Ελεγχόμενη μεταβολή της δομής ζωνών με κράματα

π.χ. $Al_x Ga_{1-x} As$, $In_x Ga_{1-x} As$, $In_x Ga_{1-x} N$, ...

Συνήθως

$$\boxed{a = x \cdot a_{AlAs} + (1-x) \cdot a_{GaAs}}$$

κρυσταλλική παράμετρος

(νόμος Vegard)

Επίσης,

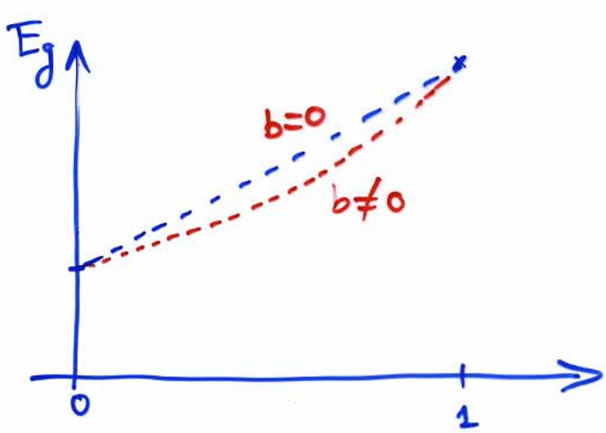
$$\boxed{E_g(x) = x \cdot E_g^{AlAs} + (1-x) \cdot E_g^{GaAs}}$$

(πρώτη προσέγγιση)

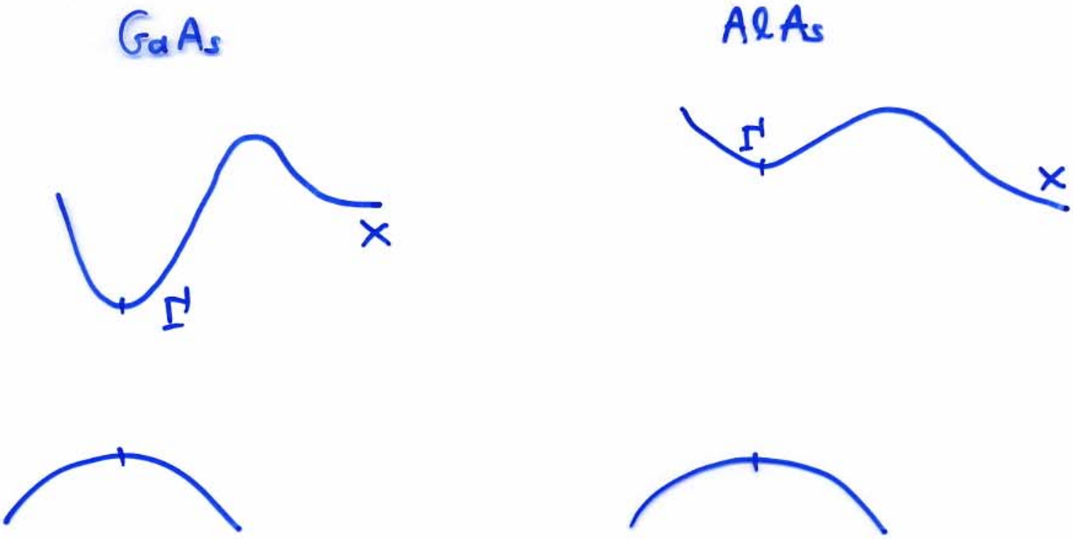
Πιο ακριβές,

$$\boxed{E_g(x) = x \cdot E_g^{AlAs} + (1-x) \cdot E_g^{GaAs} - b \cdot x \cdot (1-x)}$$

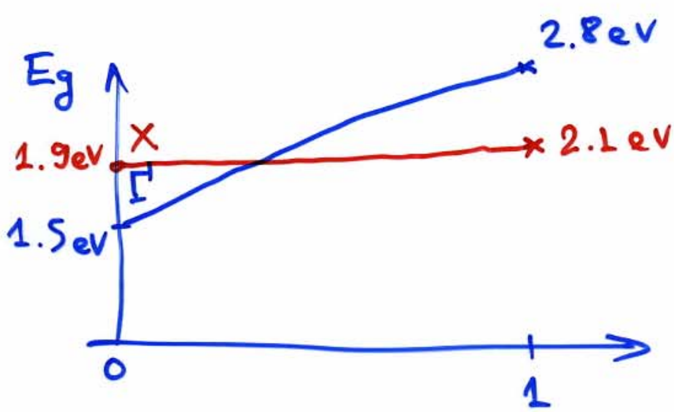
bowing coefficient
συντ. μη γραμμικότητας



Παραδείγματα: $Al_x Ga_{1-x} As$



άμεσο χάσμα — έμμεσο χάσμα

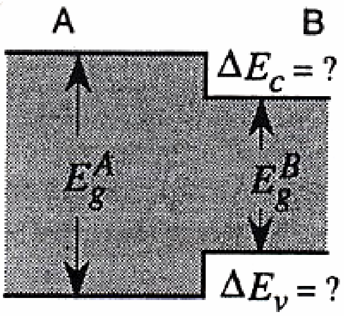


$$E_g^{\Gamma}(x) = 2.8\,\mathrm{eV}\cdot x + 1.5\,\mathrm{eV}\cdot(1-x)$$

$$E_g^{X}(x) = 2.1\,\mathrm{eV}\cdot x + 1.9\,\mathrm{eV}\,(1-x)$$

Για $x > 0.4$ Al_xGaAs γίνεται ημιαγωγός ΕΜΜΕΣΟΥ χάσματος

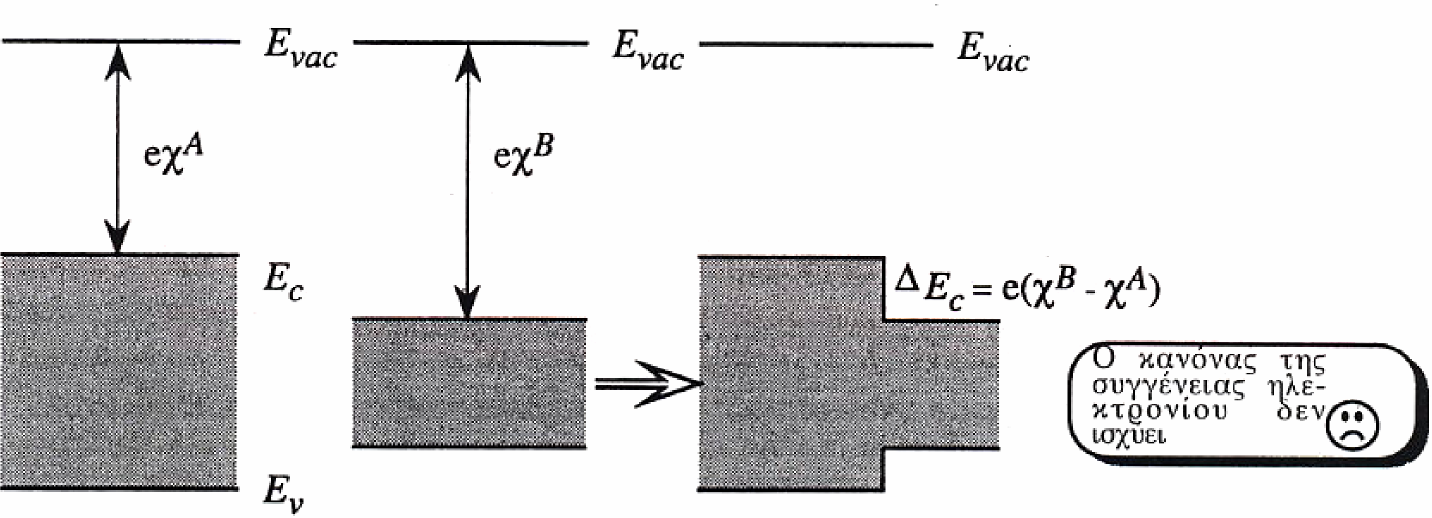
Ετεροδομές



$$\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} = (E_g^A - E_g^B)x$$

$x = ?$

(a)



$$\Delta E_c + \Delta E_v = \Delta E_g$$

Για $GaAs / Al_x Ga_{1-x} As$ ετεροδομές

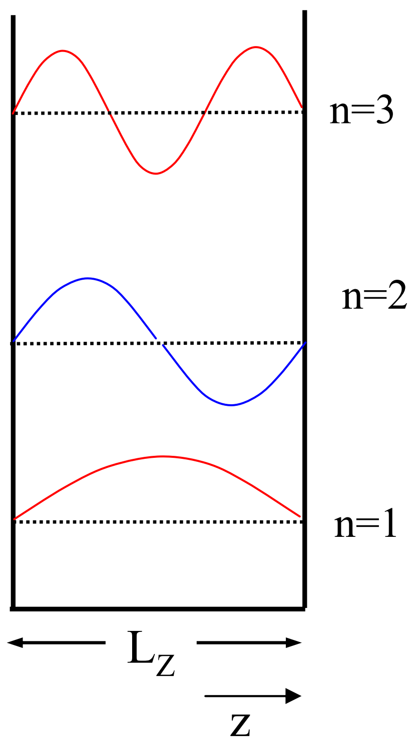
$$\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} \cong \frac{60}{40} - \frac{65}{35}$$

Κβαντικά περιοριζμένες καταστάσεις

- Χρησιμοποιούμε τετραγωνικό πηγάδι με ∞ φραγμό δυναμικού (προσέγγιση)

- Συνοριακές συνθήκες $\psi \rightarrow 0$ στο φραγμό

- 1-D περιορισμός - π.χ. κβαντικό πηγάδι



$$k_Z = \frac{3\pi}{L_Z}$$

$$k_Z = \frac{2\pi}{L_Z}$$

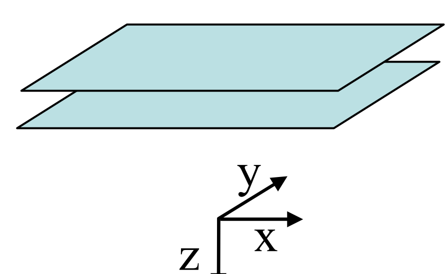
$$k_Z = \frac{\pi}{L_Z}$$

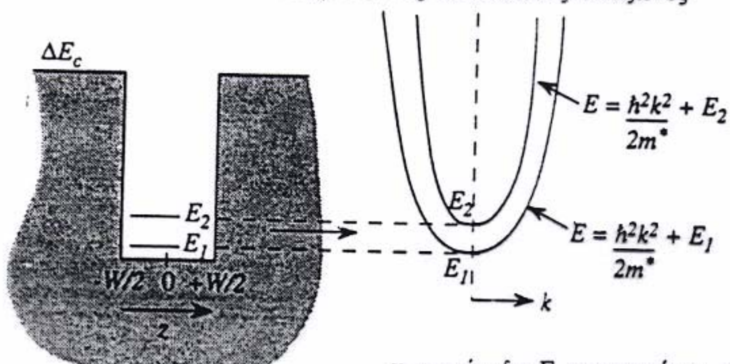
- Γενικότερα $k_Z = \frac{n\pi}{L_Z}$ και $E_Z = \frac{\hbar^2 k_Z^{\ 2}}{2m^*} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \frac{n^2}{L_Z^2}$

Συνολική ενέργεια (κινητική)

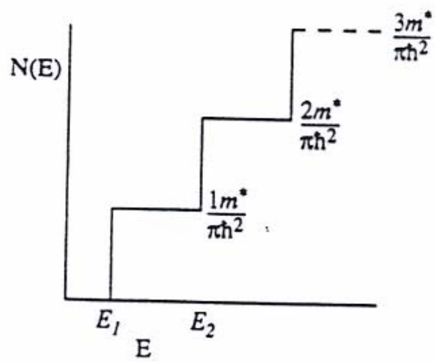
$$E_n = E_x + E_y + E_z$$

$$= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \cdot \frac{n^2}{L_z^2}$$





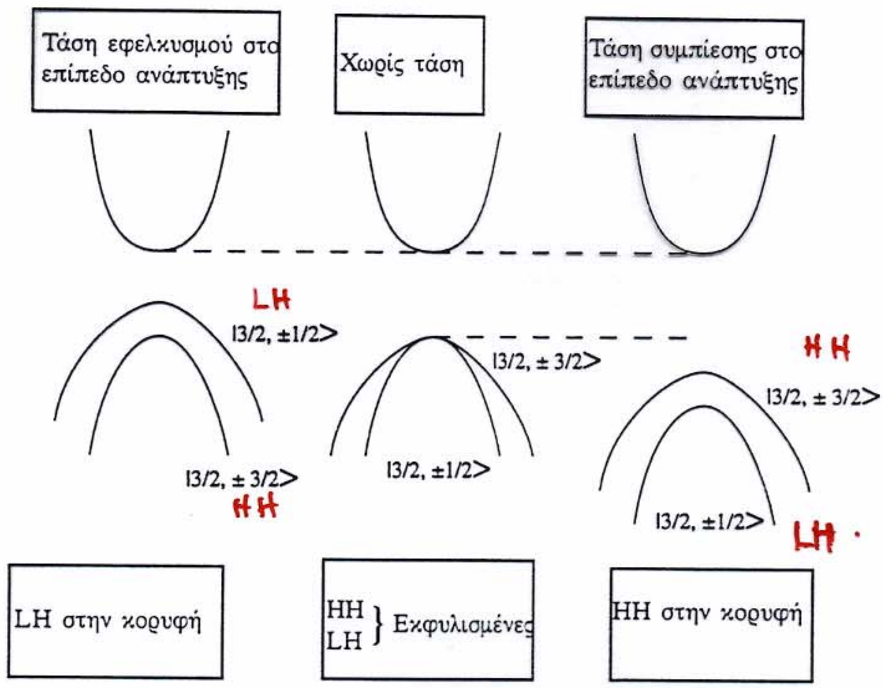
x-y επίπεδο E συναρτήσει του k



$$E(n, k_x, k_y) = \underbrace{\frac{\pi^2 \hbar^2 \cdot n^2}{2m^* \cdot W^2}}_{\text{κβαντικές στάθμες για απειρόβαθο πηγάδι}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}}_{\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}\ \text{«κινητική ενέργεια»}}$$

$n = 1, 2, \ldots$

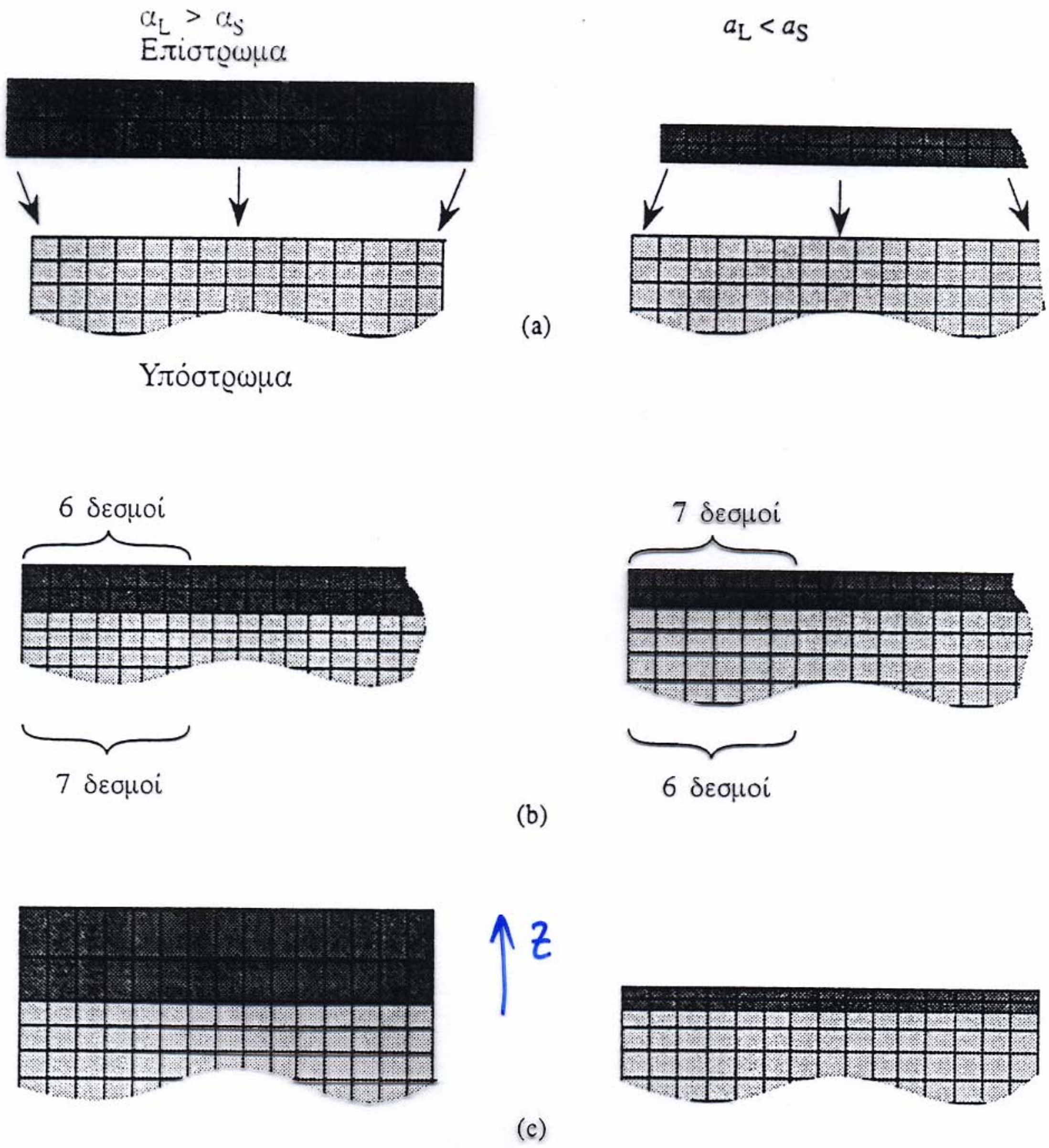
Τροποποίηση δομών ζωνών από τάση



$$\Delta E_{hh}(\epsilon) = \left[2a_d \cdot \left(\frac{C_{11}-C_{12}}{C_{11}}\right) + b_d\left(\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}}\right)\right]\epsilon$$

$$\Delta E_{lh}(\epsilon) = \left[2a_d \cdot \left(\frac{C_{11}-C_{12}}{C_{11}}\right) - b_d \cdot \left(\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}}\right)\right]\epsilon$$

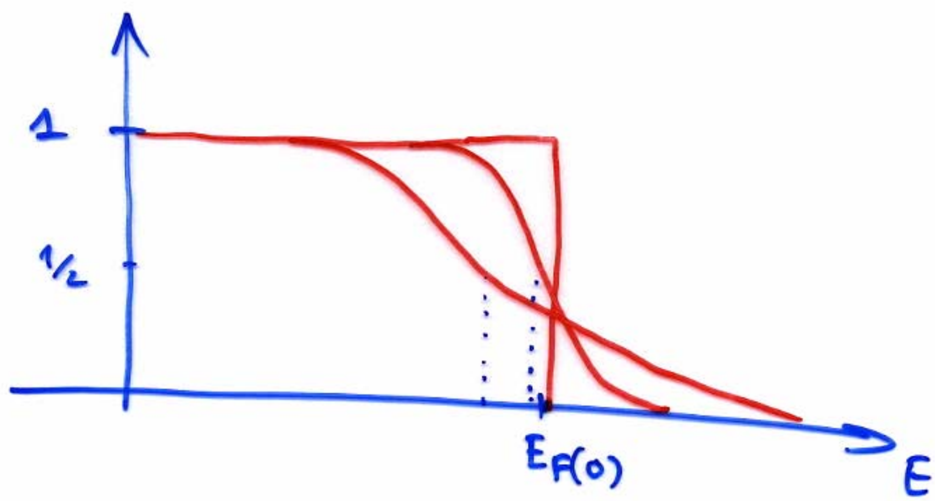
Ετεροδομές υπό τάση



$$\epsilon = \frac{a_L - a_S}{a_S}$$

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon$$

$$\epsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \cdot \epsilon$$

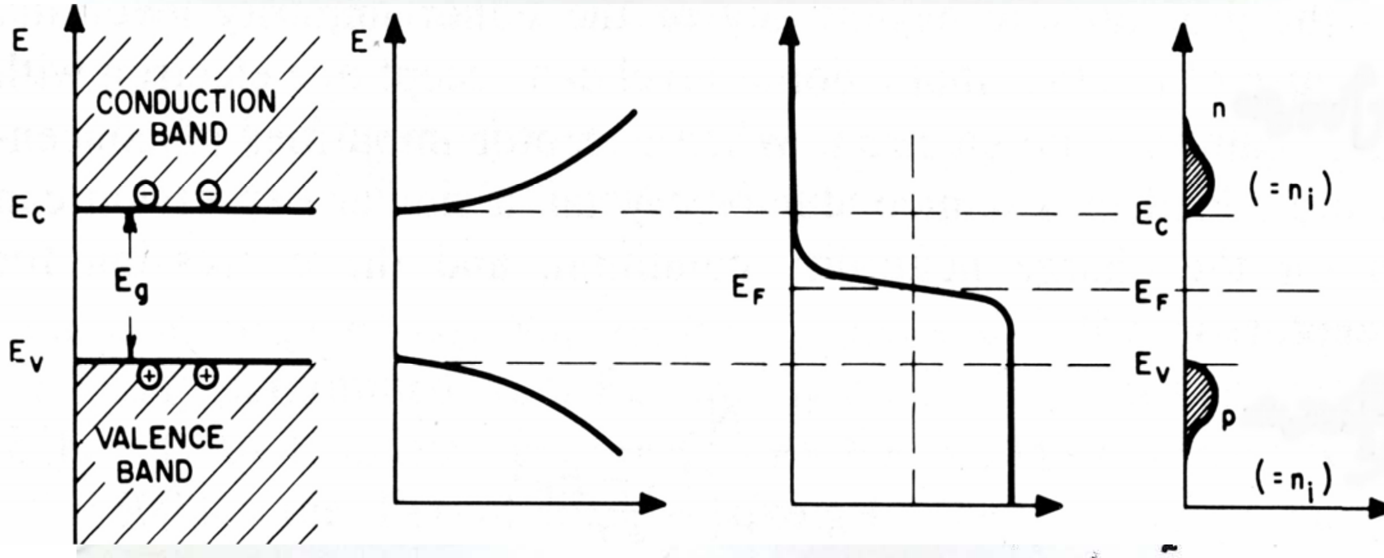


$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$

Για $T = 0^\circ K$ $\quad f(E) \begin{cases} 1 & E \leq E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases}$

Για $T \neq 0^\circ K$, $\quad f(E = E_F) = \frac{1}{2}$

Ενδογενής συγκέντρωση φορέων



$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}$$

$$N(E) = \frac{\sqrt{2}\,(m^*)^{3/2} \cdot E^{1/2}}{\pi^2 \cdot \hbar^3}$$

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E)\cdot N(E)\, dE = \frac{1}{2\pi^2}\cdot\left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2}\right)^2 \cdot \int_{E_c}^{\infty} \frac{(E-E_c)^{1/2}\, dE}{\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)+1}$$

Για $E - E_F \gg kT$ $\quad \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)+1} \simeq \exp\left[-\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)\right]$

προσέγγιση Boltzmann

$$\Rightarrow \quad n = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \exp\left(\frac{E_F}{kT}\right) \cdot \int_{E_c}^{\infty} (E-E_c)^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE$$

αλλαγή μεταβλητών $E \rightarrow E - E_c$

και χρήση του ολοκληρώματος

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} \cdot e^{-x} \cdot dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{n = N_c \cdot \exp\left[(E_F - E_c)/kT\right]}$$

όπου $N_c = 2 \cdot \left(\dfrac{m_e^* k_B \cdot T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$

ενεργός πυκνότητα καταστάσεων $[cm^{-3}]$

$\left([N_e] = eV^{-1} \cdot cm^{-3} \right)$

Ομοίως $p = \int_{-\infty}^{E_v} (1 - f(E)) \cdot N_h(E) \cdot dE$

$1 - f(E) \cong \exp\left[-\left(\dfrac{E_F - E}{kT}\right)\right]$ για $E_F - E \gg kT$

$\Rightarrow \ldots$

$$\boxed{p = N_v \cdot \exp \cdot \left[(E_v - E_F)/k_B T\right]}$$

όπου $N_v = 2 \cdot \left(\dfrac{m_h^* \cdot k_B \cdot T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$

Σε ένα ενδογενή ημιαγωγό $n = p$

$$n \cdot p = N_c \cdot N_v \cdot e^{-E_g/k_B T} = n_i^2$$

δεν εξαρτάται από E_F

$$n = p \Rightarrow \exp\left[-(E_c - E_F)/k_B T\right] = \left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)^{3/2} \cdot \exp\left[-(E_F - E_v)/k_B T\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{E_F = \frac{E_g}{2} - \frac{3}{4} \cdot k_B T \cdot \ln\left(\frac{m_e^*}{m_h^*}\right)}$$

στο μέσο του χάσματος

[Si] $\rightarrow$ $1.5 \times 10^{10}\ cm^{-3}$ φορείς στους 300K

[GaAs] $\rightarrow$ $1.8 \times 10^{6}\ cm^{-3}$

Τυπική τιμή για μέταλλα $\sim 10^{21}\ cm^{-3}$