):

A) στην περίπτωση του άμεσου ενεργειακού χάσματος, (π.χ., GaAs), $k_0=0$, και οι ισοενεργειακές επιφάνειες είναι σφαίρες, άρα: $m_{e,x}^* = m_{e,y}^* = m_{e,z}^* = m_e^*$, και :

$$E_c(\vec{k}) = E_c(\vec{k}_0 = 0) + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

B1) στην περίπτωση του έμμεσου ενεργειακού χάσματος, του Si, όπου $k_0=(0,0,k_0)$, υπάρχουν 6 ισοδύναμα σημεία στην 1^η Z. Brillouin : $(0,0,\pm k_0)$, $(0,\pm k_0, 0)$, $(\pm k_0,0,0)$, και οι ισοενεργειακές επιφάνειες είναι ελλειψοειδή εκ περιστροφής, άρα: $m_{e,x}^* = m_{e,y}^* = m_T^*$, $m_{e,z}^* = m_L^*$, και :

$$E_c(\vec{k}) = E_c(\vec{k}_0 = 0) + \frac{\hbar^2}{2m_T^*} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_L^*} (k_z - k_0)^2$$

B2) στην περίπτωση του έμμεσου ενεργειακού χάσματος, του Ge, όπου $k_0=(k_0,k_0,k_0)/\sqrt{3}$, υπάρχουν 8 ισοδύναμα σημεία στην 1^η Z. Brillouin :

$$(k_0,k_0,k_0), (-k_0,k_0,k_0), (k_0,-k_0,k_0), (-k_0,-k_0,k_0)$$

$$(k_0,k_0,-k_0), (-k_0,k_0,-k_0), (k_0,-k_0,-k_0), (-k_0,-k_0,-k_0),$$

οι ισοενεργειακές επιφάνειες είναι ελλειψοειδή εκ περιστροφής, η μαθηματική έκφραση των οποίων απλοποιείται όταν αναφέρεται ως προς τοπικό σύστημα αναφοράς παράλληλο στον κύριο και τους δευτερεύοντες άξονες του κάθε ελλειψοειδούς, οπότε: $m^*_{e,x} = m^*_{e,y} = m^*_T$, $m^*_{e,z} = m^*_L$.

Υλικό	k_0	(m_L/m_0)	(m_T/m_0)
Si	0,85X	0.92	0.19
Ge	1,00L	1.58	0.081
GaAs	Γ	0.067	0.067
GaP	0.92X	7.25	0.21

Παρόμοια, στη Ζώνη Σθένους, (όπου: $k_0=0$, και $E_v(k_0=0)=0$), οι ισοενεργειακές επιφάνειες είναι σφαίρες, οπότε :

$$m_{h,x}^* = m_{h,y}^* = m_{h,z}^* = m_h^*, \text{ και}$$

$$E_v(\vec{k}) = \frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} \left. \frac{\partial^2 E_v}{\partial k_i^2} \right|_{\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})^2 = \hbar^2 \frac{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}{2m_h^*}$$

όπου, η ενεργός μάζα των οπών m_h^* (h=holes) είναι αρνητική, όπως προκύπτει από την παράγωγο της σχέσης διασποράς

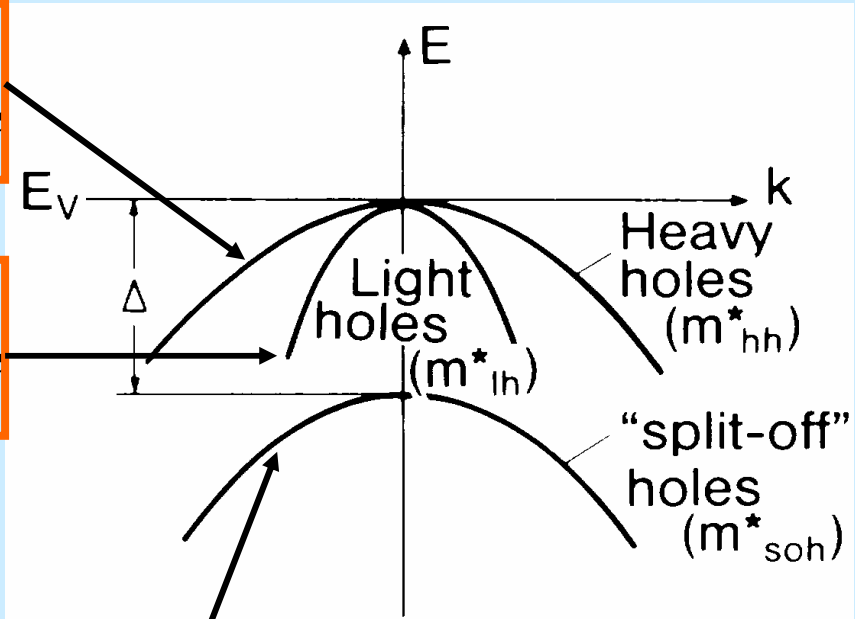
ΔΗΛΑΔΗ: τα θετικά φορτία που απομένουν στην Ζ. Σθένους, μετά την διέγερση ηλεκτρονίου, συμπεριφέρονται ως «ελεύθερες οπές» ($E=p^2/2m_h^*$), αλλά με αρνητική «ενεργό μάζα» $m_h^* \neq m_0$.

Αλλά : Αντίθετα με τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας, των οποίων το spin δεν αλληλεπιδρά με τροχιακά χαρακτηριστικά, (ακριβέστερα: αλληλεπιδρά με μη-εκφυλισμένα τροχιακά τύπου S), οι οπές στη Ζώνη Σθένους, [3-πλά εκφυλισμένη, (τύπου-p) χωρίς spin], [6-πλά εκφυλισμένη, συμπεριλαμβάνοντας το spin], υπόκεινται σε αλληλεπίδραση spin-τροχιάς, η οποία αίρει εν μέρει τον 6-πλό εκφυλισμό. Οπότε:

$$E_{hh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}$$

$$E_{lh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}}$$

$$E_{soh} = -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{soh}}$$



J=3/2
 Εκφυλισμός:4
 hh:↑↓
 lh:↑↓

J=1/2, Εκφυλισμός:2, soh:↑↓

(hh=heavy hole) Βαρειές Οπές,
(lh=light hole) Ελαφρειές Οπές

spin-orbi=spin-τροχιά

soh=spin – orbit hole

Δ =Ενέργεια διαχωρισμού spin-τροχιάς

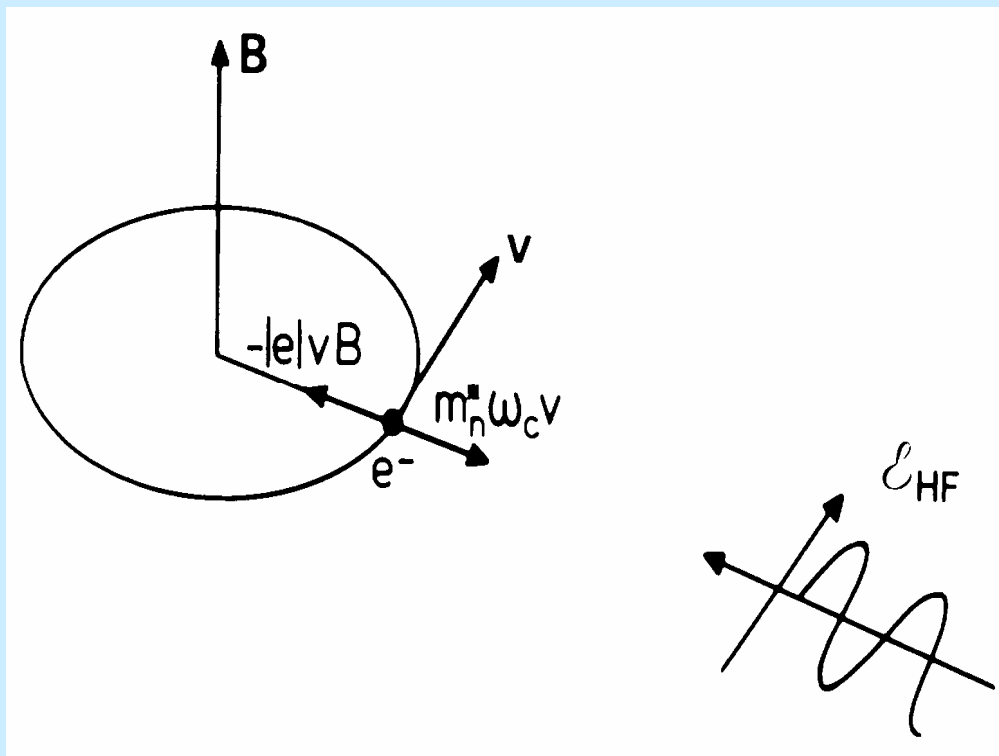
Υλικό	m_e/m_0	m_{hh}/m_0	m_{lh}/m_0	m_{soh}/m_0	$\Delta(\text{eV})$
Si	$k \neq 0$	0.54	0.15	0.24	0.04
Ge	$k \neq 0$	0.28	0.04	0.09	0.29
GaAs	0.067	0.45	0.082	0.15	0.34
GaP	$k \neq 0$	0.67	0.17	-	0.08

Προσδιορισμός των ισο-ενεργειακών επιφανειών
Στην περιοχή ακροτάτων του αντίστροφου χώρου



Προσδιορισμός των ενεργών μαζών

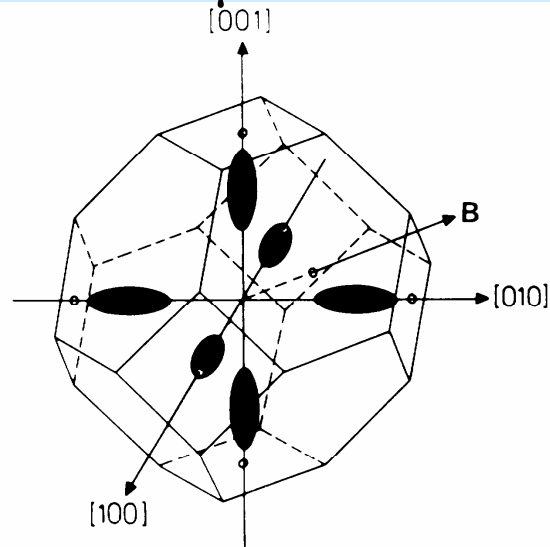
ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ ΚΥΚΛΟΤΡΟΝΙΚΟΥ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ



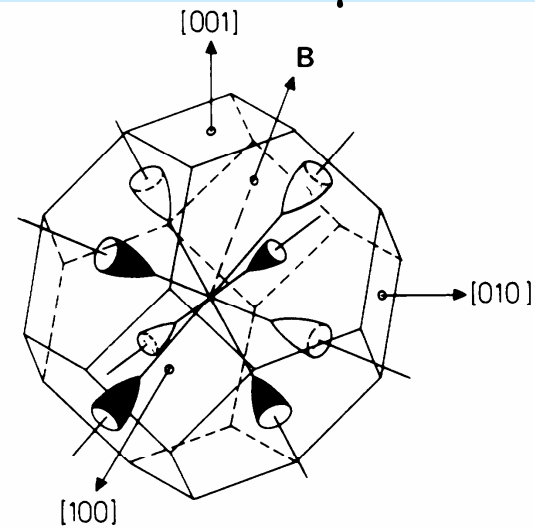
Απορρόφηση
υψηλής-AC
συναρτήσεως
στατικού Μαγ.Π: B

Αύξηση απορρόφησης
Όταν η συχνότητα του AC
Συμπίπτει με την
Κυκλοτρονική
συχνότητα
 $\omega_c = -eB/m^*$

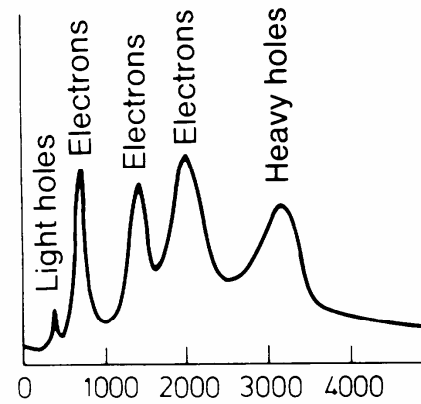
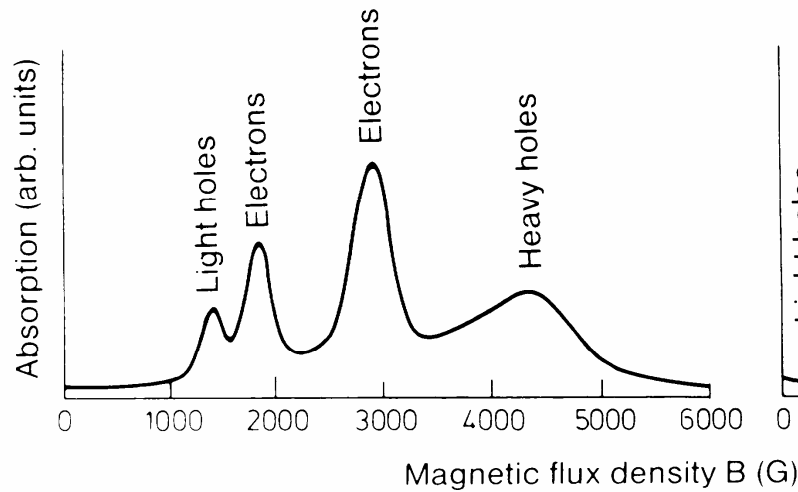
Αποτελέσματα Κυκλοτρονικού Συντονισμού



Silicon



Germanium



$$\mathbf{B} = (B \cos 30^\circ, B \sin 30^\circ, 0)$$

Εξιτόνιο (Exciton)

Το ηλεκτρόνιο και η οπή (ως ετερόσημα φορτία) έλκονται



Σχηματίζουν υδρογονοειδές συγκρότημα, όταν :

$$\nabla_{\vec{k}} E_C(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} E_V(\vec{k}) : (\text{Κοινή ταχύτητα ομάδας})$$

$$\text{ΟΠΟΤΕ: } E_{ex} = E_g - \frac{g}{n^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)}$$

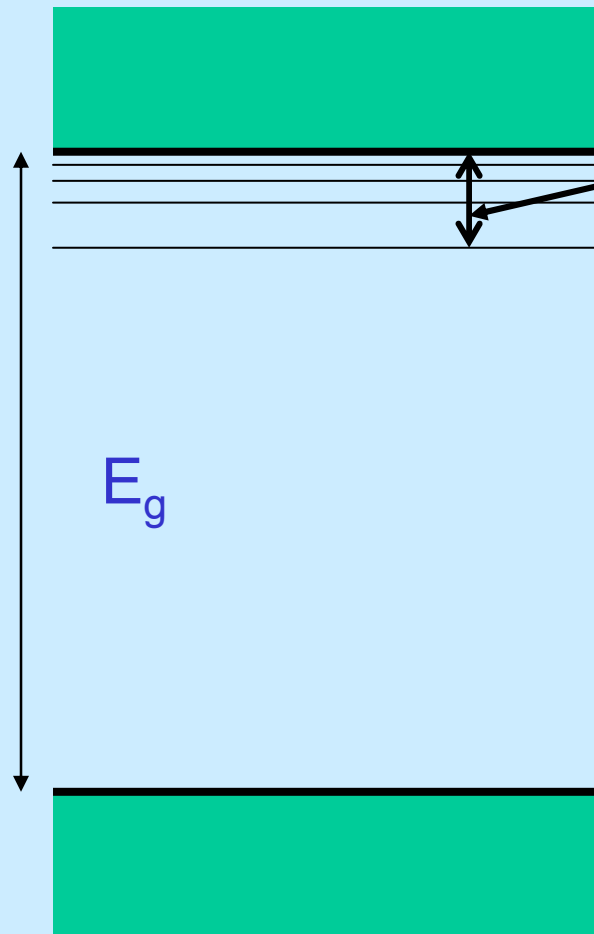
$$g = \left(\frac{\mu}{\epsilon_\infty^2} \right) \left(\frac{e^4}{2\hbar^2} \right) = \left(\frac{\mu}{\mu_H \epsilon_\infty^2} \right) E_H, \quad \mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$$

E_H, μ_H : Ενέργεια σύνδεσης και ανηγμένη μάζα του Υδρογόνου

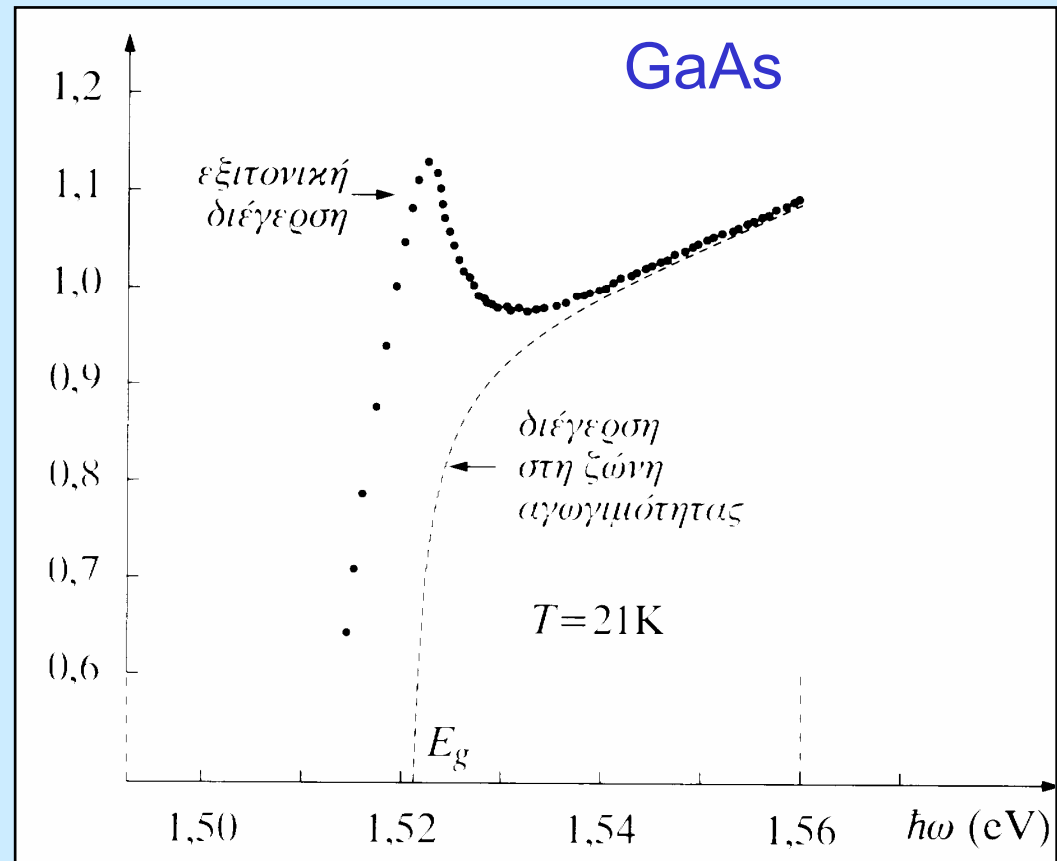
Frenkel Excitons: Μέση ακτίνα εξιτονίου \approx ατομική απόσταση

Wannier-Mott Exc.: Μέση ακτίνα εξ/νίου $>$ ατομικής απόστασης

Εξιτονικές καταστάσεις και οπτική απορρόφηση



Ενέργεια σύνδεσης εξιτονίου



Για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης φορέων:

[πυκνότητα φορέων=πυκνότητα καταστάσεων×πιθανότητα κατάληψης]

$$n = \int_{E_{c,\min}}^{E_{c,\max}} g_n(E) f_{n,F-D}(E) dE$$

$$p = \int_{E_{v,\min}}^{E_{v,\max}} g_p(E) f_{p,F-D}(E) dE = \int_{E_{v,\min}}^{E_{v,\max}} g_p(E) [1 - f_{n,F-D}(E)] dE$$

πρέπει να γνωρίζουμε

την πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων

για τα ηλεκτρόνια : $g_n(E) = dN_e/(dEdV)$

και για τις οπές : $g_p(E) = dN_p/(dEdV)$

Υπολογισμός της Πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων

Σε σύστημα :

$$1\text{-Διάστασης (1-D)} : L_1 \quad L_1 = n_1 \lambda_x \Rightarrow dp_x = h/L_1$$

$$2\text{-Διαστάσεων (2-D)} : L_1 L_2 \quad L_2 = n_2 \lambda_y \Rightarrow dp_y = h/L_2$$

$$3\text{-Διαστάσεων (3-D)} : L_1 L_2 L_3 \quad L_3 = n_3 \lambda_z \Rightarrow dp_z = h/L_3$$

↑

Κυκλικές Οριακές Συνθήκες

Άρα: για συστήματα μοναδιαίας «έκτασης», $L_1 = L_2 = L_3 = 1$,
η ελάχιστη κυψελίδα ανά κατάσταση στο χώρο των ορμών
είναι, αντίστοιχα

$$\Rightarrow dp_x = h, \quad dp_x dp_y = h^2, \quad dp_x dp_y dp_z = h^3,$$

\Rightarrow «Έκταση», στο χώρο των ορμών, μεταξύ p και $p+dp$

$$\Rightarrow 1\text{-D}: dp, \quad 2\text{-D}: 2\pi p dp, \quad 3\text{-D}: 4\pi p^2 dp,$$

\Rightarrow Αριθμός καταστάσεων μεταξύ p και $p+dp$

$$\Rightarrow 1\text{-D}: dp/h, \quad 2\text{-D}: 2\pi p dp/h^2, \quad 3\text{-D}: 4\pi p^2 dp/h^3,$$

Για να υπολογισθεί ο αριθμός καταστάσεων μεταξύ $(E, E+dE)$,
Πρέπει:

1) Να υπολογιστεί η γεωμετρία της ισοενεργειακής επιφάνειας $E=\text{σταθ.}$, στο χώρο των ορμών, κοντά στο k_0 , όπου k_0 , σημείο ακροτάτου (min, max) της ζώνης (E_c, E_v) αντίστοιχα

2) Να υπολογισθεί, συναρτήσει της ενέργειας, η διαφορική «έκταση» (1-D:μήκος, 2-D:επιφάνεια, 3-D:όγκος) ανάμεσα στις ισοενεργειακές επιφάνειες, $E=\text{σταθ.}$ και $E=\text{σταθ.}+dE$, στο χώρο των ορμών

3) Να διαιρεθεί ο διαφορικός όγκος με την ελάχιστη «κυψελίδα ανά κατάσταση» του χώρου των ορμών, (ανάλογα με τις διαστάσεις του συστήματος), και με το διαφορικό dE

4) Το αποτέλεσμα της διαίρεσης, επί τον αριθμό M των ισοδυνάμων ακροτάτων, είναι η πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα όγκου και ενέργειας $g(E)=M[dN/(dVdE)]$

[Άμεσο Χάσμα, π.χ. GaAs: $M=1$,

Έμμεσο Χάσμα. Π.χ. Si: $M=6$, Ge: $M=8 \times (1/2)=4$ (βλ. σ. 11, 17, 29)]

Εφαρμογή: Ζώνης Αγωγιμότητας - Άμεσο Χάσμα

$$3\text{-D}:= dN(E, E+dE) = 4\pi p^2 dp / h^3,$$

$$p^2 = 2m(E - E_{c, \min}), \quad dp = mdE/p = mdE/[2m((E - E_{c, \min}))^{1/2}]$$

Συνυπολογίζοντας εκφυλισμό ($\times 2$) λόγω spin:

$$g_n(E) \equiv 2 \frac{dN(E, E + dE)}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{\hbar^3} (E - E_{c, \min})^{1/2}$$

$$2\text{-D}:= dN(E, E+dE) = 2\pi p dp / h^2, \quad p = [2m(E - E_{c, \min})]^{1/2},$$

Συνυπολογίζοντας εκφυλισμό ($\times 2$) λόγω spin:

$$g_n(E) \equiv 2 \frac{dN(E, E + dE)}{dE} = \frac{1}{2\pi} \frac{(2m_e^*)}{\hbar^2}$$

$$1\text{-D}:= dN(E, E+dE) = dp / h, \quad dp = mdE/p = mdE/[2m((E - E_{c, \min}))^{1/2}]$$

Συνυπολογίζοντας εκφυλισμό ($\times 2$) λόγω spin:

$$g_n(E) \equiv 2 \frac{dN(E, E + dE)}{dE} = \frac{1}{2\pi} \frac{(2m_e^*)^{1/2}}{\hbar} (E - E_{c, \min})^{-1/2}$$

Εφαρμογή: Ζώνης Αγωγιμότητας - Έμμεσο Χάσμα

3-D: Έστω ότι έχουμε τρεις διαφορετικές ενεργές μάζες (μηδενικά μη-διαγώνια στοιχεία, με κατάλληλη επιλογή του συστήματος αναφοράς στον αντίστροφο χώρο)

$$E = E_{c,\min} + \frac{(p_x - p_{x0})^2}{2m_x^*} + \frac{(p_y - p_{y0})^2}{2m_y^*} + \frac{(p_z - p_{z0})^2}{2m_z^*}$$

Οι ισοενεργειακές επιφάνειες είναι ελλειψοειδή, με όγκο αναλλοίωτο σε αλλαγή της αρχής των αξόνων ($p_{x0}=p_{y0}=p_{z0}=0$)

$$\frac{p_x^2}{2m_x^*(E - E_{c,\min})} + \frac{p_y^2}{2m_y^*(E - E_{c,\min})} + \frac{p_z^2}{2m_z^*(E - E_{c,\min})} = 1 \Rightarrow \frac{p_x^2}{a^2} + \frac{p_y^2}{b^2} + \frac{p_z^2}{c^2} = 1$$

$$a = \sqrt{2m_x^*(E - E_{c,\min})}, \quad b = \sqrt{2m_y^*(E - E_{c,\min})}, \quad c = \sqrt{2m_z^*(E - E_{c,\min})}$$

Όγκος ελλειψοειδούς: $V_p = \frac{4}{3} \pi abc = \frac{4}{3} \pi \sqrt{8m_x^* m_y^* m_z^* (E - E_{c,\min})}^{3/2}$

Διαφορικός Όγκος: $dV_p(E, E + dE) = 2\pi \sqrt{8m_x^* m_y^* m_z^*} (E - E_{c,\min})^{1/2} dE$

Διαιρώντας με τη στοιχειώδη κυψελίδα (h^3) του αντίστροφου χώρου και συνυπολογίζοντας εκφυλισμό (2) λόγω spin :

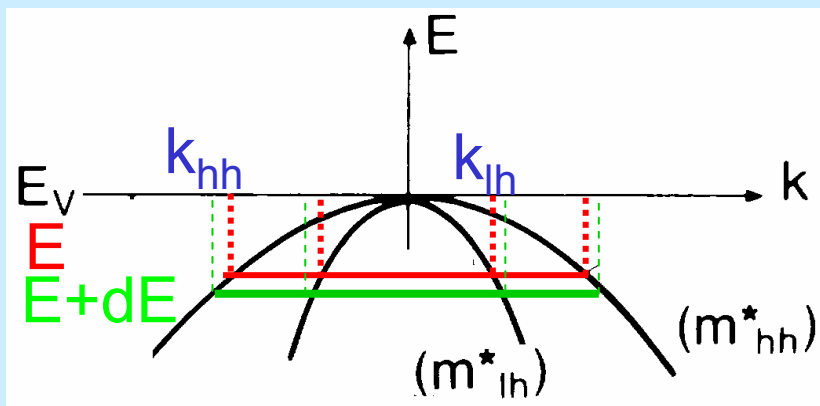
$$g_n(E) = M 2 \frac{dV_p(E, E + dE)}{h^3 dE} = M 2 \frac{2\pi}{h^3} \sqrt{8m_x^* m_y^* m_z^*} (E - E_{c,\min})^{1/2}$$

Για την περίπτωση του πυριτίου,
(όπου: $m_x^* = m_y^* = m_t^*$ $m_z^* = m_l^*$, $M=6$).

$$g_n(E) = \frac{(2m_{e,DoS}^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (E - E_{c,\min})^{1/2}$$

Ενεργός μάζα πυκνότητας καταστάσεων : $m_{e,DoS}^{*3} = M^2 (m_t^{*2} m_l^*)$
($DoS = \text{Density of States}$)

Εφαρμογή: Ζώνη Σθένους με «βαρειές» και «ελαφρείς» οπές



Όγκος ισοενεργειακών σφαιρών
στον αντίστροφο χώρο

$$V_p(E) = \frac{4}{3} \pi p_{hh}^3(E) + \frac{4}{3} \pi p_{lh}^3(E)$$

Όπου :

$$|E| = \frac{p_{hh}^2}{2m_{hh}^*} = \frac{p_{lh}^2}{2m_{lh}^*}$$

$$\Rightarrow V_p(E) = \frac{4}{3} \pi (2|E|)^{3/2} (m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2})$$

Άρα $\Rightarrow dV_p(E, E + dE) = 2\pi(2)^{3/2} (m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}) |E|^{1/2} dE$

Διαιρώντας με τη στοιχειώδη κυψελίδα (h^3) του αντίστροφου χώρου και συνυπολογίζοντας εκφυλισμό (2) λόγω spin :

$$g_p(E) \equiv 2 \frac{dV_p(E, E + dE)}{h^3 dE} = \frac{(2m_{h,DoS}^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{-E}$$

Ενεργός μάζα πυκνότητας καταστάσεων : $m_{h,DoS}^* = (m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2})^{2/3}$
(DoS=Density of States)

Συγκέντρωση φορέων στους ενδογενείς ημιαγωγούς

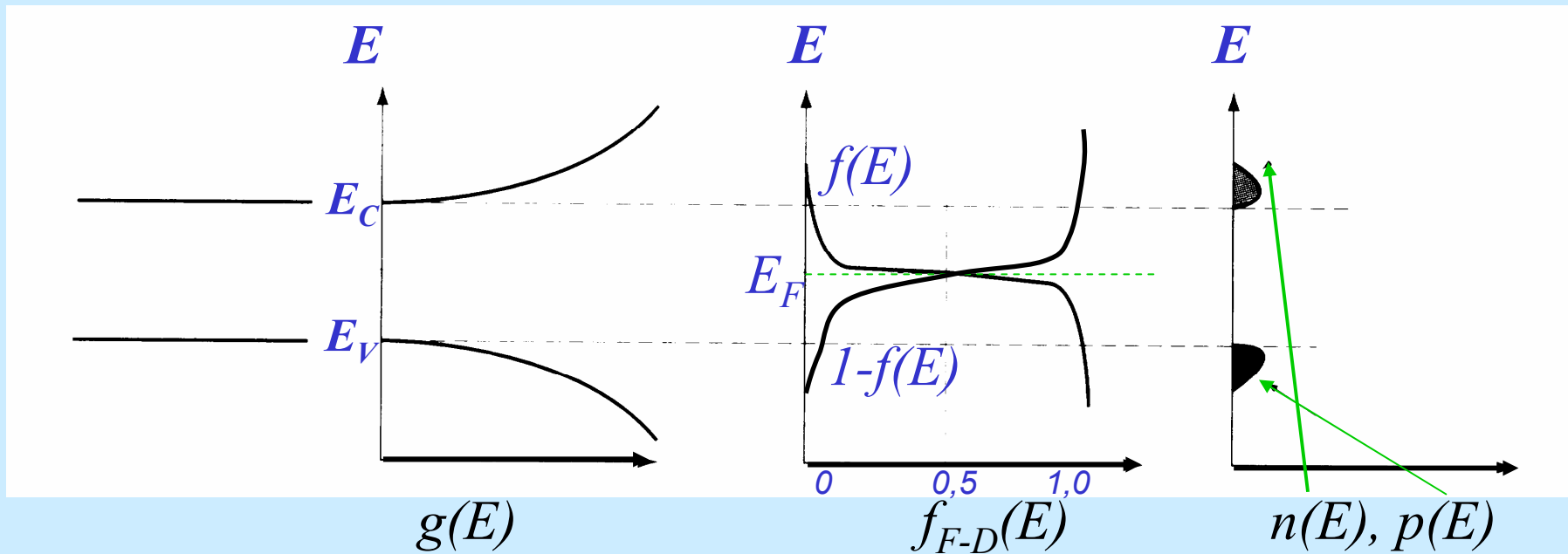
Ενδογενείς Ημιαγωγοί : ΟΧΙ προσμίξεις

(i = intrinsic)

ΟΧΙ πλεγματικές ατέλειες

Συγκέντρωση ηλεκτρονίων: $n_i = p_i$:συγκέντρωση οπών

$$f_{F-D,T}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}, \quad f_{F-D,T}(E_F) = 1/2$$



$$n=p \Rightarrow E_F \approx (E_C + E_V)/2 \Rightarrow E - E_F \gg kT \Rightarrow f(E) \approx \left(e^{E_F/kT} \right) e^{-E/kT}$$

Οπότε:

$$n = \int_{E_{c,\min}}^{E_{c,\max}} g_n(E) f_{n,F-D}(E) dE \approx \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{E_F/kT} \int_{E_{c,\min}}^{E_{c,\max}} e^{-E/kT} (E - E_{c,\min})^{1/2} dE$$

λόγω της ισχυρά φθίνουσας εξάρτησης του εκθετικού όρου, από την ενέργεια, αντικαθιστούμε, το άνω όριο του ολοκληρώματος: $E_{c,\max} \rightarrow \infty$

$$n = \int_{E_{c,\min}}^{E_{c,\max}} g_n(E) f_{n,F-D}(E) dE \approx \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{E_F/kT} \int_{E_{c,\min}}^{\infty} e^{-E/kT} (E - E_{c,\min})^{1/2} dE$$

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_{c,\min} - E_F)/kT} \int_0^{\infty} e^{-(E - E_{c,\min})/kT} (E - E_{c,\min})^{1/2} d(E - E_{c,\min})$$

Οπότε :

$$n = 2 \left(\frac{m_n^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT} \right)$$

καί όμοια για τις οπές:

$$p = 2 \left(\frac{m_p^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_V - E_F}{kT} \right)$$

Ενεργός Πυκνότητα Καταστάσεων
Στη Ζώνη Αγωγιμότητας

Ενεργός Πυκνότητα Καταστάσεων
Στη Ζώνη Σθένους

$$N_{C,eff} = 2 \left(\frac{m_n^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$N_{V,eff} = 2 \left(\frac{m_p^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$$

Στην προσέγγιση των μη-εκφυλισμένων ημιαγωγών (ενδογενείς ημιαγωγοί με χαμηλές συγκεντρώσεις φορέων) οι δύο ζώνες (Σθένους και Αγωγιμότητας) μπορούν να προσεγγισθούν με απλές ενεργειακές στάθμες (E_V , E_C) με πυκνότητες καταστάσεων ($N_{V,eff}$, $N_{C,eff}$) που εξαρτώνται από την θερμοκρασία, και αντίστοιχες πιθανότητες κατάληψης που υπακούουν σε στατιστική Boltzmann, με στάθμη αναφοράς την E_F .

T=300K	Si	GaAs
N_C (cm ⁻³)	2.80×10^{19}	4.7×10^{17}
N_V (cm ⁻³)	1.04×10^{19}	7.0×10^{18}

Η στάθμη Fermi προσδιορίζεται από τη συνθήκη ουδετερότητας

$$n = p \Rightarrow E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3}{4}kT \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \equiv E_i$$

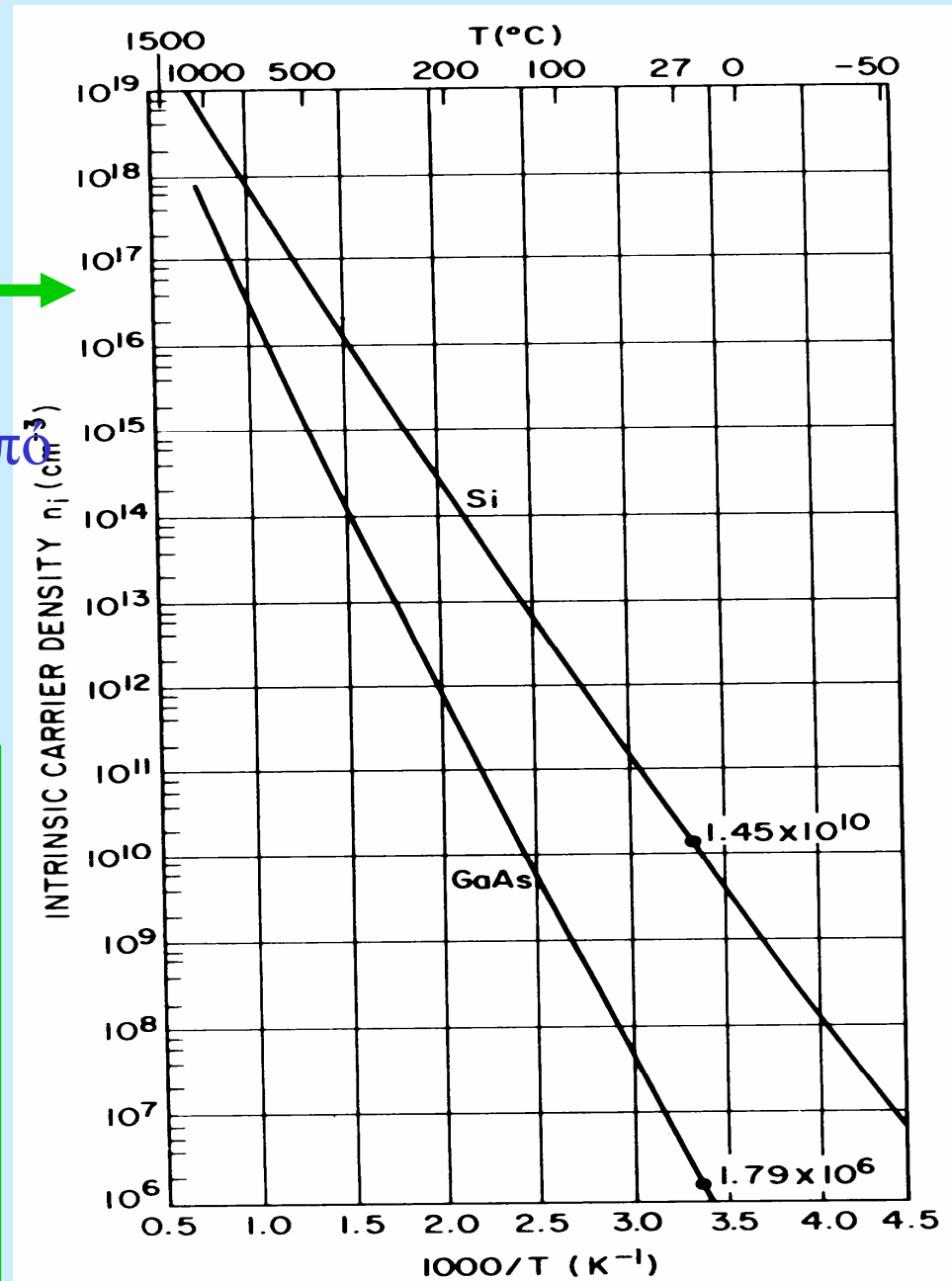
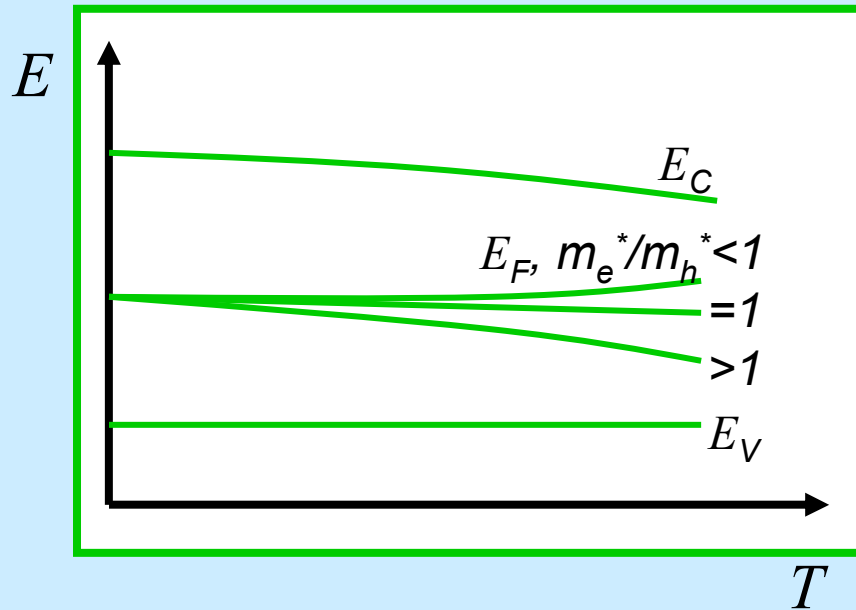
Αντικαθιστώντας την E_F στις σχέσεις για τις συγκεντρώσεις φορέων, παίρνουμε, για τους ενδογενείς (i) ημιαγωγούς

$$n_i = p_i = 2 \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} \exp\left(-\frac{(E_C - E_V)}{2kT} \right) = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT} \right)$$

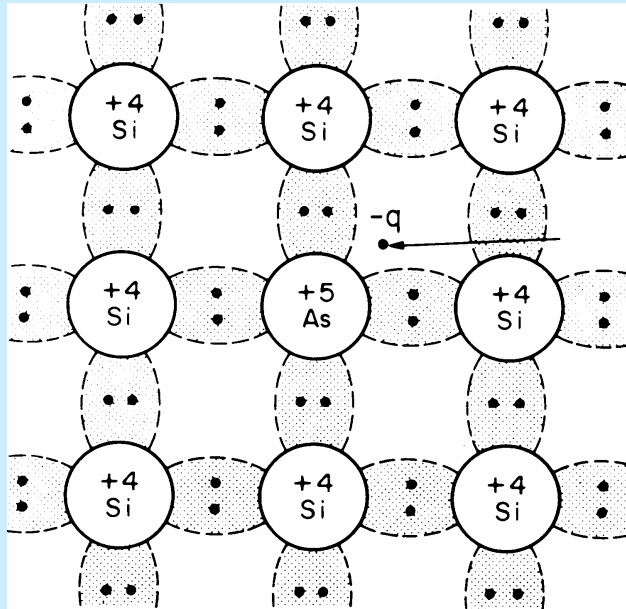
T=300K	Si	GaAs
E_g (eV)	1.12	1.52
$n_i=p_i$ (cm ⁻³)	$\approx 10^{10}$	$\approx 10^6$

Εξάρτηση της συγκέντρωσης ενδογενών φορέων από την θερμοκρασία, (Si, GaAs)

Εξάρτηση των E_g και E_F , από τη θερμοκρασία, για ενδογενείς ημιαγωγούς



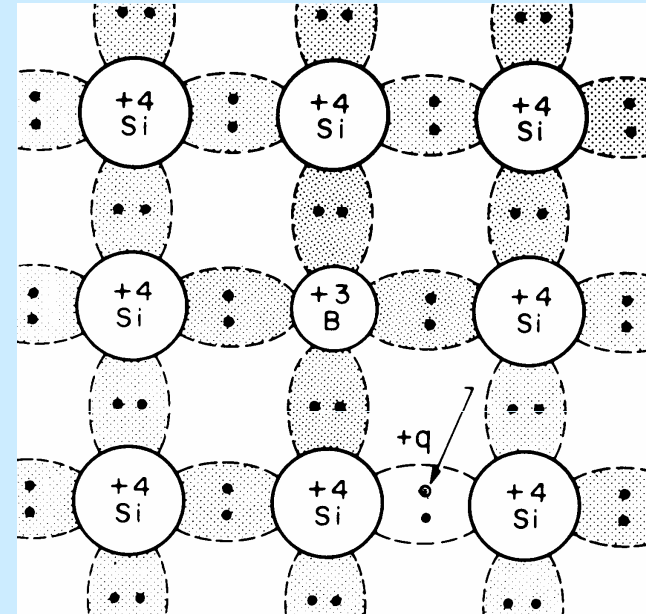
Εξωγενείς Ημιαγωγοί – Προσμείξεις



Προσμείξεις τύπου «Δότες»
(περίσσεια ηλεκτρονίου)
π.χ.: προσμείξεις As σε Si



Προσφορά αγωγίμου
ηλεκτρονίου



Προσμείξεις τύπου «Αποδέκτες»
(έλλειμμα ηλεκτρονίου)
π.χ.: προσμείξεις B σε Si



Προσφορά αγωγίμης οπής

Ενδοχασματικές ενεργειακές στάθμες λόγω προσμείξεων

π.χ., πρόσμειξη **As** σε κρύσταλλο **Si** :

Το 5^ο ηλεκτρόνιο του ατόμου του **As** (εκτός δεσμικού τροχιακού), τείνοντας να κυκλοφορήσει ως ελεύθερο στο κρυσταλλικό περιβάλλον του **Si**, (δηλαδή, με ενεργό μάζα m_e^*), «βλέπει» το θετικά ιονισμένο άτομο (**As⁺**) θωρακισμένο, μέσω της σχετικής διηλεκτρικής σταθεράς ϵ_r του πυριτίου.

Άρα, σύμφωνα με το μοντέλο του **Bohr** για τα υδρογονοειδή άτομα :

$$\left\{ E = \frac{1}{2} m_e^* v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r}, \quad \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r^2} = m_e^* \frac{v^2}{r} \right\} \Rightarrow E = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r}$$
$$\left\{ l \equiv m_e^* v r = n\hbar, \quad m_e^* \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r^2} \Rightarrow (m_e^* v r)^2 = \frac{m_e^* e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} r \right\} \Rightarrow r_n = \frac{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 \hbar^2}{m_e^* e^2} n^2$$
$$r_n = \epsilon_r \frac{m_e}{m_e^*} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} n^2 = \epsilon_r \frac{m_e}{m_e^*} a_0 = \epsilon_r \frac{m_e}{m_e^*} (0.5 A^0)$$
$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e^* e^4}{\epsilon_r^2 (4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{2}{n^2} = \left(-\frac{1}{2} \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2} \right) \frac{m_e^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon_r^2} = \left(-\frac{13.6 eV}{n^2} \right) \frac{m_e^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon_r^2}$$

με στάθμη αναφοράς (ελευθέρου ηλεκτρονίου) το ελάχιστο της Ζώνης Αγωγιμότητας

Προσέγγιση της ενεργού Hamiltonian

Για κίνηση κοντά στο ελάχιστο της Ζώνης Αγωγιμότητας, το 5^ο («μη-δεσμικό») ηλεκτρόνιο, μπορεί να θεωρηθεί ότι περιγράφεται με καλή προσέγγιση από τη ενεργό Hamiltonian :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \left(E_g + \frac{\hat{p}^2}{2m_e^*} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} = E_g + \left(\frac{\hat{p}^2}{2m_e^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} \right)$$

Το τμήμα της τελευταίας παρένθεσης είναι η Hamiltonian ενός υδρογονοειδούς ατόμου, με τις αντικαταστάσεις :

$$e^2 \rightarrow e^2 / \epsilon_r, \quad m_e \rightarrow m_e^*,$$

Οπότε, οι ιδιοενέργειες του συστήματος είναι :

$$\begin{aligned} E_n &= E_g - \frac{1}{2} \frac{m_e^* e^4}{\epsilon_r^2 (4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2} = \\ &= E_g - \left(\frac{1}{2} \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2} \right) \frac{m_e^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon_r^2} = E_g - \left(\frac{13.6 eV}{n^2} \right) \frac{m_e^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon_r^2} \end{aligned}$$

Ανάλογα αποτελέσματα προκύπτουν στην περίπτωση των οπών, αρκεί να ληφθεί υπόψη ότι $m_h^* < 0$, και ως επίπεδο αναφοράς μηδενικής ενέργειας το $E_V(\mathbf{k}=0)=0$

Τυπικές τιμές για την ενέργεια δοτών

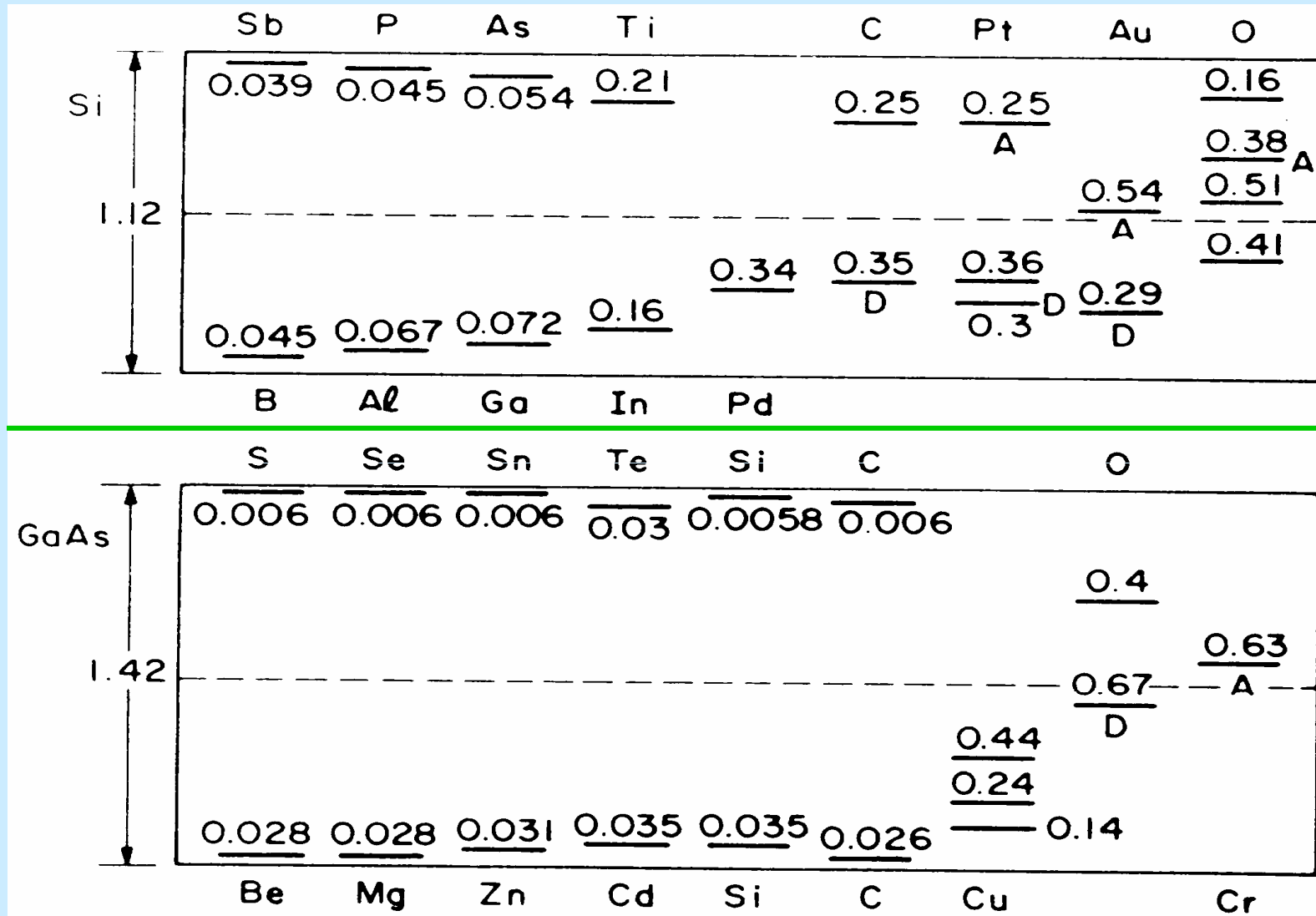
$$\text{Si: } \begin{aligned} \epsilon_r &= 11.7, & m_e^* &= 0.5m_e \\ \Rightarrow E_D &\approx E_g - 50\text{meV}, & r_D &\approx 23a_0 \end{aligned}$$

Άρα : τα αποτελέσματα είναι αυτοσυνεπή με την παραδοχή της προσέγγισης του υδρογονοειδούς ατόμου

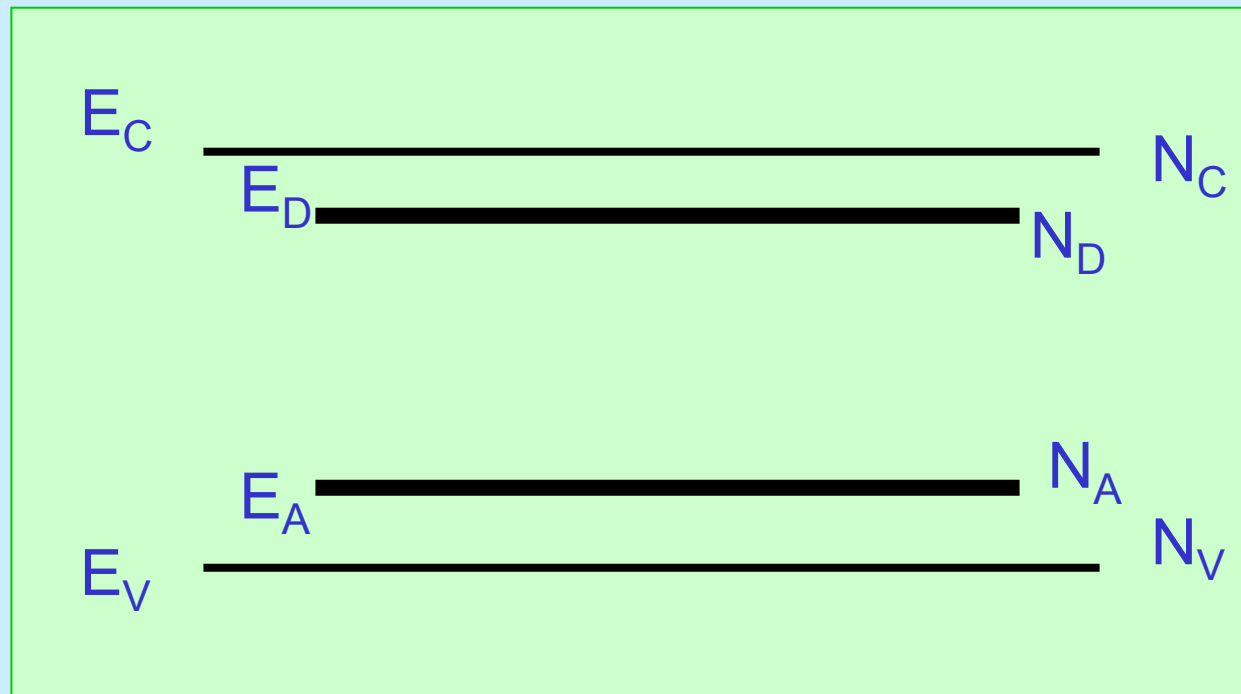
Σχηματική απεικόνιση ενδοχασματικών καταστάσεων



Πραγματικές ενδοχασματικές καταστάσεις διαφόρων προσμείξεων σε Si και GaAs



Υπολογισμός στάθμης Fermi σε εξωγενείς ημιαγωγούς



Έστω: N_D^+ = συγκέντρωση ιονισμένων δοτών

N_A^- = συγκέντρωση ιονισμένων αποδεκτών

n = συγκέντρωση ηλεκτρονίων (ενδο-, εξω-γενών)

p = συγκέντρωση οπών (ενδο-, εξω-γενών)

Συνθήκη ουδετερότητας : $n + N_A^- = p + N_D^+$

(Συνθήκη υπολογισμού της στάθμης Fermi), όπου :

Από τις εκφράσεις :

$$n = N_C(T) \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right) \quad p = N_V(T) \exp\left(\frac{E_V - E_F}{kT}\right)$$

$$N_D^+ = N_D - N_D^0 = N_D - \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{kT}\right)} = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{kT}\right)}$$

$$N_A^- = N_A - N_A^0 = N_A - \frac{N_A}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_F - E_A}{kT}\right)} = \frac{N_A}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_F - E_A}{kT}\right)}$$

και τη σχέση ουδετερότητας :
προκύπτει

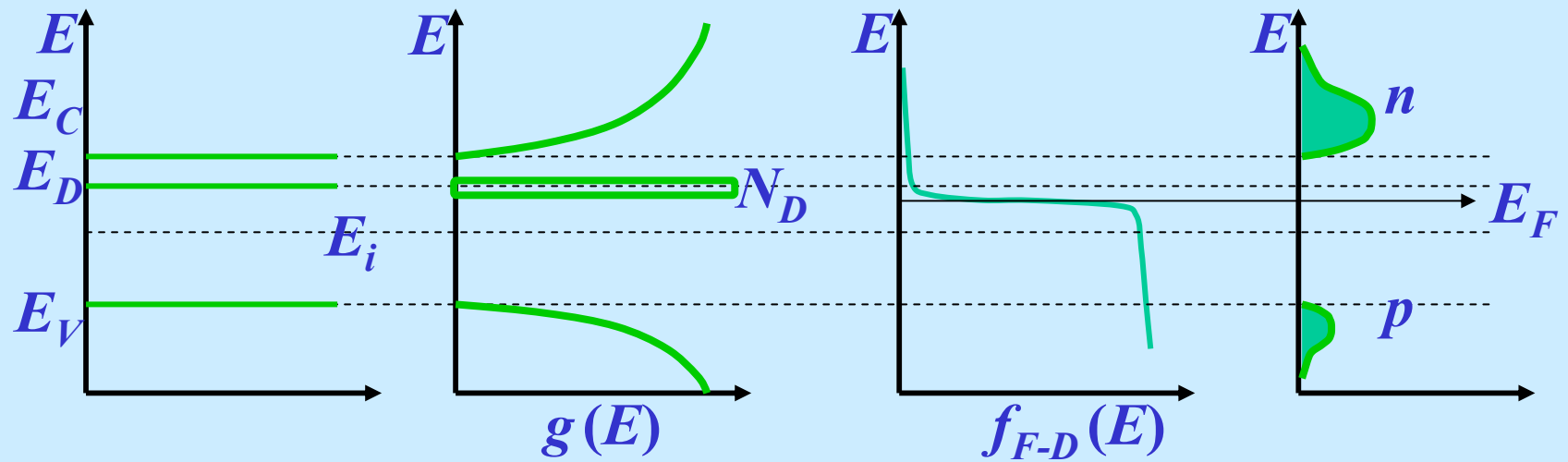
$$p + N_D^+ - n - N_A^- = 0$$

η στάθμη Fermi $E_F = E_F(N_V(T), N_C(T), E_V, E_C, N_D, E_D, N_A, E_A; T)$

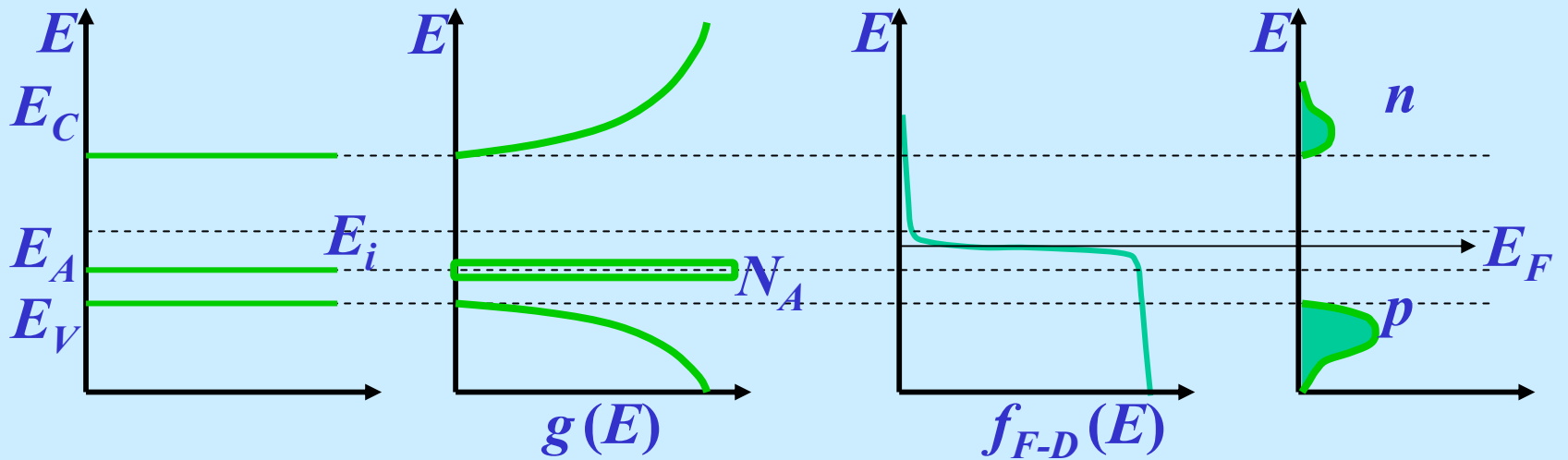
ενώ εξακολουθεί να ισχύει ο «νόμος δράσης των μαζών»

$$n \cdot p = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = n_i^2$$

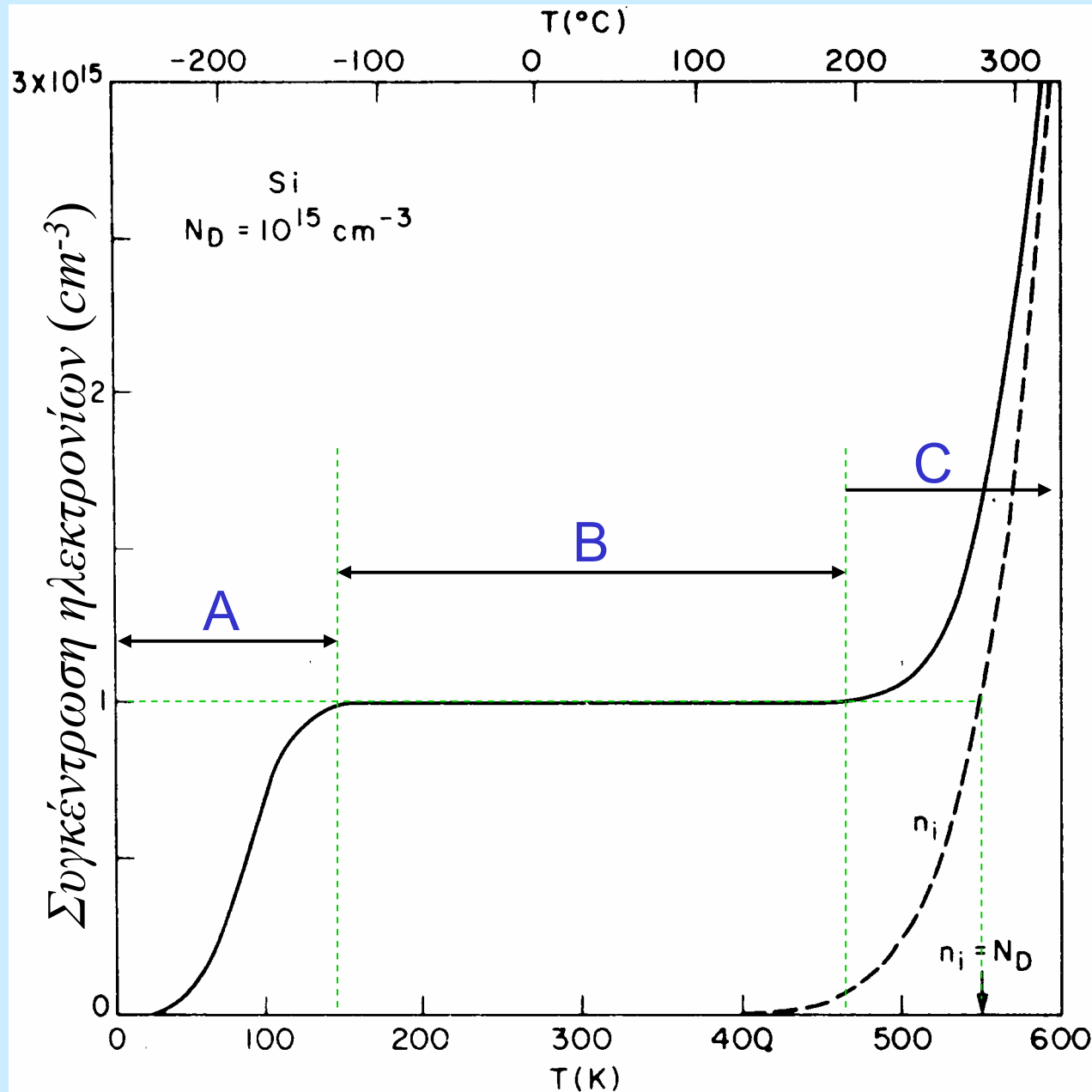
ανεξάρτητα από την προέλευση των φορέων και από την E_F



Προσμίξεις τύπου «Δότες»



Προσμίξεις τύπου «Αποδέκτες»

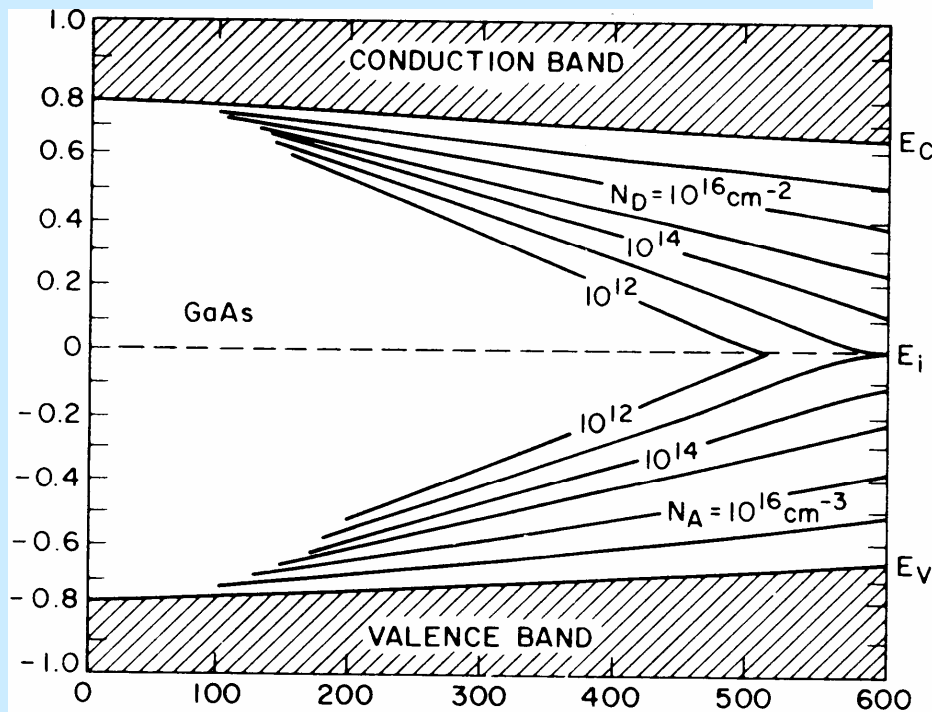
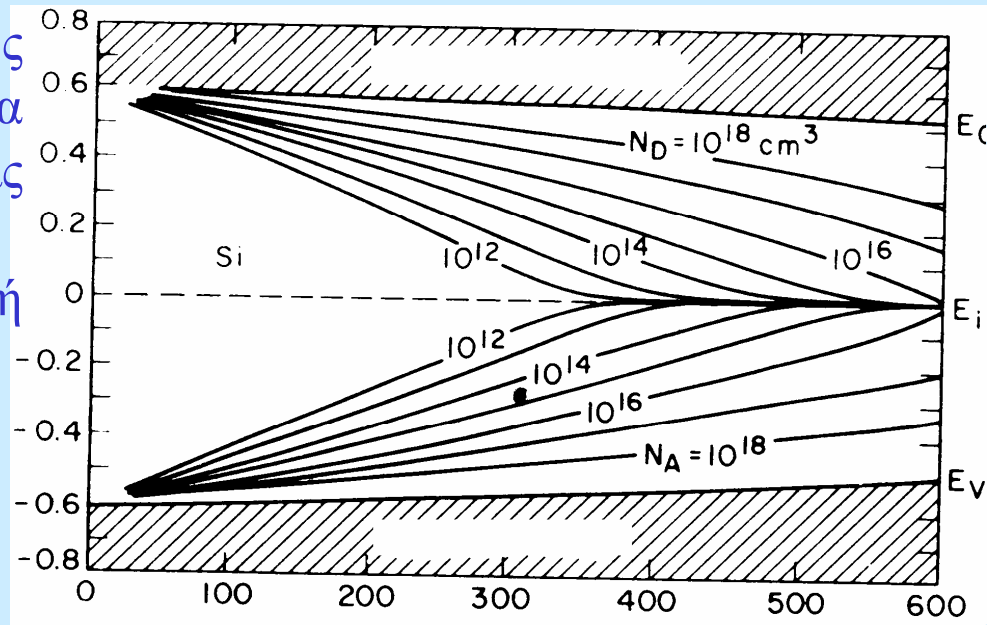


A: Περιοχή «ψύξης»
(εξάρτηση από T , μέχρι να ιονιστούν όλοι οι Δότες)

B: Περιοχή εξωγενούς αγωγιμότητας
(ανεξαρτησία από T λόγω ιονισμού όλων των Δοτών και ασήμαντης συνεισφοράς των ενδογενών φορέων)

C: Περιοχή ενδογενούς αγωγιμότητας
(εξάρτηση από T λόγω σημαντικής συνεισφοράς των ενδογενών φορέων)

Μεταβολή, με την θερμοκρασία, της στάθμης Fermi του Si, για διαφορετικές συγκεντρώσεις προσμείξεων τύπου n και τύπου p. (Σημειώνεται και η θερμοκρασιακή μεταβολή του χάσματος)



Μεταβολή, με την θερμοκρασία, της στάθμης Fermi του GaAs, για διαφορετικές συγκεντρώσεις προσμείξεων τύπου n και τύπου p. (Σημειώνεται και η θερμοκρασιακή μεταβολή του χάσματος)

Υπολογισμός συγκέντρωσης φορέων και στάθμης Fermi, στην προσέγγιση του πλήρους ιονισμού, $N_D^+ \approx N_D$, $N_A^- \approx N_A$

a) Εξωγενής ημιαγωγός τύπου-n, $N_D > N_A$

$n_n \equiv$ φορείς πλειονότητας

$$\left\{ \begin{array}{l} n_n + N_A = p_n + N_D \\ n_n p_n = n_i^2 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} n_n = \frac{1}{2} \left[(N_D - N_A) + \sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2} \right] \\ p_n = \frac{n_i^2}{n_n} \end{array} \right\}$$

$$n_n = N_C \cdot e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} \Rightarrow E_F = E_C - kT \ln[N_C / n_n]$$

Στην περίπτωση: $N_D \gg N_A + 2n_i \Rightarrow n_n \approx N_D - N_A$

$$\text{Αν, } N_A = 0 \quad n_n = \frac{N_D}{2} \left[1 + \left(1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2} \right)^{1/2} \right]$$

$$\text{a}_1) N_D \gg n_i \Rightarrow n_n = N_D + n_i^2 / N_D, \quad p_n = n_i^2 / N_D$$

$$\text{a}_2) N_D \ll n_i \Rightarrow n_n = n_i + N_D / 2, \quad p_n = n_i - N_D / 2$$

Υπολογισμός συγκέντρωσης φορέων και στάθμης Fermi, στην προσέγγιση του πλήρους ιονισμού, $N_D^+ \approx N_D$, $N_A^- \approx N_A$

b) Εξωγενής ημιαγωγός τύπου-p, $N_A > N_D$

$p_p \equiv$ φορείς πλειονότητας

$$\left\{ \begin{array}{l} n_p + N_A = p_p + N_D \\ n_p p_p = n_i^2 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} p_p = \frac{1}{2} \left[(N_A - N_D) + \sqrt{(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2} \right] \\ n_p = \frac{n_i^2}{p_p} \end{array} \right\}$$

$$p_p = N_V \cdot e^{-\frac{E_V - E_F}{kT}} \Rightarrow E_F = E_V + kT \ln \left[N_V / p_p \right]$$

Στην περίπτωση: $N_A \gg N_D + 2n_i \Rightarrow p_p \approx N_A - N_D$

$$\text{Αν, } N_D = 0 \quad p_p = \frac{N_A}{2} \left[1 + \left(1 + \frac{4n_i^2}{N_A^2} \right)^{1/2} \right]$$

$$\text{b}_1) N_A \gg n_i \Rightarrow p_p = N_A + n_i^2 / N_A, \quad n_p = n_i^2 / N_A$$

$$\text{b}_2) N_A \ll n_i \Rightarrow p_p = n_i + N_A / 2, \quad n_p = n_i - N_A / 2$$