



ΗΜΙΑΓΩΓΑ ΥΛΙΚΑ: ΘΕΩΡΙΑ-ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ

Μέρος 1^ο: Στοιχεία Θεωρίας Ημιαγωγών
Ενότητα 7^η: Αγωγιμότητα ηλεκτρονίων στα στερεά.

Γεώργιος Λιτσαρδάκης
Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών
& Μηχανικών Υπολογιστών



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.





7. Αγωγιμότητα ηλεκτρονίων στα στερεά.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



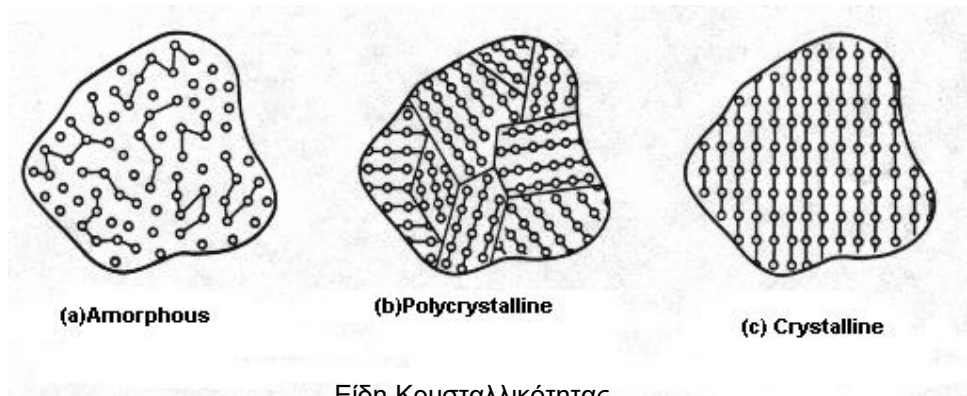
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Περιεχόμενα ενότητας

1. Μοντέλο ελεύθερων ηλεκτρονίων.
2. Διάκριση αγωγών-μη αγωγών.
3. Ενεργειακές ζώνες.
4. Ενεργός μάζα.
5. Οπές.

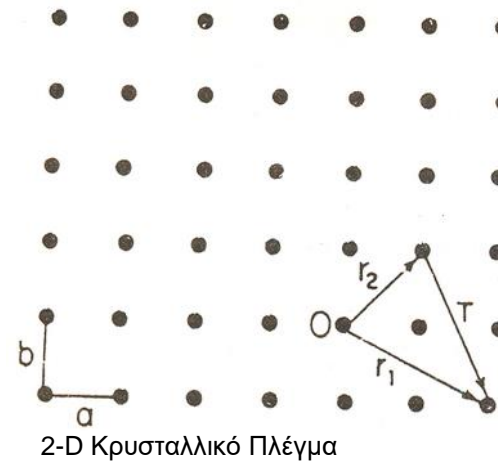


Κρυσταλλική δομή



Πηγή: <http://www.jhaj.net/jasjeet/tcad/Learn1/l1a.htm>

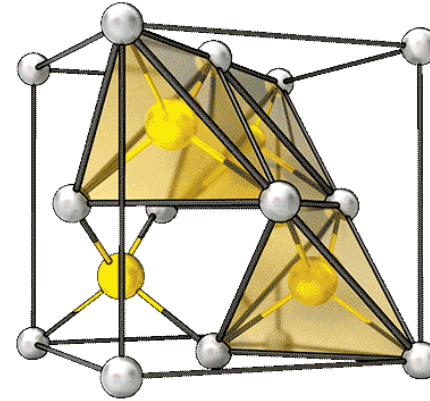
- Περιοδική δομή
- Διανύσματα βάσης $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$: η μικρότερη περίοδος επανάληψης (άπειροι συνδυασμοί)
- Πλέγμα $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}$
- Κόμβοι του πλέγματος



Πηγή: Unit-1: Introduction to Crystallography,
<http://pms.iitk.ernet.in/wiki/images/thumb/Jk1.png/400px-Jk1.png>
<http://pms.iitk.ernet.in/wiki/index.php/Unit-1: Introduction to Crystallography>

κυψελίδα

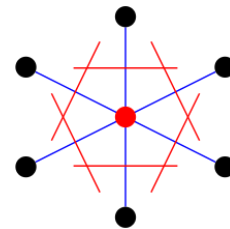
- στοιχειώδης - περιλαμβάνει 1 κόμβο (άπειροι συνδυασμοί)
- (συμβατική) μοναδιαία, με τη συμμετρία του πλέγματος
- Στοιχειώδης με τη συμμετρία του πλέγματος : *Wigner-Seitz*



Μονοδιάστατη Κυψελίδα

Πηγή: Own work

Author: Д. Ильин, https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/e/ed/Animation_of_zincblende_unit_crystal_cell.gif



Πηγή: Transferred from [de.wikipedia](https://de.wikipedia.org/wiki/Wigner-Seitz_cell) to Commons. Transfer was stated to be made by [User:User:Elgauchito](https://en.wikipedia.org/wiki/Wigner-Seitz_cell). (Original text: selbst gezeichnet), https://en.wikipedia.org/wiki/Wigner-Seitz_cell

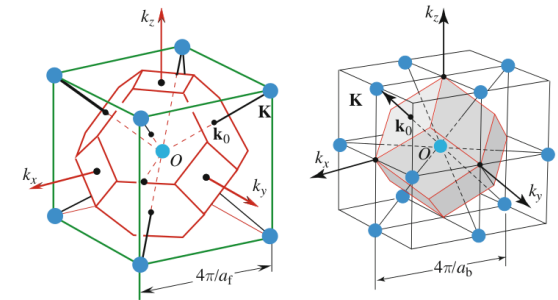


Fig. P4.4 First BZ of the fcc structure (left) and of the bcc structure (right)

Ζώνες Brillouin για fcc και bcc δομές αντίστοιχα.

Πηγή: Introduction to the Physics of Electrons in Solids by Henri Alloul, <http://physics.stackexchange.com/questions/48048/how-can-crystal-structures-be-determined-using-x-ray-diffraction>

Πλέγμα

- 14 είδη πλεγμάτων (σε τρεις διαστάσεις) : πλέγματα Bravais
- 7 κρυσταλλικά συστήματα, (συστήματα συντεταγμένων)

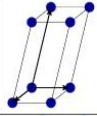
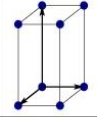
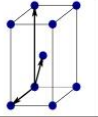
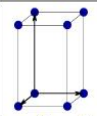
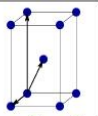
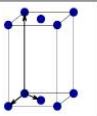
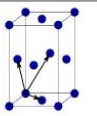
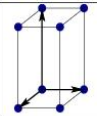
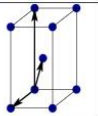
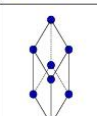
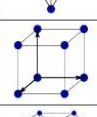
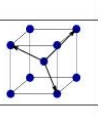
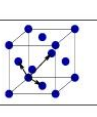
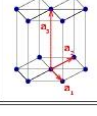
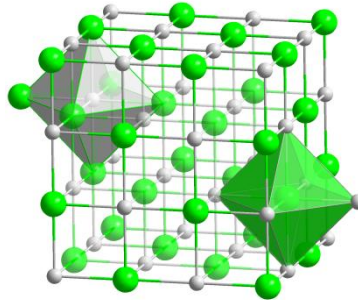
Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				

Table 1.1: Bravais lattices in three-dimensions.

Πλέγματα Bravais

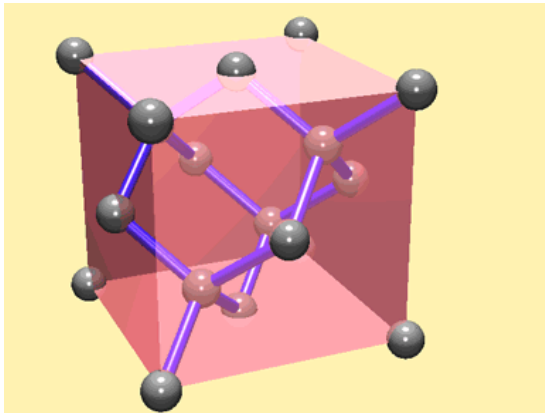
Πηγή: Dr. Dragoș-Victor Anghel,
http://www.theory.nipne.ro/~dragos/Solid/Bravais_table.jpg

Παραδείγματα δομών



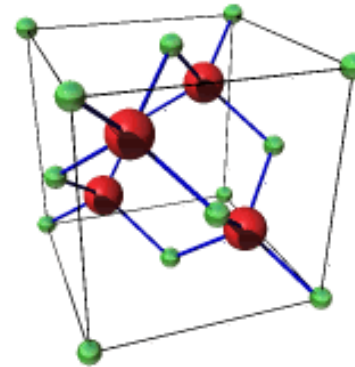
Crystal structure of NaCl with coordination polyhedra

Πηγή: From Wikimedia Commons, the free media repository, Author: Solid State
https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c0/NaCl_polyhedra.png



Κυψελίδα Διαμαντιού

Πηγή: Image courtesy: Dr. Axel Lorke, University of Duisburg-Essen, Germany.
http://www.aps.org/units/dcmp/gallery/images/diamond_orig.gif
<http://www.aps.org/units/dcmp/gallery/diamond.cfm>

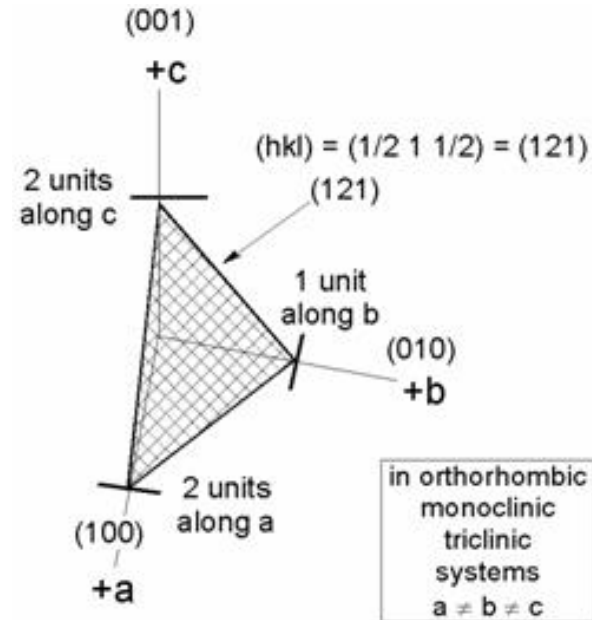


“zinc blende” (cubic zinc sulfide) lattice – gallium arsenide

Πηγή: http://web.eng.gla.ac.uk/groups/sim_centre/courses/basic/pics/GaAs.gif
http://web.eng.gla.ac.uk/groups/sim_centre/courses/basic/basic_2.html

Δείκτες Miller

- κρυσταλλική διεύθυνση $[hkl]$: τρεις μικρότεροι τρεις ακέραιοι, που αποτελούν τις συντεταγμένες ενός διανύσματος με την ίδια διεύθυνση
- $\langle hkl \rangle$, ισοδύναμες διευθύνσεις, (π.χ οι διευθύνσεις $[100]$, $[010]$ και $[001]$ σε ένα κυβικό πλέγμα είναι ισοδύναμες - γράφουμε $\langle 100 \rangle$).
- δείκτες Miller (hkl) : είναι οι αντίστροφοι των συντεταγμένων των σημείων τομής του επιπέδου με τους άξονες, με αναγωγή, ώστε να προκύψουν οι μικρότεροι ακέραιοι με την ίδια αναλογία
- ισοδύναμα επίπεδα $\{hkl\}$
- Στα κυβικά πλέγματα, η διεύθυνση $[hkl]$ είναι κάθετη στο επίπεδο (hkl) .



Miller Indices

$$(h \ k \ l) = (1/a \ 1/b \ 1/c)$$

Δείκτες Miller

Πηγή: Cornell,

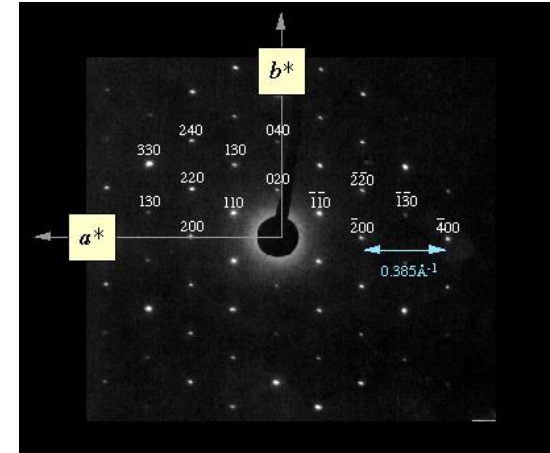
http://www.geo.cornell.edu/geology/classes/eas355/Class05/Lecture%204%202005_files/image005.gif,

<http://www.geo.cornell.edu/geology/classes/eas355/Class05/Lecture%204%202005.htm>



Το αντίστροφο πλέγμα

- Το αντίστροφο πλέγμα είναι μια μαθηματική κατασκευή.
- Χρήσιμο στη μελέτη της κρυσταλλικής περίθλασης, των συναρτήσεων με την περιοδικότητα του πλέγματος Bravais και της διατήρησης της ορμής σε περιοδικό δυναμικό...
- Ορίζεται από τα διανύσματα \mathbf{G} για τα οποία $e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1 \Leftrightarrow \vec{G}\cdot\vec{R} = 2\pi m$ ($\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ διάνυσμα του ορθού πλέγματος)



Πηγή:

<http://clay.uga.edu/courses/8550/muscoviteED.gif>
<http://clay.uga.edu/courses/8550/CM26.html>

- Διανύσματα βάσης : $b_i = \frac{2\pi(\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}{\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)} = 2\pi \frac{(\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}{V_C}$ ($i, j, k = 1, 2, 3$ κυκλικά)



Ιδιότητες του αντίστροφου πλέγματος

- Το αντίστροφο πλέγμα είναι ένα πλέγμα Bravais
- Το κύμα $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, με κυματοδιάνυσμα \mathbf{k} ένα διάνυσμα \mathbf{G} του αντίστροφου πλέγματος, έχει την περιοδικότητα του (ορθού) πλέγματος Bravais:

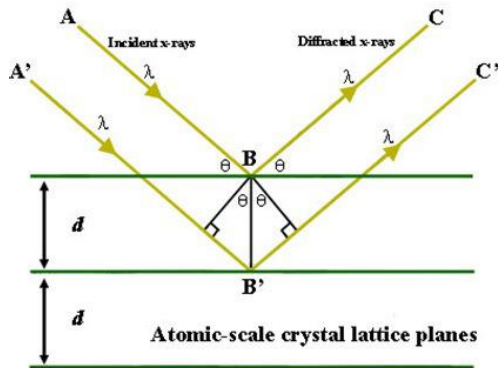
$$\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{R})] = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R})$$

$$\Leftrightarrow \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) = 1$$

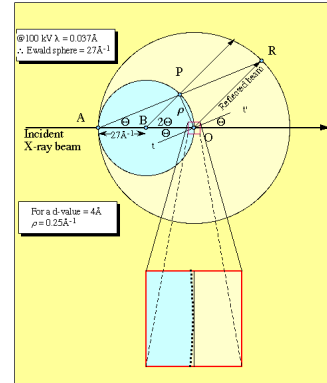
- Το διάνυσμα $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ του αντίστροφου πλέγματος είναι κάθετο στο επίπεδο (hkl) του κρυστάλλου (του "ορθού" πλέγματος).



Κρυσταλλική περίθλαση-ανάκλαση Bragg



Πηγή:
<https://physics4u.wordpress.com/2012/06/20/100-%CF%87%CF%81%CF%8C%E%BD%CE%B9%CE%B1-%CE%B1%CF%80%CF%8C-%CF%84%CE%B7%CE%BD-%CE%B1%CE%BD%CE%B1%CE%BA%CE%AC%CE%BB%CF%85%CF%88%CE%B7-%CF%84%CE%BF%CF%85-%CE%BD%CF%8C%CE%BC%CE%BF%CF%85-bragg-%CF%83/>



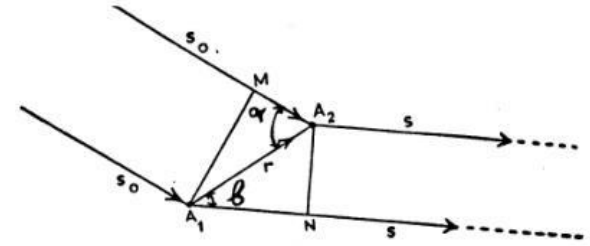
Πηγή:
<http://clay.uga.edu/courses/8550/CM26.html>

- Σκέδαση ακτινοβολίας ή σωματιδίων και εποικοδομητική συμβολή
- μέγιστα έντασης σε ορισμένες διευθύνσεις ($\Delta\phi = n\lambda$, όπου $\phi = kx - \omega t$)
 - αν υποθέσουμε κατοπτρική ανάκλαση με γωνία θ από παράλληλα κρυσταλλικά επίπεδα απόστασης d , $\Delta\phi = 2d \cdot \sin\theta$
- Συνθήκη Bragg $n\lambda = 2d \cdot \sin\theta$
- Μεταβάλλουμε το λ ή (συνήθως) το θ



Σκέδαση Laue

- ελαστική σκέδαση $|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}'|=2\pi/\lambda$,
σε τυχαίες διευθύνσεις,
"Ανακλάσεις" (μέγιστα εντάσεων) προκύπτουν
σε διευθύνσεις που συμβαίνει εποικοδομητική
συμβολή.



Πηγή:

<http://biophysics.biol.uoa.gr/courses/biophysics/XRAY/askisi.htm>

- Συνθήκη περίθλασης: $\Delta x = d\cos\theta + d\cos\theta' = d(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = n\lambda$
(\mathbf{q} και \mathbf{q}' είναι μοναδιαία διανύσματα διεύθυνσης)

Πολλαπλασιάζουμε επί $2\pi/\lambda$:

- $d(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \mathbf{R}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi n \Leftrightarrow \exp[i\mathbf{R}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] = \exp(2\pi n) = 1$
- Η διαφορά $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ισούται με ένα διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος, και επομένως (συνθήκη περίθλασης) : *Περίθλαση προκύπτει όταν η μεταβολή του διανύσματος κύματος ισούται με ένα διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος, $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}$.*

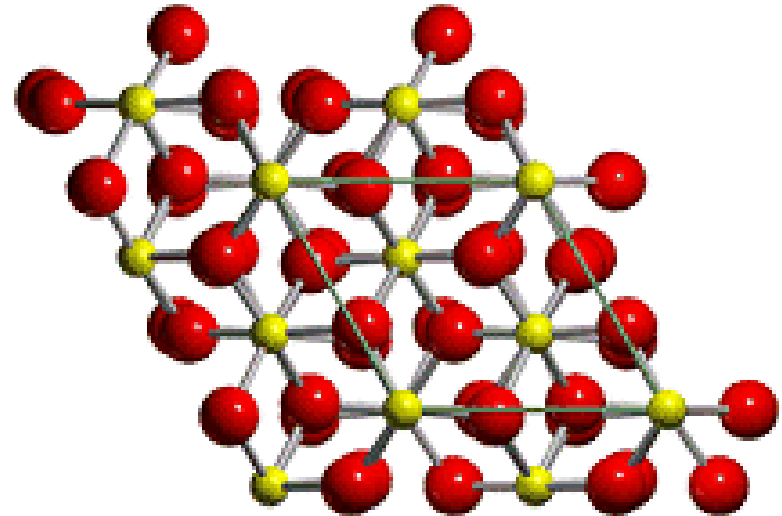
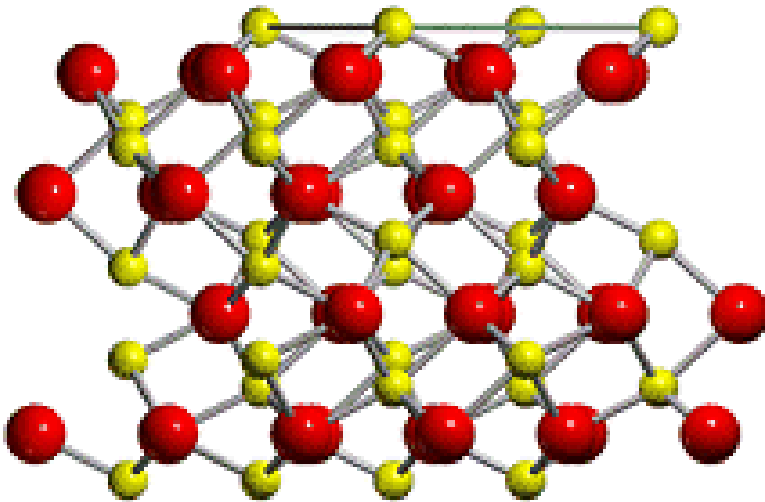


Μοντέλο ελεύθερων ηλεκτρονίων

- Ηλεκτρόνια αγωγιμότητας
ελεύθερα (δυναμικό $V=0$) + ανεξάρτητα
- αντίσταση: σκέδαση από «ατέλειες»
 - πεδίο E_x , δύναμη $F=-eE_x$
 - μέση ταχύτητα μετατόπισης u_D
 - μέσος χρόνος μεταξύ σκεδάσεων τ
(πιθανότητα σκέδασης dt/τ)
 - μέση ελεύθερη διαδρομή $\ell_D = u_D \cdot \tau$ (~ 100 nm)
 - ευκινησία $\mu = u_D/E = e\tau/m$
 - πυκνότητα ρεύματος $J = -neu_D = -ne\mu E = \sigma E$



Τι καθορίζει τις ηλεκτρικές ιδιότητες?



Πηγή:

http://www.chem.uoa.gr/chemicals/images/Al2O3/Al2O3_a-alumina.gif

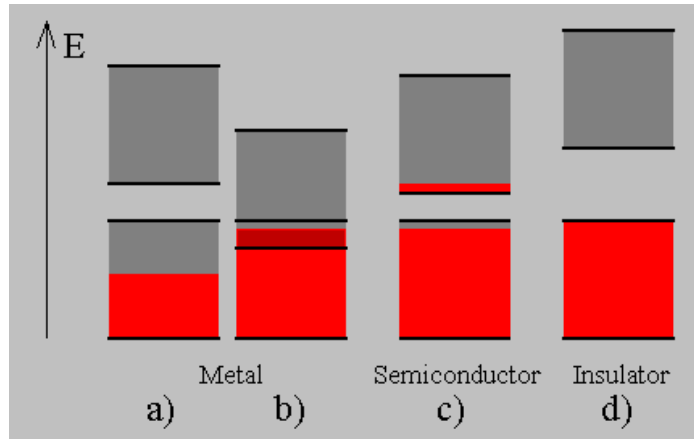
http://www.chem.uoa.gr/chemicals/chem_Al2O3.htm

(Σιζορδριεζλιγγα Σεκιλαρδκι)

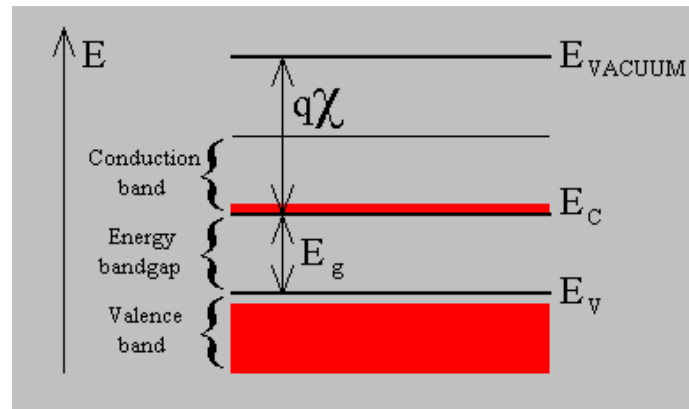


αγωγοί - μονωτές - ημιαγωγοί

- Ενεργειακές ζώνες
- ζώνη σθένους
- ζώνη αγωγιμότητας
- ενεργειακό χάσμα
- Πού είναι η στάθμη Fermi ?

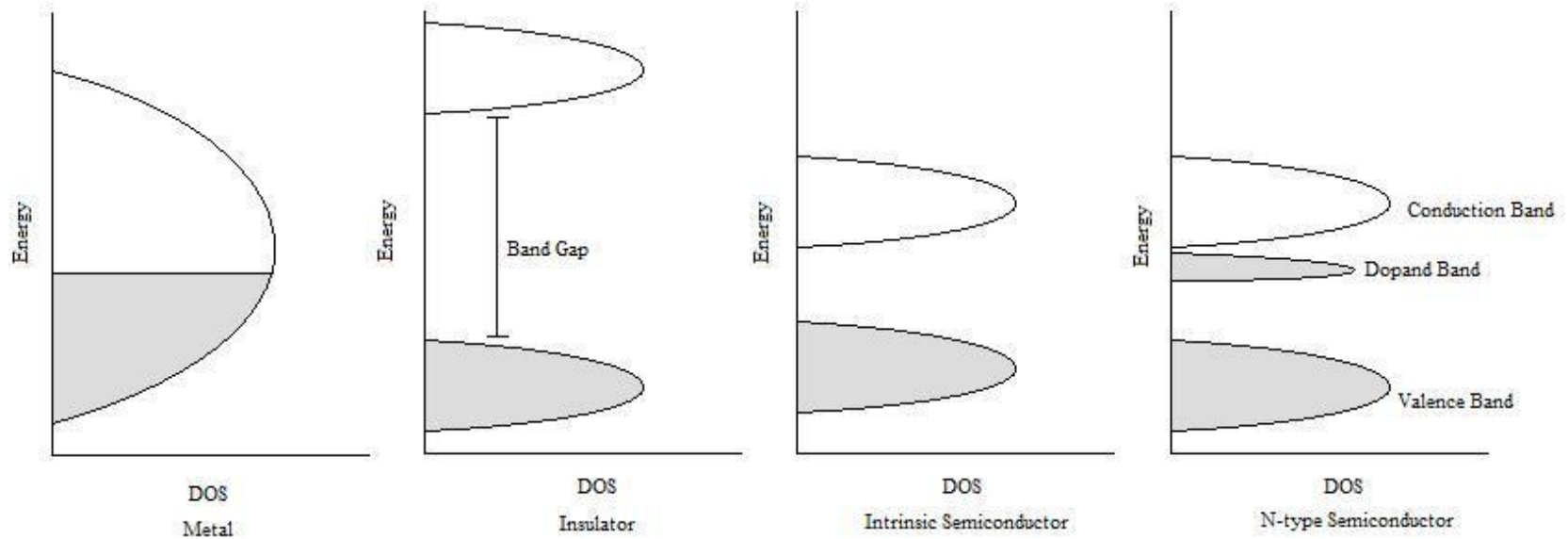


Πηγή:
<http://ecee.colorado.edu/~bart/book/actfig2.htm>
http://ecee.colorado.edu/~bart/book/book/chapter2/ch2_3.htm#2_3_4



Πηγή:
<http://ecee.colorado.edu/~bart/book/actfig2.htm>
http://ecee.colorado.edu/~bart/book/book/chapter2/ch2_3.htm#2_3_4





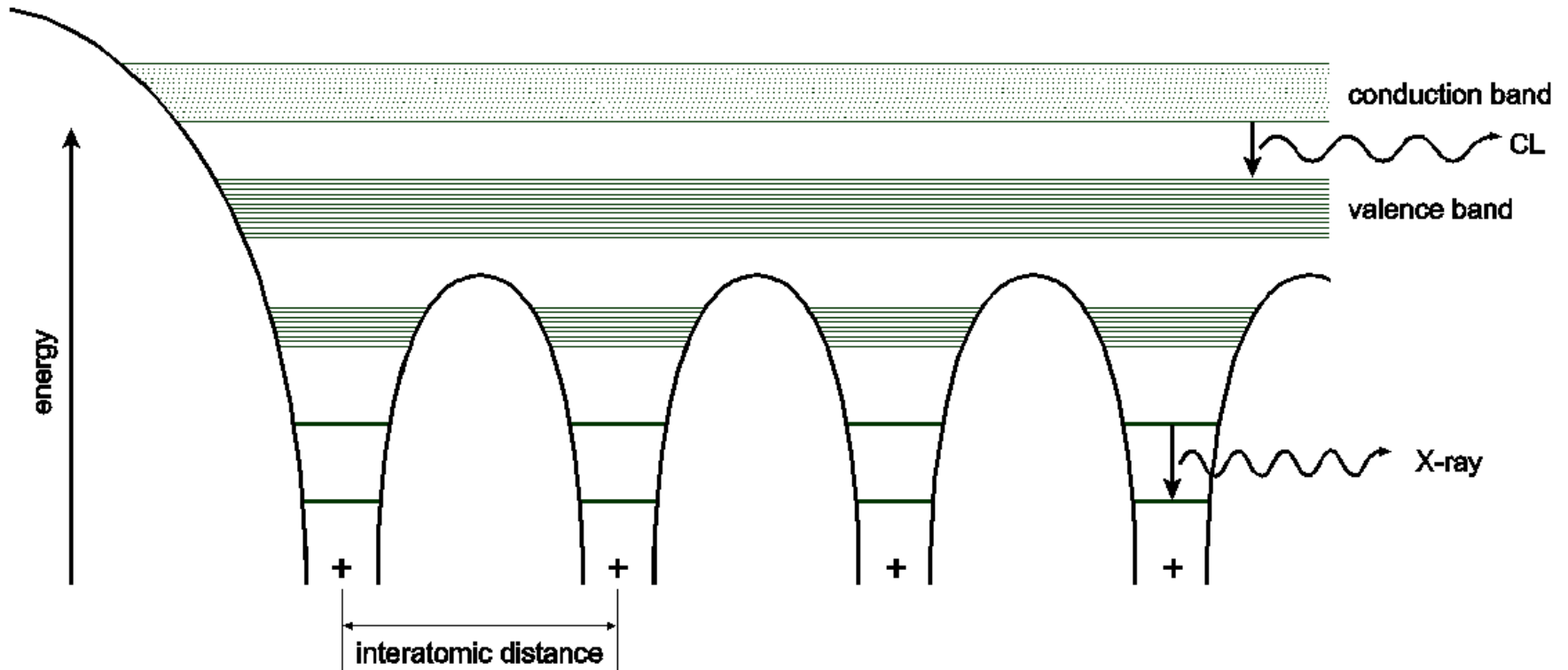
Πηγή:

<https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/5/52/MalloryBrendanTom1.jpg>

<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:MalloryBrendanTom1.jpg>



ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΖΩΝΕΣ



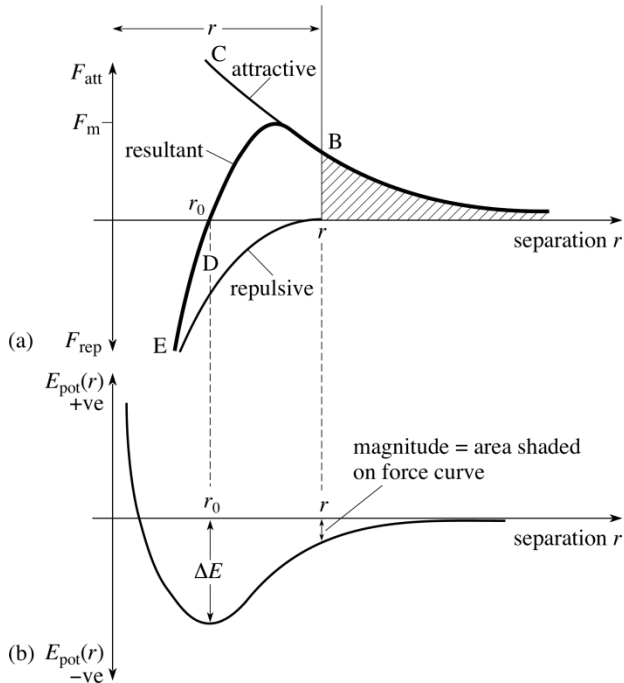
Πηγή:

<http://www.intechopen.com/source/html/17728/media/image26.png>

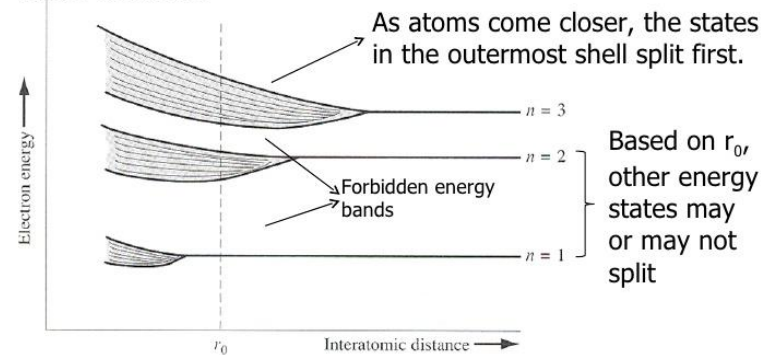
<http://www.intechopen.com/books/crystalline-silicon-properties-and-uses/defect-related-luminescence-in-silicon-dioxide-network-a-review>



ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΖΩΝΕΣ – τι είναι ;



What happens in an atom containing many more electrons?



Splitting of energy states into allowed bands of energies in an atom containing electrons up to $n=3$.

September/October 2007

Department of Microelectronics & Computer Engineering



Πηγή: TUDelft

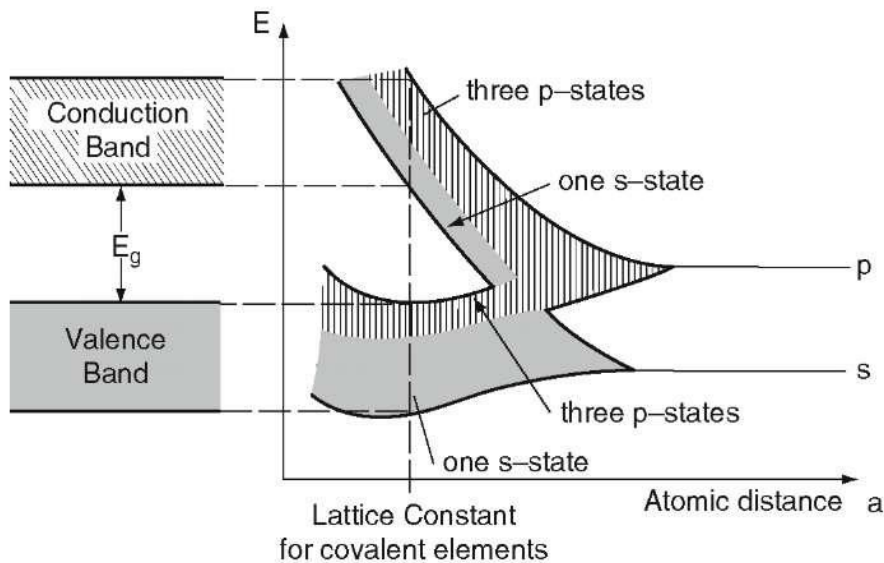
<http://www.slideshare.net/DelftOpenEr/03-introduction-to-quantum-theory-of-solids>

<http://image.slidesharecdn.com/03introtoquantumtheoryofsolids-111001105434-phpapp01/95/03-introduction-to-quantum-theory-of-solids-4-728.jpg?cb=1362115136>

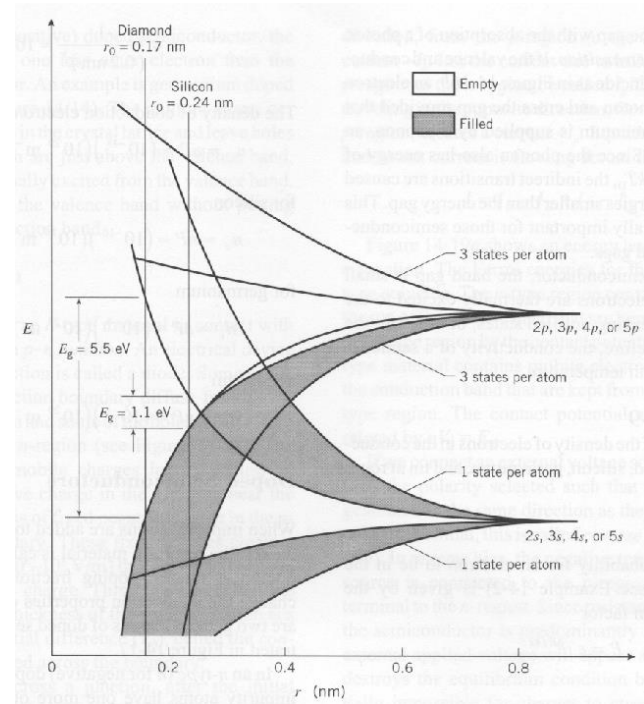
- Ισχυρός δεσμός - επικάλυψη κυματοσυναρτήσεων



επικάλυψη κυματοσυναρτήσεων



Πηγή:
<http://what-when-how.com/wp-content/uploads/2011/07/tmp6C359.jpg>

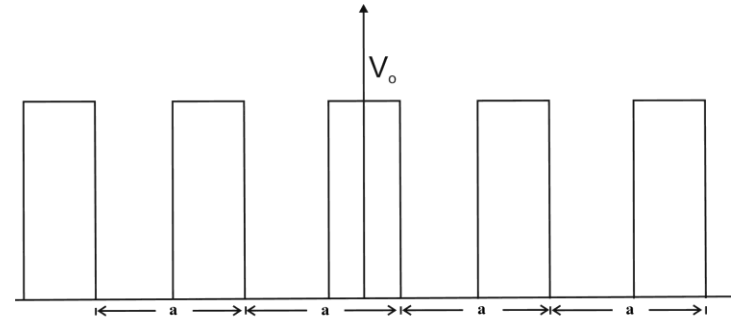


Πηγή:
http://quantummechanics.ucsd.edu/ph130a/130_notes/img1310.png



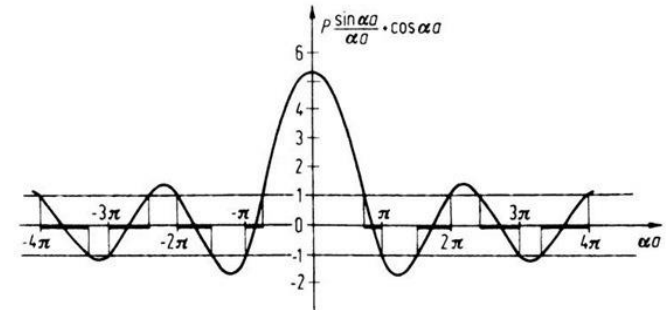
περιοδικό δυναμικό - Το μοντέλο Kroning-Penney

- περιοδικό δυναμικό $U(x+a)=U(x)$
- Εξ. Scr. $\Psi(x)=U_k(x)\exp(ikx)$
- $U_k(x+a)=U_k(x)$, π.χ $U_k(x)=\exp(-iGx)$
- Λύνουμε χωριστά για $U=U_0/2$, $U=-U_0/2$ και στα όρια επιβάλλουμε τις συνθήκες συνέχειας
- το φράγμα δυναμικού είναι συνάρτηση Dirac, (U_0 ενώ το γινόμενο U_0b μένει σταθερό)
- $\cos(ka) = P\sin(qa)/qa + \cos(qa)$
- $P=maU_0b/\hbar^2$, $q=\sqrt{2mE}/\hbar$
- ασυνέχειες στη συνάρτηση $E(k)$ για $k=n\pi/a$
- Όταν $P \rightarrow 0$, $\cos(ka)=\cos(qa) \Rightarrow E = \hbar^2k^2/2m$, δηλ. η περίπτωση του ελεύθερου ηλεκτρονίου.
- Όταν $P \rightarrow \infty$, έχουμε τις διακριτές στάθμες του άπειρου δυναμικού: το ηλεκτρόνιο είναι δεσμευμένο σε ένα ιόν



Πηγή:

<http://cnx.org/resources/d02ee217355749894d883e1515de68a9bea574e5/graphics1.png>
<http://cnx.org/contents/56fc5eaa-e47d-4664-a3c6-9f60f4153102@1>



Πηγή:

http://what-when-how.com/wp-content/uploads/2011/07/tmp6C153_thumb2_thumb.jpg
<http://what-when-how.com/electronic-properties-of-materials/solution-of-the-schrodinger-equation-for-four-specific-problems-fundamentals-of-electron-theory-part-3/>

$$\cos ka = F = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sinh \alpha b \sin \beta(a - b) + \cosh \alpha b \cos \beta(a - b)$$

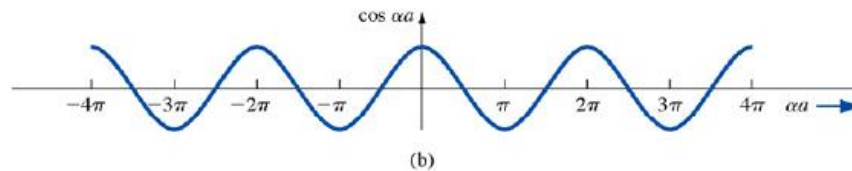
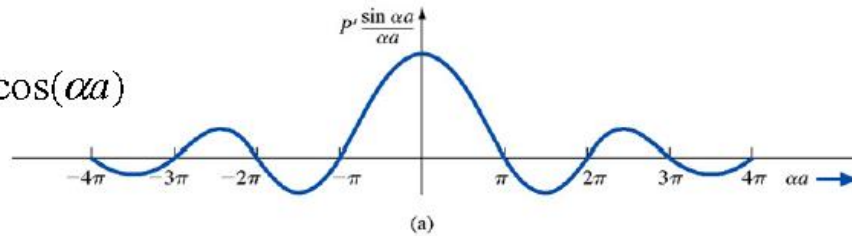
$$\text{where } \alpha = \frac{2\sqrt{E}}{\hbar} \sqrt{2mE} \text{ and } \beta = \frac{2\sqrt{V_0 - E}}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$



μοντέλο Kroning-Penney

Left side

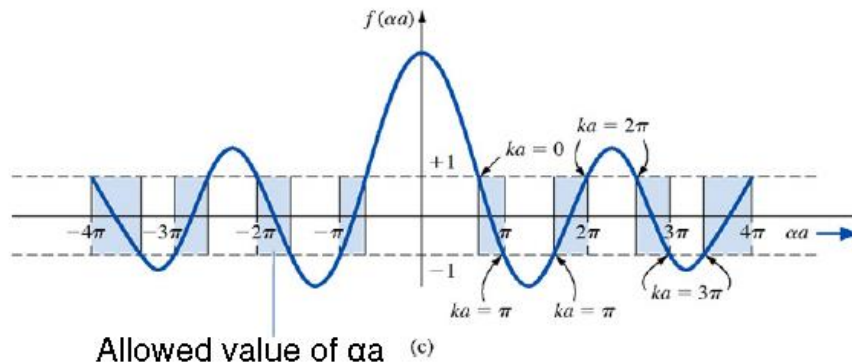
$$f(\alpha a) = P' \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a)$$



Right side

$$f(\alpha a) = \cos(ka)$$

Value must be
between -1 and 1

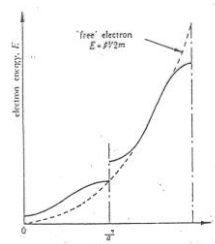


Πηγή:

<http://www.fke.utm.my/mine/SEL4233/Chapter3%20Introduction%20to%20the%20Quantum%20Theory%20of%20Solids.pdf>



ενεργειακές ζώνες «σχεδόν ελεύθερα» ηλεκτρόνια



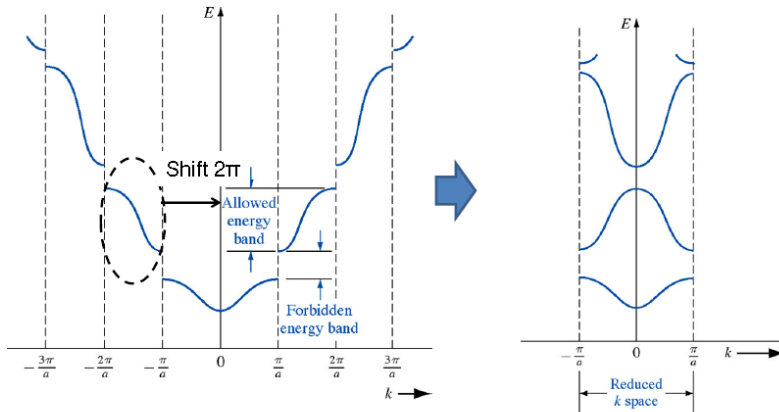
- ελεύθερο ηλεκτρόνιο - κύμα $\exp(ikx)$
- για κρύσταλλο μήκους L , σταθεράς a , με N κυψελίδες είναι: $k=2\pi m/L=2\pi m/Na$, $m=0, \pm 1, \pm 2$
- Όταν $m=(N/2)n$, τότε $k=n\pi/a$ (συνθήκη ανάκλασης Bragg $2a=n\lambda$, $\theta=0$)
- Τα ηλεκτρόνια με $k=n\pi/a$ δεν κινούνται ελεύθερα στον κρύσταλλο αλλά ανακλώνται από το πλέγμα.
- Οι κυματοσυναρτήσεις τους είναι στάσιμα κύματα, της μορφής $\psi(k)_{\pm} = (1/2)[\exp(ikx) \pm \exp(-ikx)]$, $\psi(k)_{+} = 2\cos(kx)$, $\psi(k)_{-} = i2\sin(kx)$
- δυναμική ενέργεια των κυματοσυναρτήσεων: $U_{+} = U_n$, $U_{-} = -U_n$
- για τα ηλεκτρόνια με κυματικό αριθμό $k=n\pi/a$ υπάρχουν δύο επιτρεπτές τιμές ενέργειας $E_{\pm} = E_0 \pm U_n$, ($E_0 = h^2 k^2 / 8\pi^2 m$).
- Ενδιάμεσες ενεργειακές καταστάσεις δεν υπάρχουν
- Το ενεργειακό χάσμα είναι $E_G = 2U_n$



ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΖΩΝΕΣ - ΠΕΡΙΟΔΙΚΟ ΔΥΝΑΜΙΚΟ

Right side

$$f(\alpha a) = \cos(ka) = \cos(ka + 2n\pi) = \cos(ka - 2n\pi)$$



Πηγή:

<http://www.fke.utm.my/mine/SEL4233/Chapter3%20Introduction%20to%20the%20Quantum%20Theory%20of%20Solids.pdf>

Ασυνέχειες στην $E(k)$ για $k=n\pi/a$

Για μικρές τιμές του k οι καταστάσεις είναι ίδιες.

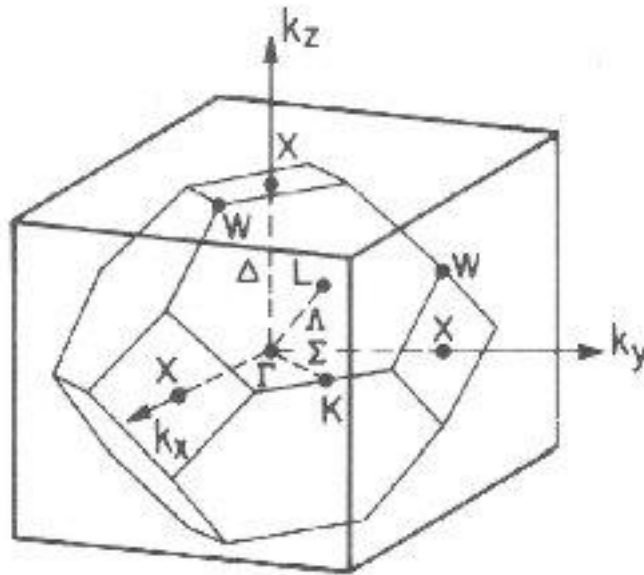
Για k κοντά στα όρια της ζώνης, οι ενεργειακές καταστάσεις μεταβάλλονται

για $k=n\pi/a$ υπάρχουν δύο επιτρεπτές τιμές ενέργειας

$$E_{\pm} = E_0 \pm U, \text{ όπου } E_0 = E = \frac{1}{2}k^2/m.$$



bandgap



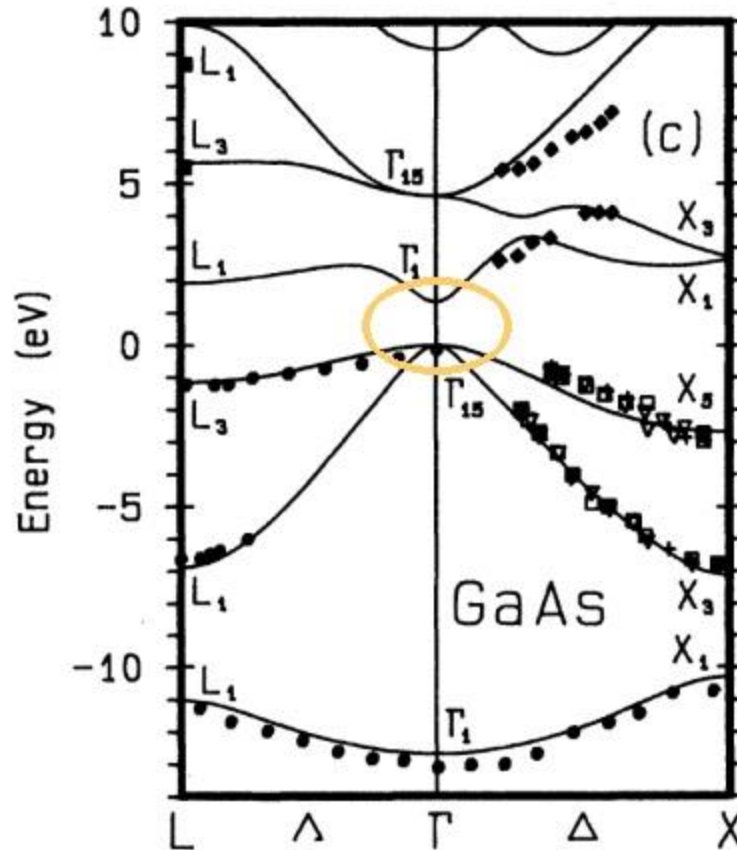
Πηγή:

http://www.nextnano.de/nextnano3/images/input_parser/database/docu/brillouin_zb.jpg

http://www.nextnano.de/nextnano3/input_parser/database/docu/effective_masses.htm



bandgap2



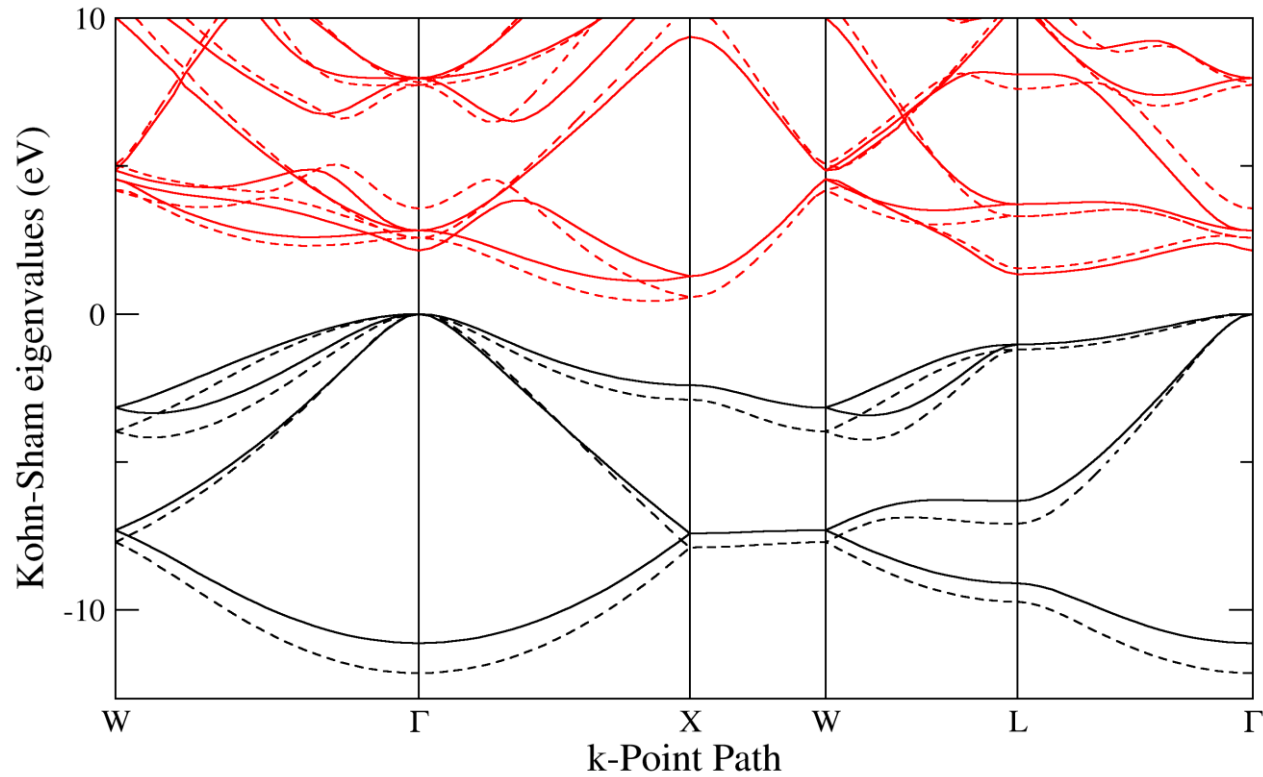
Πηγή:

<http://backreaction.blogspot.gr/2007/12/band-structure-of-gallium-arsenide.html>

http://th.physik.uni-frankfurt.de/~hossi/Bilder/BR/Plot/BandStructureGaAs_s_mark.jpg



bandgap3



Si bands

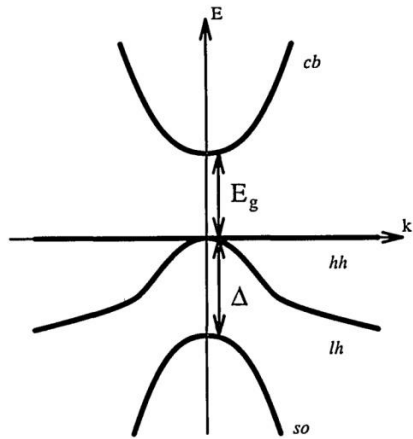
Πηγή:

http://cmt.dur.ac.uk/sjc/thesis_dbj/si_bands_modcusp_WSDA_LDA.png

http://cmt.dur.ac.uk/sjc/thesis_dbj/node75.html

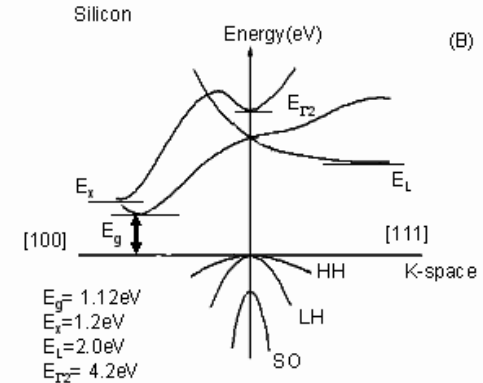
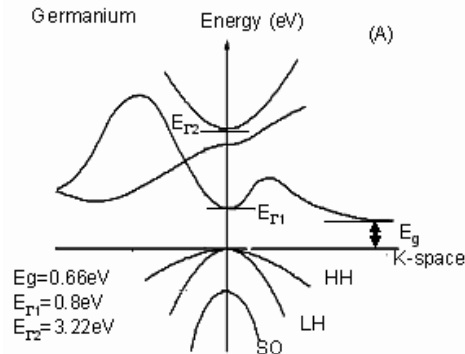


bandgap4



Zinc blende semiconductor

Πηγή:
<http://imagebank.osa.org/getImage.xg?img=dTcqLmxhcmdLGpvc2FiLTktMTlEtMjA2NS1nMDAx>
<https://www.osapublishing.org/josab/abstract.cfm?uri=josab-9-11-2065>




Πηγή:
<http://nptel.ac.in/courses/115102025/module1/img2/img28.png>
<http://nptel.ac.in/courses/115102025/module1/5.html>

One relevant conduction band is formed from S- like atomic orbitals "unit cell" part of wavefunction is approximately spherically symmetric. The three upper valence bands are formed from (three) P- like orbitals and the spin-orbit interaction splits off lowest, "split-off" hole (i. e., valence) band. The remaining two hole bands have the same energy ("degenerate") at zone center, but their curvature is different, forming a "heavy hole" (hh) band (broad), and a "light hole" (lh) band (narrower)

ενεργός μάζα

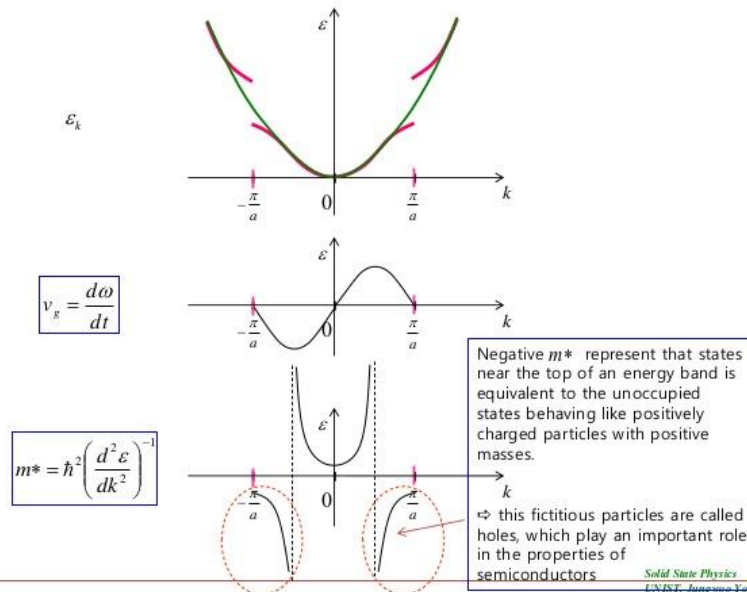
- η συνολική δύναμη στο ηλεκτρόνιο $F = m \cdot \gamma$
 $= F_{\text{ext}} + F_{\text{int}}$
- η F_{int} -από το δυναμικό των ιόντων- δεν είναι γνωστή
- *ενεργός μάζα* : ο παράγοντας αναλογίας της επιτάχυνσης γ με την F_{ext} (πεδίο) $\rightarrow F_{\text{ext}} = m^* \cdot \gamma = F - F_{\text{int}}$

 μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις εξισώσεις για την αγωγιμότητα των ελεύθερων ηλεκτρονίων (για τα οποία $F_{\text{int}} = 0$ και $F = F_{\text{ext}}$), βάζοντας όπου m την ενεργό μάζα m^*



ενεργός μάζα

Effective Mass



Συμπεριφορά Ενεργούς μάζας σε σχέση με τη θέση της στην ενεργειακή ζώνη

Πηγή: Solid State Physics UNIST, Jungwoo Yoo,
<http://image.slidesharecdn.com/solidstatephysics-05-theeffectofperiodicpotential-140531015450-phapp02/95/solid-state-physics-05the-effect-of-periodic-potential-59-638.jpg?cb=1401501420>
<http://www.slideshare.net/jongyeonglee1/solid-state-physics-05the-effect-of-periodic-potential>

$$m^* = \hbar^2 / (d^2 E / dk^2)$$

- Στο κάτω όριο της ζώνης είναι θετική και αυξάνει με το k
- Στο μέσον της ζώνης γίνεται άπειρη (τα ηλεκτρόνια δεν επιταχύνονται)
- Πάνω από το μέσον είναι αρνητική (τα ηλεκτρόνια επιβραδύνονται)



ενεργός μάζα - υπολογισμός

$$m^* = \hbar^2 / (d^2E/dk^2)$$

$$v_g = d\omega/dk$$

$$\text{επειδή } E = \hbar\omega, v_g = (1/\hbar)(dE/dk)$$

$$\gamma = dv/dt = (1/\hbar)(d^2E/dk^2)(dk/dt)$$

Το έργο της F_{ext} ($dE = FdS$) είναι

$$dE = F_{\text{ext}} v_g dt \Rightarrow F_{\text{ext}} = (1/v_g)(dE/dt) =$$

$$= (1/v_g)(dE/dk)(dk/dt) = \hbar(dk/dt)$$

$$F_{\text{ext}}/\gamma = m^* = \hbar^2 / (d^2E/dk^2)$$




Αγωγιμότητα σε πλήρεις και μη-πλήρεις ζώνες

- σε μια πλήρη ζώνη δεν υπάρχουν διαθέσιμες ενεργειακές καταστάσεις - το συνολικό ρεύμα είναι :

$$J = -e \sum_i^N \vec{v}_i = 0$$

- σε μια σχεδόν πλήρη ζώνη τα ηλεκτρόνια μπορούν να επιταχυνθούν- το συνολικό ρεύμα είναι :

Λείπει ένα
ηλεκτρόνιο με
ταχύτητα v_j


$$J = -e \sum_{i \neq j}^N \vec{v}_i = -e \sum_i^N \vec{v}_i + e \cdot \vec{v}_j = +e \cdot \vec{v}_j$$

- Το ρεύμα από τη συλλογική κίνηση των ηλεκτρονίων φαίνεται να προέρχεται από **υποθετικούς φορείς** με θετικό φορτίο



οπές

- Το υποθετικό σωματίο, που αντιστοιχεί στην κενή ενεργειακή κατάσταση λέγεται οπή.
- Η οπή έχει θετική ενεργό μάζα, (ενώ το ηλεκτρόνιο που λείπει έχει αρνητική ενεργό μάζα)
 $q_e = m \cdot \gamma$ - το πεδίο ϵ και η επιτάχυνση γ έχουν την ίδια φορά
- Η ενέργεια της οπής αυξάνεται όταν μειώνεται το k (προς τις χαμηλότερες καταστάσεις της ζώνης).



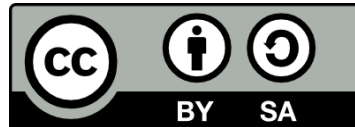
Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Λιτσαρδάκης Γεώργιος.
«Ημιαγωγά Υλικά: Θεωρία – Διατάξεις» Έκδοση: 1.0. Θεσσαλονίκη 2015.
Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:
<http://eclass.auth.gr/courses/OCRS463>.



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά - Παρόμοια Διανομή [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

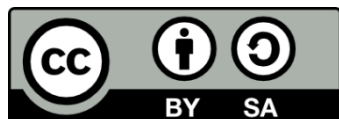
[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>





Τέλος ενότητας

Επεξεργασία: Καρανάσιος Νικόλαος
Θεσσαλονίκη, 2015



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ