ΣΧΟΛΗ ΕΜΦΕ – ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ
Ημιαγωγοί και Ημιαγώγιμες Δομές ($7^{ο}$ Εξάμηνο Σπουδών)

1η Σειρά Ασκήσεων
14/11/07
Ι. Σ. Ράπτης **Επιστροφή μέχρι 30/11/07**

1. Η σχέση διασποράς για τη ζώνη αγωγιμότητας, $E_c=E_c(\mathbf{k})$, ενός κυβικού ημιαγώγιμου υλικού, κατά μήκος της διεύθυνσης [100] του αντίστροφου χώρου, στην οποία παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο, και σε μικρές αποστάσεις γύρω απ' αυτό, (με επίπεδο αναφοράς (E=0) το μέγιστο της ζώνης σθένους), έχει τη μορφή :

$$E_c(k_x,k_y,k_z)=E_0+\frac{\hbar^2}{2m}\left[Dk_x^4-Fk_x^2+G\left(k_y^2+k_z^2\right)\right],$$

όπου E_0, D, F, και G, θετικές σταθερές, και m η μάζα του ελεύθερου ηλεκτρονίου.
(α) Δώστε τις μονάδες των E_0, D, F, και G, και προσδιορίστε τη θέση (στον αντίστροφο χώρο) και την τιμή του ελαχίστου της ζώνης αγωγιμότητας . **(β)** Αν η ζώνη σθένους του υλικού παρουσιάζει μέγιστο στο κέντρο της ζώνης Brillouin, δείξτε ότι το υλικό αυτό έχει έμμεσο ενεργειακό χάσμα και προσδιορίστε το μήκος κύματος που πρέπει να έχουν οι πλεγματικές ταλαντώσεις (φωνόνια) που θα μπορούσαν να συμμετάσχουν σε μία οπτική διέγερση ηλεκτρονίου από το μέγιστο της ζώνης σθένους στο ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας. **(γ)** Αν η θέση και η τιμή του ελαχίστου της ζώνης αγωγιμότητας είναι αντίστοιχα $\vec{k}_0=\left(\xi\frac{2\pi}{a},0,0\right)$ και $E_{C\min}=E_0-\Delta E$, (όπου $0<\xi<1$, $\Delta E>0$ και a η πλεγματική σταθερά), να υπολογιστούν τα D και F, συναρτήσει των (a, m, ξ, ΔE). **(δ)** Να υπολογιστούν η εγκάρσια και η διαμήκης μάζα του ηλεκτρονίου, κοντά στο ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας.

Λύση

(α) Οι διαστάσεις των E_0, D, F, και G προκύπτουν από την απαίτηση να έχει διαστάσεις ενέργειας (π.χ., eV) όλη η παράσταση

$$E_c(k_x,k_y,k_z)=E_0+\frac{\hbar^2}{2m}\left[Dk_x^4-Fk_x^2+G\left(k_y^2+k_z^2\right)\right]$$

$[E_0]$ = eV

Επειδή: $\left[\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right]$=eV $\Rightarrow\left[Dk^2\right]$: καθαρός αριθμός, άρα : [D]=$\frac{1}{[k^2]}$=$[L]^2$
Και [F] = [G] = καθαροί αριθμοί

Για τα ακρότατα:

$$\left.\frac{\partial E_C}{\partial k_x}\right|_{k_{x0}}=0\Rightarrow\frac{\hbar^2}{2m}\left[4Dk_x^3-2Fk_x\right]_{k_{x0}}=0\Rightarrow 2k_{x_0}\left[2Dk_{x_0}^2-F\right]=0\Rightarrow\begin{cases}k_{x_0,1}=0\\ k_{x_0,2}=\sqrt{F/2D}\end{cases}$$

$$\left.\frac{\partial^2 E_C}{\partial k_x^2}\right|_{k_{x0}}=\frac{\hbar^2}{2m}\left[12Dk_x^2-2F\right]_{k_{x0}}=\begin{cases}-\frac{F\hbar^2}{m}<0, & \gamma\iota\alpha\ k_{x_0,1}=0, & \alpha\rho\alpha:\mu\varepsilon\gamma\iota\sigma\tau o\\ 4\frac{F\hbar^2}{2m}>0, & \gamma\iota\alpha\ k_{x_0,2}=\sqrt{F/2D}, & \alpha\rho\alpha:\varepsilon\lambda\alpha\chi\iota\sigma\tau o\end{cases}$$

$\frac{\partial E_C}{\partial k_y} = \frac{G\hbar^2}{m} k_y$, $\quad \frac{\partial E_C}{\partial k_z} = \frac{G\hbar^2}{m} k_z$, που μηδενίζονται στα $k_{y_0} = k_{y_0} = 0$, οπότε :

$$\left.\frac{\partial^2 E_C}{\partial k_y^2}\right|_{k_{y0}} = \left.\frac{\partial^2 E_C}{\partial k_z^2}\right|_{k_{z0}} = G\frac{\hbar^2}{m} > 0$$, άρα, ελάχιστο

Επομένως σημείο ελαχίστου: $\left(k_{x_0} = \sqrt{\frac{F}{2D}}, 0, 0\right)$, και, για λόγους (κυβικής) συμμετρίας, τα υπόλοιπα (ισοδύναμα) σημεία ελαχίστου στον αντίστροφο χώρο είναι τα:

$\left(\pm\sqrt{\frac{F}{2D}}, 0, 0\right)$, $\left(0, \pm\sqrt{\frac{F}{2D}}, 0\right)$, $\left(0, 0, \pm\sqrt{\frac{F}{2D}}\right)$

(β) Επειδή (κατά την εκφώνηση) το $E_{V,\max}$ είναι στο $\vec{k} = \vec{0}$, ενώ (σύμφωνα με το ερώτημα (α)) το $E_{C,\min}$ βρίσκεται σε $\vec{k} \neq \vec{0}$, έχουμε υλικό έμμεσου ενεργειακού χάσματος. Προκειμένου να επιτευχθεί, π.χ. οπτική διέγερση ηλεκτρονίου, από $E_{V,\max}$ σε $E_{C,\min}$, είναι απαραίτητη η συμμετοχή, π.χ., μίας πλεγματικής ταλάντωσης που θα εξασφαλίσει την παροχή κρυσταλλικής ορμής στο διεγειρόμενο ηλεκτρόνιο. Επειδή το κυματάνυσμα του φωτονίου μίας, π.χ., οπτικής διέγερσης είναι αμελητέο σε σχέση μα τα όρια της ζώνης Brillouin, όπου εντοπίζεται το $E_{C,\min}$, (η ακριβής θέση, βέβαια, εξαρτάται από τις τιμές των σταθερών F και D), η πλεγματική ταλάντωση που θα μεσολαβήσει θα πρέπει να έχει κρυσταλλική ορμή (κυματάνυσμα) ίση με

$$q_{\max} = k_{x_0,1} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda_{phonon}} = \sqrt{\frac{F}{2D}} \Rightarrow \lambda_{phonon} = 2\pi\sqrt{\frac{2D}{F}}$$

(γ) Αν $k_{x_0,1} = \left(\xi\frac{2\pi}{a}\right) = \sqrt{\frac{F}{2D}} \Rightarrow \frac{F}{2D}\left(\xi\frac{2\pi}{a}\right)^2$ (1)

και

$$E_{C,\min} = E_C\left(k_{x_0,1},0,0\right) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\left[D\frac{F^2}{4D^2} - F\frac{F}{2D}\right] = E_0 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{F^2}{4D} \Rightarrow \Delta E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{F^2}{4D} = \frac{\hbar^2 F}{4m}\frac{F}{2D}$$

$$\overset{(1)}{\Rightarrow} \frac{4m\Delta E}{\hbar^2 F} = \xi^2\frac{4\pi^2}{a^2} \Rightarrow F = m\Delta E\left(\frac{a}{\xi\hbar\pi}\right)^2$$

Επίσης: $\boxed{D = m\Delta E\left(\frac{a}{\xi\pi}\right)^4\frac{1}{8\hbar^2}}$

(δ) $\frac{1}{m_{e,L}} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_C}{\partial k_x^2} = \frac{1}{\hbar^2}2\frac{F\hbar^2}{m} \Rightarrow \frac{1}{m_{e,L}} = \frac{2F}{m} \Rightarrow m_{e,L} = \frac{m}{2F}$

$$\frac{1}{m^*_{e,T}} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_C}{\partial k_y^2} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{G\hbar^2}{m} \Rightarrow \frac{1}{m^*_{e,T}} = \frac{G}{m} \Rightarrow m^*_{e,T} = \frac{m}{G}$$

2. Ένας ημιαγωγός με κυβική δομή αδάμαντα και έμμεσο ενεργειακό χάσμα, έχει το μέγιστο της ζώνης σθένους στο κέντρο της ζώνης Brillouin, (όπου θεωρούμε ότι $E_V(\boldsymbol{k}=0)=0$), και χαρακτηρίζεται από τα εξής μεγέθη: i) στο κέντρο της ζώνης Brillouin, $E_C(\boldsymbol{k}=0)=E_0=3.3$ eV, ii) **κοντά** σε ένα από τα έξι ισοδύναμα ελάχιστα της ζώνης αγωγιμότητας,

$$E_C(k_x,k_y,k_z)=E_0-A\cos\left[a(k_x-9.8nm^{-1})\right]-B\left[\cos(bk_y)+\cos(bk_z)\right]$$

όπου A=0.5 eV, B=0.3 eV, $a=1.1\hbar/(m_0A)^{1/2}$, $b=2.3\hbar/(m_0B)^{1/2}$, και m_0 η μάζα του ελεύθερου ηλεκτρονίου. α) Προσδιορίστε το σημείο του αντίστροφου χώρου, (k_{x0}, k_{y0}, k_{z0}) όπου η ζώνη αγωγιμότητας παρουσιάζει ελάχιστο, επιβεβαιώστε ότι το υλικό έχει έμμεσο ενεργειακό χάσμα και υπολογίστε την τιμή του E_g. β) Ποια είναι, κατά τη γνώμη σας, τα άλλα πέντε (5) σημεία του αντίστροφου χώρου, όπου η ζώνη αγωγιμότητας παρουσιάζει ισοδύναμα ελάχιστα. Δώστε τις συντεταγμένες τους, και εξηγείστε με επιχειρήματα συμμετρίας. γ) Αναπτύξτε σε σειρά Taylor, ως προς k_x, k_y, k_z, την ενέργεια της ζώνης αγωγιμότητας, **κοντά** σε ένα από τα ισοδύναμα σημεία του αντίστροφου χώρου όπου παρουσιάζει ελάχιστο, [Υπενθύμιση: $\cos(\theta)\approx 1-\theta^2/2$, για μικρές τιμές του θ], και υπολογίστε την εγκάρσια και τη διαμήκη ενεργό μάζα του ηλεκτρονίου **σε αυτές τις περιοχές** της ζώνης Brillouin.

Λύση

$$\frac{\partial E_C}{\partial k_x}=aA\sin\left[a\left(k_x-9.8\ nm^{-1}\right)\right]\Rightarrow \left.\frac{\partial E_C}{\partial k_x}\right|_{k_{x0}}=0\Rightarrow k_{x_0}=9.8\ nm^{-1}$$

και $\left.\dfrac{\partial^2 E_C}{\partial k_x^2}\right|_{k_{x0}}=a^2A>0 \quad\Rightarrow$ ελάχιστο

$\left.\dfrac{\partial E_C}{\partial k_y}\right|_{k_{y0}}=bB\sin\left(bk_{y_0}\right)=0\Rightarrow k_{y_0}=0$, και $\left.\dfrac{\partial^2 E_C}{\partial k_y^2}\right|_{k_{y0}}=b^2B\cos(bk_{y_0})=b^2B>0 \quad\Rightarrow$ ελάχιστο

Όμοια, στο $k_z=k_{z_0}=0$, έχουμε ελάχιστο.

(β) Άρα το $E_{C,\min}$ λαμβάνει χώρα στα εξής έξι (6) ισοδύναμα (λόγω κυβικής συμμετρίας) σημεία, $\left(\pm 9.8\ nm^{-1},0,0\right)$, $\left(0,\pm 9.8\ nm^{-1},0\right)$, $\left(0,0,\pm 9.8\ nm^{-1}\right)$, και επειδή το $E_{V,\max}$ παρατηρείται στο $\vec{k}=(0,0,0)$, το υλικό έχει έμμεσο ενεργειακό χάσμα..
Η τιμή του ελαχίστου υπολογίζεται σε ένα από τα 6 ισοδύναμα σημεία και βρίσκεται η τιμή του ενεργειακού χάσματος
$E_g=E_0-(A+2B)=\left[3.3-(0.5+2\times 0.3)\right]eV=2.2\ eV$

(γ) Αναπτύσσοντας κατά Taylor στην περιοχή του ελαχίστου, έχουμε:

$$E_C=E_0-A\left[1-\frac{a^2\left(k_x-9.8\ nm^{-1}\right)^2}{2}\right]-B\left[1-\frac{b^2k_y^2}{2}+1-\frac{b^2k_z^2}{2}\right]$$

$\dfrac{1}{m_{e,L}^*}=\dfrac{1}{\hbar^2}\dfrac{\partial^2 E_C}{\partial k_x^2}=\dfrac{1}{\hbar^2}Aa^2\Rightarrow m_{e,L}^*=\dfrac{\hbar^2}{Aa^2}$. Όμοια $m_{e,T}^*=\dfrac{\hbar^2}{Bb^2}$

Οπότε: $m_{e,L}^*=0.826m_0$, και $m_{e,T}^*=0.189m_0$

3. Ενδογενής ημιαγωγός με δομή αδάμαντα και πλεγματική σταθερά a, έχει μέγιστο της ζώνης σθένους στο κέντρο της ζώνης Brillouin (σημείο Γ) και παρουσιάζει την εξής δομή ζώνης-αγωγιμότητας:

i) υπάρχουν έξι (6) ελάχιστα στα 6 ισοδύναμα σημεία Χ, [στα όρια της ζώνης Brillouin, κατά μήκος της διεύθυνσης (0,0,k) και των συμμετρικά ισοδυνάμων διευθύνσεων του αντίστροφου χώρου], με ενέργεια E_X,ως προς το μέγιστο της ζώνης σθένους,

ii) υπάρχει επίσης ένα τοπικό ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας, στο σημείο Γ της ζώνης Brillouin, με ενέργεια E_Γ, ως προς το μέγιστο της ζώνης σθένους,και $E_\Gamma > E_X$.

Οι ενεργές μάζες των ελευθέρων ηλεκτρονίων, στη ζώνη αγωγιμότητας είναι $m^*(\Gamma)$, $m^*(X)_{||}$, $m^*(X)_\perp$.

α) Δώστε, συναρτήσει του a, τις συντεταγμένες (k_x, k_y, k_z) των 6 ισοδύναμων τοπικών ελαχίστων $E_C(X)$.

β) Με ενεργειακό επίπεδο αναφοράς το μέγιστο της ζώνης σθένους, γράψτε μία έκφραση για την ενέργεια των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας, που έχουν κρυσταλλική ορμή (k_x, k_y, k_z) τέτοια ώστε να ευρίσκονται, ενεργειακά, λίγο πάνω από το τοπικό ελάχιστο $E_C(\Gamma)$

γ) Μέ ενεργειακό επίπεδο αναφοράς το μέγιστο της ζώνης σθένους, γράψτε μία έκφραση για την ενέργεια των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας, που έχουν κρυσταλλική ορμή (k_x, k_y, k_z) τέτοια ώστε να ευρίσκονται, ενεργειακά, λίγο πάνω από το τοπικό ελάχιστο $E_C(X)$, κοντά σε ένα από τα 6 σημεία της ερώτησης (α), το οποίο μπορείτε να επιλέξετε ελεύθερα.

δ) Ποια σχέση πρέπει να ικανοποιούν τα μεγέθη $m^*(\Gamma)$, $m^*(X)_{||}$, $m^*(X)_\perp$, ώστε να υπάρχει πεπερασμένη θερμοκρασία κατά την οποία οι πυκνότητες ηλεκτρονίων στα ελάχιστα Γ και Χ να εξισώνονται;

ε) Στην περίπτωση που ικανοποιείται η συνθήκη (δ), υπολογίστε, συναρτήσει των E_Γ, E_X, $m^*(\Gamma)$, $m^*(X)_{||}$, $m^*(X)_\perp$, τη θερμοκρασία κατά την οποία εξισώνονται οι πυκνότητες ηλεκτρονίων στα δύο ελάχιστα (Γ και Χ) της ζώνης αγωγιμότητας;

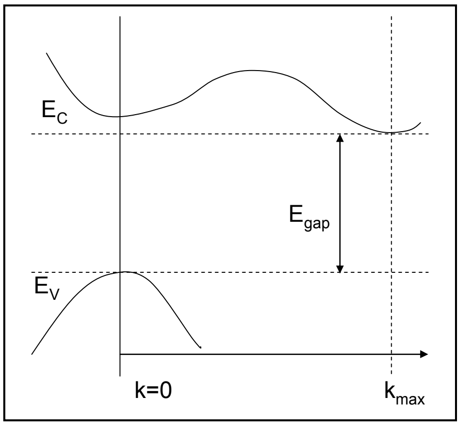
Λύση

(α)Τα έξι ισοδύναμα ελάχιστα βρίσκονται στα σημεία

$$\left(\pm\frac{2\pi}{a}, 0, 0\right),\ \left(0, \pm\frac{2\pi}{a}, 0\right),\ \left(0, 0, \pm\frac{2\pi}{a}\right),$$

Αφού $2\pi/a$ είναι το όριο της ζώνης Brillouin, με a την πλεγματική σταθερά.

(β) Η δομή ζώνης, όπως περιγράφεται στην άσκηση, έχει την παρακάτω μορφή, όπου



k=0 : το σημείο Γ του αντίστροφου χώρου

και

$k=k_{max}$: το σημείο Χ του αντίστροφου χώρου

(γ) Η ενέργεια των ηλεκτρονίων κοντά στο ελάχιστο (σημείο: Χ) της ζώνης αγωγιμότητας γράφεται :

$$E_{C,X}(\vec{k}) = E_{C,X} + \frac{\hbar^2\left(k_x - {2\pi}/{a}\right)}{2m_{\|}^*(X)} + \frac{\hbar^2\left(k_y^2 + k_z^2\right)}{2m_{\perp}^*(X)}$$

(δ) Προκειμένου να εξισωθούν οι πυκνότητες ηλεκτρονίων στα ελάχιστα X και Γ πρέπει

$$N_{C,\Gamma} e^{-\frac{E_{C,\Gamma}-E_F}{kT}} = N_{C,X} e^{-\frac{E_{C,X}-E_F}{kT}} \Rightarrow \left(\frac{m_\Gamma^*}{m_X^*}\right)^{3/2} = \frac{e^{-\frac{E_{C,X}-E_F}{kT}}}{e^{-\frac{E_{C,\Gamma}-E_F}{kT}}} = e^{\frac{-E_X+E_F+E_\Gamma-E_F}{kT}} \Rightarrow \left(\frac{m_\Gamma^*}{m_X^*}\right)^{3/2} = e^{\frac{E_\Gamma-E_X}{kT}}$$

όπου

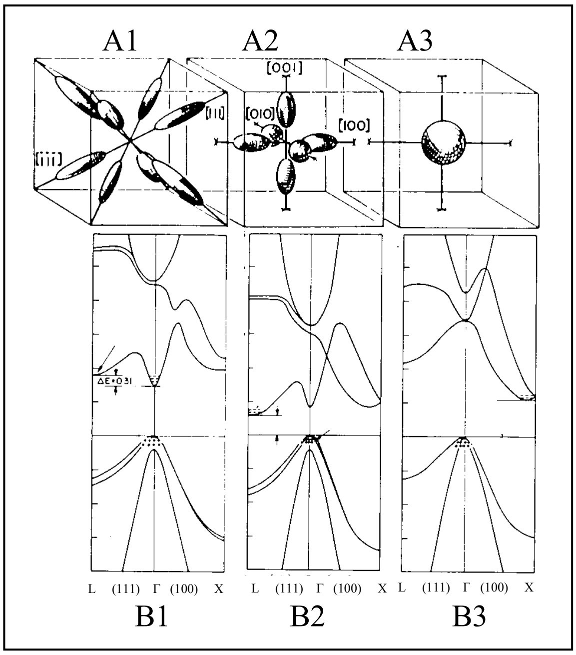
$m_X^{*\,3} = M^2\left(m_\perp^2 m_{\|}\right) \Rightarrow \left(m_X^*\right)^{3/2} = M\left(m_\perp^2 m_{\|}\right)^{1/2}$, οπότε

$$\frac{m_\Gamma^{3/2}}{M\left(m_\perp^2 m_{\|}\right)} = e^{\frac{E_\Gamma-E_X}{kT}} \Rightarrow kT = \frac{2\left(E_\Gamma - E_X\right)}{\ln\left({m_\Gamma^3}/{m_\perp^2 m_{\|}}\right)}.$$

Επομένως, προκειμένου να υπάρχει $T>0$ που να ικανοποιείται η προηγούμενη σχέση πρέπει $\ln\left({m_\Gamma^3}/{m_\perp^2 m_{\|}}\right) > 0 \Rightarrow m_\Gamma^3 > m_\perp^2 m_{\|}$.

(ε) Στην περίπτωση που ικανοποιείται η προηγούμενη συνθήκη (ερώτημα (γ)), η θερμοκρασία στην οποία εξισώνονται οι συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων στα δύο ελάχιστα, δίνεται από τη σχέση

$$T = \frac{2\left(E_\Gamma - E_X\right)}{k\ln\left({m_\Gamma^3}/{m_\perp^2 m_{\|}}\right)}$$



4. Στο διπλανό σχήμα φαίνονται: **i)** ισοενεργειακές επιφάνειες, $E_C(\boldsymbol{k})$=σταθ., γύρω από το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας στον αντίστροφο χώρο, (k_x, k_y, k_z), για τρία ημιαγώγιμα υλικά (A1, A2, A3), και **ii)** τρείς δομές ζώνης, (σχέσεις διασποράς, B1, B2, B3), που αντιστοιχούν στα ίδια υλικά, ΑΛΛΑ ΟΧΙ ΜΕ ΤΗΝ ΙΔΙΑ ΣΕΙΡΑ. **iii)** Για τα ίδια υλικά, δίνονται στον παρακάτω πίνακα τιμές για τον αριθμό των ισοδυνάμων ακροτάτων και τις ενεργές μάζες, ΜΕ ΤΗΝ ΣΩΣΤΗ ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΙΑ.

	Si (M=6)	Ge (M=4)	GaAs
($m_\perp$ /$m_{\|\|}$)	0.19/0.91	0.08/1.60	0.07/0.07
(m_{lh} /m_{hh})	0.15/0.54	0.04/0.30	0.07/0.50
(α)–A(1,2,3)			
(β)–B(1,2,3)			
(γ)			
(δ)			

Συμπληρώστε τον Πίνακα, γράφοντας κάτω από κάθε στοιχείο, (Si, Ge, GaAs), τη σωστή αντιστοιχία α) των ισοενεργειακών επιφανειών, β) των σχέσεων διασποράς, γ) την ενεργό μάζα πυκνότητας καταστάσεων ηλεκτρονίων, δ) την ενεργό μάζα πυκνότητας καταστάσεων οπών για κάθε υλικό.
ε) Εξηγήστε τις τιμές M=6 και M=4 του Πίνακα.

Λύση

	Si (M=6)	Ge (M=4)	GaAs
($m_\perp$ /$m_{\|\|}$)	0.19/0.91	0.08/1.60	0.07/0.07
(m_{lh} /m_{hh})	0.15/0.54	0.04/0.30	0.07/0.50
(α)–A(1,2,3)	**A2**	**A1**	**A3**
(β)–B(1,2,3)	**B3**	**B2**	**B1**
(γ)	**1.058**	**0.547**	**0.070**
(δ)	**0.591**	**0.309**	**0.517**

(γ) $m_e^{*3} = M^2\left(m_\perp^2 m_{\|}\right)$

(δ) $m_h^* = \left(m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}\right)^{2/3}$

(α) Αφού ο αριθμός των ισοδύναμων ελαχίστων της ζώνης αγωγιμότητας είναι M=6, για το Si και M=4 για το Ge, τότε, στο Si αντιστοιχούν οι ισοενεργειακές επιφάνειες A2 με τα M=6 ελλειψοειδή. Στο Ge, με M=4, αντιστοιχούν οι ισοενεργειακές επιφάνειες A1, όπου τα 8 ελλειψοειδή έχουν το κέντρο τους ακριβώς στα όρια της ζώνης Brillouin, επομένως συνεισφέρουν μόνο κατά το ήμισυ (M= 8/2 = 4) στην αγωγιμότητα. Η ισοενεργειακή επιφάνεια A3 παρουσιάζει ένα μόνο ελάχιστο στο k=0, επομένως αντιστοιχεί στο GaAs, για το οποίο δεν αναγράφεται αριθμός ισοδύναμων ελαχίστων (άρα M=1).

(β) Με βάση τις απαντήσεις που έχουν δοθεί στο ερώτημα (α), οι σχέσεις διασποράς B1, που παρουσιάζουν ελάχιστο στο k=0, αντιστοιχούν στο GaAs. Όμοια, οι σχέσεις διασποράς B2 που παρουσιάζουν ελάχιστο κατά μήκος του άξονα k (1,1,1), αντιστοιχούν στο Ge, ενώ οι B3, που παρουσιάζουν ελάχιστο κατά μήκος του άξονα k(1,0,0), αντιστοιχούν στο Si.