

# Ημιαγώγιμα και διηλεκτρικά υλικά

Ε. Λοιδωρίκης  
Δ. Παπαγεωργίου

# Ψηφιακή τεχνολογία



# Η εφεύρεση του τρανζίστορ



John Bardeen, William Shockley, Walter Brattain, Bell Labs 1948

# Το πρώτο τρανζίστορ



τρανζίστορ σημειακής επαφής Γερμανίου, Bell Labs

## Τεχνολογία πυριτίου



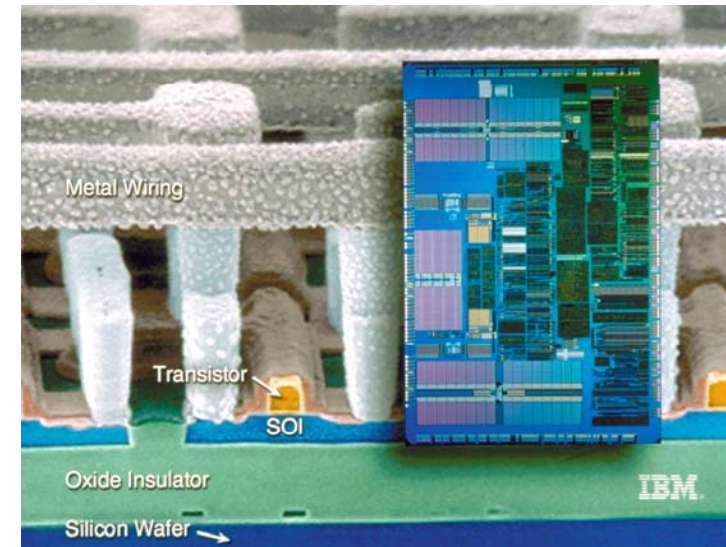
[MEMC, Electronic Materials Inc.]

Ημιαγώγιμα και διηλεκτρικά υλικά

5

Σύγχρονη θεωρία στερεών

## Τεχνολογία πυριτίου

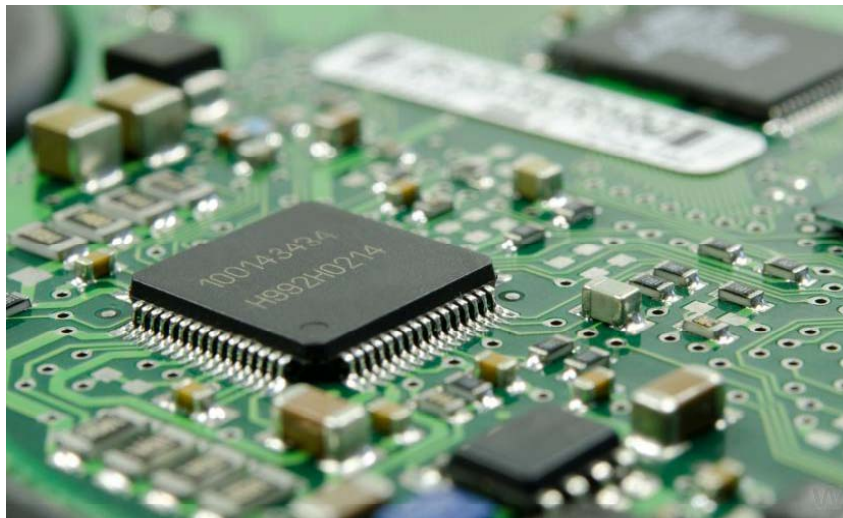


Ημιαγώγιμα και διηλεκτρικά υλικά

6

Σύγχρονη θεωρία στερεών

## Ολοκληρωμένα κυκλώματα-επεξεργαστές



Ημιαγώγιμα και διηλεκτρικά υλικά

7

Σύγχρονη θεωρία στερεών

## Ηλιακά κύτταρα



The Honda Dream

Ημιαγώγιμα και διηλεκτρικά υλικά

8

Σύγχρονη θεωρία στερεών



### ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1<sup>ο</sup> Σύγχρονη θεωρία στερεών

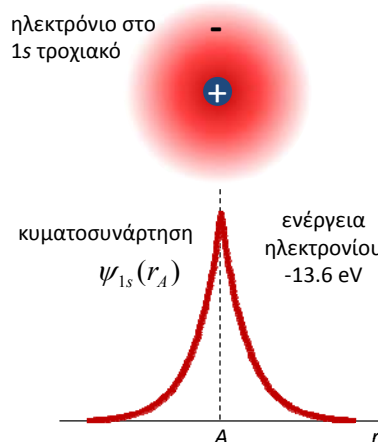
## Περιεχόμενα

- Ατομικός δεσμός
- Μοριακά τροχιακά
- Τροχιακά στερεών
- Ενεργειακές ζώνες
- Ενέργεια Fermi
- Πυκνότητα καταστάσεων
- Στατιστική Fermi-Dirac
- Αγωγή ρεύματος

## Άτομο υδρογόνου

Απομονωμένο άτομο υδρογόνου

ηλεκτρόνιο στο  
1s τροχιακό

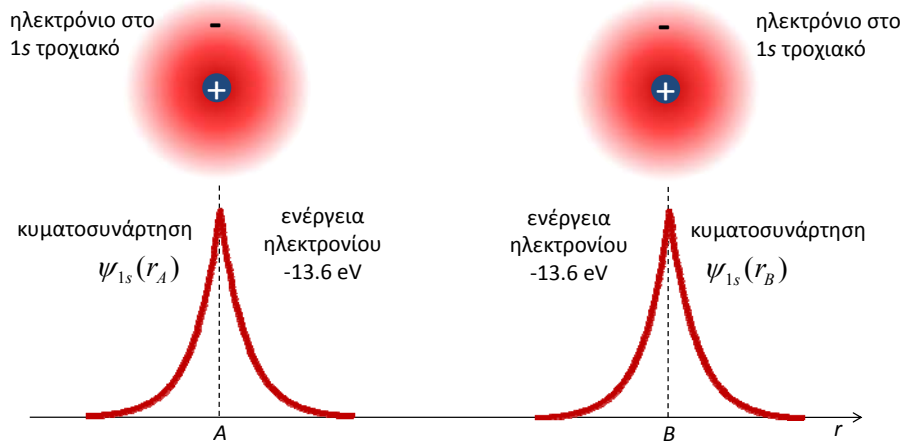


ενεργειακές ιδιοτιμές  
διεγερμένων τροχιακών

$$E_n = \frac{-13.6}{n^2} \text{ eV}$$

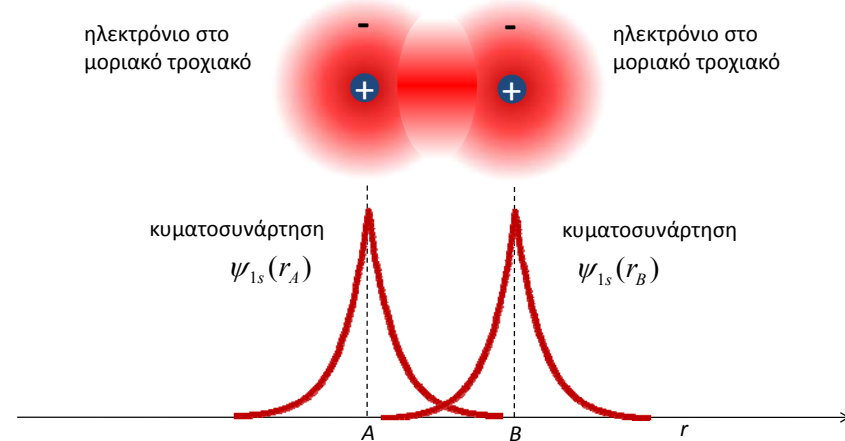
## Μόριο υδρογόνου

Δύο απομονωμένα άτομα υδρογόνου  
πως και γιατί κάνουν χημικό δεσμό όταν έρθουν κοντά;



## Μόριο υδρογόνου

Δύο απομονωμένα άτομα υδρογόνου  
πως και γιατί κάνουν χημικό δεσμό όταν έρθουν κοντά;



## Μοριακά τροχιακά

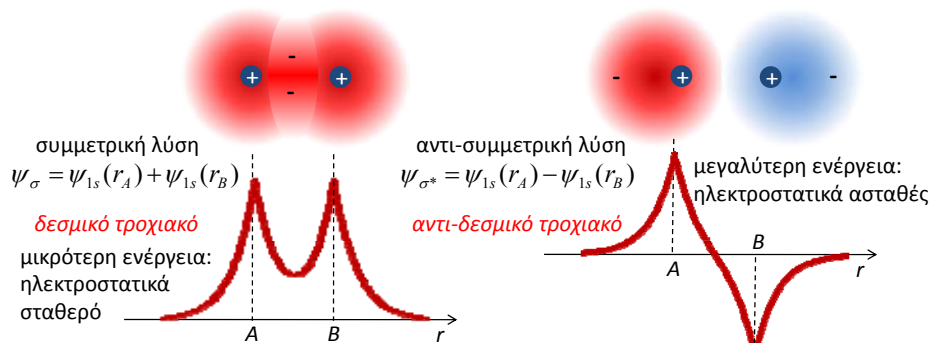
Από δύο ατομικά θα πρέπει να προκύψουν δύο μοριακά τροχιακά

→ αρχή διατήρησης του αριθμού καταστάσεων

Μοριακά τροχιακά προκύπτουν ως γραμμικός συνδυασμός των ατομικών

→ μόνο οι γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις

→ διατήρηση βασικών συμμετριών



## Ενεργειακές ιδιοτιμές

Προσεγγιστικά με την μέθοδο «γραμμικού συνδυασμού ατομικών τροχιακών» (linear combination of atomic orbitals - LCAO)

$$\psi_{\sigma} = \psi_{1s}(r_A) + \psi_{1s}(r_B) = \psi_A + \psi_B$$

Γνωρίζουμε:  $\int \psi_A^* \psi_A d\mathbf{r} = 1$   $\int \psi_A^* \psi_B d\mathbf{r} = 0$

$$H\psi_A = E_1\psi_A \Rightarrow \int \psi_A^* H\psi_A d\mathbf{r} = E_1 \int \psi_A^* \psi_A d\mathbf{r} = E_1$$

Εφαρμόζουμε:  $H\psi_{\sigma} = E_{\sigma}\psi_{\sigma} \Rightarrow \int \psi_{\sigma}^* H\psi_{\sigma} d\mathbf{r} = E_{\sigma} \int \psi_{\sigma}^* \psi_{\sigma} d\mathbf{r}$

$$\Rightarrow \int (\psi_A^* + \psi_B^*) H(\psi_A + \psi_B) d\mathbf{r} = E_{\sigma} \int (\psi_A^* + \psi_B^*)(\psi_A + \psi_B) d\mathbf{r}$$

$$\Rightarrow \int \psi_A^* H\psi_A d\mathbf{r} + \int \psi_B^* H\psi_B d\mathbf{r} + \int \psi_A^* H\psi_B d\mathbf{r} + \int \psi_B^* H\psi_A d\mathbf{r} =$$

$$= E_{\sigma} \left( \int \psi_A^* \psi_A d\mathbf{r} + \int \psi_B^* \psi_B d\mathbf{r} + \int \psi_A^* \psi_B d\mathbf{r} + \int \psi_B^* \psi_A d\mathbf{r} \right)$$

## Ενεργειακές ιδιοτιμές

$$\Rightarrow \int \psi_A^* H \psi_A d\mathbf{r} + \int \psi_B^* H \psi_B d\mathbf{r} + \int \psi_A^* H \psi_B d\mathbf{r} + \int \psi_B^* H \psi_A d\mathbf{r} =$$

$$= E_\sigma \left( \int \psi_A^* \psi_A d\mathbf{r} + \int \psi_B^* \psi_B d\mathbf{r} + \int \psi_A^* \psi_B d\mathbf{r} + \int \psi_B^* \psi_A d\mathbf{r} \right)$$

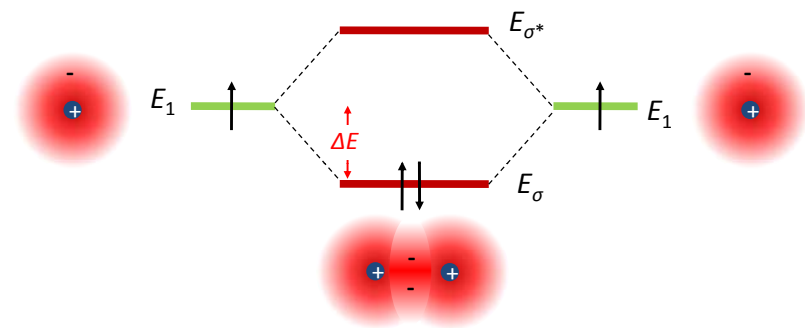
Προσεγγιστικά:  $\int \psi_A^* \psi_A d\mathbf{r} \cong 1$      $\int \psi_A^* \psi_B d\mathbf{r} \cong 0$      $\int \psi_A^* H \psi_A d\mathbf{r} \cong E_1$

Επίσης θέτουμε:  $\int \psi_A^* H \psi_B d\mathbf{r} = -V_\sigma = \int \psi_B^* H \psi_A d\mathbf{r}$      $V_\sigma$  είναι η ενέργεια δεσμού

δεσμικό τροχιακό:  $2E_1 - 2V_\sigma = 2E_\sigma$      $E_\sigma = E_1 - V_\sigma$

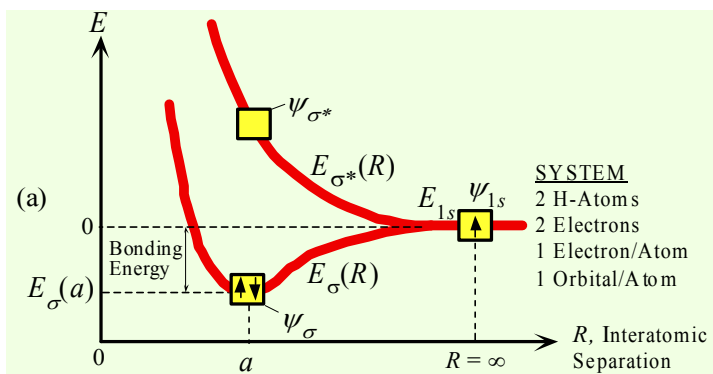
αντι-δεσμικό τροχιακό:  $2E_1 + 2V_\sigma = 2E_{\sigma^*}$      $E_{\sigma^*} = E_1 + V_\sigma$

## Μοριακό υδρογόνο



$\Delta E =$  ενέργεια δεσμού

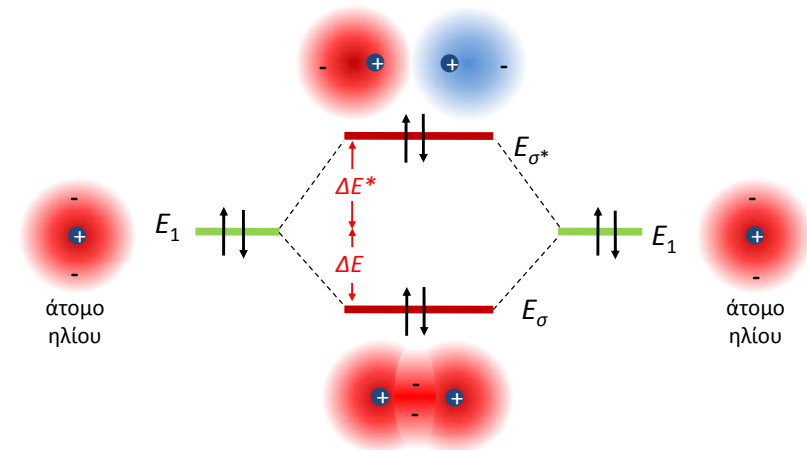
## Μοριακό υδρογόνο



Στην πράξη, μετά από ακριβείς κβαντομηχανικούς υπολογισμούς, βρίσκουμε ότι η  $E_{\sigma^*}$  απέχει πιο πολύ από την  $E_1$  από ότι η  $E_\sigma$

$$E_{\sigma^*} - E_1 > E_1 - E_\sigma$$

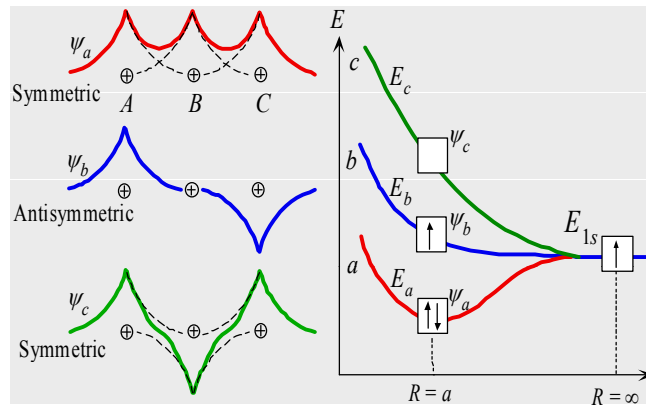
## Μοριακό ήλιο υπάρχει?



Η απάντηση είναι όχι: η συνολική ενέργεια θα ήταν  $E = 2E_\sigma + 2E_{\sigma^*} > 4E_1$

Το ήλιο, όπως και όλα τα στοιχεία με συμπληρωμένες στοιβάδες είναι ευγενή αέρια

## Μοριακό H<sub>3</sub>



Ίδιοι κανόνες: διατήρηση αριθμού τροχιακών, συμμετρία τροχιακών

- τρία μοριακά τροχιακά
- εναλλάξ συμμετρικό/αντισυμμετρικό
- μεταξύ τους ορθογώνια

$$\left. \begin{aligned} \psi_a &= \psi_A + \psi_B + \psi_C \\ \psi_b &= \psi_A - \psi_C \\ \psi_c &= \psi_A - 2\psi_B + \psi_C \end{aligned} \right\}$$

## Ενεργειακή σύγκριση H<sub>2</sub> και H<sub>3</sub>

Δείξτε ότι τα τροχιακά του H<sub>3</sub> είναι ορθογώνια μεταξύ τους

$$\text{δείξτε ότι } \int \psi_a^* \psi_b d\mathbf{r} = \int \psi_a^* \psi_c d\mathbf{r} = \int \psi_b^* \psi_c d\mathbf{r} = 0$$

Βρείτε τις ενεργειακές ιδιοτιμές τους

$$H\psi_a = E_a\psi_a \Rightarrow E_a = \frac{\int \psi_a^* H\psi_a d\mathbf{r}}{\int \psi_a^* \psi_a d\mathbf{r}}$$

χρησιμοποιώντας

$$\int \psi_A^* H\psi_B d\mathbf{r} = \int \psi_B^* H\psi_C d\mathbf{r} = -V_\sigma$$

παρομοίως τα  $E_b, E_c$

$$\int \psi_A^* H\psi_C d\mathbf{r} = 0$$

Βρείτε την συνολική ενέργεια του H<sub>3</sub>

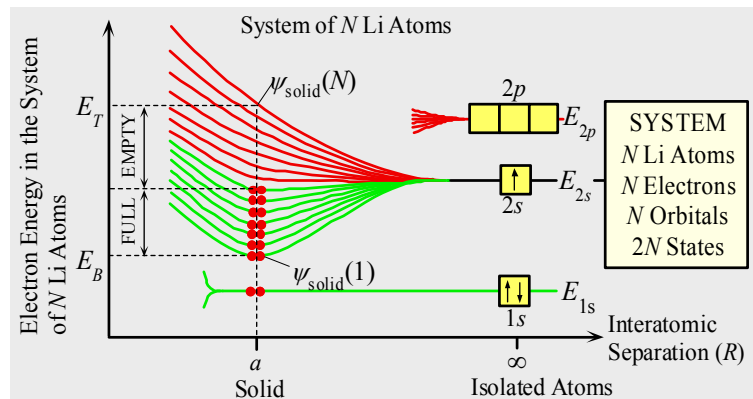
τρία ηλεκτρόνια σύνολο  $E_{H_3} = 2E_a + E_b$

Ποιό είναι σταθερότερο, το H<sub>2</sub> ή το H<sub>3</sub>;

συγκρίνουμε  $6H \rightarrow 3H_2$  με  $6H \rightarrow 2H_3$

## Ενεργειακές ζώνες

Δημιουργούνται όταν πολλά άτομα έρχονται κοντά για να σχηματίσουν το στερεό

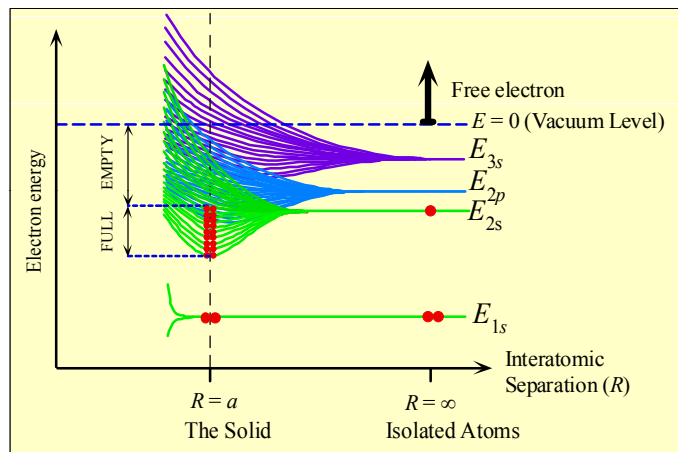


Κάθε κατάσταση μπορεί να καταληφθεί από μόνο δύο ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλα spin

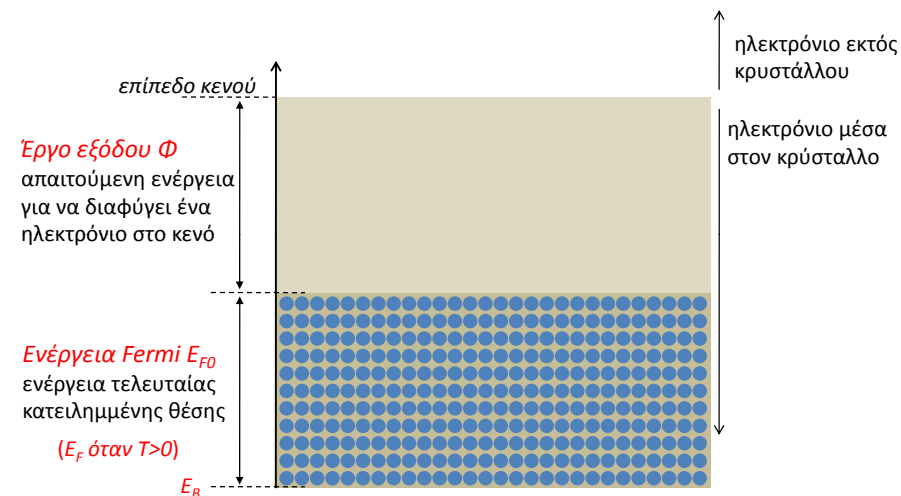
Τα ηλεκτρόνια «γемίζουν» τις καταστάσεις με την χαμηλότερη ενέργεια

## Ενεργειακές ζώνες

Ζώνες από διαφορετικά τροχιακά μπορούν να αλληλεπικαλύπτονται δημιουργώντας μια ενιαία ζώνη



## Δομή ζώνης μετάλλου

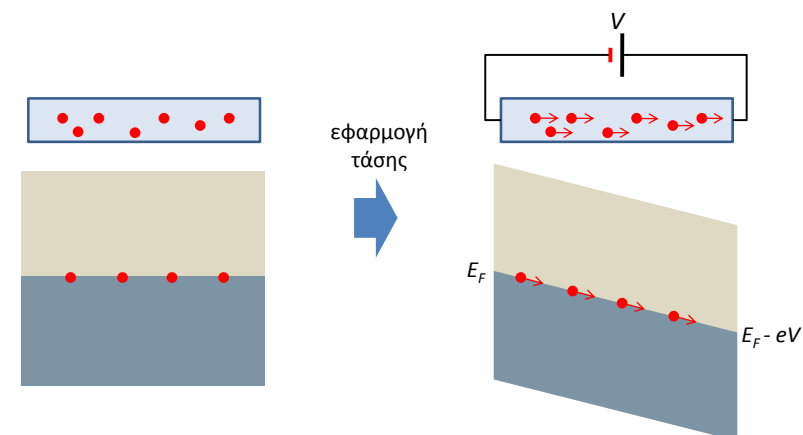


## Έργο εξόδου και ενέργεια Fermi

	Metal							
	Ag	Al	Au	Cs	Cu	Li	Mg	Na
$\Phi$ (eV)	4.5	4.28	5.0	2.14	4.65	2.3	3.7	2.75
$E_{F0}$ (eV)	5.5	11.7	5.5	1.58	7.0	4.7	7.1	3.2

## Αγωγή ρεύματος στα μέταλλα

Η εφαρμογή τάσης προκαλεί κλίση στις ενεργειακές ζώνες

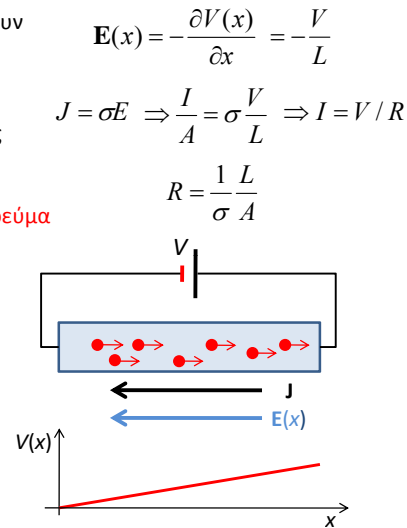
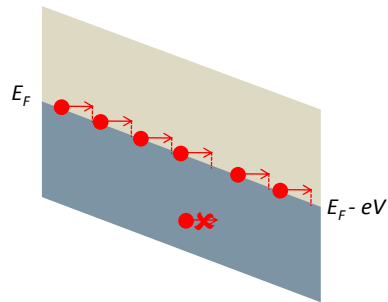


## Αγωγή ρεύματος στα μέταλλα

Pauli → αγωγή φορέων γίνεται μόνο όταν υπάρχουν κενές ενεργειακές θέσεις

Η αγωγή των φορέων γίνεται ουσιαστικά με μετακινήσεις σε κενές θέσεις και συνεπακόλουθες μεταπτώσεις πίσω στην επιφάνεια Fermi

→ μόνο φορείς κοντά στην  $E_F$  συνεισφέρουν στο ρεύμα



$$\mathbf{E}(x) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} = -\frac{V}{L}$$

$$J = \sigma E \Rightarrow \frac{I}{A} = \sigma \frac{V}{L} \Rightarrow I = V/R$$

$$R = \frac{1}{\sigma} \frac{L}{A}$$

## Ηλεκτρικές ιδιότητες μετάλλων

Ποιά ηλεκτρόνια συνεισφέρουν;

→ μόνο αυτά που είναι στην ενέργεια Fermi

Πόσα είναι αυτά; Μπορούμε να τα μετρήσουμε;

→ ναι μπορούμε, μετρώντας πιθανές καταστάσεις και εφαρμόζοντας στατιστική

Τι είδους στατιστική;

→ αφού ισχύει ο νόμος Pauli, άρα εφαρμόζουμε στατιστική Fermi-Dirac

Στατιστική Fermi-Dirac: Η πιθανότητα μια κατάσταση με ενέργεια  $E$  σε σύστημα με ενέργεια Fermi  $E_F$  και θερμοκρασία  $T$  να είναι κατειλημμένη

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$

## Η κατανομή Fermi-Dirac

Έστω μια ενεργειακή κατάσταση  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$

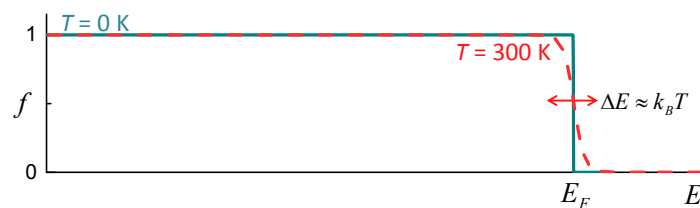
Η πιθανότητα να είναι κατειλημμένη

$$f(\mathbf{k}) = f(E(\mathbf{k})) = f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1}$$

→ για  $T=0$

$$f(E) = 1 \text{ for } E < E_{F0}$$

$$f(E) = 0 \text{ for } E > E_{F0}$$



## Μέτρηση καταστάσεων

Μας ενδιαφέρουν μόνο το ηλεκτρόνια στην τελευταία ζώνη (ζώνη αγωγιμότητας)

→ για μέταλλα θεωρούμε ότι συμπεριφέρονται σαν ελεύθερα ηλεκτρόνια

Ο κρύσταλλος (ιόντα και άλλα ηλεκτρόνια) δεν επιδρούν στην κίνησή τους;

→ ναι, επιδρά. Για να το λάβουμε υπόψη προσεγγίζουμε τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας σαν ελεύθερα αλλά με διαφορετική μάζα αδράνειας

Ενεργός μάζα ηλεκτρονίων  $m^*$

→ η φαινομενική μάζα αδράνειας των ηλεκτρονίων λόγω των αλληλεπιδράσεών τους με τον κρύσταλλο και τα άλλα τροχιακά

Metal	Ag	Au	Bi	Cu	K	Li	Na	Ni	Pt	Zn
$\frac{m_e^*}{m_e}$	0.99	1.10	0.047	1.01	1.12	1.28	1.2	28	13	0.85

Πως μετράμε καταστάσεις; Ποιές είναι αυτές;

→ είναι οι καταστάσεις με διαφορετικές ορμές και ενέργειες

Πρέπει να βρούμε ποιές ορμές και ποιες ενέργειες επιτρέπονται στον κρύσταλλο

→ ηλεκτρονική δομή ζώνης – ζώνη Brillouin



## Μέτρηση καταστάσεων στα μέταλλα

Μας ενδιαφέρουν μόνο το ηλεκτρόνια στην τελευταία ζώνη (ζώνη αγωγιμότητας)

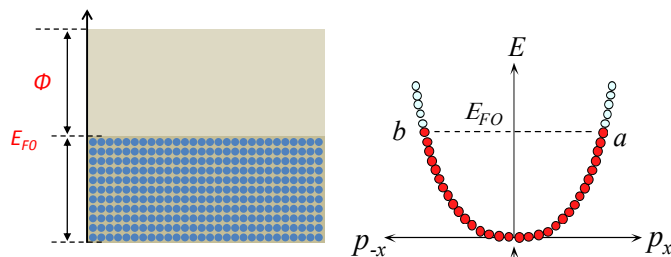
→ για μέταλλα θεωρούμε ότι συμπεριφέρονται σαν ελεύθερα ηλεκτρόνια

→ άρα δεν χρειάζεται να εξετάσουμε κρυσταλλικές συμμετρίες

Η ενέργειά τους είναι μόνο κινητική  $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + E_B$

Ως μηδέν ενέργεια παίρνουμε το κάτω άκρο της ζώνης, δηλαδή  $E_B = 0$

Υπενθύμιση: η ορμή είναι τρισδιάστατο διάνυσμα



## Επιλογή επιτρεπτών ορμών

Ποιες είναι οι επιτρεπτές καταστάσεις;

→ τα ηλεκτρόνια είναι κύματα που υπακούουν την εξίσωση Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}) \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Οι λύσεις είναι επίπεδα κύματα

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$$

Χρειαζόμαστε μια συνοριακή συνθήκη

→ έστω ο κρύσταλλος είναι ένα κυβικό κουτί πλευράς  $L$

→ η κυματοσυνάρτηση είναι περιοδική στα όρια του κουτιού

$$\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z)$$

Πως επιλέγουμε τα κατάλληλα  $\mathbf{k}$ ; → συνθήκη κβάντωσης

## Επιλογή επιτρεπτών ορμών

Εφαρμόστε την συνθήκη συνέχειας  $\psi_{\mathbf{k}}(x+L, y, z) = \psi_{\mathbf{k}}(x, y, z)$

στην κυματοσυνάρτηση  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

όπου  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z$

$$\text{Λύση: } e^{i(k_x(x+L)+k_y y+k_z z)} = e^{i(k_x x+k_y y+k_z z)}$$

$$e^{ik_x L} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$$

$$e^{ik_x L} = 1 \Rightarrow k_x L = n_x 2\pi \Rightarrow k_x = n_x (2\pi / L)$$

→ οι επιτρεπτές τιμές του  $k_x$  είναι ακέραια πολλαπλάσια του  $2\pi/L$

→ το  $n_x$  είναι ο κβαντικός αριθμός για την διεύθυνση  $x$

Με παρόμοιο τρόπο λύνουμε και για τις  $y$  και  $z$  διευθύνσεις

→ εισάγουμε τους  $n_y$  και  $n_z$  κβαντικούς αριθμούς για τις διευθύνσεις  $x$  και  $z$

## Θεμελιώδης κατάσταση ελεύθερων ηλεκτρονίων

Γεμίζουμε την ζώνη με ηλεκτρόνια

→ δύο (σπιν πάνω και κάτω) σε κάθε θέση

$$(n_x, n_y, n_z) = (0, 0, 0)$$

$$(n_x, n_y, n_z) = (1, 0, 0)$$

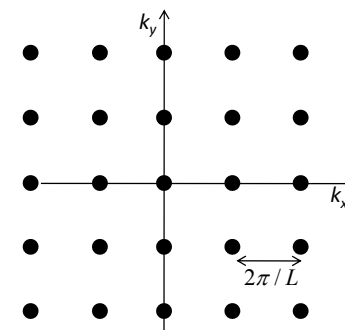
$$(n_x, n_y, n_z) = (-1, 0, 0)$$

$$(n_x, n_y, n_z) = (0, 1, 0)$$

$$(n_x, n_y, n_z) = (0, -1, 0)$$

$$(n_x, n_y, n_z) = (1, 1, 0)$$

⋮



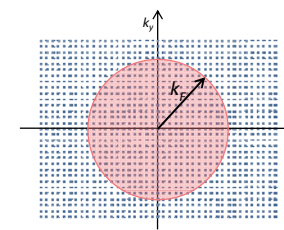
Δημιουργείται ένας «κρύσταλλος»

→ κυβικό πλέγμα με περίοδο  $2\pi/L$

→ αντίστροφος χώρος

Αριθμός σημείων  $k$  = αριθμός ηλεκτρονίων

$$n = \frac{\rho_m \cdot Z \cdot N_A}{A} \left( \frac{e l}{cm^3} \right) \sim 10^{22} \text{ el/cm}^3$$



## Αριθμός καταστάσεων για $T=0$

Ο αντίστροφος χώρος (χώρος των ορμών) έχει σφαιρική συμμετρία

- το μέγιστο  $k$  θα είναι το  $k_{F0}$  (κυματοδιάνυσμα Fermi)
- η μέγιστη ενέργεια θα είναι η  $E_{F0}$  (ενέργεια Fermi)

Ο αριθμός των σημείων  $k$  που χωρούν στην σφαίρα  $K_{F0}$

→ όγκος σφαίρας Fermi  $\frac{4\pi k_{F0}^3}{3}$

→ στοιχειώδης όγκος για κάθε  $k$   $(2\pi/L)^3$

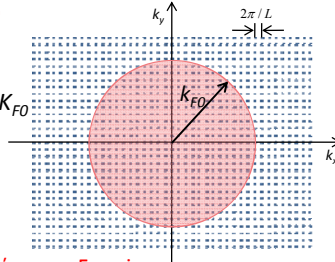
→ αριθμός των  $k$  (αριθμός καταστάσεων) και κυματοδιάνυσμα Fermi

$$N = 2 \frac{4\pi k_{F0}^3 / 3}{(2\pi/L)^3} = \frac{k_{F0}^3 L^3}{3\pi^2} \Rightarrow \frac{N}{V} = n = \frac{k_{F0}^3}{3\pi^2} \Rightarrow k_{F0} = \sqrt[3]{3n\pi^2}$$

Γνωρίζοντας το  $n$  για κάθε μέταλλο, βρίσκουμε επίσης:

→ ενέργεια Fermi  $E_{F0} = \hbar^2 k_{F0}^2 / 2m^*$

→ ταχύτητα Fermi  $v_{F0} = \hbar k_{F0} / m^*$



## Χαρακτηριστικά διαφόρων μετάλλων

ELEMENT	Z	$n$ ( $10^{22}/\text{cm}^3$ )	$\epsilon_F$	$T_F$	$k_F$	$v_F$
Li (78 K)	1	4.70	4.74 eV	$5.51 \times 10^4$ K	$1.12 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$	$1.29 \times 10^8 \text{ cm/sec}$
Na (5 K)	1	2.65	3.24	3.77	0.92	1.07
K (5 K)	1	1.40	2.12	2.46	0.75	0.86
Rb (5 K)	1	1.15	1.85	2.15	0.70	0.81
Cs (5 K)	1	0.91	1.59	1.84	0.65	0.75
Cu	1	8.47	7.00	8.16	1.36	1.57
Ag	1	5.86	5.49	6.38	1.20	1.39
Au	1	5.90	5.53	6.42	1.21	1.40
Be	2	24.7	14.3	16.6	1.94	2.25
Mg	2	8.61	7.08	8.23	1.36	1.58
Ca	2	4.61	4.69	5.44	1.11	1.28
Sr	2	3.55	3.93	4.57	1.02	1.18
Ba	2	3.15	3.64	4.23	0.98	1.13
Nb	1	5.56	5.32	6.18	1.18	1.37
Fe	2	17.0	11.1	13.0	1.71	1.98
Mn (z)	2	16.5	10.9	12.7	1.70	1.96
Zn	2	13.2	9.47	11.0	1.58	1.83
Cd	2	9.27	7.47	8.68	1.40	1.62
Hg (78 K)	2	8.65	7.13	8.29	1.37	1.58
Al	3	18.1	11.7	13.6	1.75	2.03
Ga	3	15.4	10.4	12.1	1.66	1.92
In	3	11.5	8.63	10.0	1.51	1.74
Tl	3	10.5	8.15	9.46	1.46	1.69
Sn	4	14.8	10.2	11.8	1.64	1.90
Pb	4	13.2	9.47	11.0	1.58	1.83
Bi	5	14.1	9.90	11.5	1.61	1.87
Sb	5	16.5	10.9	12.7	1.70	1.96

## Πυκνότητα καταστάσεων

Πυκνότητα καταστάσεων για κυματοδιάνυσμα  $k$

- ο αριθμός καταστάσεων μεταξύ  $k$  και  $k+\Delta k$

Ο αριθμός των σημείων  $k$  που χωρούν στον φλοιό

- όγκος φλοιού  $4\pi k^2 dk$
- στοιχειώδης όγκος για κάθε  $k$   $(2\pi/L)^3$
- αριθμός των  $k$  (αριθμός καταστάσεων)

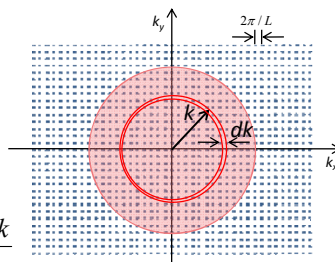
$$dN = 2 \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi/L)^3} = \frac{k^2 L^3 \Delta k}{\pi^2} \Rightarrow \frac{dN}{V} = \frac{k^2 dk}{\pi^2}$$

Συνήθως το γράφουμε συναρτήσει της ενέργειας:  $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$

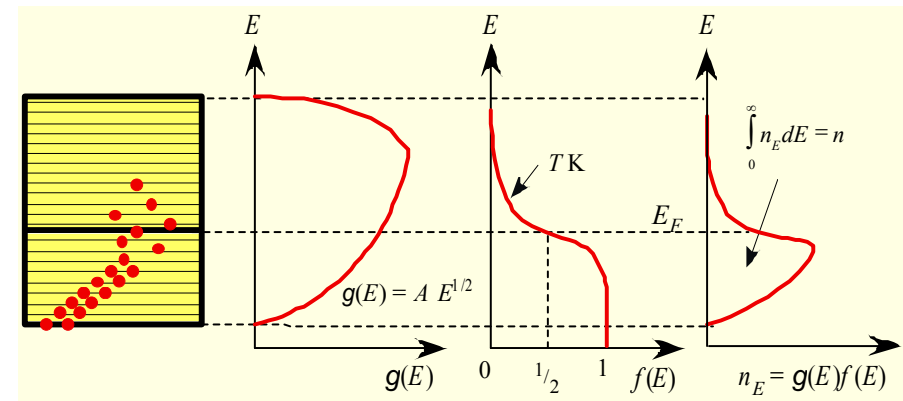
$$\Rightarrow k^2 = 2m^* E / \hbar^2 \Rightarrow 2k dk = 2m^* dE / \hbar^2 \Rightarrow dk = m^* dE / \hbar^2 k$$

$$\Rightarrow dk = m^* dE / \hbar^2 \sqrt{2m^* E / \hbar^2} \Rightarrow dk = \sqrt{m^* / 2E} dE / \hbar$$

Πυκνότητα καταστάσεων  $g(E)$ :  $\frac{dN}{V} = g(E)dE = \frac{\sqrt{2m^*}^{3/2} \sqrt{E}}{\pi^2 \hbar^3} dE$



## Πυκνότητα καταστάσεων



## Στατιστική μετάλλων για $T > 0$

Αριθμός καταστάσεων

$$n = \int_0^{E_F + \Phi} g(E) f(E) dE \cong \int_0^{\infty} g(E) f(E) dE$$

$$n = \frac{\sqrt{2m}^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \sqrt{E} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dE$$

Ο αριθμός καταστάσεων  $n$  είναι σταθερός για κάθε μέταλλο

→ χρησιμοποιούμε την παραπάνω σχέση για να λύσουμε ως προς  $E_F$

$$E_F(T) = E_{F0} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_{F0}} \right)^2 \right] \cong E_{F0}$$

Άσκηση: επαληθεύστε για  $T=0$  τον αριθμό καταστάσεων που είχαμε βρει:  $n = \frac{k_{F0}^3}{3\pi^2}$

## Ενέργεια ηλεκτρονίων

Ολική κινητική ενέργεια ηλεκτρονίων

$$E_{ολικη} = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE$$

$$E_{ολικη} = \frac{\sqrt{2m}^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} E^{3/2} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dE$$

$$\rightarrow \text{για } T=0 \quad E_{ολικη} = \frac{\sqrt{2m}^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} E^{3/2} dE = \frac{\sqrt{2m}^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{5} E_F^{5/2}$$

Μέση κινητική ενέργεια ηλεκτρονίων

$$E_{μέση} = \frac{E_{ολικη}}{n} = \frac{\frac{\sqrt{2m}^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{5} E_F^{5/2}}{\frac{\sqrt{2m}^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} E_F^{3/2}} = \frac{3}{5} E_F$$

Για  $T > 0$  συνεχίζει να ισχύει

→ η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων δεν εξαρτάται από την θερμοκρασία!  
→ αυτή είναι η μεγάλη διαφορά από την κλασική θεωρία!

## Παράδειγμα 1

Δεδομένου ότι το πλάτος της ενεργειακής ζώνης είναι περίπου 10 eV, να υπολογίσετε τα ακόλουθα μεγέθη ανά  $\text{cm}^3$  και ανά eV:

- Την πυκνότητα καταστάσεων στο κέντρο της ζώνης
- Τον αριθμό των καταστάσεων ανά μονάδα όγκου στην μικρή ενεργειακή περιοχή  $k_B T$  γύρω από το κέντρο
- Την πυκνότητα καταστάσεων σε ενέργεια  $k_B T$  πάνω από τον πυθμένα της ζώνης
- Τον αριθμό των καταστάσεων ανά μονάδα όγκου στην μικρή ενεργειακή περιοχή από  $k_B T$  μέχρι  $2k_B T$  γύρω από τον πυθμένα της ζώνης

## Παράδειγμα 1

- Την πυκνότητα καταστάσεων στο κέντρο της ζώνης

$$g(E) = \frac{8\pi\sqrt{2m}^{*3/2}}{h^3} E^{1/2}$$

$$g(5 \text{ eV}) = \frac{8\pi\sqrt{2}(9.1 \times 10^{-31})^{3/2}}{(6.626 \times 10^{-34})^3} (5 \times 1.6 \times 10^{-19})^{1/2}$$

$$= 9.50 \times 10^{46} \text{ m}^{-3} \text{ J}^{-1}$$

$$= (9.50 \times 10^{46} \text{ m}^{-3} \text{ J}^{-1})(10^{-6} \text{ m}^3 \text{ cm}^{-3})(1.6 \times 10^{-19} \text{ J eV}^{-1})$$

$$= 1.52 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$$

## Παράδειγμα 1

β. Τον αριθμό των καταστάσεων ανά μονάδα όγκου στην μικρή ενεργειακή περιοχή  $k_B T$  γύρω από το κέντρο

Στην θερμοκρασία δωματίου ( $T \approx 300$  K)  $k_B T \approx 0.026$  eV

$$\begin{aligned}n &= g(E)\Delta E \\&= g(5 \text{ eV})k_B T \\&= (1.52 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1})(0.026 \text{ eV}) \\&= 3.9 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}\end{aligned}$$

## Παράδειγμα 1

γ. Την πυκνότητα καταστάσεων σε ενέργεια  $k_B T$  πάνω από τον πυθμένα της ζώνης

Στην θερμοκρασία δωματίου ( $T \approx 300$  K)  $k_B T \approx 0.026$  eV

$$\begin{aligned}g(E) &= \frac{8\pi\sqrt{2}m^{*3/2}}{\hbar^3} E^{1/2} \\g(0.026 \text{ eV}) &= \frac{8\pi\sqrt{2}(9.1 \times 10^{-31})^{3/2}}{(6.626 \times 10^{-34})^3} (0.026 \times 1.6 \times 10^{-19})^{1/2} \\&= 6.84 \times 10^{45} \text{ m}^{-3} \text{ J}^{-1} \\&= (6.84 \times 10^{46} \text{ m}^{-3} \text{ J}^{-1})(10^{-6} \text{ m}^3 \text{ cm}^{-3})(1.6 \times 10^{-19} \text{ J eV}^{-1}) \\&= 1.10 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}\end{aligned}$$

## Παράδειγμα 1

δ. Τον αριθμό των καταστάσεων ανά μονάδα όγκου στην μικρή ενεργειακή περιοχή από  $k_B T$  μέχρι  $2k_B T$  γύρω από τον πυθμένα της ζώνης

$$\begin{aligned}n &= g(E)\Delta E \\&= g(0.026 \text{ eV})k_B T \\&= (1.10 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1})(0.026 \text{ eV}) \\&= 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}\end{aligned}$$

## Παράδειγμα 2

Βρείτε τον συνολικό αριθμό καταστάσεων στην ζώνη αγωγιμότητας για τον άργυρο ( $E_{FO} = 5.5$  eV,  $\Phi = 4.5$  eV) και συγκρίνετε με την ατομική συγκέντρωση του αργύρου

Θεωρούμε ότι η πυκνότητα είναι συμμετρική ως προς το κέντρο της ζώνης. Άρα ολοκληρώνουμε μέχρι την μέση, και το πολλαπλασιάζουμε επί δύο

→ Η ζώνη έχει πλάτος  $5.5 + 4.5 = 10$  eV

→ ολοκληρώνουμε την πυκνότητα από 0 ως 5 eV

$$\begin{aligned}n &= 2 \int_0^{5 \text{ eV}} g(E) dE \\&= 2 \frac{8\pi\sqrt{2}m^{*3/2}}{\hbar^3} \int_0^{5 \text{ eV}} \sqrt{E} dE = 2 \frac{8\pi\sqrt{2}m^{*3/2}}{\hbar^3} \frac{2}{3} E^{3/2} \Big|_0^{5 \text{ eV}} \\&= \frac{32\pi\sqrt{2}(9.1 \times 10^{-31} \text{ kg})^{3/2}}{3(6.626 \times 10^{-34} \text{ Js})^3} (5 \text{ eV} \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J/eV})^{3/2} \\&= 10.16 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}\end{aligned}$$

## Παράδειγμα 2

---

Η ατομική συγκέντρωση του αργύρου

$$n = \frac{\rho_m \cdot Z \cdot N_A}{A} \text{ el} \cdot \text{cm}^{-3}$$

→ πυκνότητα μάζας  $\rho = 10.5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$

→ ατομικό βάρος  $A = 107.9 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

→ αριθμός Avogadro  $N_A = 6.023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

→ αριθμός ηλεκτρονίων για κάθε άτομο  $Z = 1$

$$n = 5.85 \times 10^{22} \text{ el} \cdot \text{cm}^{-3}$$