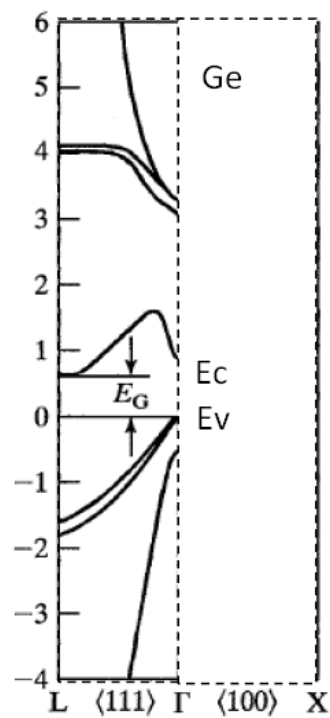
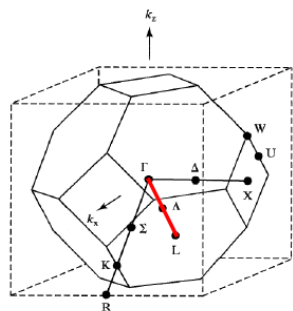
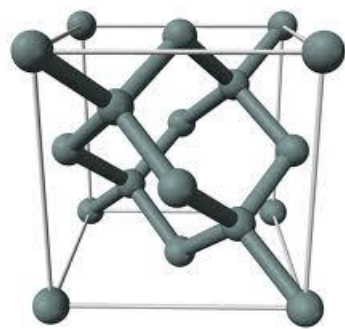


ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ ΚΟΡΜΟΥ II



ΑΣΚΗΣΗ Σ1-Σ2**Το ενεργειακό χάσμα του Γερμανίου (Ge)****Προαπαιτούμενες γνώσεις**

- ✓ Θεωρία ζωνών
- ✓ Ημιαγωγοί
- ✓ Ενδογενής αγωγιμότητα

Προτεινόμενη βιβλιογραφία

- 1) Π. Βαρώτσος, Κ. Αλεξόπουλος, «Φυσική Στερεάς Κατάστασης», Εκδόσεις Σαββάλας (1995).
- 2) C. Kittel, «Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης», Εκδόσεις Α. Γ. Πνευματικός (1979).
- 3) N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, «Φυσική Στερεάς Κατάστασης», Εκδόσεις Α. Γ. Πνευματικός (2012).
- 4) H. Ibach, H. Lüth, «Φυσική Στερεάς Κατάστασης», Εκδόσεις Ζήτη (2012).
- 5) Γ. Π. Τριμπέρης, «Φυσική Ημιαγωγών» Εκδ. Liberal Books (2013).

Περιεχόμενο της άσκησης

Σ' έναν απόλυτα καθαρό ημιαγωγό οι συγκεντρώσεις των ηλεκτρονίων και των οπών είναι ίσες αφού η διαδικασία παραγωγής ενός ηλεκτρονίου στη ζώνη αγωγιμότητας δημιουργεί μια οπή στη ζώνη σθένους. Η αντίστοιχη αγωγιμότητα καλείται ενδογενής. Η ενδογενής αγωγιμότητα ενός κρυστάλλου ημιαγωγού μεταβάλλεται με τη θερμοκρασία. Σκοπός της άσκησης αυτής είναι ο υπολογισμός του ενεργειακού χάσματος του Ge από μετρήσεις ενδογενούς αγωγιμότητας σε διάφορες θερμοκρασίες. Κατόπιν, σύμφωνα με τα προβλεπόμενα από τη θεωρία, υπολογίζεται το ενεργειακό χάσμα του Ge. Η πειραματική τιμή του (εμμέσου) ενεργειακού χάσματος του Ge είναι 0.74 eV και 0.67 eV σε θερμοκρασία 0 K και 300 K, αντιστοίχως.

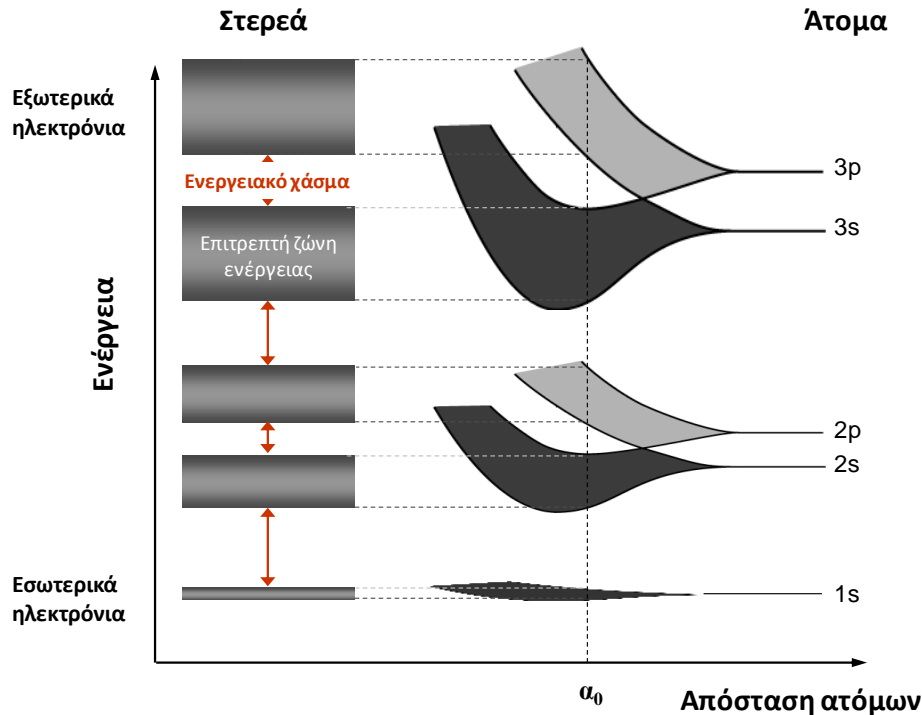
1. Εισαγωγή

Μία από τις σημαντικότερες ιδιότητες των στερεών είναι η ηλεκτρική τους αγωγιμότητα δηλαδή η απόκριση των ηλεκτρονίων τους σε ένα εξωτερικά εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό πεδίο. Τα κρυσταλλικά στερεά διακρίνονται ανάλογα με τις ηλεκτρικές τους ιδιότητες σε τρεις κατηγορίες: *μέταλλα*, *μονωτές* και *ημιαγωγούς*. Τυπικές τιμές της ειδικής αντίστασης ρ των μεταλλικών αγωγών σε θερμοκρασία δωματίου ($T_{\Delta} = 300$ K, $k_B T_{\Delta} \approx 0.025$ eV) βρίσκονται στην περιοχή των 10^{-6} Ω·cm, σε αντίθεση με τους μονωτές ($\rho \approx 10^{14}$ - 10^{22} Ω·cm) και τους ημιαγωγούς όπου η ρ κυμαίνεται μεταξύ 10^{-2} και 10^9 Ω·cm. Οι εξαιρετικά μεγάλες διαφορές στην ηλεκτρική αγωγιμότητα των υλικών (η ρ μεταβάλλεται μεταξύ 10^{-8} και 10^{22} Ω·cm), εξηγούνται σε μεγάλο βαθμό από τη διαμόρφωση του ενεργειακού φάσματος των στερεών σε ενεργειακές ζώνες και του διαφορετικού ποσοστού κατάληψής τους από ηλεκτρόνια, το οποίο καθορίζει τη συγκέντρωση των φορέων αγωγιμότητας.

2. Ενεργειακές ζώνες στερεών

Το ενεργειακό διάγραμμα των ελεύθερων ατόμων αποτελείται από διακριτές ενεργειακές στάθμες (Σχ. 1). Όταν N άτομα πλησιάσουν ώστε να σχηματίσουν ένα κρυσταλλικό στερεό, τα εξωτερικά ηλεκτρόνια των ατόμων, ιδιαίτερα τα ηλεκτρόνια των εξωτερικών στοιβάδων (ηλεκτρόνια σθένους), παύουν να είναι εντοπισμένα στα επιμέρους άτομα και υπόκεινται σε ένα μέσο ηλεκτροστατικό δυναμικό που οφείλεται στους ακίνητους πυρήνες και στο σύνολο των ηλεκτρονίων που συνθέτουν τον κρύσταλλο, το οποίο έχει την περιοδικότητα του κρυσταλλικού πλέγματος. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη διάσπαση των διακριτών ατομικών ενεργειακών καταστάσεων και τη δημιουργία πλήθους ενεργειακών σταθμών για το σύστημα των N ατόμων. Ο αριθμός ενεργειακών σταθμών καθορίζεται από τον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους σε ένα στερεό που είναι της τάξης του αριθμού των ατόμων του, δηλαδή του αριθμού Avogadro $N_A = 6.022 \times 10^{23}$. Επειδή ο αριθμός αυτός είναι πάρα πολύ μεγάλος, οι ενεργειακές στάθμες των ηλεκτρονίων στα στερεά είναι τόσο κοντά η μια στην άλλη, ώστε το ενεργειακό διάγραμμα να μην έχει πλέον διακριτό χαρακτήρα αλλά να παίρνει τη μορφή **ενεργειακών ζωνών** (Σχ. 1). Μεταξύ των ενεργειακών ζωνών υπάρχουν απαγορευμένες ενεργειακές περιοχές, όπως δείχνει η κβαντομηχανική ανάλυση που διέπει το φαινόμενο, όπου δεν υπάρχουν επιτρεπόμενες ενεργειακές στάθμες. Οι ενεργειακές αυτές περιοχές καλούνται **ενεργειακά χάσματα**. Όπως φαίνεται στο Σχ. 1, όσο μικρότερη είναι η απόσταση μεταξύ των ατόμων σ' ένα κρυσταλλικό στερεό τόσο ισχυρότερη γίνεται η μεταξύ τους αλληλεπίδραση και η παραμόρφωση των κυματοσυναρτήσεων των ηλεκτρονίων σθένους, τα οποία παύουν να είναι εντοπισμένα στα επιμέρους άτομα αλλά εκτείνονται σε μεγάλες αποστάσεις μέσα στον κρύσταλλο. Αντίθετα με τα ηλεκτρόνια σθένους, τα ηλεκτρόνια στο εσωτερικό του ατόμου τα οποία καταλαμβάνουν και τις χαμηλότερες ενεργειακά στάθμες, επηρεάζονται λιγότερο από τα πλησιέστερα άτομα με αποτέλεσμα οι ενεργειακές τους στάθμες να διευρύνονται σε μικρότερο βαθμό. Η τελική μορφή που παίρνει το ενεργειακό διάγραμμα του στερεού, καθορίζεται από την πλεγματική σταθερά, α_0 , του

κρυστάλλου δηλαδή την απόσταση των ατόμων στη κρυσταλλική δομή. Στην περίπτωση του Ge, το οποίο έχει δομή διαμαντιού, δηλαδή εδροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος (face centered cubic, fcc) με διατομική βάση, η πλεγματική σταθερά είναι $a = 0.5658 \text{ nm}$.



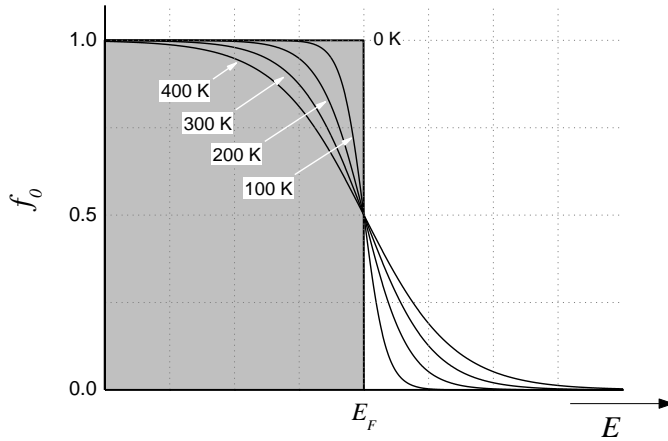
Σχήμα 1. Σχηματικό διάγραμμα της μετάβασης από τις διακριτές ενεργειακές στάθμες των ατόμων στη συνεχή, κατά διαστήματα, ενεργειακή δομή των στερεών. Το εύρος των ζωνών καθορίζεται από την απόσταση a_0 μεταξύ των ατόμων του κρυστάλλου.

3. Συνάρτηση κατανομής

Λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli, η πιθανότητα μία ενεργειακή στάθμη E να είναι κατειλημμένη από ένα ηλεκτρόνιο δίνεται από τη συνάρτηση κατανομής Fermi - Dirac

$$f_0(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \quad (1)$$

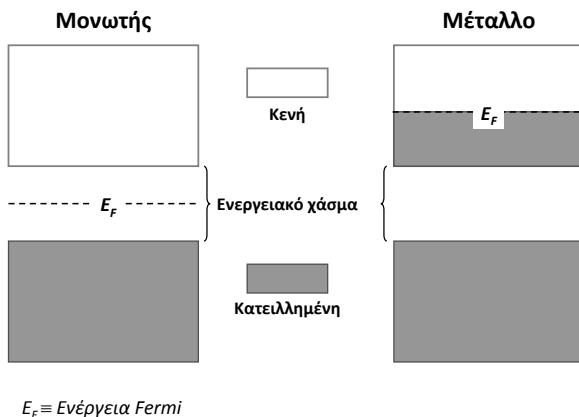
Ο δείκτης «0» αναφέρεται σε κατάσταση ισορροπίας και μ είναι το **χημικό δυναμικό** (chemical potential). Η τιμή του χημικού δυναμικού σε θερμοκρασία $T = 0 \text{ K}$ ονομάζεται **ενέργεια Fermi**, E_F , δηλαδή $\mu(0\text{K}) = E_F$. Το Σχήμα 2 δείχνει τη συνάρτηση κατανομής Fermi - Dirac σε διάφορες θερμοκρασίες. Παρατηρούμε ότι σε θερμοκρασία $T = 0 \text{ K}$, η f_0 είναι ίση με 1 για ενέργειες $E < E_F$ και ίση με 0 για $E > E_F$. Έτσι, η ενέργεια Fermi είναι η ενέργεια της τελευταίας κατειλημμένης ενεργειακής κατάστασης στο απόλυτο μηδέν.



Σχήμα 2. Η συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac σε διάφορες θερμοκρασίες.

4. Ηλεκτρική αγωγιμότητα κρυσταλλικών στερεών

Οι ηλεκτρικές ιδιότητες των κρυσταλλικών στερεών καθορίζονται από τη δυναμική των ηλεκτρονίων τους σε ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο, σύμφωνα με το ενεργειακό φάσμα που προκύπτει στο περιοδικό δυναμικό του κρυσταλλικού πλέγματος, το οποίο αποτελείται από επιτρεπτές και απαγορευμένες ενεργειακές ζώνες. Πιο συγκεκριμένα τα ηλεκτρόνια σθένους των ατόμων που συνιστούν τον κρύσταλλο αποτελούν τη **ζώνη σθένους**. Αν η ζώνη σθένους είναι πλήρως κατειλημμένη τότε τα ηλεκτρόνια στη ζώνη αυτή δεν έχουν τη δυνατότητα να απορροφήσουν ενέργεια από το εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό πεδίο, αφού οι μόνες διαθέσιμες ενεργειακές καταστάσεις στις οποίες θα μπορούσαν να μεταβούν είναι εκείνες της επόμενης ζώνης η οποία ονομάζεται **ζώνη αγωγιμότητας** και η οποία απέχει σημαντικά από τη ζώνη σθένους λόγω του **ενεργειακού χάσματος** (E_g). Όταν συμβαίνει αυτό σε θερμοκρασία $T = 0 \text{ K}$ ο κρύσταλλος χαρακτηρίζεται ως **μονωτής** ή **ημιαγωγός**. Η διάκριση μεταξύ μονωτή και ημιαγωγού αφορά το μέγεθος του ενεργειακού χάσματος, το οποίο είναι σχετικά μεγάλο στην πρώτη περίπτωση και σχετικά μικρό στη δεύτερη. Αντίθετα, όταν η ζώνη σθένους δεν είναι πλήρης τα ηλεκτρόνια της ζώνης μπορούν να επιταχυνθούν εύκολα από το ηλεκτρικό πεδίο, καθώς μπορούν να μεταβούν στις μη κατειλημμένες ενεργειακές καταστάσεις της ίδιας ζώνης. Ο κρύσταλλος τότε χαρακτηρίζεται ως **μέταλλο**. (βλ. Σχ. 3)



$E_F \equiv \text{Ενέργεια Fermi}$

Σχήμα 3. Σχηματικό ενεργειακό διάγραμμα μονωτών και μετάλλων.

4.1 Μέταλλα

Η ηλεκτρική αγωγιμότητα ενός μεταλλικού αγωγού οφείλεται στην κίνηση των ηλεκτρονίων εντός της μερικώς κατειλημμένης ζώνης σθένους υπό την επίδραση ενός ηλεκτρικού πεδίου, το οποίο όμως δεν είναι αρκετά ισχυρό ώστε να προκαλεί μεταβάσεις σε ανώτερες ενεργειακές ζώνες. Σύμφωνα με την κβαντική θεωρία των στερεών, τα ηλεκτρόνια, που περιγράφονται με κυματοσυναρτήσεις επίπεδων κυμάτων διαμορφωμένων κατά πλάτος από το περιοδικό δυναμικό του πλέγματος (ηλεκτρόνια Bloch), μπορούν να διαδίδονται ελεύθερα χωρίς απώλεια ενέργειας και αντίστασης σε ένα ιδανικό κρυσταλλικό πλέγμα που αποτελείται από ιόντα, ακίνητα στις θέσεις ισορροπίας τους με ενεργό μάζα m^* . Η αντίσταση που παρατηρείται πειραματικά οφείλεται στη σκέδαση των ηλεκτρονίων από πλεγματικές ατέλειες, προσμίξεις και τις ταλαντώσεις του πλέγματος (φωνόνια). Μία καλή εκτίμηση της ηλεκτρικής αγωγιμότητας των μετάλλων μπορεί να γίνει στο πλαίσιο της προσέγγισης του χρόνου αποκατάστασης (relaxation time approximation), η οποία προϋποθέτει ότι η κατανομή των ηλεκτρονίων ακολουθεί τη συνάρτηση Fermi-Dirac (1). Για ηλεκτρόνια αγωγιμότητας με ενέργεια που ακολουθεί την παραβολική προσέγγιση της σχέσης διασποράς $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ με σταθερή ενεργό μάζα m^* , η ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα δίνεται από την έκφραση

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_F}{m^*} \quad (2)$$

όπου n η συγκέντρωση ηλεκτρονίων και τ_F ο χρόνος αποκατάστασης στην επιφάνεια Fermi, καθώς η αγωγιμότητα προέρχεται από ηλεκτρόνια με ενέργεια κοντά στην E_F . Η ειδική αντίσταση ρ ορίζεται σαν το αντίστροφο της ειδικής ηλεκτρικής αγωγιμότητας, σύμφωνα με τη σχέση

$$\rho = \frac{m^*}{ne^2\tau_F} \quad (3)$$

Η ειδική αντίσταση πολλών μετάλλων σε θερμοκρασία δωματίου είναι αποτέλεσμα της σκέδασης των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας λόγω των ταλαντώσεων των ατόμων του κρυσταλλικού πλέγματος (φωνόνια), ενώ σε χαμηλές θερμοκρασίες εμφανίζεται σημαντική συνεισφορά από τις συγκρούσεις με πλεγματικές ατέλειες και προσμίξεις. Σε μια πρώτη προσέγγιση, οι αντίστοιχοι ρυθμοί σκέδασης είναι ανεξάρτητοι μεταξύ τους, έτσι ώστε ο ολικός χρόνος αποκατάστασης τ , να εκφράζεται από τη σχέση

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_L} + \frac{1}{\tau_i} \quad (4)$$

όπου τ_L και τ_i είναι οι χρόνοι αποκατάστασης κατά τη σκέδαση των ηλεκτρονίων με πλεγματικά φωνόνια και ατέλειες/προσμίξεις, αντίστοιχα. Η ολική ειδική αντίσταση δίνεται

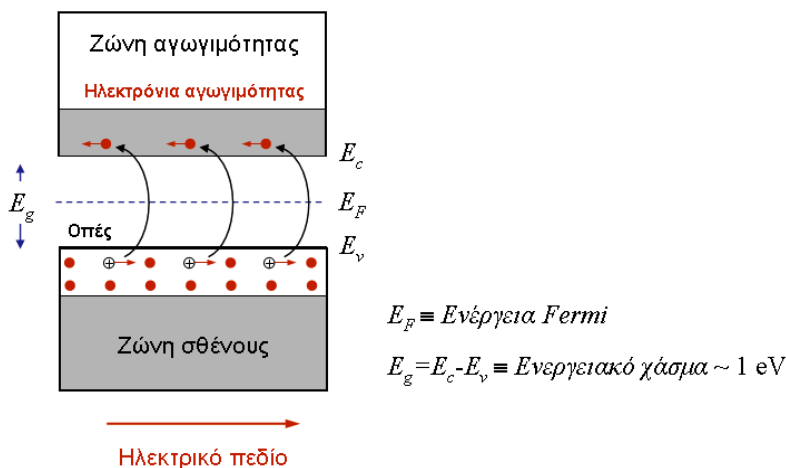
από τη σχέση

$$\rho = \rho_L + \rho_i \quad (5)$$

όπου ρ_L είναι η ειδική αντίσταση που προκαλείται από τα φωνόνια και εξαρτάται σημαντικά από τη θερμοκρασία, ενώ ρ_i είναι η ειδική αντίσταση που οφείλεται στη σκέδαση από στατικές ατέλειες του κρυσταλλικού πλέγματος και η οποία συχνά είναι ανεξάρτητη της θερμοκρασίας. Η σχέση (5), η οποία είναι προσεγγιστική καθώς οι χρόνοι τ_L και τ_i είναι διαφορετικές συναρτήσεις του κυματανύσματος k , εκφράζει τον κανόνα του Matthiessen που χρησιμεύει στην ανάλυση των πειραματικών δεδομένων.

4.2 Ημιαγωγοί

Η αγωγιμότητα των ημιαγωγών διαφέρει σημαντικά από την αγωγιμότητα των μετάλλων ως προς το μέγεθος αλλά κυρίως ως προς την εξάρτησή της από τη θερμοκρασία. Το ενεργειακό διάγραμμα ενός ημιαγωγού (Σχ. 4) χαρακτηρίζεται από την παρουσία ενεργειακού χάσματος τυπικού μεγέθους $E_g \approx 1$ eV, σε αντίθεση με τους μονωτές όπου $E_g \approx 4-5$ eV. Σε θερμοκρασία απολύτου μηδενός ένας ημιαγωγός είναι μονωτής. Η ζώνη σθένους είναι πλήρως κατειλημμένη, ενώ η επόμενη ζώνη, δηλ. η ζώνη αγωγιμότητας, είναι κενή σε $T=0$ K. Με την αύξηση της θερμοκρασίας, ηλεκτρόνια διεγείρονται θερμικά από τη ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας όπου υπάρχουν διαθέσιμες ενεργειακές καταστάσεις. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία κενών ενεργειακών καταστάσεων στη ζώνη σθένους, οι οποίες καλούνται οπές (Σχ. 4). Η εφαρμογή ηλεκτρικού πεδίου οδηγεί τότε στην εμφάνιση ηλεκτρικής αγωγιμότητας, στην οποία συνεισφέρουν τόσο τα ηλεκτρόνια στη ζώνη αγωγιμότητας όσο και στη ζώνη σθένους που συμπληρώνουν τις κενές ενεργειακές καταστάσεις των οπών, οι οποίες με τον τρόπο αυτό συμπεριφέρονται ως θετικά φορτία (Σχ. 4).



Σχήμα 4. Σχηματικό ενεργειακό διάγραμμα ενός ενδογενούς αγωγιμότητας ημιαγωγού.

Ένας ημιαγωγός μεγάλης καθαρότητας με αμελητέο αριθμό προσμίξεων, εμφανίζει ενδογενή

αγωγιμότητα η οποία εξαρτάται κυρίως από τη συγκέντρωση ενδογενών φορέων (ηλεκτρονίων και οπών). Σε αντίθεση με τους μεταλλικούς αγωγούς όπου η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας είναι σταθερή και η αγωγιμότητα μειώνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας λόγω των σκεδάσεων με τα φωνόνια, η αγωγιμότητα ενός ημιαγωγού αυξάνει με την αύξηση της θερμοκρασίας, αντανακλώντας την αύξηση της συγκέντρωσης φορέων. Ο χρόνος αποκατάστασης στους ημιαγωγούς μειώνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας, όπως στα μέταλλα, με αργό όμως ρυθμό σχετικά με το ρυθμό αύξησης της συγκέντρωσης ενδογενών φορέων. Η αγωγιμότητα προκύπτει από το άθροισμα των συνεισφορών ηλεκτρονίων και οπών

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_h = \frac{ne^2\tau_e}{m_e^*} + \frac{pe^2\tau_h}{m_h^*} \quad (6)$$

όπου n και p είναι οι συγκεντρώσεις, τ_e και τ_h οι χρόνοι αποκατάστασης, m_e^* και m_h^* οι ενεργές μάζες των ηλεκτρονίων και των οπών, αντίστοιχα. Για να προσδιορίσουμε την αγωγιμότητα ενός ημιαγωγού είναι απαραίτητο να γνωρίζουμε τις συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων (n) και οπών (p) συναρτήσει της θερμοκρασίας. Για έναν καθαρό ημιαγωγό χωρίς προσμίξεις με ενεργειακό διάγραμμα όπως αυτό του Σχήματος 4, προκύπτει (βλ. ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1)

$$n = p = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T} \quad (7)$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (6) και (7) προκύπτει η έκφραση:

$$\sigma = 2e^2 \left(\frac{\tau_e}{m_e^*} + \frac{\tau_h}{m_h^*} \right) \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T}. \quad (8)$$

Η παραπάνω σχέση δείχνει ότι η ειδική αγωγιμότητα έχει μια ισχυρή εκθετική εξάρτηση από τη θερμοκρασία. Οι χρόνοι αποκατάστασης, αντίθετα, αποδεικνύεται ότι μειώνονται με τη θερμοκρασία με έναν απλό αλγεβρικό νόμο, όπως $\propto T^{-3/2}$ που προβλέπεται στην περίπτωση σκέδασης από ακουστικά φωνόνια. Η θερμοκρασιακή εξάρτηση του χρόνου αποκατάστασης αντισταθμίζεται μερικά από τον παράγοντα $T^{3/2}$ που υπεισέρχεται στην έκφραση της συγκέντρωσης των φορέων αγωγιμότητας και γενικά είναι αρκετά ασθενής ώστε να επηρεάσει σημαντικά την εκθετική εξάρτηση της $\sigma(T)$ που ακολουθεί τη σχέση:

$$\sigma = \sigma_0 e^{-E_g/2k_B T}. \quad (9)$$

Λογαριθμίζοντας την (9) προκύπτει η σχέση:

$$\ln\sigma = \ln\sigma_0 - \frac{E_g}{2k_B} \frac{1}{T} \quad (10)$$

η οποία είναι γραμμική ως προς $1/T$ με κλίση $-E_g/2k_B$. Από την κλίση της ευθείας αυτής προσδιορίζεται η τιμή του ενεργειακού χάσματος E_g .

Στο Σχήμα 5 παρουσιάζεται η μεταβολή της αγωγιμότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας σε ένα πραγματικό ημιαγωγό με προσμίξεις. Σε υψηλές θερμοκρασίες επικρατεί η *ενδογενής αγωγιμότητα* του ημιαγωγού με αποτέλεσμα η ποσότητα $\ln\sigma$ να μεταβάλλεται γραμμικά ως συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας ($1/T$), ανεξάρτητα από την παρουσία προσμίξεων. Από την κλίση ($-E_g/2k_B$) της ευθείας του $\ln\sigma$ συναρτήσει του $1/T$ σε αυτή την περιοχή θερμοκρασιών προσδιορίζεται η τιμή του ενεργειακού χάσματος E_g με βάση τη σχέση (10), που περιγράφει την ειδική αντίσταση. Σε χαμηλές θερμοκρασίες κυριαρχεί η *εξωγενής αγωγιμότητα* όπου οι δημιουργούμενοι φορείς οφείλονται σε ενεργειακές καταστάσεις που δημιουργούνται εντός του ενεργειακού χάσματος του ημιαγωγού λόγω προσμίξεων. Η κλίση της περιοχής αυτής είναι περίπου $-E_d/k_B$, όπου E_d η απόσταση της στάθμης που εισάγει η πρόσμιξη μέσα στο ενεργειακό χάσμα από την πλησιέστερη ενεργειακή ζώνη. Μεταξύ της ενδογενούς και της εξωγενούς περιοχής υπάρχει μία ενδιάμεση περιοχή θερμοκρασιών όπου η αγωγιμότητα είναι σταθερή με τη θερμοκρασία (περιοχή κόρου). Η αύξηση της θερμοκρασίας στην περιοχή αυτή δεν συνοδεύεται από αντίστοιχη αύξηση της αγωγιμότητας διότι δεν δημιουργούνται επί πλέον φορείς από τις προσμίξεις.

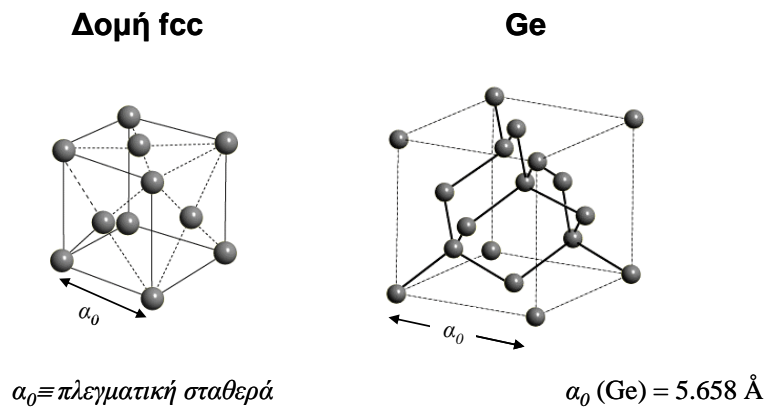


Σχήμα 5. Σχηματική μεταβολή της αγωγιμότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας σε ένα πραγματικό ημιαγωγό με προσμίξεις.

4.3 Κρυσταλλική και ηλεκτρονική δομή Ge

Στην άσκηση αυτή θα μελετήσουμε την ενδογενή αγωγιμότητα και θα προσδιορίσουμε το ενεργειακό χάσμα ενός κρυστάλλου γερμανίου. Ημιαγωγοί όπως το πυρίτιο (Si) και το γερμάνιο (Ge) κρυσταλλώνονται στην εδροκεντρωμένη κυβική δομή (*face centered cubic-fcc*) του διαμαντιού, όπως φαίνεται στο Σχήμα 6. Η δομή του διαμαντιού μπορεί να

σχηματισθεί από την υπέρθεση 2 απλών δομών *fcc*, μετατοπισμένων μεταξύ τους κατά το ένα τέταρτο μιας διαγωνίου χώρου του κύβου. Έτσι, κάθε άτομο βρίσκεται στο κέντρο ενός κανονικού τετραέδρου με 4 όμοια άτομα ως πλησιέστερους γείτονες με τα οποία σχηματίζει 4 ισχυρούς ομοιοπολικούς δεσμούς, διαθέτοντας όλα τα ηλεκτρόνια σθένους του (ο άνθρακας, το πυρίτιο και το γερμάνιο ανήκουν στην ομάδα IV του περιοδικού πίνακα). Ενεργειακά, τα ηλεκτρόνια αυτά καταλαμβάνουν πλήρως τη ζώνη σθένους, ενώ διέγερσή τους στη ζώνη αγωγιμότητας απαιτεί ενεργειακό κόστος για το σπάσιμο του δεσμού που αντιστοιχεί στο ενεργειακό άλμα κατά E_g .



Σχήμα 6. Οι κρυσταλλική δομή του Ge (δομή διαμαντιού) σε σύγκριση με την πρότυπη εδροκεντρωμένη κυβική δομή *fcc*.

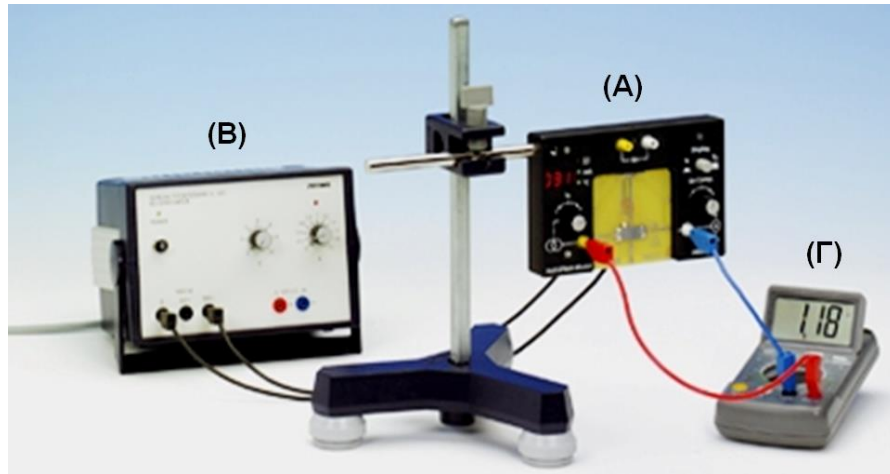
5. Πειραματική Διάταξη

Η πειραματική διάταξη που φαίνεται στο Σχήμα 7 περιλαμβάνει παρακάτω στοιχεία:

(Α) Μονάδα μέτρησης τάσης-ρεύματος του κρυστάλλου Ge διαστάσεων $20 \times 10 \times 1 \text{ mm}^3$ ως συνάρτηση της θερμοκρασίας (μέγιστη θερμοκρασία $140 \text{ }^\circ\text{C}$).

(Β) Τροφοδοτικό συνεχούς τάσης 0-12V που τροφοδοτεί το κυρίως κύκλωμα σε κοινή μονάδα με τροφοδοτικό εναλλασσόμενης τάσης για την παροχή ρεύματος στο κύκλωμα θέρμανσης του δείγματος.

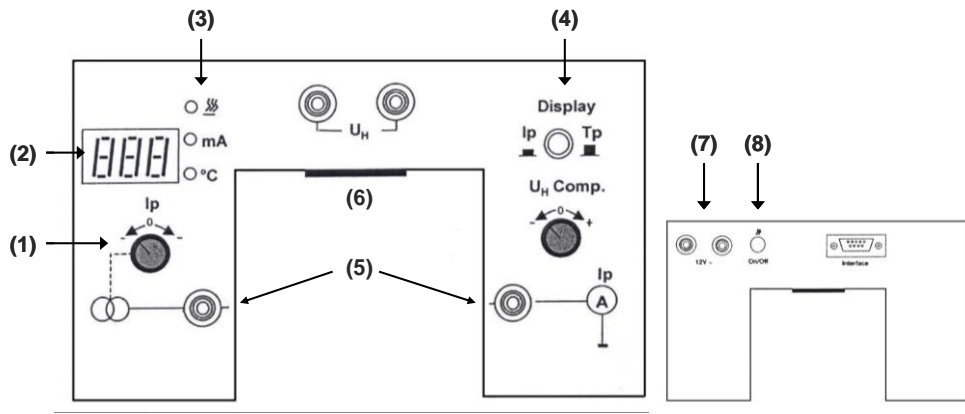
(Γ) Ψηφιακό πολύμετρο που παρεμβάλλεται παράλληλα με την αντίσταση του Ge για τη μέτρηση της τάσης.



Σχήμα 7. Η πειραματική διάταξη μέτρησης της αγωγιμότητας του Ge ως συνάρτηση της θερμοκρασίας.

Η μονάδα μέτρησης (A) περιλαμβάνει τα παρακάτω στοιχεία (Σχήμα 8):

- (1) Το μεταγωγό ρύθμισης του ρεύματος (I) που διαρρέει τον κρύσταλλο Ge.
 - (2) Ψηφιακή οθόνη η οποία απεικονίζει την τιμή ρεύματος (mA) ή την τιμή θερμοκρασίας ($^{\circ}\text{C}$) του δείγματος.
 - (3) Λυχνίες LED οι οποίες όταν ενεργοποιηθούν δείχνουν αν το δείγμα βρίσκεται στην κατάσταση θέρμανσης.
 - (4) Διακόπτης επιλογής απεικόνισης του ρεύματος $I(\text{mA})$ ή της θερμοκρασίας $\Theta(^{\circ}\text{C})$ του δείγματος στην ψηφιακή οθόνη.
 - (5) Υποδοχές εισόδου για τη μέτρηση της τάσης στα άκρα του κρυστάλλου Ge.
 - (6) Υποδοχή πλακέτας Ge.
- Στο πίσω μέρος της μονάδας βρίσκονται:
- (7) Διακόπτης που ρυθμίζει τη λειτουργία θέρμανσης του δείγματος (ON-OFF).
 - (8) Υποδοχές εισόδου της τάσης τροφοδοσίας (12 V).



Σχήμα 8. Σχηματικό διάγραμμα της μονάδας μέτρησης (A).

6. Εκτέλεση της άσκησης

1. Αναγνωρίστε τα διάφορα όργανα στο κύκλωμα της άσκησης (σχήμα 7).
2. Εφαρμόστε τάση τροφοδοσίας $V = 6V$ από το τροφοδοτικό (B).
3. Επιλέξτε την απεικόνιση του ρεύματος στην ψηφιακή οθόνη (2) μέσω του διακόπτη (4). Ρυθμίστε το ρεύμα που διαρρέει τον αντιστάτη Ge στα 5 mA χρησιμοποιώντας τον μεταγωγό (1) και παρακολουθώντας την ένδειξη ρεύματος στην ψηφιακή οθόνη (2). Η ρύθμιση του ρεύματος στα 5 mA θα μείνει σταθερή μέχρι την ολοκλήρωση του παρόντος πακέτου μετρήσεων.
4. Ενεργοποιήστε τη λειτουργία θέρμανσης του δείγματος με τον διακόπτη (8) στη θέση (ON) (θα ενεργοποιηθούν οι αντίστοιχες λυχνίες LED δίπλα στην ψηφιακή οθόνη) και ταυτόχρονα επιλέξτε την απεικόνιση της θερμοκρασίας στην ψηφιακή οθόνη (2) μέσω του διακόπτη (4). Καταγράψτε τις τιμές της τάσης V (mV) που αναγράφονται στο πολύμετρο (Γ) (στην κατάλληλη κλίμακα) σε κάθε θερμοκρασία Θ ($^{\circ}\text{C}$) με βήμα 5°C κατά την άνοδο της θερμοκρασίας μέχρι τους 100°C , ώστε να αποφευχθεί υπερθέρμανση του κυκλώματος (η λυχνία με την ένδειξη θέρμανσης θα σβήσει). ΠΡΟΣΟΧΗ! Η θέρμανση γίνεται αρχικά με γρήγορο ρυθμό. Κατά την ψύξη του δείγματος στη θερμοκρασία περιβάλλοντος, καταγράψτε συμπληρωματικές μετρήσεις της τάσης V (mV) για τιμές θερμοκρασίας με βήμα 5°C , καθώς αποκαθίσταται με αργό ρυθμό η θερμοκρασία δωματίου στο κύκλωμα. Καταχωρήστε τα αποτελέσματά σας στις δύο πρώτες στήλες του Πίνακα 2. Επαναλάβετε τις μετρήσεις για τιμές ρεύματος $4, 3, 2$ και 1 mA .

Πίνακας 2

Θ ($^{\circ}\text{C}$)	V (mV)	T (K)	σ ($\Omega^{-1}\text{mm}^{-1}$)	$1/T$ (1/K)	$\ln\sigma$

7. Επεξεργασία των μετρήσεων

Η επεξεργασία των μετρήσεων θα γίνει στο εργαστήριο με χρήση του προγράμματος Origin 7.0 (Παράρτημα 3). Πρέπει να έχετε μαζί σας ένα «καθαρό» USB stick για την αποθήκευση των μετρήσεων (Παράρτημα 3).

1. Μετατρέψτε τις τιμές θερμοκρασίας από °C σε μονάδες απόλυτης θερμοκρασίας $T(K)$ και καταχωρήστε τις στην αντίστοιχη στήλη του Πίνακα 2 (για τις μετρήσεις με $I = 5$ mA). Για κάθε τιμή απόλυτης θερμοκρασίας T , υπολογίστε τις αντίστοιχες τιμές της αγωγιμότητας του Ge με βάση τη σχέση $\sigma = IL/VA$ (I είναι το ρεύμα, $L = 20$ mm και $A = 10\text{mm}^2$) και συμπληρώστε την αντίστοιχη στήλη του Πίνακα 2.

2. Κάντε την γραφική παράσταση της $\sigma(T)$. Εξηγήστε ποιοτικά τη μεταβολή της αγωγιμότητας με τη θερμοκρασία. Σχολιάστε, προς αντιδιαστολή, τις αντίστοιχες καμπύλες $\sigma(T)$ για τα μέταλλα εξηγώντας εν συντομία τους λόγους της αντίθετης επιδεικνυόμενης συμπεριφοράς.

3. Κάντε την γραφική παράσταση της $\ln\sigma$ συναρτήσει του $1/T$ και υπολογίστε το ενεργειακό χάσμα του ημιαγωγού E_g . Επαναλάβετε την ίδια διαδικασία για τις μετρήσεις με $I = 4, 3, 2$ και 1 mA. Υπολογίστε τη μέση τιμή του E_g και το σφάλμα της.

4. Αποδεικνύεται ότι το ενεργειακό χάσμα των ημιαγωγών ελαττώνεται καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία ακολουθώντας μια εμπειρική σχέση της μορφής $E_g(T) = E_g(0) - \beta T$, όπου $\beta = 4 \times 10^{-4}$ eV/K. Η τιμή που βρίσκετε από την επεξεργασία των μετρήσεων στο ερώτημα 3 αντιπροσωπεύει το $E_g(0)$ ή το $E_g(T)$. Εξηγήστε.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1

Για να υπολογίσουμε προσεγγιστικά τη συγκέντρωση των ηλεκτρονίων/οπών στη ζώνη αγωγιμότητας/σθένους χρησιμοποιούμε το απλοποιημένο ενεργειακό διάγραμμα του Σχήματος 4.

Το πλήθος των ηλεκτρονίων dn στη μονάδα του όγκου που έχουν ενέργεια μεταξύ E και $E+dE$ είναι ανάλογο της πυκνότητας ηλεκτρονίων στην περιοχή αυτή. Η πυκνότητα ηλεκτρονίων ισούται με το γινόμενο της πυκνότητας $N(E)$ των δυνατών ενεργειακών καταστάσεων στην περιοχή της ενέργειας E επί την πιθανότητα $f_0(E)$ για την κατάληψη των καταστάσεων αυτών από ηλεκτρόνια:

$$dn = f_0(E)N(E)dE \quad (\text{Π1})$$

Η πυκνότητα $N(E)$ σαν συνάρτηση της ενέργειας $E-E_c$, όπου E_c είναι το χαμηλότερο σημείο της ζώνης αγωγιμότητας, δίνεται από τον τύπο:

$$N(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (\text{Π2})$$

Αντίστοιχα, η πυκνότητα των επιτρεπομένων καταστάσεων στην ζώνη σθένους είναι:

$$N(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_h^*)^{3/2} (E_v - E)^{1/2} \quad (\text{Π3})$$

όπου η E_v αντιστοιχεί στο μέγιστο της ζώνης σθένους. Η πιθανότητα κατάληψης των ενεργειακών σταθμών από ηλεκτρόνια ακολουθεί τη κατανομή Fermi-Dirac (1) αλλά ακόμα και σε σχετικά υψηλές θερμοκρασίες (ισχύει ότι $E-E_F > 3k_B T$, αφού $E > E_c$ και $E_c - E_F > 0.1\text{eV}$), η f_0 δίνεται κατά προσέγγιση από τη σχέση:

$$f_0(E) \approx e^{-(E-E_F)/k_B T} \quad (\text{Π4})$$

που είναι ουσιαστικά η συνάρτηση κατανομής Boltzmann για κλασσικό αέριο σωματιδίων. Σύμφωνα με την (Π1), η πυκνότητα φορέων στην ζώνη αγωγιμότητας δίνεται:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f_0(E)N(E)dE \quad (\text{Π5})$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (Π2) και (Π4) βρίσκουμε ότι :

$$n = N_c e^{-(E_c - E_F)/k_B T}, \quad (\text{Π6})$$

$$\text{όπου } N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} . \quad (\text{Π7})$$

Το N_c καλείται ενεργός πυκνότητα καταστάσεων στη ζώνη αγωγιμότητας. Ομοίως, για την πυκνότητα p των οπών σθένους βρίσκουμε:

$$p = \int_0^{E_v} [1 - f_0(E)] N(E) dE = N_v e^{-(E_F - E_v)/k_B T} , \quad (\text{Π8})$$

$$\text{όπου } N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} . \quad (\text{Π9})$$

Το N_v καλείται αντίστοιχα ενεργός πυκνότητα καταστάσεων στη ζώνη σθένους. Στην περίπτωση των οπών χρησιμοποιήσαμε την πιθανότητα μία στάθμη να μην είναι κατειλημμένη από ένα ηλεκτρόνιο, σύμφωνα με τη σχέση:

$$1 - f_0(E) = \frac{e^{(E - E_F)/k_B T}}{1 + e^{(E - E_F)/k_B T}} \quad (\text{Π10})$$

η οποία μέσα στη ζώνη σθένους, όπου $(E_F - E) \gg k_B T$, δίνεται κατά προσέγγιση από τη σχέση:

$$f_0(E) \approx e^{(E - E_F)/k_B T}$$

Παρατηρούμε ότι το γινόμενο np είναι:

$$np = N_c N_v e^{-(E_c - E_v)/k_B T} \sim T^3 e^{-E_g/k_B T} \quad (\text{Π11})$$

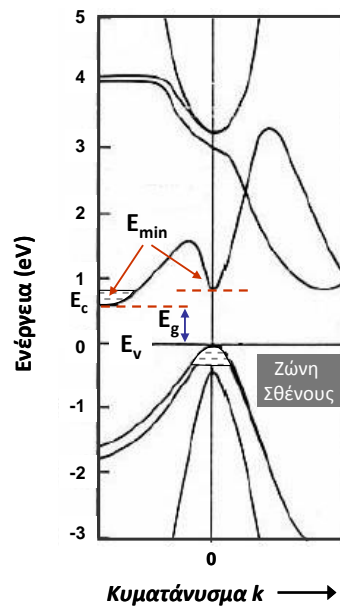
όπου $E_g = E_c - E_v$ το **ενεργειακό χάσμα** του ημιαγωγού. Η έκφραση αυτή στην οποία δεν υπεισέρχεται η ενέργεια Fermi και ισχύει για όλους τους ημιαγωγούς ανεξάρτητα από την παρουσία προσμίξεων, δείχνει ότι η συγκέντρωση φορέων αγωγιμότητας εξαρτάται εκθετικά από τη θερμοκρασία σε βαθμό που καθορίζεται από το μέγεθος του ενεργειακού χάσματος.

Σε ένα καθαρό ημιαγωγό χωρίς προσμίξεις, η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων n είναι ίση με τη συγκέντρωση οπών p , καθώς κάθε ηλεκτρόνιο που μεταπίπτει στη ζώνη αγωγιμότητας αφήνει μια ελεύθερη οπή στη ζώνη σθένους (Σχήμα 4), οπότε από την (Π11) προκύπτει

$$n = p = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T} . \quad (\text{Π12})$$

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 2

Στο Σχήμα Π.1 παρουσιάζεται το διάγραμμα ενεργειακών ζωνών του Ge συναρτήσει του κυματανύσματος k των ηλεκτρονίων (σχέση διασποράς). Η ζώνη σθένους αποτελείται από περισσότερες της μιας υποζώνες με μέγιστο στο κυματάνυσμα $k=0$, ενώ η ζώνη αγωγιμότητας εμφανίζει τοπικά ελάχιστα σε διαφορετικές τιμές του κυματάνυσματος k . Στην περίπτωση που το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας (E_c) και το μέγιστο της ζώνης σθένους (E_v) εμφανίζονται στην ίδια τιμή του k , το ενεργειακό χάσμα είναι *άμεσο*, ενώ στην περίπτωση που διαφέρουν μεταξύ τους το ενεργειακό χάσμα είναι *έμμεσο*. Στους ημιαγωγούς έμμεσου ενεργειακού χάσματος η διέγερση ηλεκτρονίων από την ‘κορυφή’ της υψηλότερης υπο-ζώνης σθένους στην κοντινότερη ενεργειακά κατάσταση της ζώνης αγωγιμότητας που βρίσκεται σε διαφορετικό κυματάνυσμα k απαιτεί εκτός από την πρόσληψη της κατάλληλης ενέργειας και μεταβολή της ορμής των ηλεκτρονίων ($\Delta k \neq 0$), ώστε να ικανοποιηθεί η αρχή διατήρησης της ορμής. Για να πραγματοποιηθεί μια τέτοια ηλεκτρονική μετάβαση με απορρόφηση φωτονίων, απαιτείται μεταφορά ορμής στα ηλεκτρόνια, η οποία παρέχεται από τις ταλαντώσεις του κρυστάλλου (*φωνόνια*). Για το λόγο αυτό αναφερόμαστε σε έμμεσο ενεργειακό χάσμα. Η διάκριση αυτή έχει μεγάλη σημασία στις εφαρμογές των ημιαγωγών όπως στη χρήση τους σε διατάξεις φωτοεκπομπής (LED), όπου χρησιμοποιούνται ημιαγωγοί *άμεσου* ενεργειακού χάσματος. Στην περίπτωση αυτή, η αυθόρμητη επανασύνδεση των ηλεκτρονίων και οπών που έχουν το ίδιο κυματάνυσμα δεν απαιτεί τη μεταφορά ορμής με αποτέλεσμα την εκπομπή φωτός με ενέργεια $h\nu = E_g$ που απαιτείται στις εφαρμογές LED.




Σχήμα Π1. Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών για τον ημιαγωγό Ge.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 3

Επιλέξτε το εικονίδιο του Origin. Το πρόγραμμα ανοίγει και εργάζεστε στο παράθυρο Data1.

Πίνακας 2:

- Προσθήκη στήλης: Κατασκευάστε τον Πίνακα 2 προσθέτοντας στήλες με την εξής διαδικασία : Δεξί κλικ (στο χώρο δεξιά από τις στήλες) → Add New Column ή πατώντας το εικονίδιο 
- Μετονομασία στήλης: Επιλέξτε τη στήλη που θέλετε να μετονομάσετε πατώντας πάνω στο όνομά της (θα πάρει σκούρο χρώμα). Στη συνέχεια πατήστε Δεξί κλικ → Properties → Στο πεδίο Column Name συμπληρώστε το επιθυμητό όνομα (π.χ. A → Θ) → Πατήστε OK. Μετονομάστε με την ίδια διαδικασία όλες τις στήλες που έχετε προσθέσει.
- Καταγράψτε τις μετρήσεις της θερμοκρασίας και της τάσης όπως αναφέρεται στον εργαστηριακό οδηγό.
- Στήλη T: Επιλέξτε τη στήλη πατώντας πάνω στο όνομά της → Δεξί κλικ → Set Column Values → Στο πεδίο γράφετε την επιθυμητή συνάρτηση : $col(\Theta)+273$. Πατήστε OK.
- Στήλη σ: Επιλέξτε τη στήλη πατώντας πάνω στο όνομά της → Δεξί κλικ → Set Column Values → Στο πεδίο γράφετε: $(5*20)/(10*col(V))$ για το συγκεκριμένο κρύσταλλο, σύμφωνα με τον τύπο $\sigma = \frac{I \cdot L}{V \cdot A}$. Πατήστε OK.
- Στήλη 1/T: Επιλέξτε τη στήλη πατώντας πάνω στο όνομά της → Δεξί κλικ → Set Column Values → Στο πεδίο γράφετε την επιθυμητή συνάρτηση : $1/col(T)$. Πατήστε OK.
- Στήλη lnσ: Επιλέξτε τη στήλη πατώντας πάνω στο όνομά της → Δεξί κλικ → Set Column Values → Στο πεδίο γράφετε την συνάρτηση : $ln(col(\sigma))$. Πατήστε OK.

Γραφική παράσταση (lnσ=f(T)):

- Αλλαγή μεταβλητής στήλης: Επιλέξτε τη στήλη 1/T → Δεξί κλικ → Properties → Στο πεδίο Plot Designation επιλέξτε X. Πατήστε OK.
- Γραφική Παράσταση: Μαρκάρετε τις στήλες 1/T και lnσ πατώντας πάνω στο όνομα της κάθε μιας και κρατώντας το κουμπί Control (Ctrl). Επιλέξτε Plot → Line.
- Ονομασία αξόνων: Για να αλλάξετε την ονομασία του Y Axis Title Διπλό κλικ → Αντικαταστήστε με lnσ (Επιλέξτε γραμματοσειρά Arial Greek για να δεχτεί το χαρακτήρα «σ»). Αντίστοιχα το X Axis Title με 1/T.
- Υπολογισμός κλίσης (fitting): Επιλέξτε Analysis → Fit Linear. Κάτω δεξιά εμφανίζεται ένα παράθυρο με τις παραμέτρους της συνάρτησης.

Υπολογισμός Ενεργειακού Χάσματος (Eg): Από τα στοιχεία του fitting και μέσω της κλίσης της ευθείας υπολογίστε το ενεργειακό χάσμα (Eg) του Ge. ($k_B=8.617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$)

Αποθήκευση Δεδομένων: Επιλέξτε File → Save Project As... → Δώστε ένα όνομα στο αρχείο σας που να χαρακτηρίζει την ομάδα σας.