

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

1^η 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 :

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

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 (φωτόνια) 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 $\mathbf{k}_0 = \left(\xi \frac{2\pi}{a}, 0, 0 \right)$ και $E_{c\min} = E_0 - \Delta E$, (όπου $0 < \xi < 1$, $\Delta E > 0$ και a :

πλεγματική σταθερά), να υπολογιστούν τα D και F , συναρτήσει των $(a, m, \xi, \Delta E)$. (δ) Να υπολογιστούν η εγκάρσια και η διαμήκης μάζα του ηλεκτρονίου, κοντά στο ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας.

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 $E_V(\mathbf{k}=0)=0$), και χαρακτηρίζεται από τα εξής μεγέθη: i) στο κέντρο της ζώνης Brillouin, $E_C(\mathbf{k}=0)=E_0=3.3$ 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, $a=1.1\sqrt{\hbar/(m_0A)^{1/2}}$, $b=2.3\sqrt{\hbar/(m_0B)^{1/2}}$, 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) Ποιά 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 εξηγήστε 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.

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 X, [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.

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

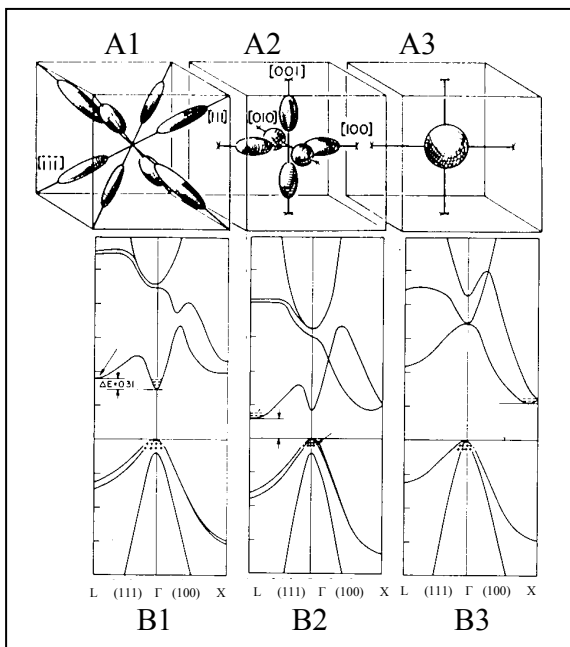
α) Δώστε, συναρτήσει του a , τις συντεταγμένες (k_x , k_y , k_z) των 6 ισοδυνάμων τοπικών ελαχίστων $E_C(X)$.

β) 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 $E_C(\Gamma)$

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) Ποιά 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 X να εξισώνονται;

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



4. Στο διπλανό σχήμα φαίνονται: i) ισοενεργειακές επιφάνειες, $E_C(\mathbf{k})$ =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) τρεις 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), την 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.