Ηλεκτρονική δομή ημιαγωγών-Περίληψη

Σχέση διασποράς για ελεύθερα ηλεκτρόνια στα μέταλλα-

Η κυματοσυνάρτηση ψ(**r**) του ελεύθερου e είναι λύση της Schrödinger:

$$\boxed{H_n\psi_n(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\bar{\nabla}^2 + V(\bar{r})\right)\psi_n(r) = E_n\psi_n(\bar{r})}$$

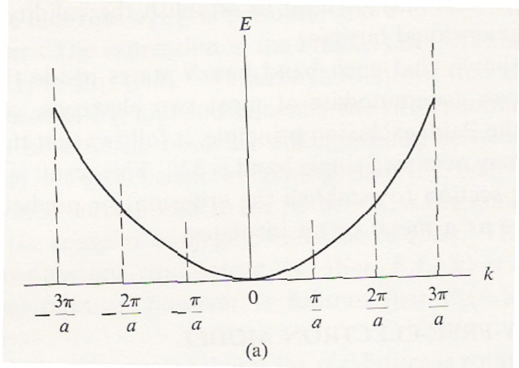
όπου E_n ιδιοτιμές του ηλεκτρονίου.

Για ελεύθερο ηλεκτρόνιο : $V(\bar{r}) = 0 \Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\bar{\nabla}^2\psi_n(r) = E_n\psi_n(\bar{r})}$

Υποθέτουμε λύση της μορφής επίπεδου κύματος: $\boxed{\psi(\bar{r}) = \psi_o e^{i\bar{k}\bar{r}}}$

Αντικαθιστούμε την $\psi(\bar{r})$ στην Schrödinger $\Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}}$

συνεχής κατανομή ενεργειών ⇨ δεν προβλέπεται η ύπαρξη χασμάτων.



Στο μοντέλο του ελεύθερου ηλεκτρονίου η σχέση E-k είναι παραβολική.

Απλοποίηση : Το πρόβλημα σε 1D:

- το ηλεκτρόνιο περιορίζεται σε μεταλλικό σύρμα μήκους L
- το φράγμα δυναμικού είναι ∞

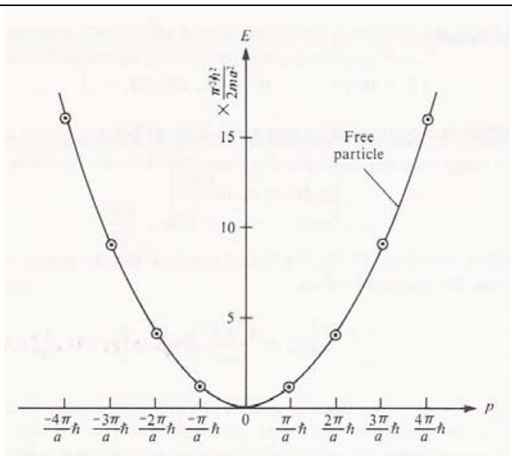
Υποθέτουμε λύση : $\psi_n(x) = \psi_o e^{ikx} = \psi_o(\cos k_x x + i\sin k_x x)$

Οριακές συνθήκες: $\psi_n(0)=\psi_n(L)=0 \Rightarrow \psi_n(x) = \psi_o \sin k_x x$

Επειδή $\psi(L)=0 \Rightarrow \boxed{k_x = \frac{n\pi}{L}}$ όπου n=1,2,3 ⇨

$\boxed{\psi_n(x) = \psi_o \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$ στάσιμο κύμα

$\Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2} \Rightarrow$ **η ενέργεια είναι κβαντισμένη**



Μεταβολή της E συναρτήσει της ορμής p, όπου α (L) είναι το εύρος του πηγαδιού.

Η συνεχής γραμμή→ ελεύθερο ηλεκτρόνιο και τα σημεία → ηλεκτρόνιο περιορισμένο στην 1 διάσταση (σημεία). Αυξανομένου του εύρους α του πηγαδιού δυναμικού τα σημεία πλησιάζουν μεταξύ τους και προς την αρχή των αξόνων.

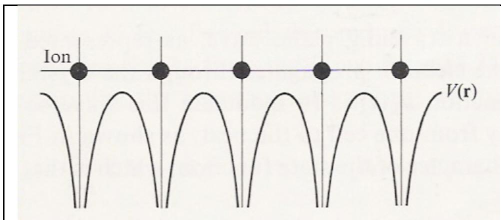
Για να τακτοποιηθούν τα Ν ηλεκτρόνια χρειαζόμαστε n_F το πλήθος στάθμες εκ των οποίων η κάθε μία δέχεται 2 ηλεκτρόνια ⇨ $2n_F=N$.

Η ενέργεια της Fermi είναι: $$\boxed{E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_F \pi}{L}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{N\pi}{2L}\right)^2}$$

Το ηλεκτρόνιο σε στερεό σώμα. Ενεργειακές ταινίες στα στερεά-επίδραση της συμμετρίας-θεώρημα Bloch

Όταν ένα ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε στερεό, το δυναμικό $V(\bar{r})$ στην εξίσωση Schrödinger περιλαμβάνει την **αλληλεπίδραση του ηλεκτρονίου τόσο με τα ιόντα όσο και με τα άλλα ηλεκτρόνια**.

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



Το περιοδικό δυναμικό του κρυστάλλου που βλέπει το e

Περιοδικότητα του δυναμικού ⇨ $V(\bar{r}+\bar{R}) = V(\bar{r})$ όπου $\bar{R}$ είναι διάνυσμα του πλέγματος.

Θεώρημα Bloch: συνδέει την τιμή της κυματοσυνάρτησης σε κάποια μοναδιαία κυψελίδα με αυτή σε ισοδύναμο σημείο κάποιας άλλης κυψελίδας.

Θεώρημα Bloch η λύση της Schrodinger για περιοδικό δυναμικό είναι $\boxed{\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\bar{r}} u_{\bar{k}}(\bar{r})}$ δηλ. οδεύον κύμα με πλάτος που διαμορφώνεται από τη συνάρτηση $u_{\bar{k}}(\bar{r})$ που έχει την ίδια συμμετρία με το πλέγμα

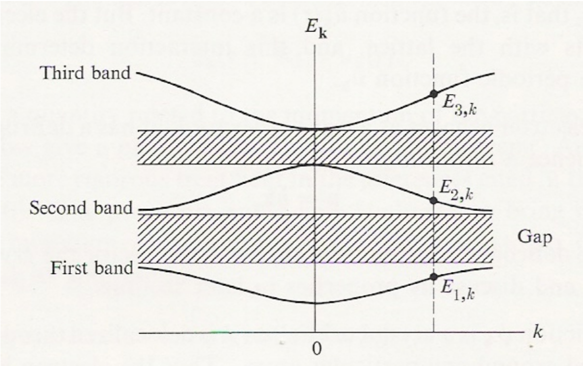
- Επειδή το ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται ως κύμα με κυματοδιάνυσμα k έχει μήκος κύματος $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ και ορμή $\bar{p} = \hbar\bar{k}$
- Η συνάρτηση Bloch είναι μη-εντοπισμένη ⇨ το ηλεκτρόνιο ανήκει σε ολόκληρο τον κρύσταλλο.

Ενεργειακές ταινίες ποιο είναι το φάσμα των ενεργειών που προκύπτουν από την επίλυση της Schrödinger?

Αν αντικαταστήσουμε στην Schrödinger τη συνάρτηση Bloch, προκύπτει η εξίσωση ιδιοτιμών

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\bar{\nabla} + i\bar{k}\right)^2 + V(\bar{r}_{\bar{k}})\right] u_{\bar{k}}(\bar{r}) = E_{\bar{k}} u_k(\bar{r})$$

Που έχει πολλές λύσεις για κάθε $\bar{k}$ ⇨ πολλές διακριτές ενέργειες E_{1k}, E_{2k} κλπ που μεταβάλλονται συνεχώς με το $\bar{k}$ ⇨ ΤΑΙΝΙΕΣ



Οι ταινίες είναι άπειρες αλλά μόνον οι χαμηλότερες είναι κατηλειμμένες. Εμφανίζονται χάσματα και λόγω του διανυσματικού χαρακτήρα του $\overline{k}$ η μορφή των ταινιών αλλάζει κατά τις k_x, k_y, k_z.

Ιδιότητες συμμετρίας των ταινιών E-k:

- $E_n(\mathbf{k}+\mathbf{G})=E_n(\mathbf{k})$ όπου **G** διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος ⇨ η $E_n(\mathbf{k})$ έχει την ίδια περιοδικότητα με το αντίστροφο πλέγμα.
- $E_n(-\mathbf{k})=E_n(\mathbf{k})$: έχουν συμμετρία αντιστροφής ως προς $\mathbf{k}=0$.
- Η $E_n(k)$ έχει την ίδια συμμετρία περιστροφής με το ευθύ πλέγμα.

Βήμα 1: Αποτέλεσμα των ιδιοτήτων συμμετρίας

Περιορίζουν την περιοχή τιμών του k όπου πρέπει να υπολογίσουμε την ενέργεια, π.χ λόγω συμμετρίας αντιστροφής υπολογίζουμε την E(k) μόνον στην μισή ZB.

Βήμα 2: Εισάγουμε το δυναμικό

Το μοντέλο του σχεδόν ελεύθερου e. Υποθέτουμε ότι το δυναμικό του κρυστάλλου είναι τόσο ασθενικό ώστε το e να συμπεριφέρεται σαν ελεύθερο και η επίδραση του πλέγματος εισάγεται σαν διαταραχή.

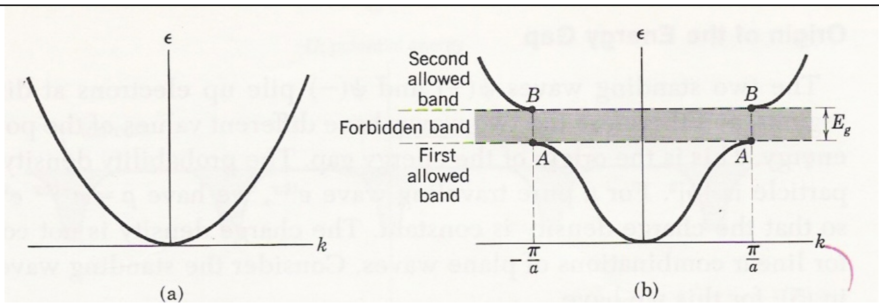
Ειδικότερα η επίδραση του δυναμικού του κρυστάλλου είναι:

Αμελητέα για τα e που έχουν λ >> ενδοατομικής απόστασης α .

Σε αυτή την περίπτωση η ενέργεια των e προσεγγίζεται ικανοποιητικά από την παραβολική προσέγγιση.

Σημαντική για τα e με υψηλή E_{kin} ή ισοδύναμα μεγάλο k ή ισοδύναμα μικρό λ.

Στην μονοδιάστατη αλυσίδα για την οριακή περίπτωση που $\lambda = 2\alpha$ **ικανοποιείται η συνθήκη του Bragg ⇨τα κύματα ανακλώνται και δημιουργούνται στάσιμα κύματα.**



Η σχέση διασποράς για ελεύθερο και σχεδόν ελεύθερο ηλεκτρόνιο σε 1D σύστημα. Η συνθήκη για ανάκλαση Bragg ικανοποιείται όταν $k=\pm n\pi/\alpha$, όπου α η πλεγματική σταθερά. **Επίδραση του δυναμικού του κρυστάλλου**: **εισάγονται χάσματα στα σημεία όπου τέμνονται οι ζώνες, δηλ. στα σημεία όπου η επίδραση του πλέγματος είναι ισχυρή.**

Γιατί εμφανίζονται τα χάσματα? Λόγω των ανακλάσεων Bragg για $k=\pm n\pi/\alpha$

Στα σημεία όπου συμβαίνει ανάκλαση κατά Bragg οι κυματοσυναρτήσεις είναι στάσιμα κύματα :

$$\psi(+) = e^{i\pi x/\alpha} + e^{-i\pi x/\alpha} = 2\cos(\pi x/\alpha)$$

$$\psi(-) = e^{i\pi x/\alpha} - e^{-i\pi x/\alpha} = 2i\sin(\pi x/\alpha)$$

Αυτά τα στάσιμα κύματα συσσωρεύουν φορτίο σε διαφορετικές περιοχές ⇨έχουν διαφορετικές τιμές δυναμικής ενέργειας ⇨ χάσματα.

Πυκνότητα καταστάσεων g(E)

Ορισμός

- **ο αριθμός ενεργειακών καταστάσεων ανά μονάδα όγκου στην ενεργειακή περιοχή (E,E+dE) ή**
- **αριθμός e ή τροχιακών ανά μονάδα ενέργειας** $\boxed{g(E) = dN/dE}$
- $$\boxed{g(E)dE = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}}$$

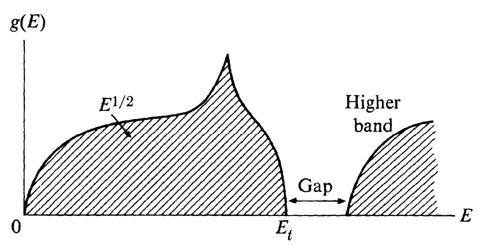
Η g(E) είναι καθοριστική για τη συγκέντρωση φορέων ⇨ είναι ιδιαίτερα σημαντική για τις ιδιότητες μεταφοράς.

Το πλήθος των e που καταλαμβάνουν τις διαθέσιμες καταστάσεις στην περιοχή ενεργειών (E,E+dE) είναι: $\boxed{dn(E)=g(E)f(E)dE}$ όπου f(E) η πιθανότητα κατάληψης, δηλ. η κατανομή Fermi-Dirac.

Η g(E) εξαρτάται από τη μορφή των ταινιών και οι αποκλίσεις τους από τον παραβολικό χαρακτήρα επηρεάζουν και την πυκνότητα καταστάσεων.

Στην παραβολική περιοχή των ταινιών

- Η $g(E) \approx E^{1/2} \Rightarrow$ παραβολικό σχήμα
- Η $g(E) \approx m^{*3/2} \Rightarrow$ η g(E) ↑ με την m^*

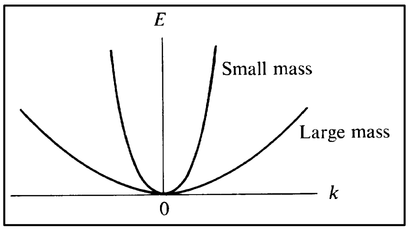


Αυξανομένης της E παύει να ισχύει ο παραβολικός χαρακτήρας των ταινιών και στα όρια της ζώνης και μέσα στο χάσμα g(E)=0. Η g(E) αυξάνεται όταν αρχίζει η επόμενη ταινία.

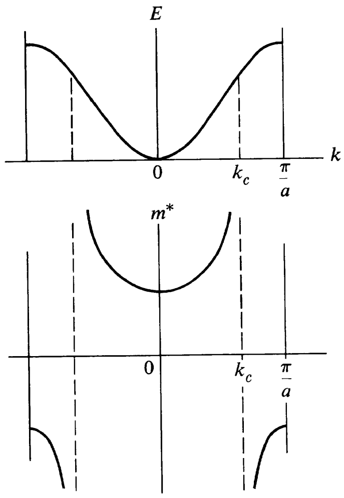
Η δυναμική ενεργός μάζα.

$$\boxed{m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)}}$$

Δηλαδή το e-Bloch συμπεριφέρεται σαν ελεύθερο e με $m=m^*$.



Η m* είναι αντιστρόφως ανάλογη της καμπυλότητας των ταινιών.



- K ≅0 ⇨ m*≅ σταθερή.
- όταν k ↑και η m* ↑.

Για k>k_C→ σημείο καμπής η **m*<0. Γιατί ??** για k=±π/α το e υφίσταται επιβράδυνση από το πλέγμα .