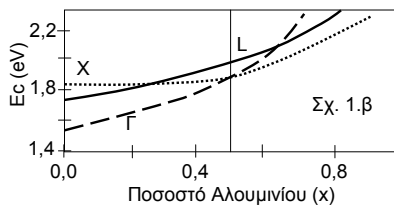
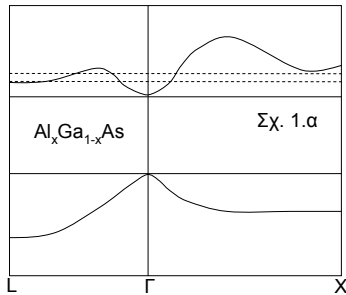


Ημιαγωγοί και Ημιαγώγιμες Δομές (7^ο Εξάμηνο) – 1^η Σειρά ασκήσεων
29/10/2008 Παράδοση: 12/11/2008

1. α) Υπολογίστε τον αριθμό των πλεγματικών σημείων που ανήκουν “εξ’ ολοκλήρου” στη μοναδιαία κυψελίδα του εδροκεντρωμένου κυβικού (FCC) συστήματος. β) Υπολογίστε τον αριθμό των ατόμων πυριτίου που ανήκουν “εξ’ ολοκλήρου” στη μοναδιαία κυψελίδα του υλικού, και την συγκέντρωση ατόμων πυριτίου ανά κυβικό εκατοστό. γ) Υπολογίστε την πυκνότητα του πυριτίου. Δίνονται: πλεγματική σταθερά (Si) = 5.43 \AA , ατομικό βάρος (Si) = 28.09 g/mole.



Σχετικά με τις Ασκήσεις 1 και 2.

Το σύνθετο ημιαγώγιμο υλικό $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ έχει κυβική κρυσταλλική δομή θειούχου ψευδαργύρου και η δομή των ενεργειακών του ζωνών σθένους και αγωγιμότητας, κατά μήκος των διευθύνσεων ($\Gamma \rightarrow X$) και ($\Gamma \rightarrow L$), περιγράφεται από το διπλανό σχήμα (Σχ.1α). Τα τοπικά ελάχιστα της ζώνης αγωγιμότητας είναι: ένα (1) στο σημείο $\Gamma \equiv (0, 0, 0)\pi/a$, έξι (6) σε σημεία ισοδύναμα του $X \equiv (0.9, 0, 0)2\pi/a$, και οκτώ (8) σε σημεία ισοδύναμα του $L \equiv (1, 1, 1)\pi/a$, όπου $a=5.65 \text{ \AA}$ (5.66 \AA) είναι η πλεγματική σταθερά του GaAs (AlAs), αντίστοιχα. Οι ενεργές μάζες ηλεκτρονίων του GaAs είναι: $m_{n\Gamma}^* = 0.07m_0$, $m_{nL,l}^* = 0.9m_0$, $m_{nL,t}^* = 0.2m_0$, $m_{nX,l}^* = 0.8m_0$, $m_{nX,t}^* = 0.1m_0$. Μεταβάλλοντας την περιεκτικότητα σε Al (x), τα τοπικά ελάχιστα της ζώνης αγωγιμότητας, στα σημεία, Γ , X, L, του αντιστρόφου

χώρου, αλλάζουν τιμή, (με ενέργεια αναφοράς $E_V(\mathbf{k}=0) \equiv E_V(\Gamma)=0$), με τον τρόπο που φαίνεται στο Σχ.1β, ενώ οι ενεργές μάζες παραμένουν, με καλή προσέγγιση, αμετάβλητες.

2. α) Σε ποιά περιοχή περιεκτικότητας αλουμινίου (x) το υλικό $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ είναι καταλληλότερο για οπτοηλεκτρονικές εφαρμογές και σε ποιά όχι, και γιατί; β) Υπολογίστε, (σε nm), το μήκος κύματος της οπτικής ακτινοβολίας και (όπου χρειάζεται) το μήκος κύματος των πλεγματικών ταλαντώσεων, που πρέπει να συνδυαστούν για τη διέγερση ενός ηλεκτρονίου από τη ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας, για $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ με περιεκτικότητες $x=0$, $x \leq 0.5$, $x \geq 0.5$, $x=1$.

3. α) Υπολογίστε, για θερμοκρασία $T=300\text{K}$, τις συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων της ζώνης αγωγιμότητας, που προέρχονται από τα τοπικά ελάχιστα Γ , X και L, για $x=0.5$, οπότε $E_{C,\Gamma} = E_{C,X} = 1.85 \text{ eV}$, $E_{C,L} = 2.00 \text{ eV}$. β) Υπολογίστε το πηλίκο (n_X/n_Γ) και (n_L/n_Γ) των συγκεντρώσεων των ηλεκτρονίων στα τρία τοπικά ελάχιστα (Γ , L, X), σε θερμοκρασία δωματίου και για $x=0.0$, οπότε $E_{C,\Gamma} = 1.53 \text{ eV}$, $E_{C,X} = 1.82 \text{ eV}$, $E_{C,L} = 1.73 \text{ eV}$. γ) Διερευνήστε αν υπάρχει δυνατότητα εξίσωσης των πηλίκων του ερωτήματος (β) με τη μονάδα, σε κάποια πεπερασμένη θερμοκρασία, και, σε περίπτωση που αυτό είναι δυνατόν, προσδιορίστε αυτή την θερμοκρασία, κατά περίπτωση.

4. Δίδονται τα παρακάτω ημιαγώγιμα υλικά με τις αντίστοιχες παραμέτρους (πλεγματική σταθερά, σχετική διηλεκτρική σταθερά, ενεργές μάζες ηλεκτρονίων-οπών).

Ημιαγ.	Πλεγματική Σταθερά / Απόσταση πλησ. γειτ.	Σχετική Διηλ/κή Σταθερά	Ενεργός Μάζα ηλεκτρονίων (\perp / \parallel)	Ενεργός μάζα οπών (\hbar / \hbar)
Ge	5,66 / 2,44	16	0,08 / 1,60	0,04 / 0,30
Si	5,40 / 2,35	12	0,19 / 0,91	0,15 / 0,54
GaAs	5,65 / 2,45	10,9	0,30 / 1,98	0,07 / 0,50
ZnSe	6,67 / 2,45	5,9	0,16	0,15 / 0,80

α) Περιγράψτε, με βάση το ημικλασικό μοντέλο του Bohr για ένα μονοηλεκτρονιακό άτομο, τον τρόπο υπολογισμού των ενεργειακών σταθμών δοτών και αποδεκτών σε καθένα από αυτά τα υλικά. Για ποιά από αυτά τα υλικά, ο υπολογισμός είναι περισσότερο αξιόπιστος και για ποιά λιγότερο;

β) Εκτιμήστε, για τον ημιαγωγό που κατά τη γνώμη σας είναι πίο αξιόπιστος ο προηγούμενος υπολογισμός, την κρίσιμη πυκνότητα της συγκέντρωσης δοτών και αποδεκτών (ανεξάρτητα η μία από την άλλη), πάνω από τις οποίες οι διάκριτες στάθμες των προσμειξέων μετατρέπονται σε ζώνες λόγω της αλληλεπικάλυψης των κυματοσυναρτήσεων των ηλεκτρονίων (ή, ανεξάρτητα, των οπών) γειτονικών ουδετέρων ατόμων της πρόσμιξης.

5. 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, ισχύει :

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

όπου $A=0.5$ eV, $B=0.3$ eV, $a=1.1 \hbar / (m_0 A)^{1/2}$, $b=2.3 \hbar / (m_0 B)^{1/2}$, 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.

6. Κρύσταλλος πυριτίου ($E_g = 1.17$ eV = 1170 meV) νοθεύεται με προσμίξεις αρσενικού, ($E_C - E_D = 40$ meV), σε συγκέντρωση 10^{16} (άτομα As)/cm³. Να υπολογιστεί η στάθμη Fermi σε θερμοκρασίες, α) δωματίου (300K), β) υγρού αζώτου (77K), γ) υγρού ηλίου (4K), με βάση τη συνθήκη ουδετερότητας, στη μη-προσεγγιστική της έκφραση. (Υπόδειξη: Σχεδιάστε, με τη βοήθεια υπολογιστή, συναρτήσει της μεταβλητής E_F , την συνάρτηση συνολικού φορτίου $Q = p + N_D^+ - n - N_A^-$, και προσδιορίστε την τιμή της μεταβλητής για την οποία η συνάρτηση φορτίου Q μηδενίζεται). δ) Να υπολογιστούν τα ποσοστά ιονισμού των προσμειξέων, σε κάθε περίπτωση. ε) Να σχολιασθεί η συνέπεια των απαντήσεων στα ερωτήματα α-δ, αν αυτά προέκυπταν με βάση την σχέση που προϋποθέτει τον ολικό ιονισμό.

7. α) Υπολογίστε το επίπεδο Fermi, σε θερμοκρασία δωματίου, για τρία δείγματα πυριτίου (Si) εμπλουτισμένα με προσμίξεις γαλλίου (Ga) με συγκεντρώσεις 10^{14} άτομα/cm³, 10^{16} άτομα/cm³, 10^{18} άτομα/cm³, αντίστοιχα, υποθέτοντας πλήρη ιονισμό των προσμειξέων. β) Χρησιμοποιείστε τις τιμές που υπολογίσατε στο προηγούμενο ερώτημα για το επίπεδο Fermi του καθενός δείγματος και ελέγξτε κατά πόσο η υπόθεση του ολικού ιονισμού ευσταθεί, κατά περίπτωση.