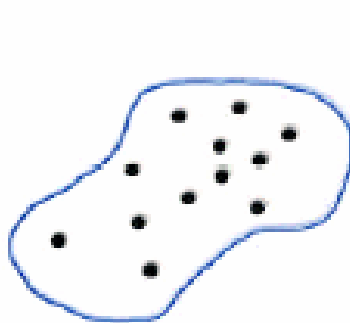


## Ημιαγώγιμα Υλικά

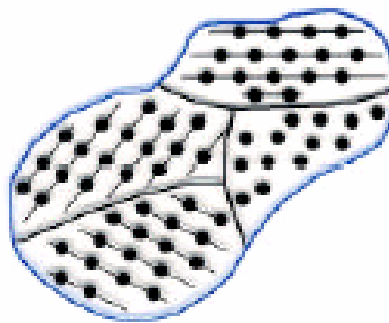
II	III	IV	V	VI
	B	C	N	
	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In		Sb	Te

Elemental	IV-IV compounds	III-V compounds	II-VI compounds
Si	SiC	GaN	ZnS
Ge	SiGe	GaAs	ZnTe
		InP	CdTe
		GaP	
		InSb	

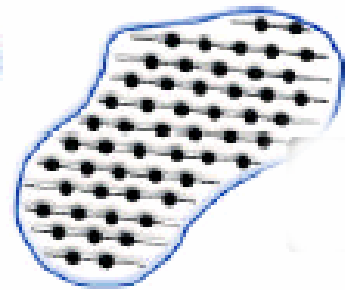
## Δομές Πλέγματος



Άμορφο

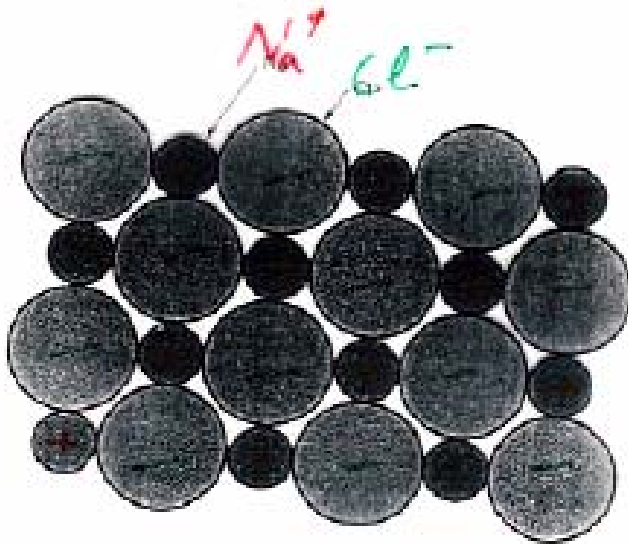


Πολύ-κρυσταλλικό

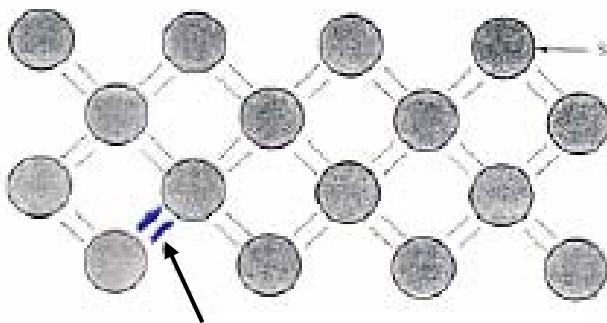


Κρυσταλλικό

# Δυνάμεις Συνοχής (Bonding Forces)

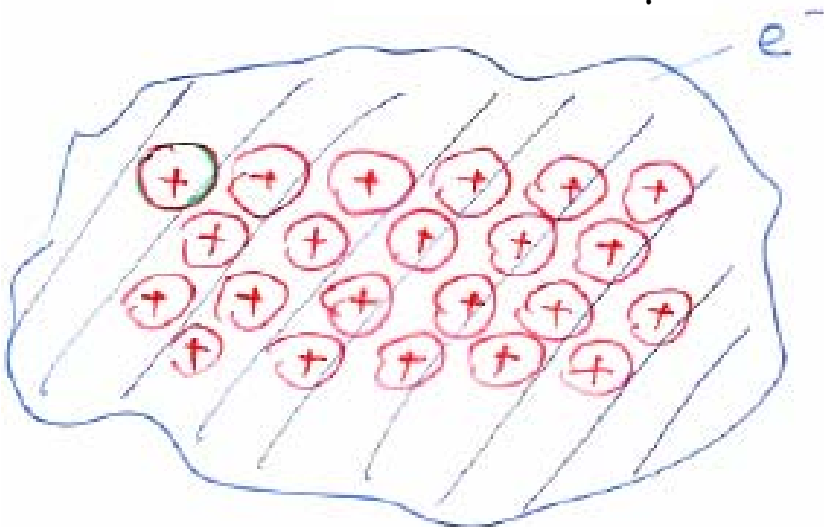


Ιονικοί  
(Μονωτές)



Ομοιοπολικοί  
(Ημιαγωγοί)

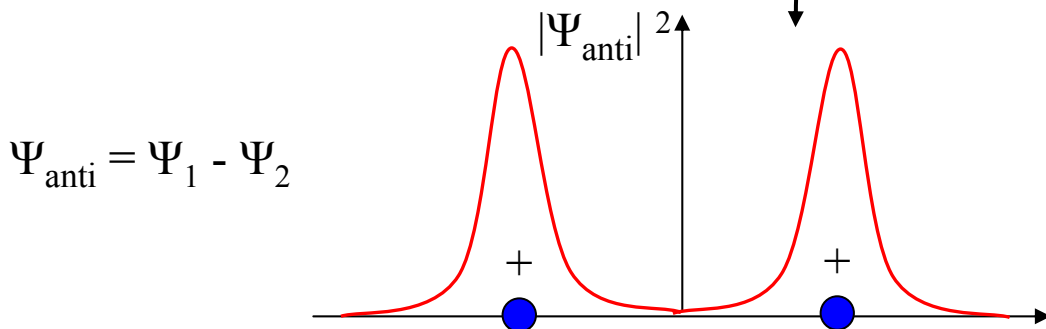
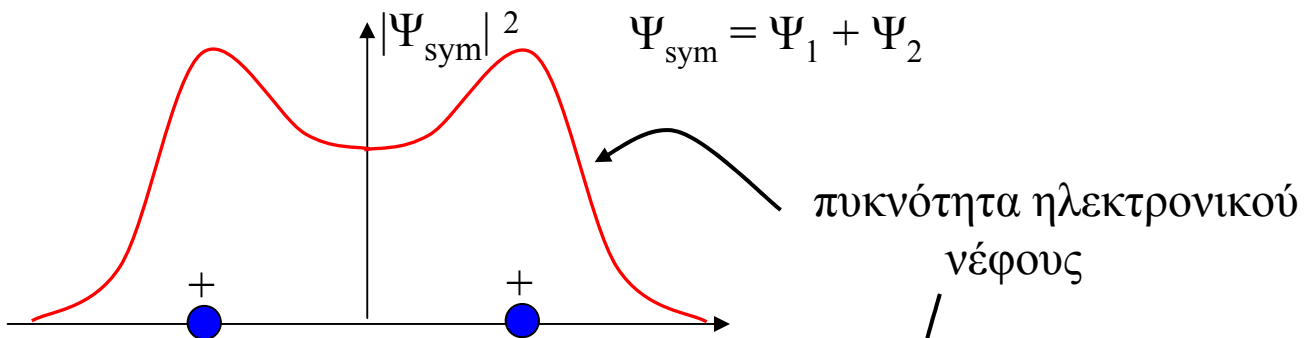
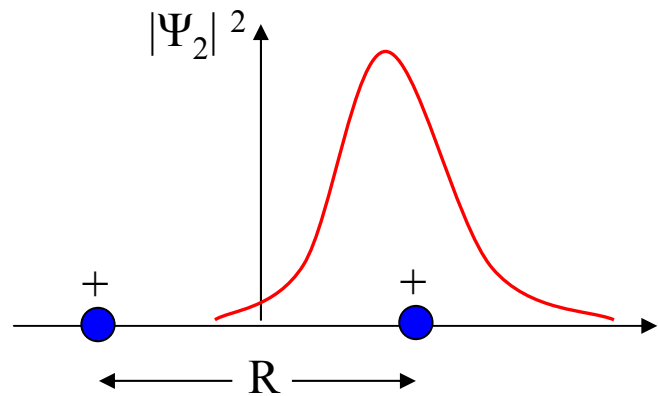
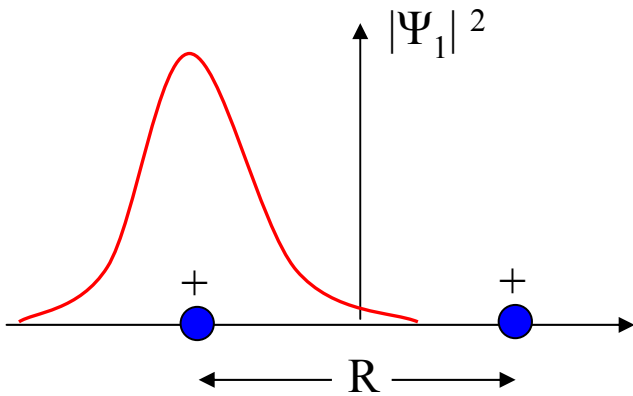
δυο  $e^-$  ανά δεσμό

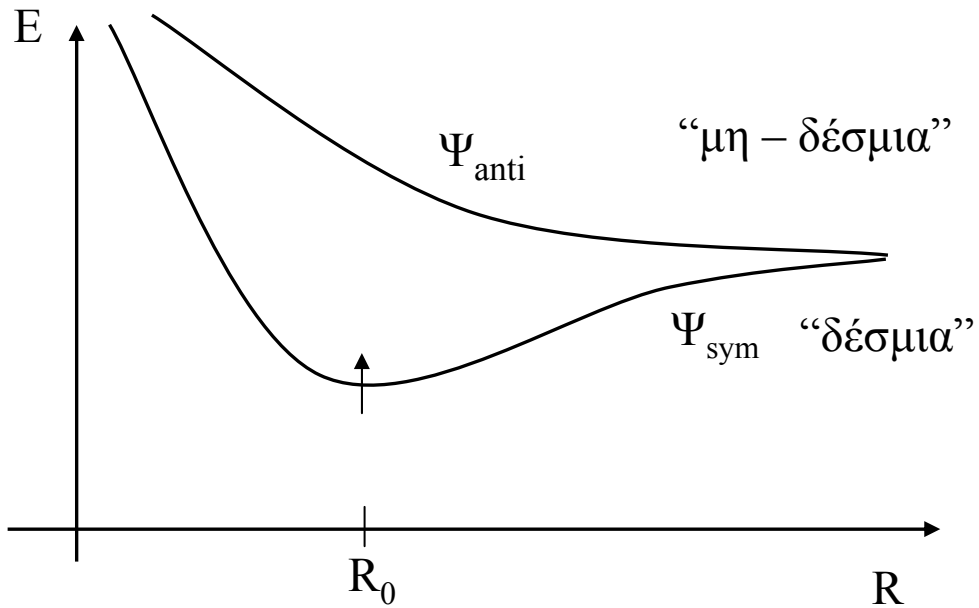


Μεταλλικοί  
(Μέταλλα)

# Ομοιοπολικοί Δεσμοί

- Ας εξετάσουμε  $H_2^+$ : 2 πρωτόνια + 1 ηλεκτρόνιο
- Οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για 2 πρωτόνια προκύπτουν με υπέρθεση των κυματοσυναρτήσεων δυο απομονωμένων ατόμων

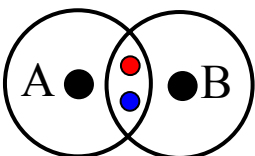




- $R_0$  είναι απόσταση ισορροπίας στο  $H_2^+$
- Το ηλεκτρόνιο καταλαμβάνει δέσμια τροχιακά
- Για το  $H_2$  το δεύτερο ηλεκτρόνιο καταλαμβάνει δέσμιο τροχιακό με αντίθετο spin

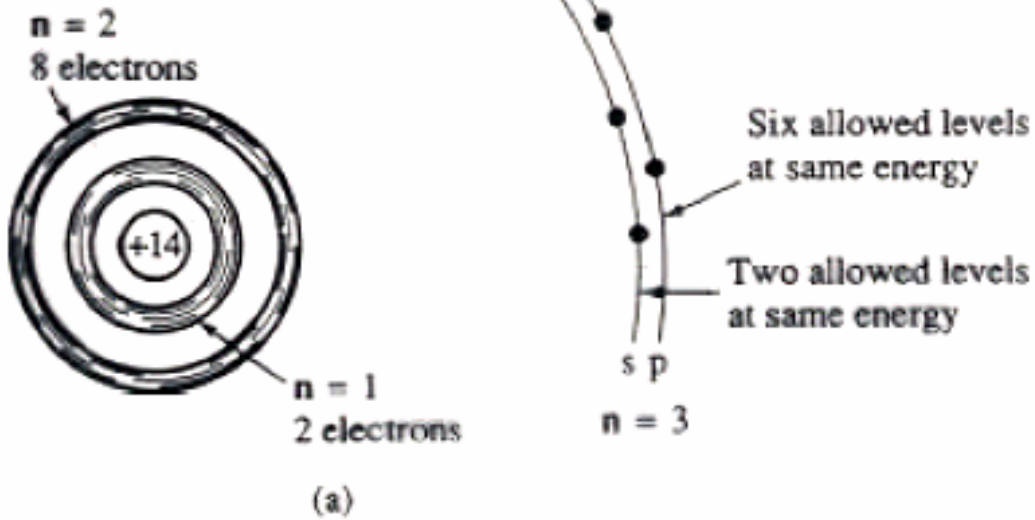


- Ομοιοπολικοί δεσμοί - σχηματίζονται με ανταλλαγή δυο ηλεκτρονίων

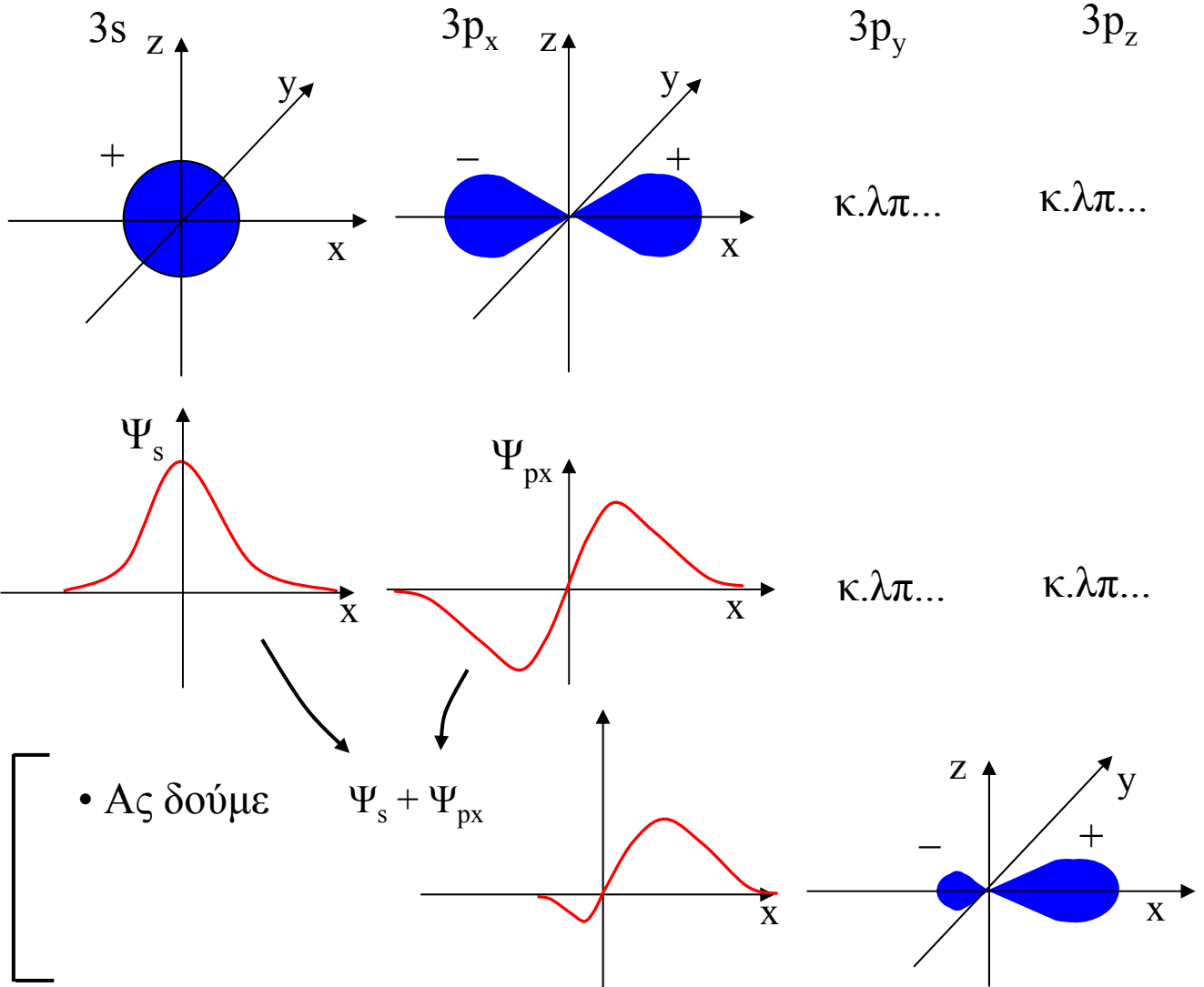


# Si-atom

14 electrons



- Εξωτερικά ηλεκτρόνια στα 3s και 3p τροχιακά
- Όλες οι καταστάσεις πρέπει να συμπεριληφθούν για να δώσουν λύσεις της εξ. Schrödinger για Si – Si στο κρύσταλλο
- Έχουμε τέσσερεις καταστάσεις τροχιακών



- Οι σωστοί συνδυασμοί είναι:

$$\Psi_1 = s + p_x + p_y + p_z$$

$$\Psi_2 = s + p_x - p_y - p_z$$

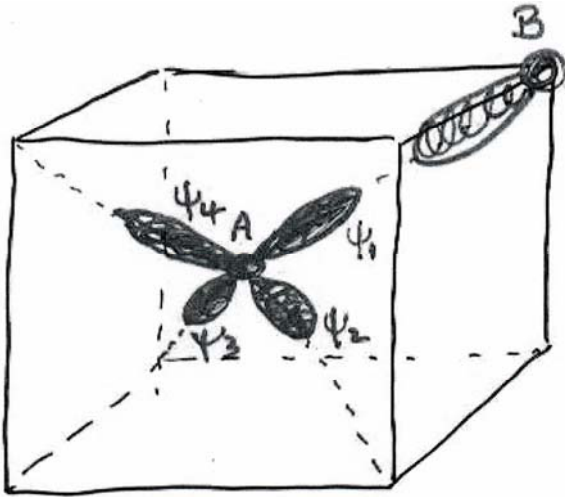
(να συμπεριληφθούν όλες οι καταστάσεις)  
 (κοιτάει προς την διεύθυνση  $\langle 111 \rangle$ )  
 (--- // --- // ---  $\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$ )

$$\Psi_3 = s - p_x + p_y - p_z$$

$$\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$$

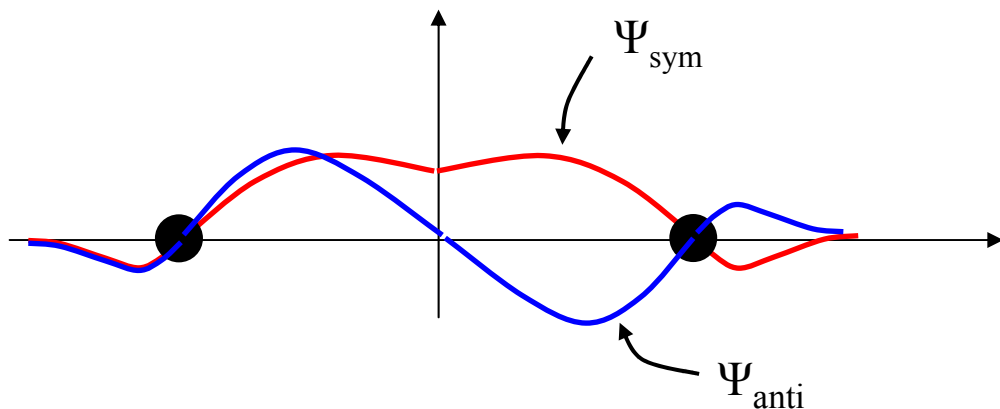
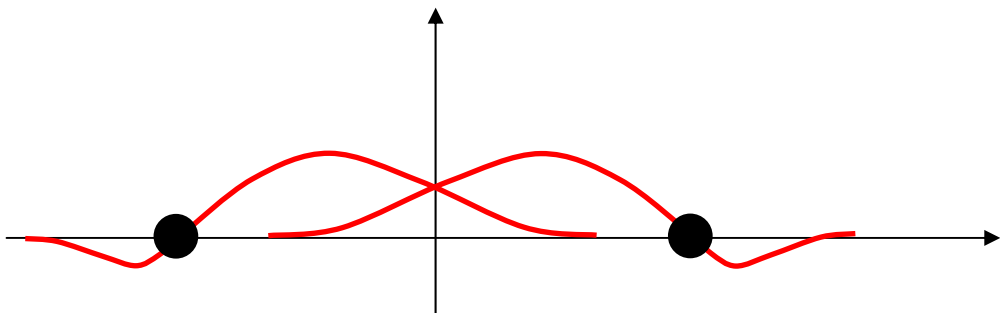
$$\Psi_4 = s - p_x - p_y + p_z$$

$$\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$$

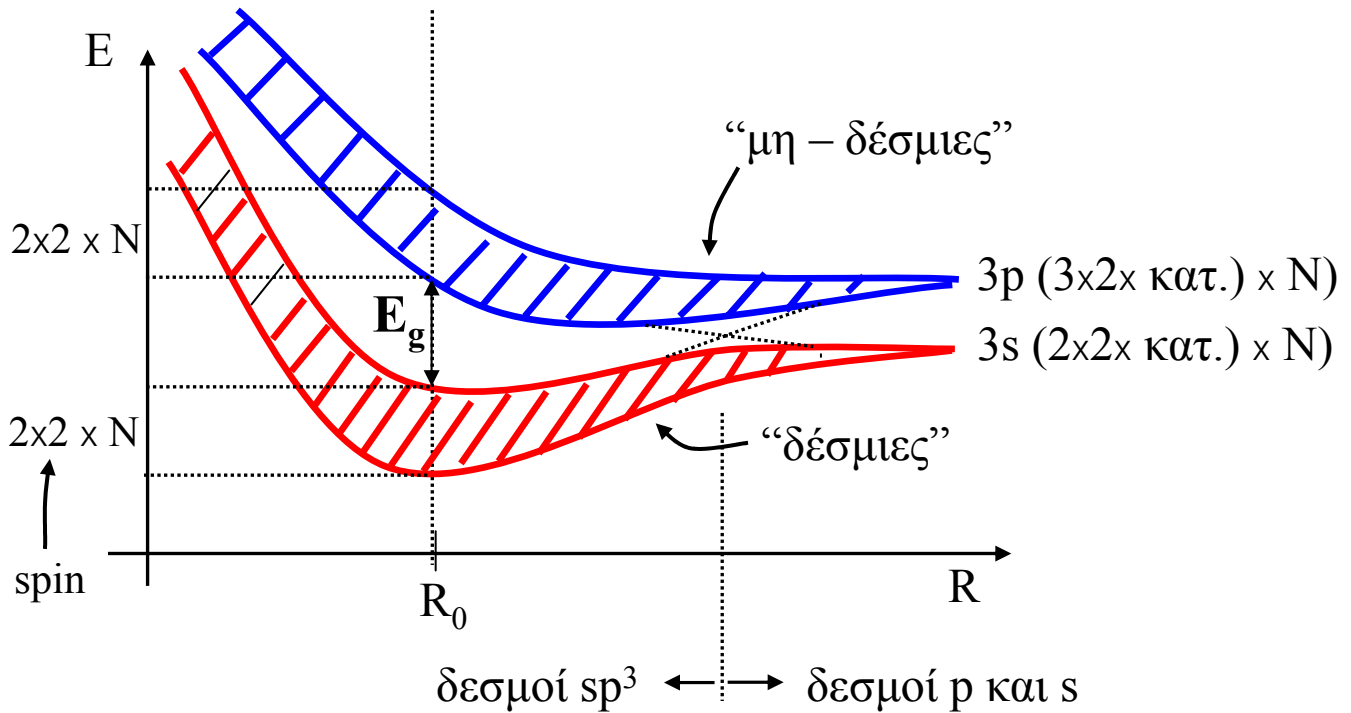


“sp<sup>3</sup>” τροχιακά

- sp<sup>3</sup> τροχιακά από γειτονικά άτομα του Si σχηματίζουν δέσμιους και μη-δέσμιους συνδυασμούς: -

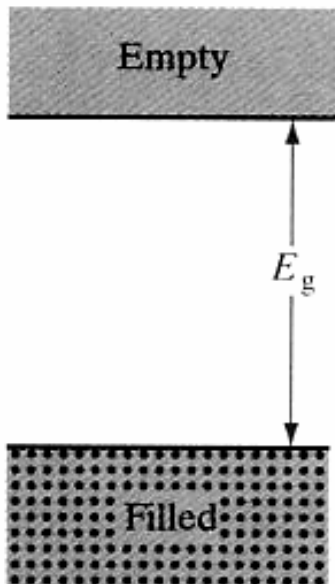


# Ενέργεια ηλεκτρονίου vs. απόσταση Si - Si



- Δέσμιες καταστάσεις  $\longrightarrow$  **Ζώνη Σθένους (ZΣ)**
- Μη-δέσμιες καταστάσεις  $\longrightarrow$  **Ζώνη Αγωγιμότητας (ZA)**
- Τα ηλεκτρόνια  $e^-$  συμπληρώνουν όλη την ZΣ
  - $N$  Si άτομα  $\times$  4  $\longrightarrow$  4  $N$  ηλεκτρόνια
- Προσέγγιση Tight - binding  
(γραμμικός συνδυασμός των ατομικών τροχιακών)

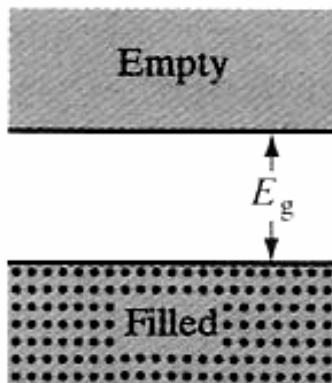




Μονωτής

$$E_g \gg kT$$

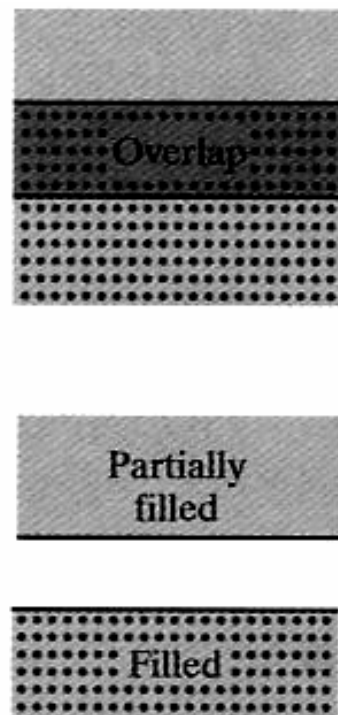
δεν έχουμε  
ελεύθερους  
φορείς



Ημιαγωγός

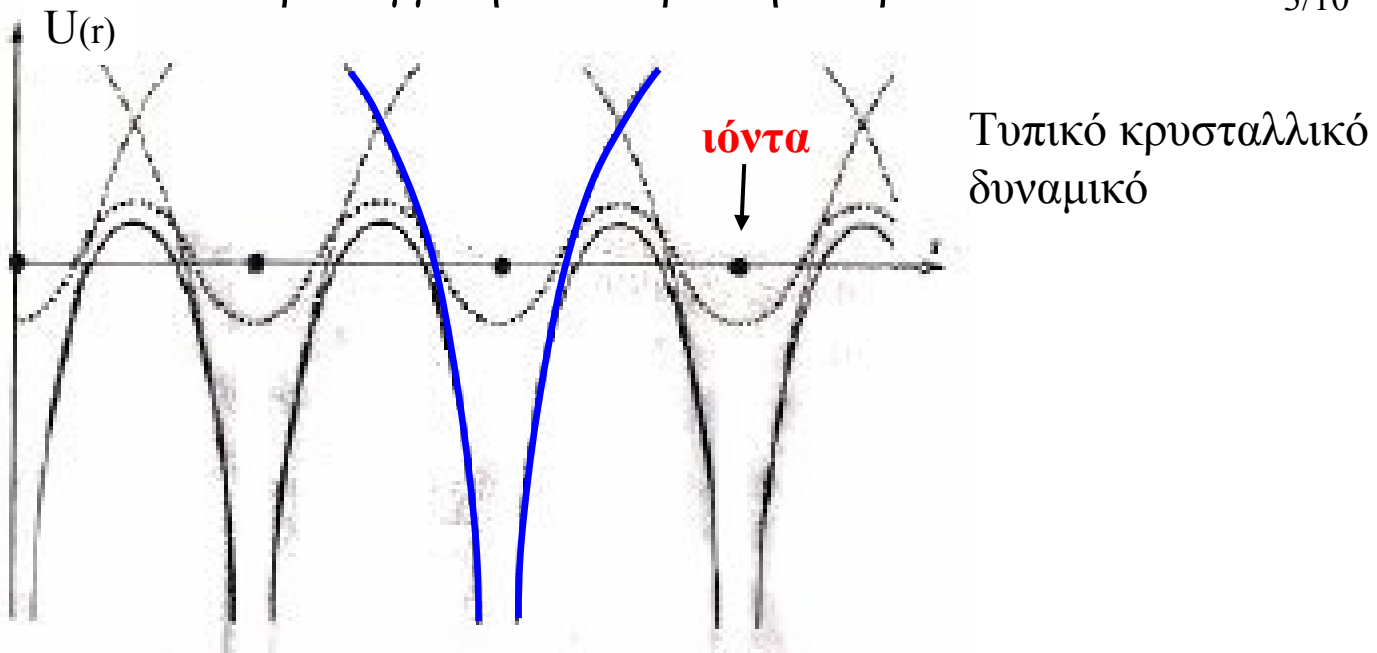
$$E_g \sim kT$$

έχουμε  
ελεύθερους  
φορείς  $\sim T$



Μέταλλο

έχουμε πάντα  
ελεύθερους  
φορείς  $\sim T$



Εξίσωση Schrödinger για ένα ηλεκτρόνιο είναι

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right) \psi = E\psi$$

$$U(r + R) = U(r) \longrightarrow \text{ενεργό δυναμικό ενός ηλεκτρονίου}$$

για όλα ανύσματα του πλέγματος Bravais

$$\psi_k(x) = u(k_x, x) e^{ik_x x} \longrightarrow \text{συνάντηση Bloch}$$

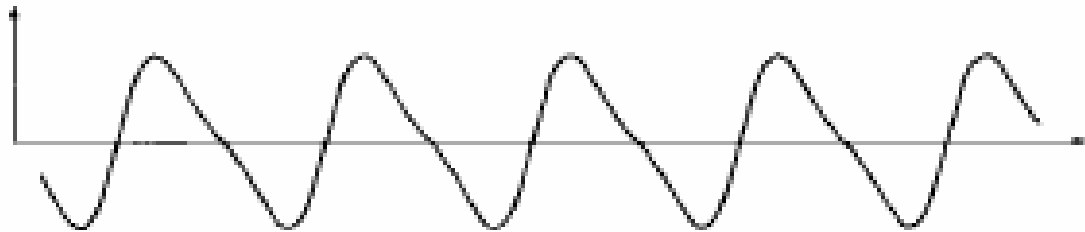
$\swarrow$  **κυματόανυσμα**

$$\text{όπου } u_k(x + R) = u_k(x) \longrightarrow \text{Bloch modulation function}$$

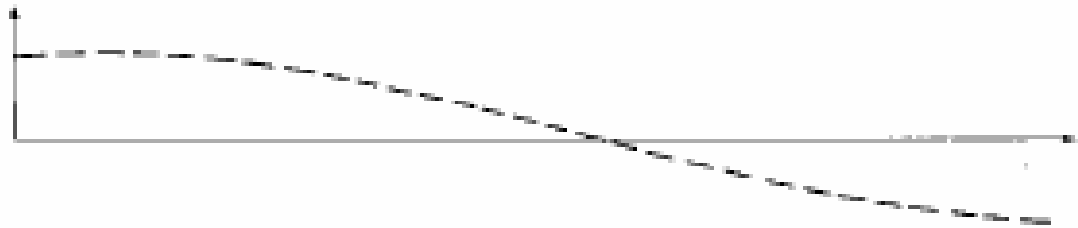
$$p = \hbar k \longrightarrow \text{ορμή}$$

$$E = E(k) \longrightarrow \text{σχέση διασποράς}$$

lattice-periodic function  $u_k(x)$



Wavefunction  $\cos(kx + \delta)$

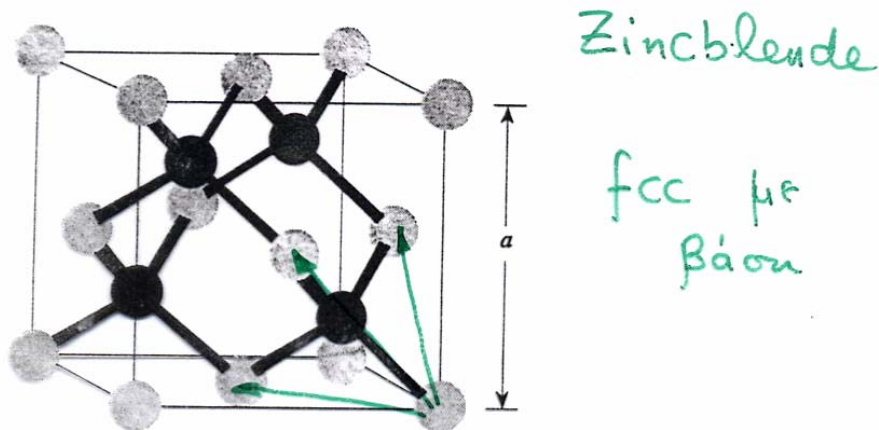


Bloch wave  $u_k(x) \cos(kx + \delta)$



Distance  $x$

Real part of  $\psi$



Σχήμα 1.5: Κρυσταλλική δομή zinc blende. Η δομή αποτελείται από τα διαπερνώντας το ένα το άλλο fcc πλέγματα, το ένα μετατοπισμένο από το άλλο κατά μία απόσταση  $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$  κατά μήκος της κύριας διαγωνίου. Το υποκείμενο πλέγμα Bravais είναι fcc με βάση δύο ατόμων. Οι θέσεις των δύο ατόμων είναι  $(0,0,0)$  και  $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$ .

Πλέγμα Bravais

$$\vec{R}' = \vec{R} + n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

Το σύνολο των  $\vec{k}$  για τα οποία τα επίπεδα κύματα έχουν την περιodicότητα του πλέγματος Bravais, δηλαδή

$$e^{i\vec{k}(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{k}\vec{r}} \Leftrightarrow e^{i\vec{k}\vec{R}} = 1 \quad \forall \vec{R}, \text{ αποζητών}$$

το ανάστροφο πλέγμα, το οποίο είναι επίσης πλέγμα Bravais.

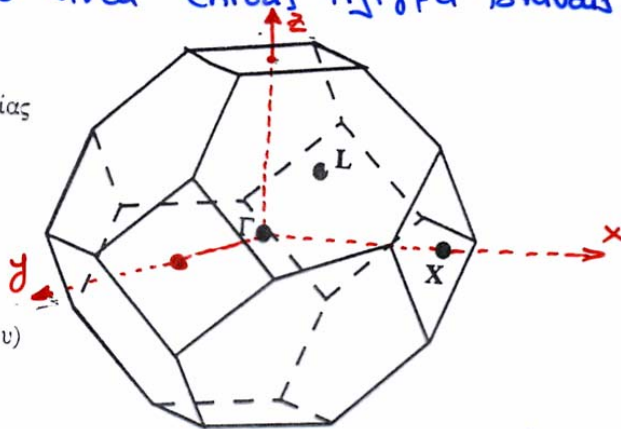
σημαντικά σημεία υψηλής συμμετρίας

σημείο  $\Gamma$ :  $k_x = 0 = k_y = k_z$

σημείο X:  $k_x = \frac{2\pi}{a}; k_y = k_z = 0$

σημείο L:  $k_x = k_y = k_z = \frac{\pi}{a}$

$a$  = σταθερά πλέγματος (ακμή κύβου)

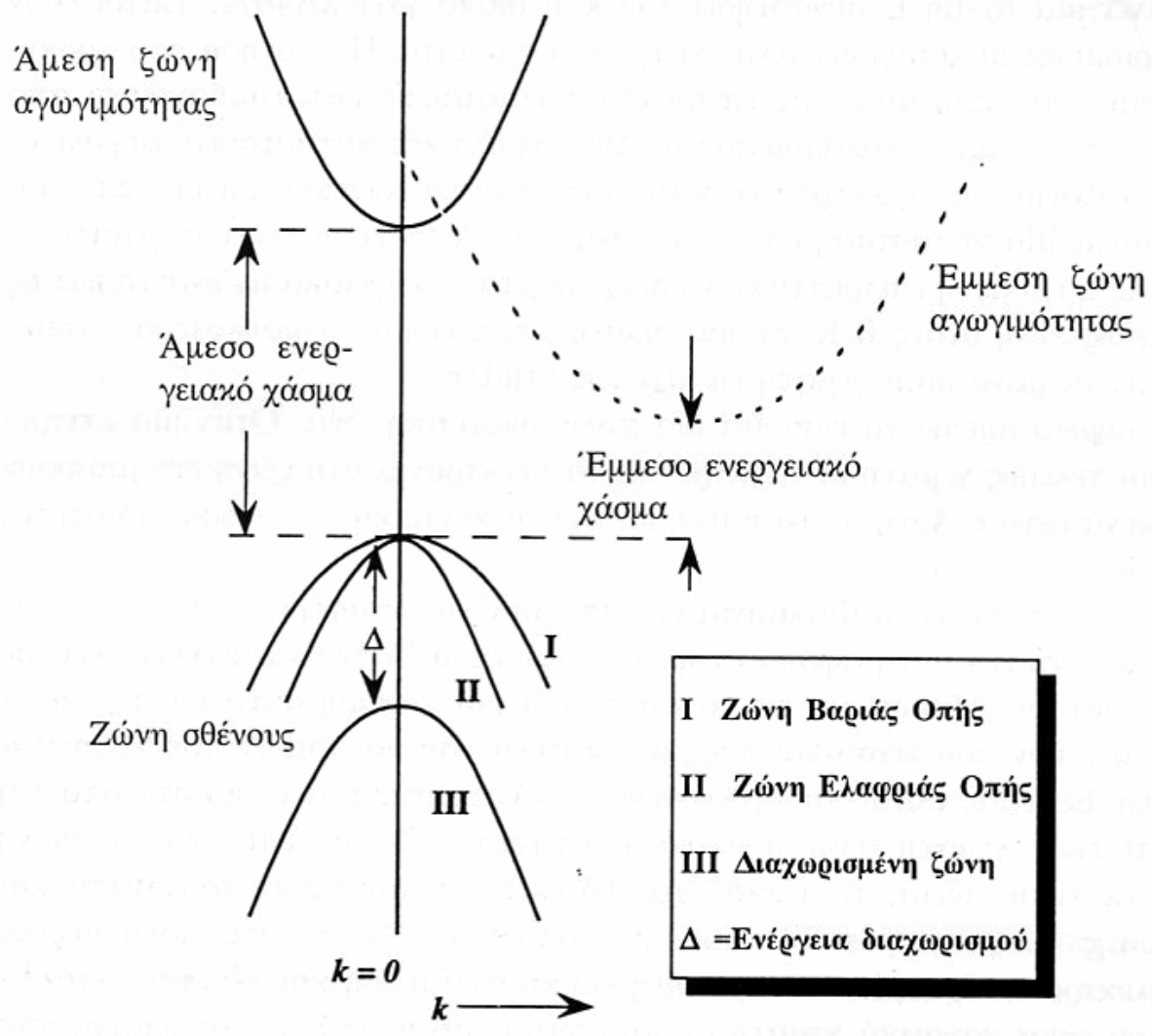


Ζώνη Brillouin του fcc.

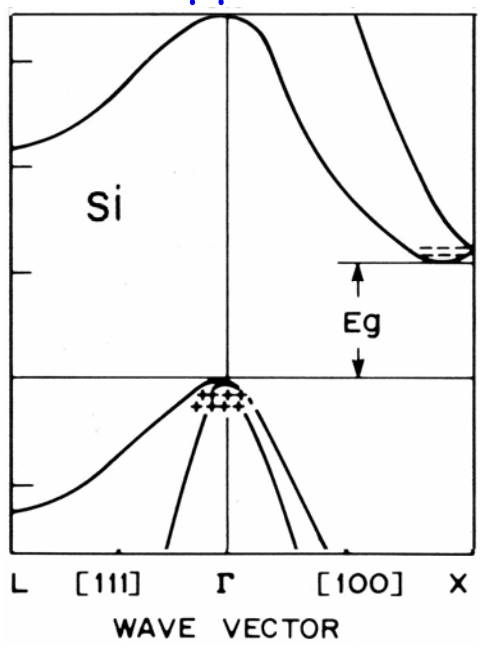
$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}$$

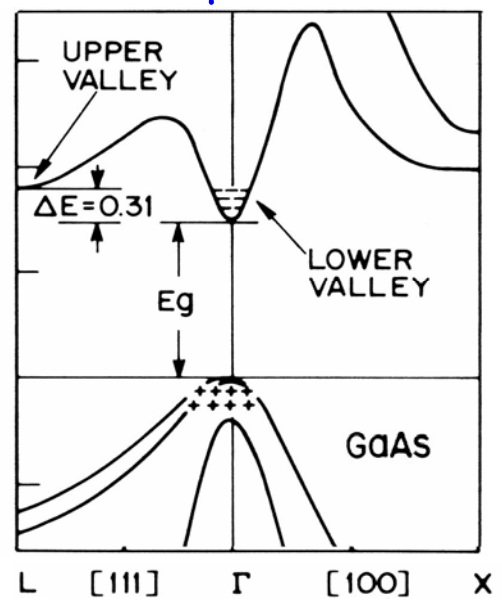
$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}$$



Έμμεσο



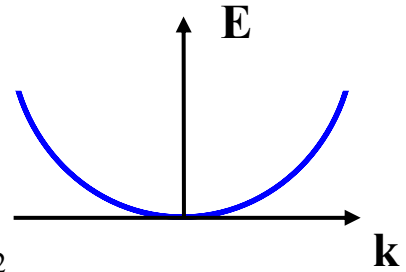
Άμεσο



Για ελεύθερο ηλεκτρόνιο

$$E = \frac{mv^2}{2} + V$$

$$p = mv = \hbar k \quad E = \frac{1}{2} \cdot \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



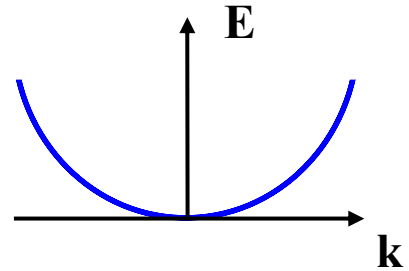
Για ηλεκτρόνιο στο κρύσταλλο  $E = E(k)$ , κοντά στις άκρες των ζωνών  $m \rightarrow m^*$   $E \sim k^2$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$m^*$  - ενεργός μάζα

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E(k) / \partial k^2}$$

$$m^* \sim \frac{1}{\text{κυρτότητα}}$$



αντίστροφο ανάλογο της κυρτότητας

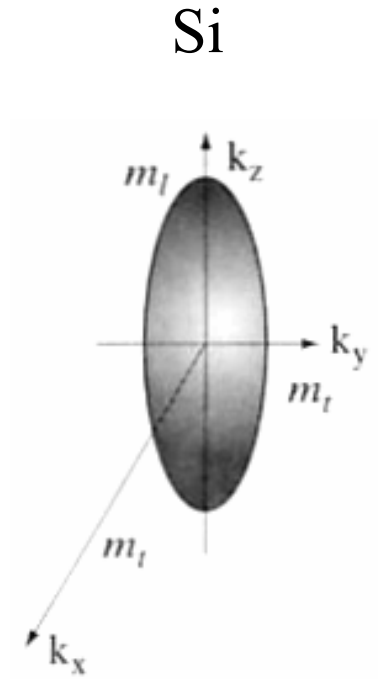
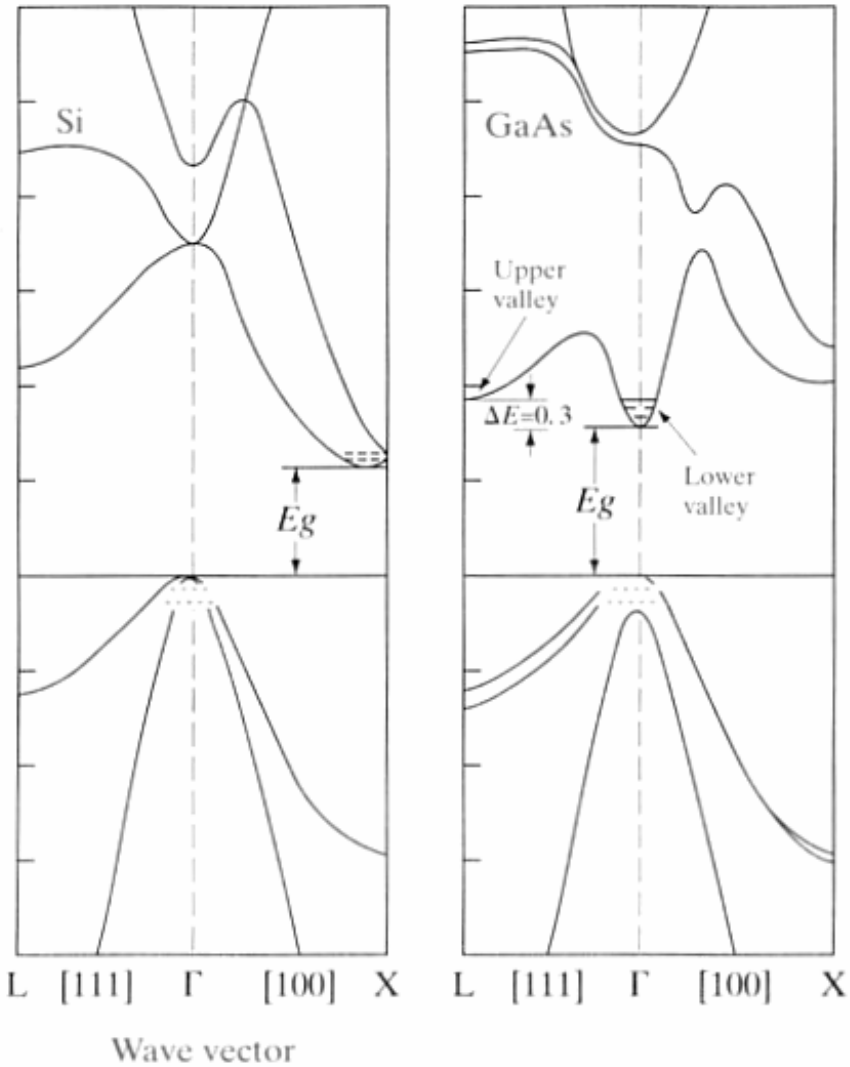
Τα ηλεκτρόνια στο κρύσταλλο δεν είναι ελεύθερα :-

Newton 2<sup>nd</sup> law  $m \frac{dv}{dt} = \sum F = \sum F_{\text{int}} + \sum F_{\text{ext}}$

δυνάμεις κρυστάλλου

αντικαταστήσουμε  $m^* \frac{dv}{dt} = F_{\text{ext}}$

προσέγγιση  
ενεργός μάζας



$m_l$  – ενεργός μάζα στην κατεύθυνση παράλληλη με ΓΧ

$m_t$  - ενεργός μάζα στην εγκάρσιο κατεύθυνση (επίπεδο  $k_x, k_y$ )

Ενεργός μάζα ζώνης αγωγιμότητας

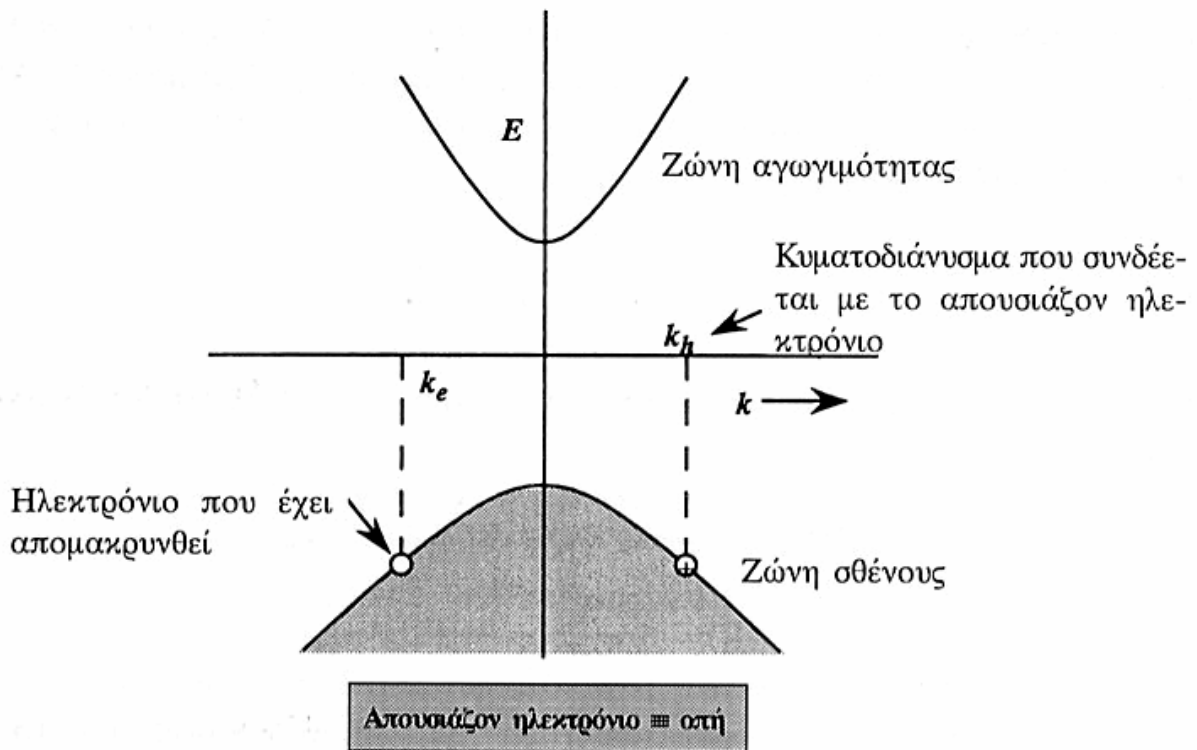
$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{m_x} + \frac{1}{m_y} + \frac{1}{m_z} \right)$$

	<b>Si</b>
$m_n^*$	$m_t=0.19m_0$ $m_l=0.98m_0$
$m_h^*$	$0.56m_0$

	<b>GaAs</b>
$m_n^*$	$0.067m_0$
$m_h^*$	$0.48m_0$

# Τι είναι οπή ?

1. Δεν είναι πραγματικό σωματίδιο
2. Χρησιμοποιείται για να περιγράψει κανείς σύστημα στο οποίο απουσιάζει το ηλεκτρόνιο
3. Ιδιότητες  $+e$  ,  $+m_h^*$



**Σχήμα 2.10:** Διάγραμμα που δείχνει το κυματοδιάνυσμα του ηλεκτρονίου που λείπει  $k_e$ . Το κυματοδιάνυσμα του συστήματος με το εκλειπόν ηλεκτρόνιο είναι  $-k_e$ , το οποίο σχετίζεται με την οπή.

$k_h = -k_e$  Το ολικό κυματόνυσμα όλων ηλεκτρονίων σε μια πλήρως κατειλημμένη ζώνη ισούται με 0 γιατί για κάθε ηλεκτρόνιο στο  $+k$  υπάρχει ένα ηλεκτρόνιο στο  $-k$ . Αφαιρώντας ένα ηλεκτρόνιο με κυματόνυσμα  $k_e$  αφήνει οπή με κυματόνυσμα  $k_h = -k_e$ .