

## Pooljuhtide tsooniteooria

**Miks mõned materjalid on väga head elektrijuhid (metallid), kuid mõned on isolaatorid?**

On ju nii metallidel kui ka isolaatoritel väga kõrge elektronide tihedus ( $10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ).

Vastus peitub kvantmehhaanikas ning kvantstatistikas.

1

## Kvantstatistika klassikud



Enrico Fermi  
Nobel prize in Physics, 1938  
"for discovery of neutron  
irradiation and slow  
neutrons"



Paul A. M. Dirac  
Nobel prize in Physics, 1933  
"for discovery of new forms  
of atomic  
radiation" (positrons and the  
Dirac equation)

2

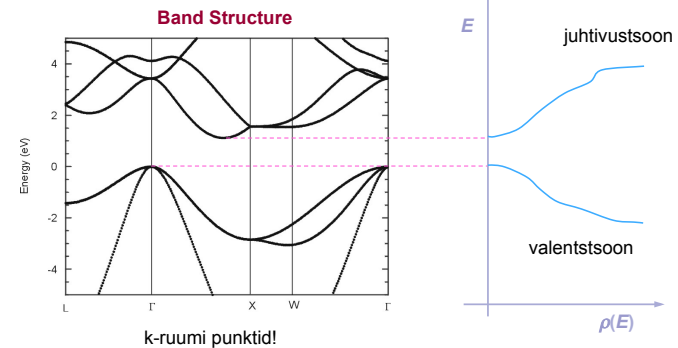
## Klassikaline ning kvantstatistika

Osakesed, millede olekute kirjeldamiseks kasutame Schrödingeri võrrandit, alluvad kvantstatistikale.

Et mingit süsteemi kirjeldada, peame teadma kõigi osakeste jaotumist olekute vahel.

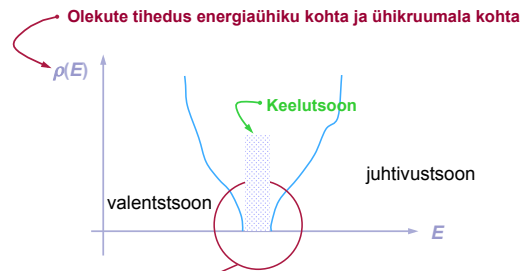
3

## Osakeste jaotumine energiate vahel pooljuhis



4

## Elektronide jaotumine lubatud olekute vahel



Mitu neist lubatud olekute on täidetud?  
Milline on tõenäosus, et mingi olek on täidetud?

5

## Fermionid ja bosonid

Kvantfüüsikas on kõik osakesed jaotatud kahte rühma: fermionid ja bosonid vastavalt nende spinnidele, mis võivad olla kas **poolarvud** või siis **täisarvud**.

Täisarvulise spinniga osakesed on **bosonid** ja poolarvulise spinniga osakesed on **fermionid**.

### Elektronid, prootonid, neutronid- fermionid

Footonid, mesonid – bosonid

Fermionid alluvad **Pauli keeluprintsiibile**, s.t. ühte olekusse ei saa kuuluda kaks identset fermioni. (Näiteks ei saa ühel energiatasemel olla kaks ühesuguse spinniga elektroni)

Bosonite jaoks Pauli keeluprintsiip ei kehti!

6

## Nii kvant- kui ka tavalise klassikalise statistika põhiülesanne on:

kindlaks teha suure arvu osakeste jaotumine võimalike olekute vahel süsteemi termilises tasakaalus.

Et seda jaotusfunktsiooni leida tuleb silmas pidada kahte nõuet:

- Jaotus peab olema selline, et süsteemi vaba energia oleks minimaalne;
- Jaotus peab arvestama osakeste liiki (fermionid ja bosonid).

Esimene nõue (termodünaamiline!):  $F=U-TS$  (1) olgu minimaalne!!

F- vaba energia  
U- osakeste süsteemi koguenergia  
S- süsteemi entroopia  
T- absoluutne temperatuur

7

$$F=U-TS$$

- Termodünaamika II seaduse kohaselt on entroopia süsteemi korrastatuse mõõt ning ta kipub kasvama!
- Et F oleks minimaalne, peaks U olema minimaalne ja S maksimaalne!
- Entroopia avaldub:  $S = k_B \ln W$  (2)

kus  $W$  on koguarv võimalikest viisidest, kuidas osakesi kõikide olekute vahel saaks jaotada,  $k_B$ - Boltzmanni konstant

8

### Teine nõue

on see, et me peame arvestama, kas meil on tegemist eristamatute kvantosakestega (fermionid ja bosonid) või eristatavate klassikaliste osakestega.

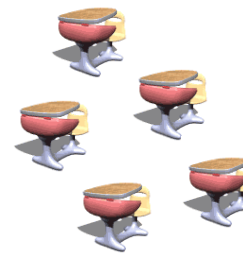
Vastavalt sellele on meil 3 võimalikku jaotusfunktsiooni:

- Fermi-Dirac** jaotus **fermionidele**
- Bose-Einsteini** jaotus **bosonitele**
- Maxwell-Boltzmanni** jaotus **klassikalistele osakestele**

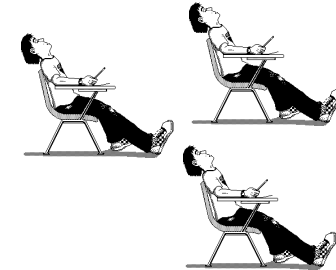
9

## Küsimused, mis tuleb lahendada:

Mitu lauda?  
(Milline on olekute (kohtade) tihedus?)



Kui palju laudu on täidetud?  
(Milline on tõenäosus, et teatud laud on täidetud?)



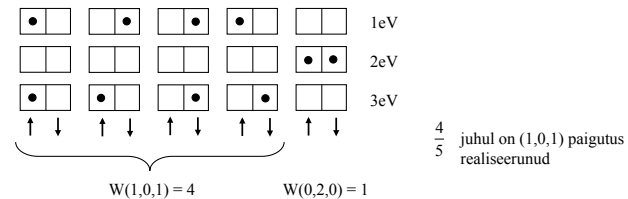
10

## Fermi-Dirac jaotusfunktsioon

Elektronid pooljuhisis alluvad **Pauli printsiibile**

Olgu meil süsteem 3 energiatasemega  $E_1 = 1\text{eV}$ ,  $E_2 = 2\text{eV}$  ja  $E_3 = 3\text{eV}$ , ja olgu meil 2 elektroni ning süsteemi koguenergia olgu  $E = 4\text{eV}$ .

Millised on võimalikud elektronide paigutused? Ja milline paigutus on kõige tõenäolisem?



Vaatame üldisemalt edasi!

11

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- Olgu meil süsteem lubatud energiatasemetega  $e_1, e_2, e_3, \dots$  ning vastava kõdvusega  $g_1, g_2, g_3, \dots$
- Olgu meil  $N$  osakest, mis võivad need olekud täita.
- Põhiküsimuseks on siis  $W$  leidmine, s.t. kokku lugeda võimalikud viisid, kuidas osakesed nende olekute vahel jaotuda võiks.

12

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- Olgu meil jaotus, kus  $N_1$  osakest on olekus  $e_1$ ,  $N_2$  osakest olekus  $e_2$  jne.
- Et selle jaotuse jaoks arvutada  $W$  peame kõigepealt leidma, mitut moodi saab  $N_1$  osakest jaotada  $g_1$  oleku vahel energiaga  $e_1$ :

13

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- osake 1 võib paikneda  $g_1$  moodi
- osake 2 võib paikneda  $(g_1-1)/2$  moodi, sest
  - kuna osake 1 on juba hõivanud ühe  $g_1$  olekust, siis osake 2 saab hõivata ülejäänud  $g_1-1$  olekut vaid järgides Pauli printsiipi.
  - Lisaks on osakesed 1 ja 2 teineteisest eristamatud ja seetõttu väheneb võimalike paigutuste arv 2 korda.

14

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- Osake 3 võib paigutada järelkult  $(g_1-2)/3$  moodi.  
.....
- Osake  $N_1$  võib paigutada  $(g_1-N_1+1)/N_1$  moodi.

15

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- Koguarv  $N_1$  osakesele  $e_1$  olekutes on siis

$$P_1 = \frac{g_1(g_1-1)(g_1-2)\dots(g_1-N_1+1)}{N_1!} = \frac{g_1!}{N_1!(g_1-N_1)!}$$

- Samamoodi on koguarv  $N_2$  osakesele  $e_2$  olekutes:

$$P_2 = \frac{g_2(g_2-1)(g_2-2)\dots(g_2-N_2+1)}{N_2!} = \frac{g_2!}{N_2!(g_2-N_2)!}$$

16

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

Siit saame kogu jaotuse paigutuste arvuks  $W$ :

$$W = \prod_i \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \quad (3)$$

17

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- Esimene nõue oli, et vaba energia peab olema minimaalne, seega

$$\delta F = 0 \Rightarrow \delta(U - TS) = \delta\left\{\left(\sum_i N_i \varepsilon_i\right) - k_B T \ln \prod_i \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!}\right\} = 0$$

(4)

$S = k_B \ln W$

18

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- Peame silmas, et

$$\ln \prod_i \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} = \sum_i \{\ln g_i! - \ln N_i! - \ln(g_i - N_i)!\} \quad (5)$$

$$\ln x! \approx x \ln x - x \quad (6)$$

19

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- Siis võrrand (4) omandab kuju

$$\sum_i \{\varepsilon_i \delta N_i - k_B T [-\ln N_i + \ln(g_i - N_i)] \delta N_i\} = 0 \quad (7)$$

Kuna osakeste koguarv on fikseeritud, siis

$$\sum_i N_i = N \Rightarrow \sum_i \delta N_i = 0 \quad (8)$$

20

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

- Korrutame võrrandit (8) konstandiga A ning lisame tulemuse võrrandisse (7), saame

$$\sum_i \{(\varepsilon_i - A) - k_B T [-\ln N_i + \ln(g_i - N_i)]\} \delta N_i = 0$$

$$\Rightarrow \ln\left(\frac{g_i - N_i}{N_i}\right) = \frac{\varepsilon_i - A}{k_B T}$$

$$\Rightarrow N_i = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i - A}{k_B T}\right) + 1} \quad (9)$$

21

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon

Oleku hõivamise tõenäosus f (ehk jaotusfunktsioon) energiale e on siis

$$f(\varepsilon, T) = \frac{N(\varepsilon)}{g(\varepsilon)} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - A}{k_B T}\right) + 1}$$

Konstanti A nimetatakse Fermi energiaks, s.t  $E_F$ , seega

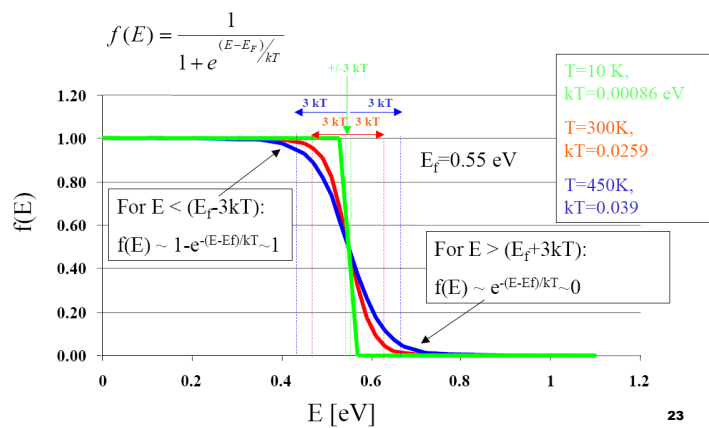
Fermi-Dirac'i  
jaotusfunktsioon

$$f(\varepsilon, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}\right) + 1}$$

(10)

22

## Fermi-Dirac'i jaotusfunktsioon



## Bose-Einsteini jaotusfunktsioon

Bosonite jaoks saame samamoodi

$$f(\varepsilon, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - A}{k_B T}\right) - 1} \quad (11)$$

NB! Märk on siin "-"

24

## Klassikaline Maxwell-Boltzmani jaotusfunktsioon

Klassikaliste osakeste jaoks on jaotusfunktsioon kujul:

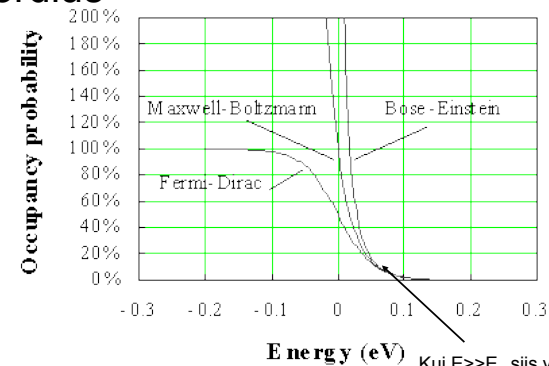
$$f(\varepsilon, T) = C \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right) \quad (12)$$

Üldiselt võib klassikalist jaotusfunktsiooni kasutada siis, kui osakeste de Broglie lainepikkus on palju väiksem kui osakeste vaheline kaugus

$$\lambda \ll d.$$

25

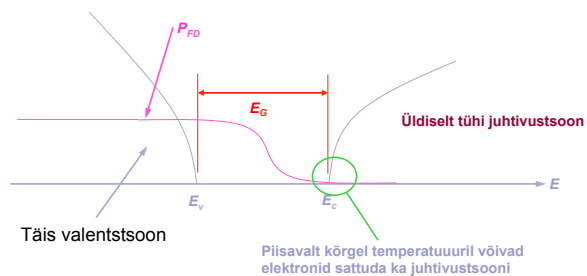
## Erinevate jaotusfunktsioonide võrdlus



Kui  $E \gg E_F$  siis võib kasutada ka Boltzmanni jaotust!

26

## Mida jaotusfunktsioon näitab?



27

## Olekute tihedus

Olekute tihedust defineeritakse:

$$\rho(E) = \frac{\Delta N(E)}{\Delta E} \frac{1}{\Delta V}. \quad (13)$$

s.t. olekute arv energiahemiku  $\Delta E$  ja ruumala  $\Delta V$  kohta

Vaatleme olekute tiheduse leidmist kõigepealt **vabade elektronide** jaoks, s.t. olukorras, kus kristalli mõjuga võib mitte arvestada!

28

## Vaba elektroni juht

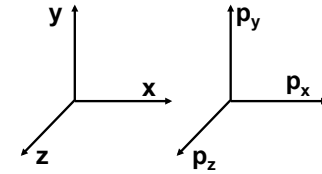
- Tuletame meelde kvantmehhaanika kursusest mõned loengud tagasi....

29

## k- ruum

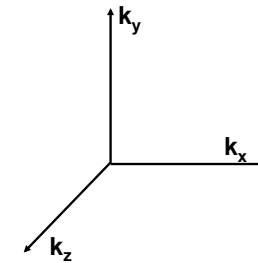
**Klassikalise vaba elektroni olekud**

Defineeritud koordinaatide  $(x, y, z)$  ja impulsiga  $(p_x, p_y, p_z)$



**Vaba elektroni kvantolekud**

Määratud lainvektoriga  $k$  või ka  $(p_x, p_y, p_z) = (\hbar k_x, \hbar k_y, \hbar k_z)$ .



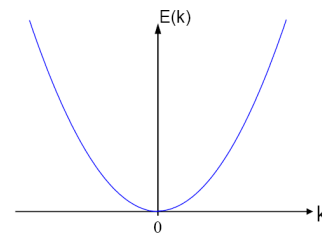
**Elektroni olek on defineeritud punktiga k-ruumis e. impulsiruumis**

30

## Vaba elektroni olekud

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m_e$$

Vaba elektroni energia sõltuvus lainearvust



$$\psi(x) = Ae^{ik_x x}$$

Vaba elektroni lainefunktsioon ( 1 koordinaadi juht)  
Tasalaine!!

$k$  - elektroni lainektor  $|k| = 2\pi/\lambda_e$

31

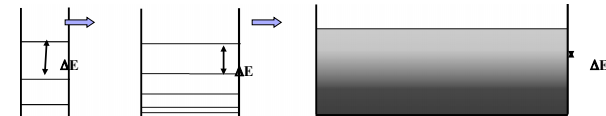
## Ühedimensionaalne juht

Olgu meil ühedimensionaalne kvantauk laiusega  $L$ . Teatavasti energiatasemed sellises augus avalduvad:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Pilu  $n$  ja  $(n+1)$  taseme vahel on

$$\Delta E_n = \frac{(2n+1)\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \rightarrow 0 \text{ kui } L \text{ kasvab.}$$



Ühedimensionaalne kvantauk. Kui augu laius kasvab, siis energiatasemete vaheline kaugus väheneb ning suureneb vajadus olekute tiheduse funktsiooni järele.

32

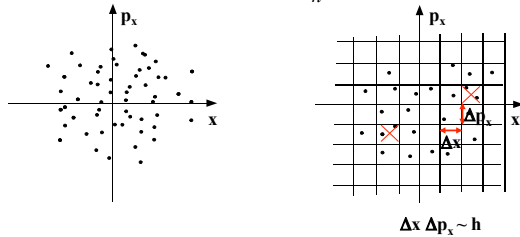


### Kuidas leida olekute tiheduse funktsiooni?

Lihtsam on arvutada olekute arvu momendi vahemiku  $dp_x$  ja koordinaadi vahemiku  $dx$  jaoks. Joonistades osakese olekud koordinaatides ( $p_x$ ,  $x$ ) saame iga oleku jaoks punkti. Klassikalises füüsikas võivad punktid olla lõpmatult lähedal teineteisele ning olekute tihedus võib samuti olla lõpmatult suur.

Kvantfüüsikas pole see võimalik tänu määramatuse printsiibile  $\Delta x \Delta p_x > h$ . Siis võime joonistada ruudustiku, kus igas ruudus saab olla vaid üks olek. Siis olekute arv "ruudus" on

$$N_{1D}(E) = \frac{dp_x dx}{h} \quad (14)$$



33

Kuna vaba elektroni jaoks:  $E = \frac{p_x^2}{2m} \Rightarrow dp_x = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{E}\right)^{1/2} dE$

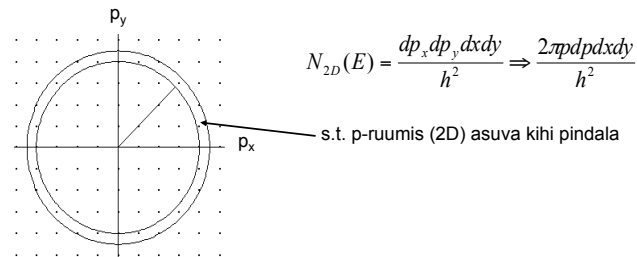
Vastavalt võrrandile (14) saame  $N_{1D}(E) = \frac{1}{2h} \left(\frac{2m}{E}\right)^{1/2} dE dx$

Seega 1D olekute tiheduse funktsiooniks saame:

$$\rho_{1D}(E) = \frac{1}{2h} \left(\frac{2m}{E}\right)^{1/2} \quad (15)$$

34

### Olekute tihedus 2D juhul



35

### Olekute tihedus 2D juhul

Kuna  $E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow dE = \frac{p dp}{m} \Rightarrow p dp = m dE$

$$N_{2D}(E) = \frac{2\pi m dE dx dy}{h^2} \quad (16)$$

2-D olekute tiheduse funktsioon:

$$\rho_{2D}(E) = \frac{2\pi m}{h^2} \quad (17)$$

36

## Olekute tihedus 3D juhul

- Olekute koguarv "ruumis"  $dp_x dp_y dp_z dx dy dz$  on

$$N_{3D}(E) = \frac{dp_x dp_y dp_z dx dy dz}{h^3} \Rightarrow \frac{4\pi p^2 dp dx dy dz}{h^3}$$

$$\text{s.t. } dV_p = 4\pi p^2 dp$$

$$N_{3D}(E) = \frac{8\pi\sqrt{2}m^{3/2}E^{1/2}dEdV}{h^3} \quad (18)$$

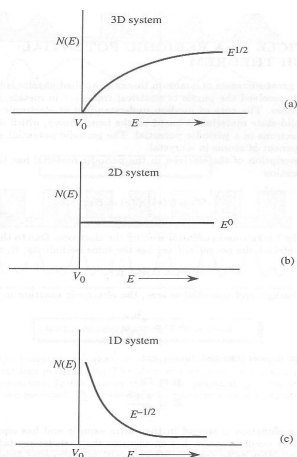
37

## Olekute tihedus 3D juhul

- Siis 3D juhul avaldub olekute tiheduse funktsioon:

$$\rho_{3D}(E) = \frac{8\pi\sqrt{2}m^{3/2}E^{1/2}}{h^3} \quad (19)$$

38



Olekute tiheduse funktsiooni käitumine energiast 1-D juhul (c), 2-D juhul (b) and 3-D juhul (a).

Et leida olekute arvu mingis energia vahemikus tuleks integreerida:

$$\int_{E_1}^{E_2} \rho(E) dE \quad (20)$$

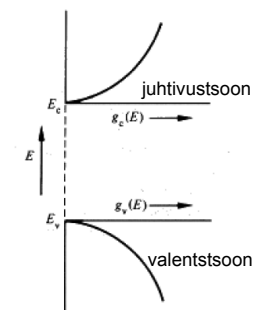
39

## Juhtivustsooni ja valentstsooni olekute tihedused pooljuhhis

$$g_c(E) = \frac{m_n^* \sqrt{2m_n^*(E - E_c)}}{\pi^2 \hbar^3}, E \geq E_c$$

$$g_v(E) = \frac{m_p^* \sqrt{2m_p^*(E_v - E)}}{\pi^2 \hbar^3}, E \leq E_v$$

$$\text{unit} \equiv \left( \frac{\text{Number of States}}{\text{cm}^3} \right) / eV$$



40

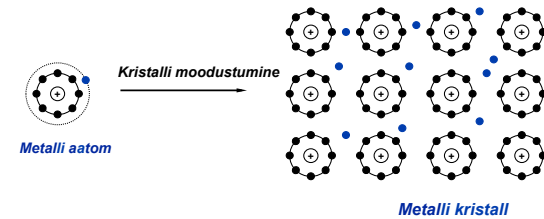
## Elektronid metallides

- Enne pooljuhtide juurde asumist vaatleme elektrone metallides.
- Metallides võib elektrone vaadelda kui vabu osakesi ehk vaba elektrongaasi.

41

## Vaba elektrongaas.

Metallides on valentselektronid nõrgalt seotud aatomitega ning seetõttu võib elektrone käsitleda kui vabu elektrone.

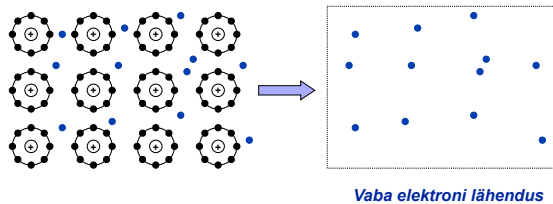


42

## Vaba elektrongaas.

Elektronid metallis on koondunud kasti ruumalaga  $V$ .

Me eeldame, et selles ruumis elektronidel pole omavahelist kulonilist vastasmõju ning neid ei mõjuta ka aatomite positiivsed ioonid.



43

## Vaba elektrongaas.

Vabu elektrone metalli kuupsentimeetris on umbes  $10^{22}$ .

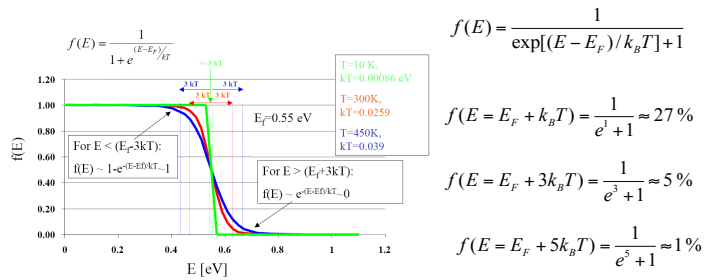
Nii suure arvu elektronide kirjeldamiseks vajame statistikat ja kuna elektronid on fermionid, siis vajame **Fermi-Diraci jaotusfunktsiooni**

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp[(E - E_f)/k_B T] + 1}$$

44

## Väike kõrvalepõige...

Fermi jaotusfunktsiooni uurides näeme, et erinevatel temperatuuridel mõjutab ta elektronide jaotust olekute vahel vaid üsna kitsas piirkonnas  $E_F$  lähedal



45

## Elektronidega täidetud olekute tihedus:

$$\rho_{\text{täis}}(E) = \rho(E)f(E) \quad (21)$$

**Fermi energia:** Fermi energiatase on tähtis suurus, mille me võime üsna lihtsalt leida. Kui vabade elektronide arv metallis on  $N$ , siis

$$N = V \int_0^{\infty} \rho(E)f(E)dE = V \int_0^{\infty} \rho(E) \frac{1}{\exp[(E - E_F)/k_B T] + 1} dE \quad (22)$$

Kui  $k_B T \ll E_F$  ehk  $T \ll E_F/k_B$ , siis  $f(E)$  võib asendada lihtsa astmega. Metallides on  $E_F$  tavaliselt mõni eV ja  $E_F/k_B \sim 10000$  K! Seega tingimus  $k_B T \ll E_F$  kehtib isegi metalli sulamistemperatuuril. Siis kasutades astet saame

$$N = V \int_0^{E_F} \rho(E)dE = V \frac{8\pi}{h^3} \int_0^{E_F} \sqrt{2m^3 E} dE = V \frac{2}{3} \frac{8\pi}{h^3} \sqrt{2m^3} E_F^{3/2} \quad (23)$$

46

Siis võrrandist (23) saame avaldada Fermi energiatase väärtuse:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 n]^{2/3} \quad (24)$$

kus  $n=N/V$  on elektronide tihedus.

47

## Elektroni olekud kristallis

- Elektroni olekute arutamiseks kristallides tuleks üldjuhul lähtuda Schrödingeri võrrandist. Probleem on selles, et elektrone on kristallis liiga palju ja seetõttu on ülimalt raske iga elektroni jaoks võrrandit lahendada.
- Metallide puhul vältisime seda lugedes elektronid vabadeks. See on aga liiga suur lihtsus. Kindlasti peaksime arvestama positiivsete ioonide mõju elektronidele.
- Õnneks on kristallid perioodilise struktuuriga. Perioodilises lihtsustab paljuski elektronide olekute määramist kristallides.
- Kristallide tsooniteooria käsitlemiseks on 2 võimalust:
  - a) vaadelda isoleeritud aatomite energiatasemeid, kui aatomid hakkavad teineteisele lähema,
  - b) vaadelda elektrone perioodilises aatomite potentsiaalis.

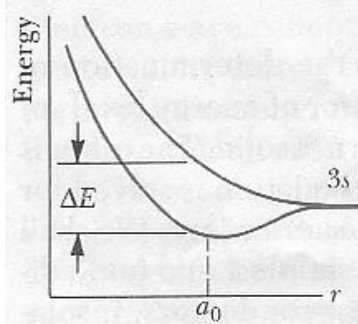
48

## Isoleeritud aatomite mudel.

Olgu meil 2 isoleeritud Na aatomit ning mõlemal neist on sama energiaga 3s elektron.

Kui need aatomid tuua teineteisele lähemale, siis nende olekute lainefunktsioonid kattuvad ning liituvad.

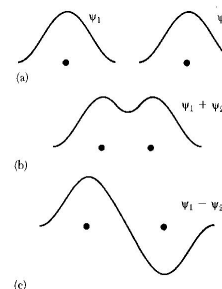
Selle tulemusena 3s energiatasemed lõhenevad nagu võib näha alumisel joonisel:



49

## Miks energiatasemed lõhenevad?

- Kahe isoleeritud aatomi lainefunktsioonid on  $\psi_1$  ja  $\psi_2$
- Liitunud lainefunktsioonid võivad olla  $\psi_1 - \psi_2$  ja  $\psi_1 + \psi_2$  s.t. nagu lainete interferents!
- Elektron olekus  $\psi_1 + \psi_2$  omab olulist tõenäosust sattumaks kahe aatomi vahele ja seega aitab nagu aatomeid kokku liita mistõttu selles olekus on tal väiksem energia.  $\psi_1 - \psi_2$  olekus on aga elektroni leidmise tõenäosus aatomite vahel 0 ja seega on selles olekus ka energia kõrgem. Nii tekibki energiatasemete lõhenemine.



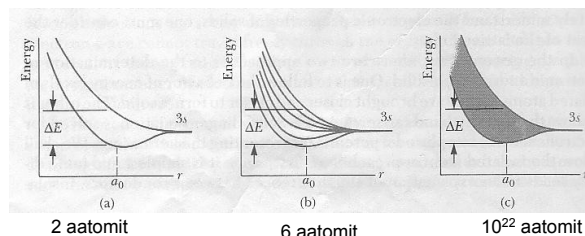
(a) Elektronide lainefunktsioonid isoleeritud aatomitel (b), (c) Kaks võimalikku lainefunktsioonide lineaarset kombinatsiooni aatomite lähenemisel.

50

## Kahe aatomi juurest suure arvu aatomiteni:

Kui 2 aatomi asemel on aatomeid väga palju, siis põhimõtteliselt tekib samasugune pilt.

Aatomite arvu suurenemisel väheneb lõhenenud energiatasemete vaheline kaugus. Kui  $N=10^{22}$ , siis võime rääkida juba pidevast jaotusest, s.t.  $10^{22}$  energiataset jaotuvad vahemikus  $\Delta E$  - s.o. tsoon!



2 aatomit

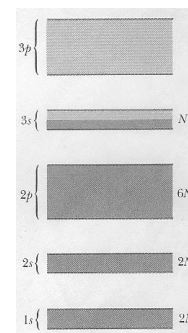
6 aatomit

$10^{22}$  aatomit

51

## Energeetilised tsoonid Na kristallis

Na kristallis tsooni, mis tekib 3s olekutest, kutsutakse **3s tsooniks**. Üldjuhul on kristallis niimitu tsooni, kuimitu energiataset on aatomis. **Tsoonide vahel moodustuvad keelatud alad** (keelutsoonid), kus puuduvad lubatud olekud elektronidele.



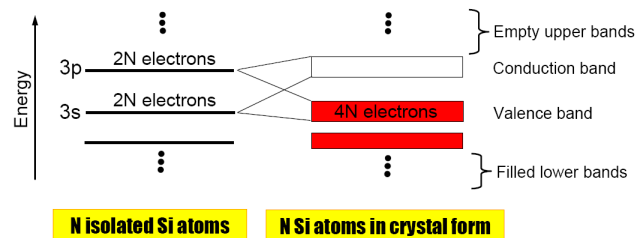
*N aatomist koosneva Na kristalli tsoonid. Igas tsoonis on N energiataset. 1s, 2s ja 2p tsoonid on kõik täidetud elektronidega, kusjuures iga tsoon võib sisaldada  $2(2l+1)N$  elektroni. Seega 1s ja 2s tsoonid sisaldavad kumbki  $2N$  elektroni ja 2p tsoon sisaldab  $6N$  elektroni. Kuna iga Na aatom omab vaid ühe 3s elektroni, siis on kristallis vaid  $N$  3s elektroni ning 3s tsoon on vaid **poolenisti täidetud**. 3p tsoon on aga täielikult tühi.*

52

## Tsoonide moodustumine ränis.

Electronic structure of Si:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

**N Si atoms: 2N electrons** in 3s orbital, **2N electrons** in 3p orbitals

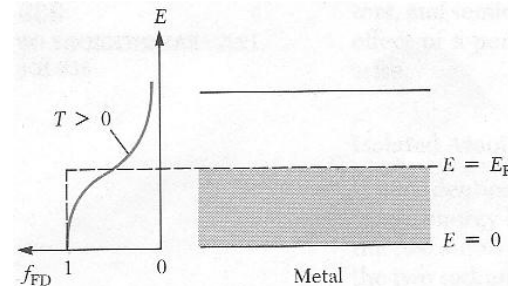


53

## Metallide, dielektrikute ning pooljuhtide tsoonid

**Metallid:** Nagu nägime, omas Na pooleldi täidetud tsooni.

Joonisel on see olukord näidatud. Elektriväljas võivad elektronid saada lisaenergiat ning väga kergelt täita Fermi tasemest kõrgemal olevaid **lubatud tsooni** tühje tasemeid. Seetõttu juhivadki metallid elektrit väga hästi!



54

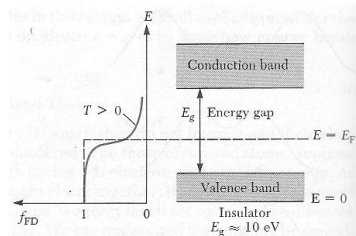
## Dielektrikud.

Dielektrikute tsoonid on kas täielikult täidetud elektronidega või siis täielikult tühjad.

Vaatleme **kõrgeimat täidetud tsooni (valentstsoon)** ja **madalaimat täitmata tsooni (juhtivustsoon)**.

Fermi energiatase asub nende tsoonide vahel keelutsoonis.

Keelutsooni laius (~10 eV) on dielektrikudel palju suurem kui soojusliikumise kineetiline energia toatemperatuuril ( $k_B T \approx 0.025$  eV) ja seetõttu ei suuda elektronid juhtivustsooni jõuda.

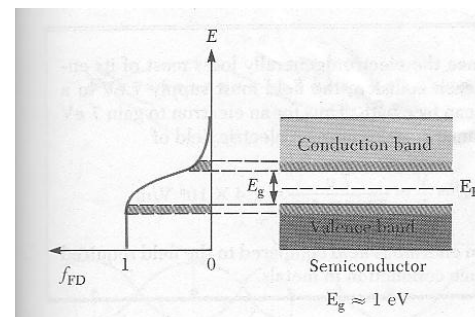


*Dielektrik omab täielikult täidetud valentstsooni ja täielikult tühja juhtivustsooni.*

55

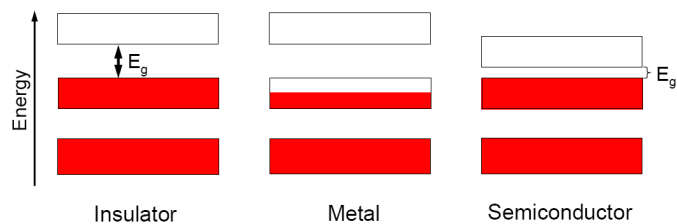
## Pooljuhid.

Ka pooljuhtide tsoonid on kas täielikult täidetud või siis täielikult tühjad, kuid keelutsooni laius neis materjalides on palju väiksem (~1 eV) kui dielektrikutes. Seetõttu pooljuhtide juhtivus temperatuuriga kasvab, kuna soojusliikumise kineetiline energia on piisav elektronide viimiseks valentstsoonist juhtivustsooni.



56

## Dielektrikud, metallid, pooljuhid



57

## Kuidas leida pooljuhi tsoonipilti?

- Pooljuht on kristall.
- Kristallis mõjutavad elektrone kristallvõre aatomid.
- Vaba elektrongaasi mudel ei kehti!

58

## Perioodilise potentsiaali mudel

Üldjuhul oleks meil vaja teada elektroni energiat pooljuhis.

Selleks tuleks lahendada Schrödingeri võrrand kristalli jaoks:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$E$  - kristalli koguenergia

$\Psi$  - kristalli lainefunktsioon, mis sõltub kõigi elektronide koordinaatidest  $r_i$  ning kõigi aatomite koordinaatidest  $R_i$

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_n)$$

59

$\hat{H}$  - Hamiltoni operaator, mis sisaldab:

a) Elektronide kineetilist energiat  $W_{ek}$ :

$$\sum_i -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \quad \begin{array}{l} m - \text{elektroni mass} \\ i - \text{elektroni indeks} \end{array}$$

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \quad \text{- Laplace operaator}$$

60

b) aatomite kineetilist energiat  $W_{AK}$ :

$$\sum_{\alpha} -\frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \Delta_{\alpha} \quad M_{\alpha} - \text{aatomite mass}$$

c) elektronide omavahelise mõju potentsiaalset e. Coulomb'i energiat  $W_{eP}$ :

$$\frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r_{ij}}$$

61

d) aatomite (tuumade) omavahelist potentsiaalset energiat  $V_{AP}$ :

$$V_{AP}(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)$$

e) elektronide ja aatomituumade vahelist potentsiaalset energiat  $U$ :

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)$$

62

Kristalli jaoks saame siis võrrandi:

$$\{W_{eK} + W_{AK} + W_{eP} + V_{AP} + U\}\Psi = E\Psi$$

Kristallides on aatomite+elektronide kontsentratsioon  $\sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

Samapalju siis ka sõltumatuid muutujaid!

**VÕIMATU LAHENDADA!**

Vaja lihtsustusi  $\rightarrow$

63

## Lihtsustused:

1) **Adiabaatiline e. Born-Oppenheimeri lähendus:**

$M \gg m$  elektron fikseeritud tuumade olukorras

2) **Valentselektronide lähendus:**

Vaadeldakse vaid valentselektrone- ülejäänud jäetakse tuumadele

3) **Üheelektroniline lähendus:**

Ei vaadelda iga elektroni paarisvastasmõju vaid kõigi teiste elektronide tekitatud üldise välja mõju antud elektronile

64



### Lihtsustatud Schrödingeri võrrand elektronile kristallis:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

elektroni potentsiaalne energia kristallis

**Kristall korrapärane -> V(r) perioodiline funktsioon  
Elektronide omavaheline mõju puudub!**

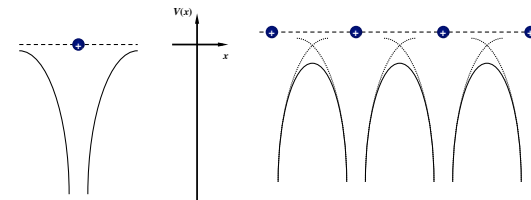
65

### Perioodilise potentsiaali mudel

• Elektronide käitumise realistlikumaks kirjeldamiseks tuleb kindlasti arvesse võtta nende vastasmõju kristallstruktuuriga.

\* Kristallides on meil tegemist positiivsete ioonidega, mis on paigutatud korrapärase võreana.

⇒ Kui elektron liigub võres, siis tema Coulomb'i vastasmõju võre ioonidega põhjustab **PERIOODILISELT** varieeruva potentsiaali U(r).



Elektroni potentsiaalse energia sõltuvus kaugusest positiivsest ioonist

Kristallvõres elektronile mõjuv perioodiline potentsiaal.

66

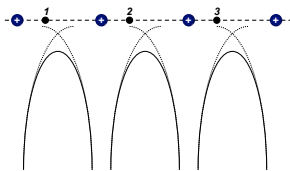
• Kristalli potentsiaal omab kindlat **SÜMMEETRIAT**

\* Ühedimensionaalsel juhul võrekonstandi a jaoks siis

$$V(x + na) = V(x), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

\* Ka elektroni leidmise tõenäosus omab samasugust sümmeetriat:

$$P(x + na) = P(x)$$



Elektroni leidmise tõenäosus punktides 1, 2 ja 3 on **SAMA SUUR!**

67

• Ka elektroni lainefunktsiooni jaoks kehtib sümmeetria:

$$P(x + na) = P(x) \Rightarrow \psi^*(x + na)\psi(x + na) = \psi^*(x)\psi(x)$$

$$\text{seega: } \psi(x + na) = \lambda \psi(x)$$

\* Siin  $\lambda$  on nn. faasikordaja kujul  $e^{i\theta}$  ja nii, et  $\lambda^* \lambda = 1$

$$\psi^*(x + na)\psi(x + na) = \lambda^* \psi^*(x) \lambda \psi(x) = \cancel{\lambda^* \lambda} \psi^*(x)\psi(x)$$

$$\text{seega } \psi^*(x + na)\psi(x + na) = \psi^*(x)\psi(x) \Rightarrow P(x + na) = P(x)$$

68

- Võib näidata, et faasitegur avaldub lihtsalt kui

$$\lambda = e^{ik_x na}$$

- \*  $k_x$  on elektroni lainearv kristallis. Siis saame

$$\psi(x + na) = e^{ik_x na} \psi(x)$$

- \* See on tuntud kui **BLOCH'** i teoreem!

⇒ Bloch'i teoreemi võib esitada ka alternatiivsel kujul:

$$\psi(x) = u_k(x) e^{ik_x x}, \quad u_k(x + na) = u_k(x)$$

Bloch'i funktsioonid

Seega Schrödingeri võrrandit on tänu perioodilisele potentsiaalile võimalik lahendada!

69

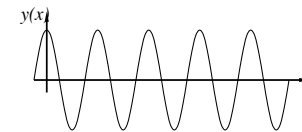
## Bloch'i funktsioonid kristallis

- Lähtume Bloch'i teoreemist:

$$\psi(x) = u_k(x) e^{ik_x x}, \quad u_k(x + na) = u_k(x)$$

- \* Selles võrrandis on  $u_k(x)$  on kristallvõrega sama perioodilisusega.
- \* Lainefunktsioon võrrandis on väga sarnane **vaba elektroni** lainefunktsiooniga, mis avaldus kujul:

$$\psi(x) = A e^{ik_x x}$$

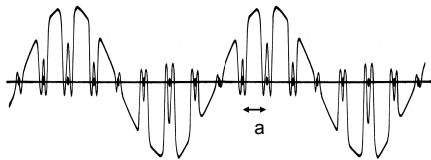


Lainevõrrand!

70

- Bloch' i teoreem näitab seega, et elektroni lainefunktsioon kristallis kujutab endast samasugust tasalainet nagu vaba elektroni puhulgi, kuid see laine on **MODULEERITUD** kristalli perioodilise potentsiaaliga.

$$\psi(x) = u_k(x) e^{ik_x x}, \quad u_k(x + na) = u_k(x)$$



• Bloch'i funktsioon elektronile kristalli perioodilise potentsiaali jaoks.

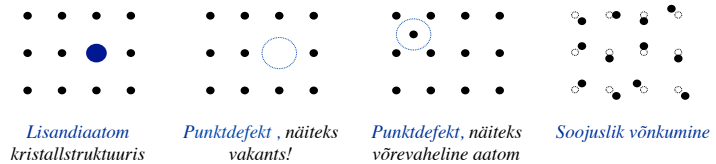
71

- Teoreemist järeldub, et **perfektses defektideta perioodilises** kristallis on lainefunktsioon tasalaine, mis levib lõpmatult- s.t. ei mingi hajumist või kustumist!

- \* Selleks, et elektron hajuks, on vaja võresse tekitada mingi ebakorrapärasus!

⇒ See **HÄIRIB** kristalli sümmeetriat ning elektroni olekud pole siis enam ideaalsed Bloch'i olekud.

⇒ Häiritus võib tulla mitmetest põhjustest:



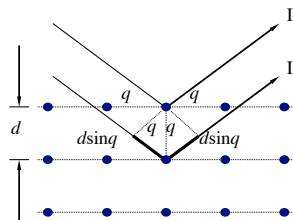
72

## Peaaegu vaba elektroni mudel

Selleks, et mõista, kuidas Bloch'i teoreemi abil saab leida pooljuhi tsoonipilti, kasutatakse sageli nn. peaaegu vaba elektroni mudelit.

Teatavasti tekib kristallis lainete **DIFRAKTSIOON**. Difraktsiooni kirjeldab **BRAGGI** valem:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



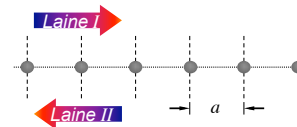
• Lainete difraktsioon kristallivõres

73

\* Peaaegu vaba elektroni mudelis eeldatakse, et elektroni-võre vastasmõju avaldub eelkõige läbi elektroni difraktsiooni võrel.

\* Ühedimensionaalse juhu jaoks määrab iga võre punkt ühe tasandi, mistõttu nurk Braggi valemis on pidevalt  $90^\circ$

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



- Lainete difraktsioon ühedimensionaalsel juhul.
- Laine I levimisel tekib alati tugev peegeldus, kui Braggi tingimus on täidetud.
- Siis tekib peegeldunud laine II, mis liigub vastupidises suunas.
- Laine I ja laine II vahel tekib **INTERFERENTS!**

74

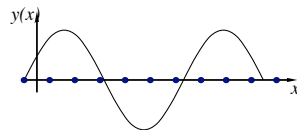
• Ühedimensionaalsel juhul saame siis Braggi tingimuse kujul:

$$2a = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

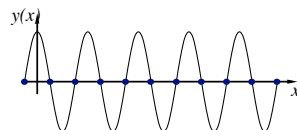
\* Sellele vastab elektroni lainearvu jaoks tingimus:

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda} = n \frac{\pi}{a} \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

⇒ Need tingimused näitavad, et difraktsioon muutub oluliseks, kui elektroni lainepikkus on võre konstandiga ühes suurusjärgus.



$\lambda > a$



$\lambda = 2a$

75

• Vaatleme nüüd esimest ( $n = 1$ ) difraktsiooni tingimust, kui

$$k_x = \pm \frac{\pi}{a}$$

\* Esialgse laine ja peegeldunud laine interferents tekitab **seisva** laine grupikiirusega 0!

\* Seisva laine jaoks saame lainefunktsiooni liites 2 vastassuunas liikuvat lainet:

$$\psi_{\pm}(x) = \psi_I(x) \pm \psi_{II}(x) = e^{ik_x x} \pm e^{-ik_x x}$$

**NB! (Euleri valemid)**

$$\psi_+(x) = 2 \cos \left[ \frac{\pi x}{a} \right]$$

$$\cos \varphi = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}$$

$$\psi_-(x) = -2i \sin \left[ \frac{\pi x}{a} \right]$$

$$\sin \varphi = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}$$

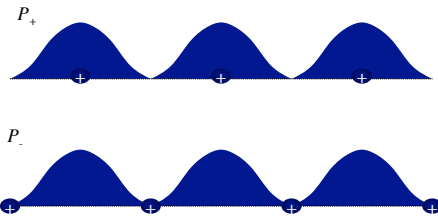
76

- Mõlemad lainefunktsiooni komponendid annavad ka erinevad tõenäosused:

$$P_+(x) = \psi_+^*(x)\psi_+(x) = 4 \cos^2 \left[ \frac{\pi}{a} x \right]$$

$$P_-(x) = \psi_-^*(x)\psi_-(x) = 4 \sin^2 \left[ \frac{\pi}{a} x \right]$$

\*  $P_+$  annab tõenäosuse maksimumi ioonide läheduses ning seetõttu on selles olekus elektronil **madalam** (negatiivsem) potentsiaal kui  $P_-$ .



77

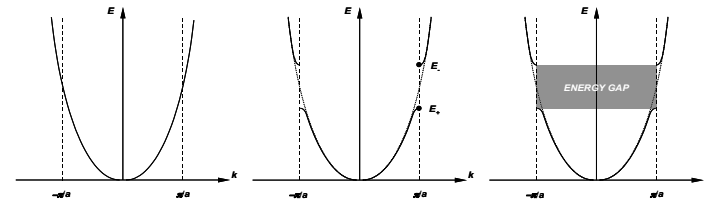
## Energeetilised tsoonid

Eelnevast nägime, et kohtades, kus tekib tugev difraktsioon, eksisteerib **2 erinevat lainefunktsiooni**, mis omakorda annavad **erinevad energiad** elektronile.

• **Vaba elektroni mudelis** oli elektroni energia pidev funktsioon, mis andis k-koordinaadis parabooli  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$

\* Peaaegu vaba elektroni mudelis saame difraktsiooni kohtades 2 erinevat energiat.

⇒ Nendes kohtades ( $n\pi/a$ ) tekivad **keelatud energiad** elektronile- keelutsoon.



VABA ELEKTRON

PEAAEGU VABA ELEKTRON

78

- Keelutsoonis puuduvad elektronile lubatud energiatasemed.

\* Keelutsooni laius sõltub kristallvõre potentsiaali tugevusest.

Oleku  $n=1$  keelutsooni laius on siis just kahe seisva laine potentsiaalsete energiate vahe:

$$\Delta E_1 = V_- - V_+ = 2V_1$$

Kusjuures  $V_-$  ja  $V_+$  avalduvad:

$$V_{\pm} = \pm \int_0^a \frac{\cos(2\pi x/a) V(x)}{a} dx \equiv \pm V_1$$

$$\text{kus } V_1 = \int_0^a \frac{\cos(2\pi x/a) V(x)}{a} dx.$$

79

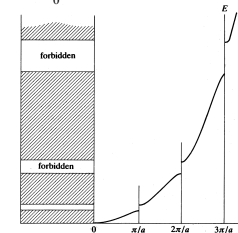
- Samamoodi tekivad keelutsoonid iga difraktsioonitingimuse jaoks:

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda} = n \frac{\pi}{a} \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Vastavad keelutsoonid on siis:

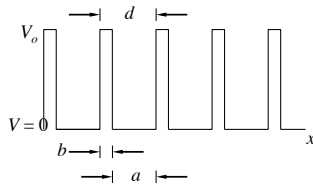
$$\Delta E_n = V_- - V_+ = 2V_n$$

$$\text{kus } V_n = \int_0^a \frac{\cos(2n\pi x/a) V(x)}{a} dx.$$



80

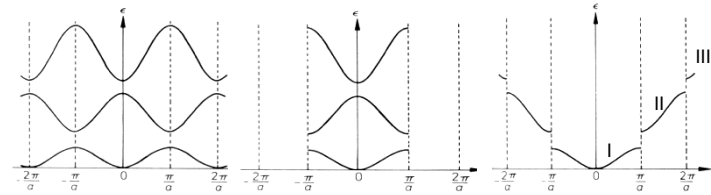
- Lisaks peaaegu vaba elektroni mudelile eksisteerib veel ka teisi võimalikke käsitlusi, millede abil on võimalik pooljuhtide tsoonide tekkimist seletada.
- Üheks selliseks on näiteks **KRONIG-PENNEY** mudel, kus elektroni vaadeldakse liikuvana tugevas perioodilises nelinurkses kristallipotentsiaalis justkui kvantaukude süsteemis.
- Ka see mudel annab üsna sarnase tulemuse, s.t. teatud  $k$ - ruumi punktides tekivad keelutsoonid.



Kristallipotentsiaali modelleerimine Kronig-Penney mudelis.

81

## Tsoonipildi $E(k)$ esitamine



Perioodiline tsoon

Vähendatud tsoon

Laiendatud tsoon

Tänu perioodilisusele võib tsoonipilti esitada mitut moodi. Levinum esitusviis on nn. vähendatud tsoon, kus  $E(k)$  kõver tuuakse vaid esimese Brillouini tsooni jaoks.

82

## Elektronide dünaamika tsoonides

### Elektroni kiirus

Elektronide grupikiirus kristallis:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Me teame ka, et lainepaketil, mis on seotud elektroniga, on kvantiseeritud energiatasemed:

$$E = hv = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = \hbar\omega$$

Kombineerides neid kahte võrrandit saame tähtsa valemi, mis seob pooljuhi tsooni omadused ning elektroni kiiruse:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

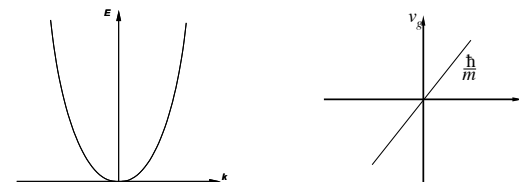
83

- Enne kui me püüame leida elektroni kiirust tsoonis, rakendame saadud valemit vabale elektronile, millel eksisteerib energia sõltuvus kujul:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

\* Siis saame lineaarse sõltuvuse elektroni lainearvu ja kiiruse vahel:

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2 k}{m} = \frac{\hbar k}{m}$$



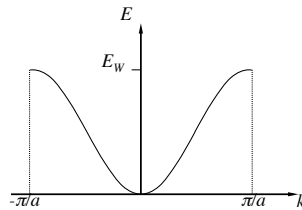
84

- Elektronidele kristalli tsoonides on dispersioonikõver teistsugune ja seetõttu peaks ka kiiruse sõltuvus lainearvust tulema teistsugune.

\* Üldiselt võib kristalli energia dispersiooni lähendada funktsiooniga:

$$E(k) = \frac{E_w}{2} - \frac{E_w}{2} \cos(ka)$$

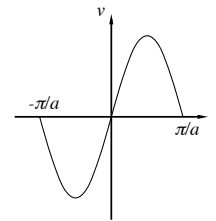
kus  $E_w$  on vastava tsooni laius.



85

- Siis saame elektroni grupikiiruseks tsoonis:

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{E_w a}{2\hbar} \sin(ka)$$



- Elektroni kiiruse sõltuvus lainearvust tsoonis.

\*  $k = 0$  ( $\Gamma$ -punkt) läheduses on kiiruse sõltuvus sarnane vaba elektroni lineaarsele sõltuvusele

\* kiirus muutub nulliks tsooni äärtes, kus  $k = \pm\pi/a$  kuigi elektroni energia pole seal sugugi null.

86

### Kristalli impulss

- Vaatleme nüüd, mis juhtub elektroniga, kui talle mõjub mingi väline jõud, mis võib olla kas elektri- või magnetväljast tingitud.

\* Newtoni teine seadus elektronile on siis:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}(t) = \mathbf{F}_{sum}(t)$$

\* Selles võrrandis on  $F_{sum}$  elektronile mõjuv KOGUJÕUD, mille võib esitada kahe komponendi summana:

$$\mathbf{F}_{sum}(t) = \mathbf{F}_v(t) + \mathbf{F}_s(t)$$

$\Rightarrow F_v$  on elektronile mõjuv väline jõud, mida on kerge välja arvutada.

$\Rightarrow F_s$  on elektronile mõjuv kristallipoolne sisemine jõud, mida on aga võimatu välja arvutada.

87

- Seega me peaksime leidma elektronile mingi liikumisvõrrandi, mis EI NÕUAKS kristalli sisemiste jõudude väljaarvutamist!

- Rakendame kristallile välise elektrivälja  $E$  mis hakkab elektrone kiirendama.

$\Rightarrow$  Lühikese ajamomendi  $dt$  jooksul välise välja poolt tehtud töö elektronile on siis:

$$dE = F_v dx = F_v v_g dt = -e \vec{E} v_g dt$$

$$\frac{dE}{dt} = -e \vec{E} v_g$$

Elektroni grupikiiruse jaoks saame siis:

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dt} \frac{dt}{dk} = -e \vec{E} v_g \frac{1}{\hbar} \frac{dt}{dk}$$

88

- Selle võrrandi edasine lihtsustamine annab:

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e\vec{E}$$

- Antud võrrandi parem pool kujutab endast välist jõudu, mis elektronile mõjub. Siis võime kirjutada üldisemalt:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}_v$$

- ⇒ Kui me loeme suurust  $\hbar\mathbf{k}$  elektroni impulsiks kristallis, siis saadud võrrand kujutab endast Newtoni teist seadust
- ⇒ Seetõttu kutsutakse suurust  $\hbar\mathbf{k}$  sageli **kristalli impulsiks**.
- ⇒  $\hbar\mathbf{k}$  pole tegelik impulss, kuid ta sisaldab kristalli sisemiste jõudude mõju elektronile.
- ⇒ Kristalli impulsi mõiste kasutuselevõtt teeb elektroni käsitlemise kristallis lihtsamaks.

89

## Efektiiivne mass

- Kristalli impulsi kasutuselevõtt oli üks lihtsustusi, mida sai kasutada tsooniteooria lihtsamaks esitamiseks. Samasugune lihtsustus on ka elektroni **EFEKTIIVNE MASS**.

- \* Elektroni efektiiivne mass  $m^*$  erineb vaba elektroni massist  $m_0$
- \* Erinevates kristallides on elektronil erinev efektiiivne mass ja seda tänu just kristalli sisemistele jõududele, mis elektronile mõjuvad.

METALL	$m^*/m_0$
Na	1.2
Al	0.97
Ni	28
Cu	1.01
Ag	0.99
Pt	13

90

- Efektiiivse massi leidmiseks lähtume kristalli impulsist ning püüame kirjutada Newtoni II seaduse:

$$a = \frac{1}{m^*} F \Rightarrow \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{m^*} F \quad F - \text{väline jõud}$$

- \* See on üldiselt loogiline, kuna kristalli impulss sisaldab ju kristalli sisemisi jõude ning niimoodi seome need ka efektiiivse massiga.
- \* Teatavasti elektronide grupikiirus avaldus:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

- \* Siis edasi saame:

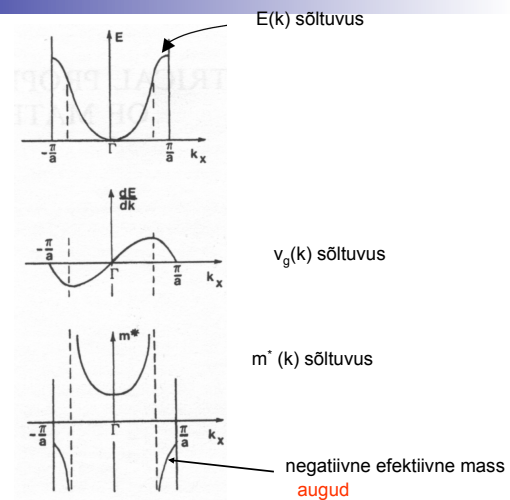
$$\frac{dV_g}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \left( \frac{dE}{dt} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \left( \frac{dE}{dk} \right) \left( \frac{dk}{dt} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \left( \frac{dk}{dt} \right)$$

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \left( \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \right) \frac{d}{dt} \hbar k = \frac{1}{m^*} F, \quad \text{sest} \quad \frac{dP}{dt} = \frac{d\hbar k}{dt} = F$$

91

- Siis efektiiivse massi jaoks saame avaldise:

$$\frac{1}{m^*} = \left( \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \right)$$



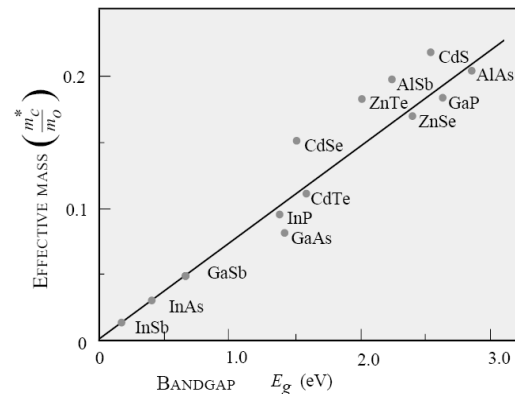
92

### Järeldused efektiivsest massist.

- Väikeste  $k$  väärtuste korral on efektiivne mass sõltumatu  $k$ -st ning seega tsooni põhja lähedal käituvad elektronid nagu vabad elektronid, millede mass on lihtsalt  $m^*$ ! Samasugune on olukord ka tsooni äärel, kus  $k \approx \pi/a$ .
- Mida suurem on elektroni efektiivne mass, seda väikem on  $E(k)$  kõverus, s.t. seda lamedam on  $E(k)$  kõver.
- $E(k)$  kõvera pöördepunktides, kus  $d^2E/dk^2 = 0$  muutub efektiivne mass lõpmatuks. Seega võib nn. efektiivse massi mudelit kasutada vaid elektronidele, mis asuvad tsooni põhjas või ääres.
- Mida kõrgemal energial asub lubatud tsoon, seda suurem on tema laius. Mida laiem on tsoon, seda **väiksem** on sellele tsoonile vastav efektiivne mass. Seetõttu ka  $m_{\text{h}}^* > m_{\text{e}}^*$ .
- Elektroni efektiivne mass sõltub üldjuhul ka pooljuhi keelutsooni laiuusest.
- Peab meeles pidama, et efektiivne mass on pooljuhi tsooni lahutamatu osa ja seetõttu sõltub ta ka tsooni ruumilisest kujust. Seega võib ta olla erisugune ka ühe tsooni piires sõltuvalt  $k$ -vektori suunast.

93

### Elektroni efektiivse massi sõltuvus pooljuhtide keelutsooni laiuusest.



94

### 3D tsoonipilt

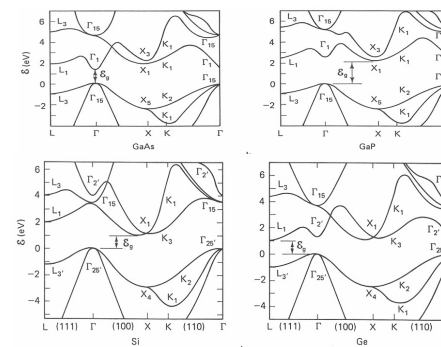
- Seni oleme pooljuhtide tsoonidest rääkides vältinud kristallide kolmemõõtmelisust.
- $k$ -ruum omab aga tegelikult 3 mõõdet, s.t. meil on  $k_x$ ,  $k_y$  ja  $k_z$ .
- 3D tsooniskeemi pole aga võimalik kuidagi normaalselt kujutada.
- Seetõttu esitatakse pooljuhtide tsooniskeeme ikkagi 2D kujul, kuid kristalli sümmeetriast lähtudes teatud kindlates  $k$ -vektori suundades.
- Eksisteerivad teatud olulised  $k$ -ruumi punktid, mis on toodud järgnevas tabelis:

PUNKT	KOORDINAAT
$\Gamma$	0,0,0
$X$	1,0,0
$L$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$K$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0$
$W$	$\frac{1}{2}, 1, 0$

Koordinaadid on toodud  $2\pi/a$  ühikutes

95

### Mõningate pooljuhtide tsoonipildid



96



- Nagu eelnevalt jooniselt oli näha, on kõige olulisemaks punktiks tsoonipildis punkt  $\Gamma$  koordinaatidega (0;0;0).

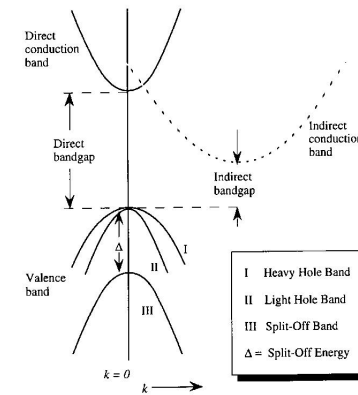
- Kui punktis  $\Gamma$  asuvad nii valentstsooni maksimum kui ka juhtivustsooni miinimum, siis on tegemist **otsese pooljuhiga** (direct band semiconductor).

- Kui juhtivustsooni miinimum ei asu  $\Gamma$  punktis, siis on tegemist **kaudse pooljuhiga** (indirect band semiconductor).

- $\Gamma$  punktis võib maksimumi omada mitu valentstsooni, millede jaoks on ka erinevad aukude efektiivsed massid. Eristatakse kergete aukude valentstsooni, raskete aukude valentstsooni ning spin-orbitaalset valentstsooni.

- Ka elektronil võivad olla erinevad efektiivsed massid sõltuvalt k-vektori suunast ruumis.

97



98

- Pea kõikide otsese pooljuhtide juhtivustsoon kohta punkti  $k=0$  lähedal kehtib võrrand:

$$E(k) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

kus  $E_C$  on juhtivustsooni miinimumile vastav energia.

- Samasugune parabolne sõltuvus kehtib ka aukudele:

$$\text{Rasked augud : } E(k) = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}^*}$$

$$\text{Kerged augud : } E(k) = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}^*}$$

$$\text{Spin - orbitaalne tsoon : } E(k) = E_V - \Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{soh}^*}$$

99

### Mõningate pooljuhtide omadusi toatemperatuuril. D ja I tähistavad "direct" ja "indirect" pooljuhte.

Material	Bandgap (eV)	Relative Dielectric Constant	Material	Electron Mass ( $m_0$ )	Hole Mass ( $m_0$ )
C	5.5, I	5.57	AlAs	0.1	
Si	1.124, I	11.9	AlSb	0.12	$m_{dir}^* = 0.98$
Ge	0.664, I	16.2	GaN	0.19	$m_{dir}^* = 0.60$
SiC	2.416, I	9.72	GaP	0.82	$m_{dir}^* = 0.60$
GaAs	1.424, D	13.18	GaAs	0.067	$m_{lh}^* = 0.082$ $m_{hh}^* = 0.45$
AlAs	2.153, I	10.06	GaSb	0.042	$m_{dir}^* = 0.40$
InAs	0.354, D	15.15	Ge	$m_l = 1.64$ $m_t = 0.082$ $m_{dir}^* = 0.56$	$m_{lh}^* = 0.044$ $m_{hh}^* = 0.28$
GaP	2.272, I	11.11	InP	0.073	$m_{dir}^* = 0.64$
InP	1.344, D	12.56	InAs	0.027	$m_{dir}^* = 0.4$
InSb	0.230, D	16.8	InSb	0.13	$m_{dir}^* = 0.4$
CdTe	1.475, D	10.2	GaN	3.44, D	10.0
AlN	6.2, D	9.14	ZnSe	2.822, D	9.1
GaN	3.44, D	10.0	ZnTe	2.394, D	8.7
ZnSe	2.822, D	9.1			
ZnTe	2.394, D	8.7			$m_{dir}^* = 1.08$

100