

# Cvičení 3

- Ideální krystalová mřížka  
periodický potenciál v krystalu
- Aplikace kvantové mechaniky  
pásová struktura polovodiče
- Nosiče náboje v polovodiči  
hustota stavů  
obsazovací funkce, Fermiho hladina  
koncentrace elektronů a děr

# Neprimitivní jednotkové buňky

Primitivní buňka (P)

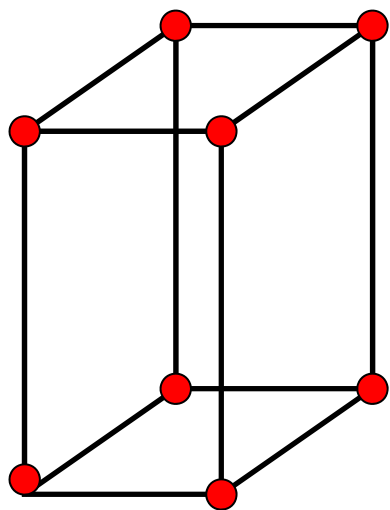
Stranově centrovaná (A, B or C)

Prostorově centrovaná (I)

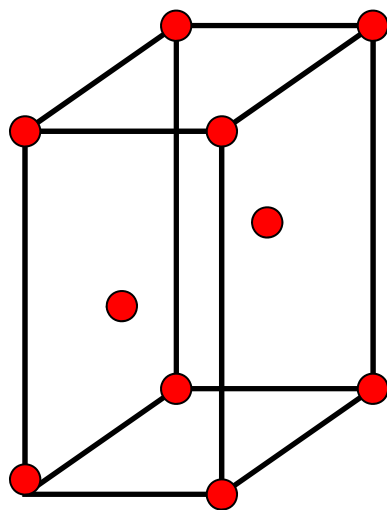
Plošně centrovaná (F)

V kombinaci se 7 primitivními buňkami vznikne

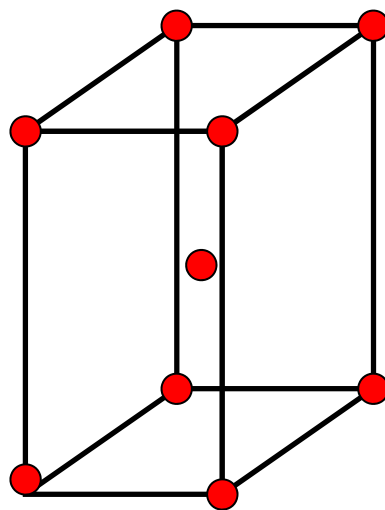
14 Bravaisových mřížek



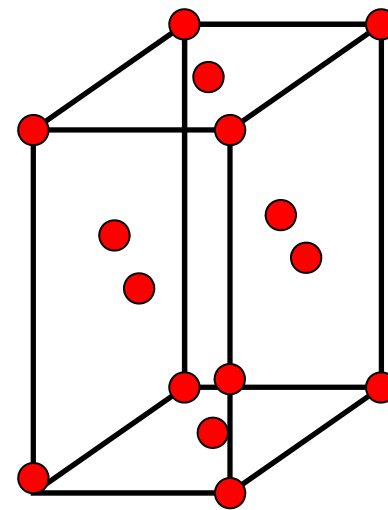
P



A



I



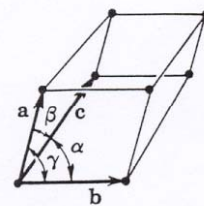
F

14

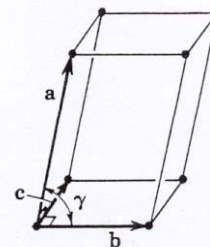
# Bravaisových krystalových mřížek

7

# krystalových soustav

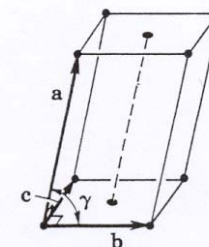


trojklonná  
(triklinická)  
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma$   
 $a \neq b \neq c$



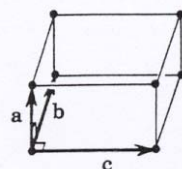
prostá

jednoklonná  
(monoklinická)

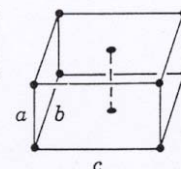


bazálně centrovaná

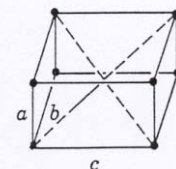
$\alpha = \beta = 90^\circ$   
 $\gamma \neq 90^\circ$   
 $a \neq b \neq c$



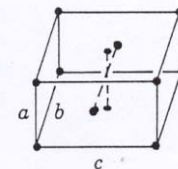
prostá



bazálně centrovaná

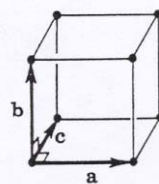


prostorově c.

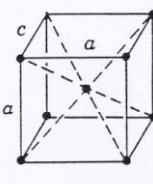


plošně centrovaná

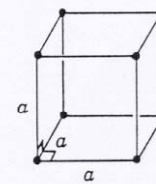
kosočtverečná  
(rombická)  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$   
 $a \neq b \neq c$



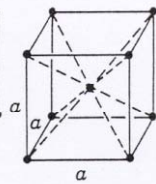
prostá



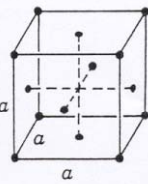
prostorově c.



prostá



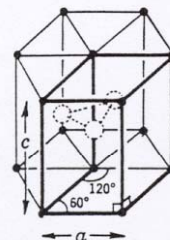
prostorově c.



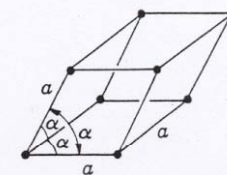
plošně centr.

čtverečná  
(tetragonální)  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$   
 $a = b \neq c$

krychlová  
(kubická)



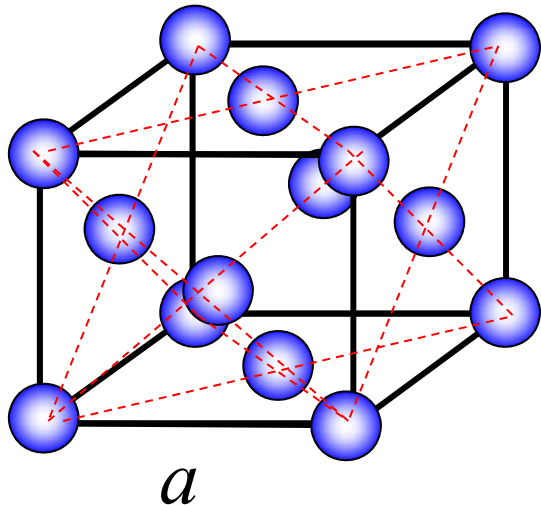
šesterečná  
(hexagonální)



klencová  
(trigonální)  $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

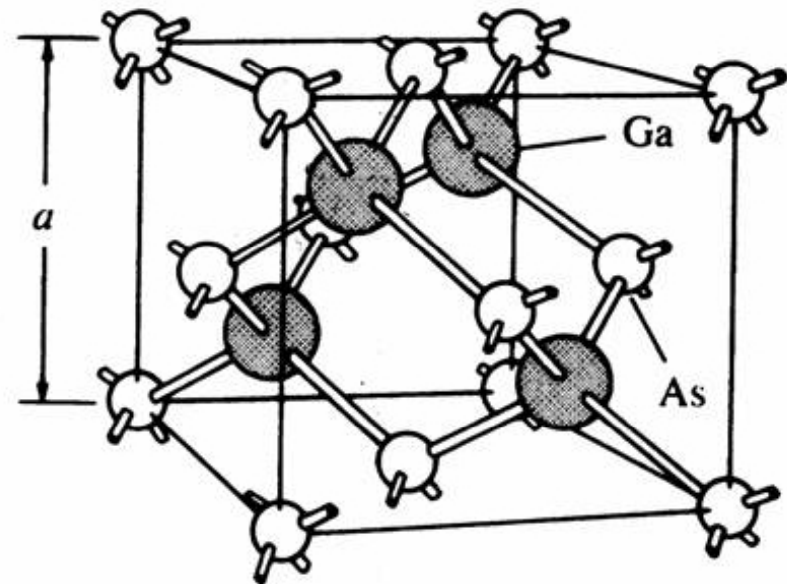
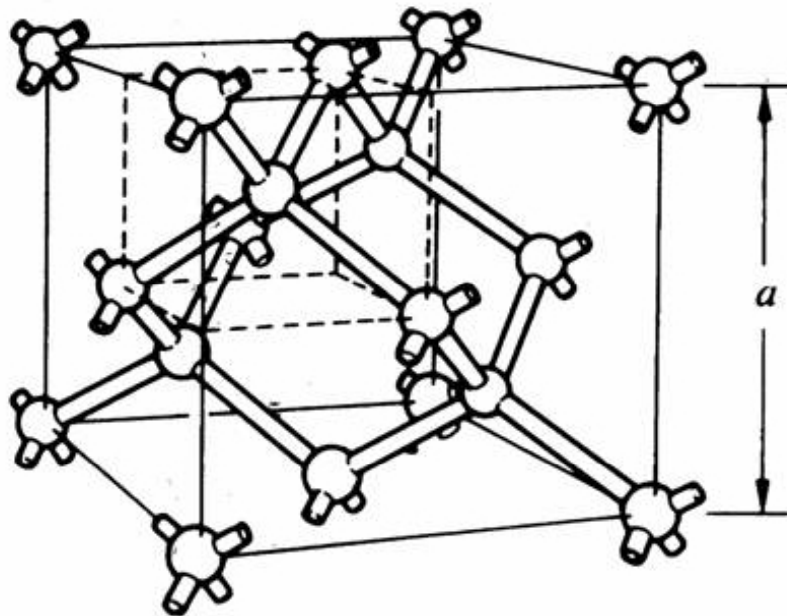
# Krystalová struktura Si, Ge, GaAs

- 2 FCC mřížky posunuté o  $\frac{1}{4}$  tělesové úhlopříčky
- 8 atomů na jednotkovou buňku
- každý atom má 4 nejbližší sousedy (ve vrcholech pravidelného 4 stěnu)
- **diamantová mřížka** - tvořena identickými atomy - (např. Si, Ge)
- mezi atomy pouze kovalentní vazby
- **sfaleritová mřížka** - (např. GaAs) - posunutá FCC tvořena jinými atomy
- mezi atomy kovalentní i iontové vazby



Plošně centrovaná kubická mřížka  
Face Centred Cubic (FCC)

# Diamantová a sfaleritová mřížka



# Millerovy indexy

## Millerovy indexy krystalových rovin

1. průsečíky roviny s osami:  $x, y, z$
2. převrácené hodnoty  $x, y, z$
3. převést na celá čísla se stejným poměrem

výsledek:  $(hkl)$

ekvivalentní roviny (stejná symetrie) :  $\{hkl\}$

## Millerovy indexy směru

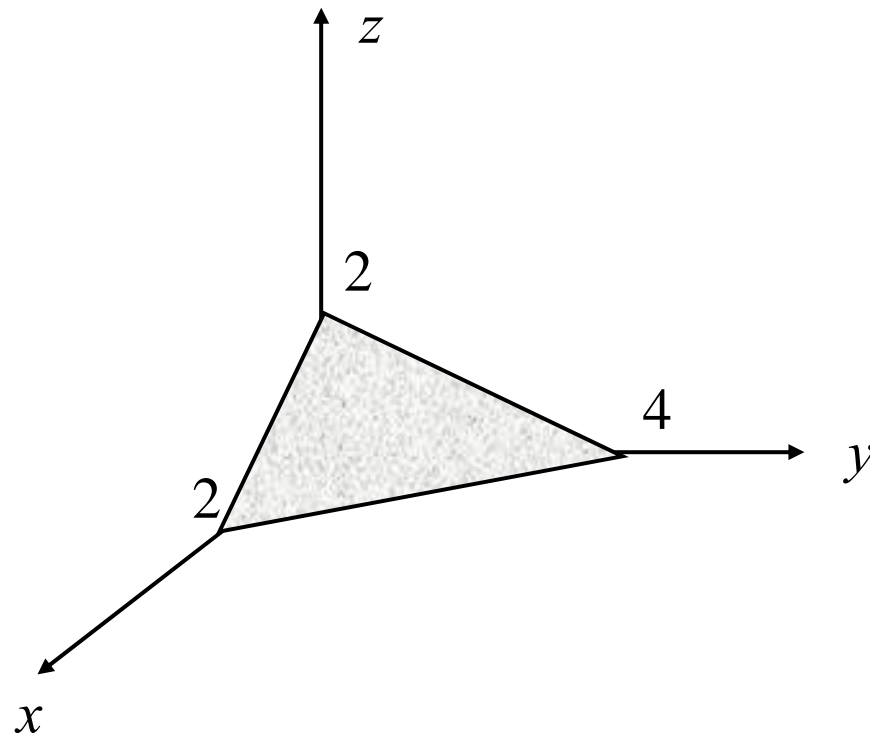
složky vektoru v daném směru převést na nejmenší celá čísla v daném poměru

$[hkl]$  – krystalografický směr

$\langle hkl \rangle$  - ekvivalentní sada směrů

# PŘÍKLAD 1

Určete Millerovy indexy roviny:



převrácené hodnoty průsečíků:

$1/2, 1/4, 1/2$

nejmenší celá čísla: 2, 1, 2

Millerovy indexy: (212).

# Millerovy indexy

rovina rovnoběžná se souřadnou osou má pro tuto osu Millerův index =0

průsečík s osou v záporné části

Millerův index :  $\bar{1}$

vzdálenost mezi rovinami v kubickém krystalu:

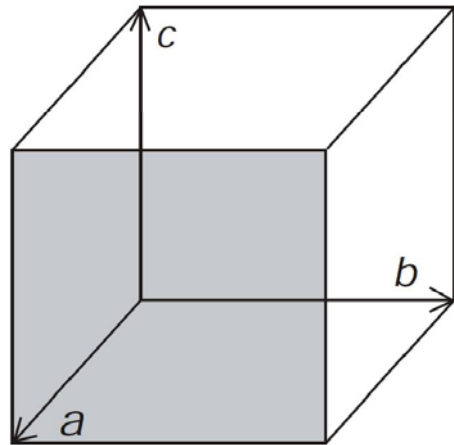
$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

úhel mezi rovinami:

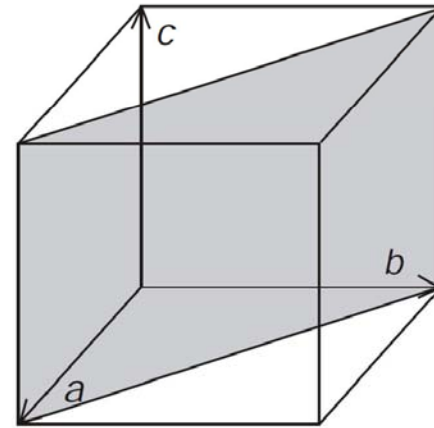
$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$



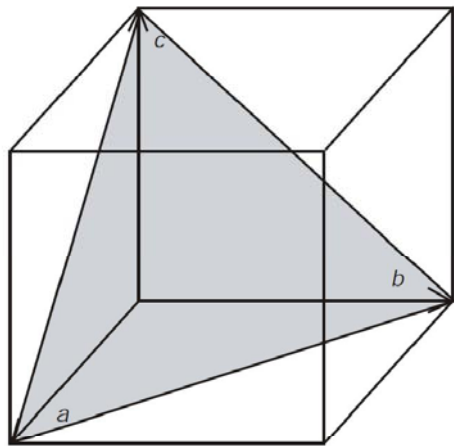
# Millerovy indexy



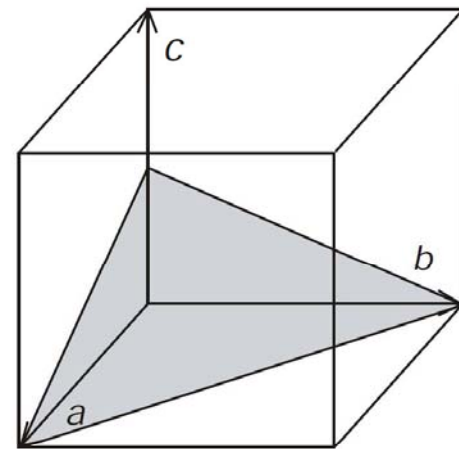
100



110



111



112

# Millerovy indexy (applet)

black background     perspective

14 Bravais Lattices  
Face-Centered Cubic

Grid=2            reset

Lattice Parameter    set

a = 4.0 Å    alpha = 90.0 °  
b = 4.0 Å    beta = 90.0 °  
c = 4.0 Å    gamma = 90.0 °

Basis Atoms

Atom Color= ■    Size = 3    rmv

xyz: 0.0 a 0.0 b 0.0 c    add

neg. sign     -     -     -

Miller Indices    1    1    1

SHOW    Plane     Direction     Points   

Set    Lib

Bravaisova mřížka

Millerovy indexy

příklady krystalů

roviny

směry

## PŘÍKLAD 2

Vypočtete objemovou koncentraci  $n_{Si}$  atomů Si v krystalu křemíku.

mřížková konstanta křemíku:  $a_0 = 5,43 \text{ \AA} = 0,543 \text{ nm}$

FCC buňka: 8 vrcholových bodů

6 bodů ve středech stěn

Si (diamantová mřížka) : 2 atomy připadají na 1 mřížový bod

Počet atomů na 1 buňku :  $(8 \times 1/8 + 6 \times 1/2) \cdot 2 = 8$

(vrchloly sousedí 8 buněk, stěnami sousedí 2 buňky)

$$n_{Si} = \frac{8}{(5,43 \cdot 10^{-10})^3} = 5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3} = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

## PŘÍKLAD 3

Vypočtete plošnou koncentraci  $n_{(100)}$  atomů Si v rovině (100).

mřížková konstanta křemíku:  $a_0 = 5,43 \text{ \AA} = 0,543 \text{ nm}$

Rovina (100): 4 rohové body

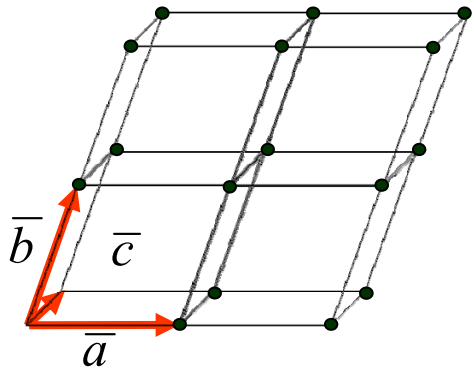
1 bod ve středu stěny

Počet atomů na 1 buňku :  $4 \times 1/4 + 1 = 2$

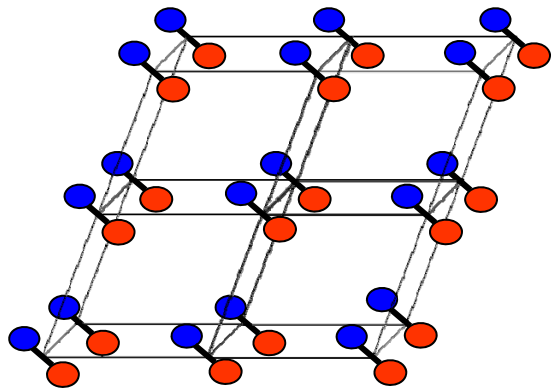
(rohy susedí 4 buňky)

$$n_{(100)} = \frac{2}{(5,43 \cdot 10^{-10})^2} = 6,8 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-2} = 6,8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$$

# Ideální krystalová mřížka



periodické  
opakování  
základní buňky



periodický průběh  
potenciálu

# Kvantová mechanika

## Dualismus vlna-částice

- De Broglieho vlnová délka:

$$\lambda = h/p$$

p... hybnost částice

h... Planckova konstanta

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}, \quad \hbar = h / 2\pi$$

- Energie fotonu:

$$E = hf$$

f... frekvence záření

# Kvantová mechanika

Jevy v mikrosvětě – operátorové rovnice

- Fyzikální veličina  $\longrightarrow$  operátor
- Měřitelná hodnota veličiny  $\longrightarrow$  vlastní číslo operátoru
- Stav částice  $\longrightarrow$  vlastní funkce operátoru

Schrödingerova rovnice v 1D

$$\hat{\mathbf{H}}\psi = E\psi \qquad \hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

- $\hat{\mathbf{H}}$  : Hamiltonův operátor - operátor energie
- vlastní číslo  $E$  : energie částice (elektronu) ve stavu popsaném vlnovou funkcí  $\psi$

# Řešení Schrödingerovy rovnice

- Vlnová funkce pro volný elektron (ve vakuu)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right]$$

spojité spektrum energií E

- Elektron v kvantové jámě,
- Elektron v centrálním poli atomového jádra  
→ diskrétní energetické stavy  $E_1, E_2, \dots$



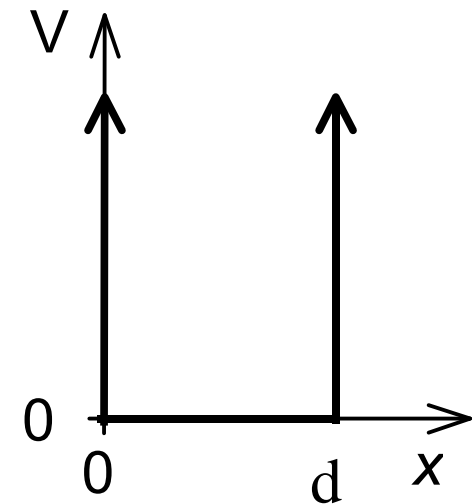
# Nekonečně hluboká pravouhlá kvantová jáma

Hledáme řešení Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E \varphi(x)$$

pro potenciálový profil

$$\begin{aligned} V &= 0 && \text{pro } 0 < x < d \\ V &= \infty && \text{jinde} \end{aligned}$$



Hledáme řešení ve tvaru

$$\varphi(x) = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x)$$

Kde  $m$  je hmotnost,  $E$  je celková energie.

$$\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Okrajové podmínky

$$\varphi(0) = 0 \quad \text{a} \quad \varphi(d) = 0$$

Tedy  $B=0$  a:

$$\varphi = A \sin(\alpha x) \quad \alpha_n d = n\pi$$

# Vlastní stavy energie

Dosazením za  $\alpha$  dostaneme **vlastní energie**

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

a **vlastní funkce**

$$\varphi_n(x) = A \sin\left(\frac{\pi n}{d} x\right) \quad \text{pro } 0 < x < d$$

$$\varphi_n(x) = 0$$

# Normovací podmínka

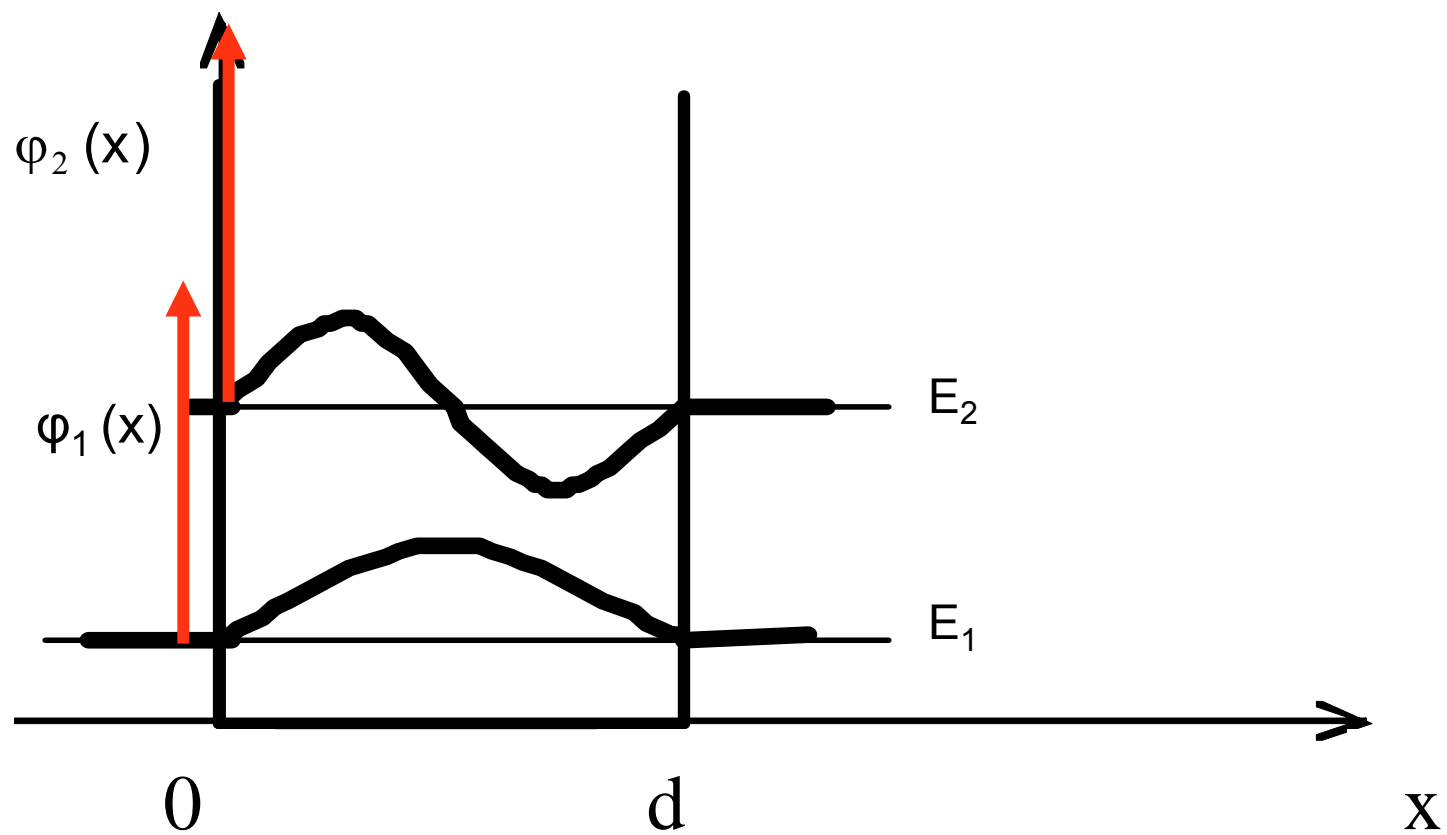
určí koeficient A:

$$\int_0^d |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

vlastní vlnové funkce:

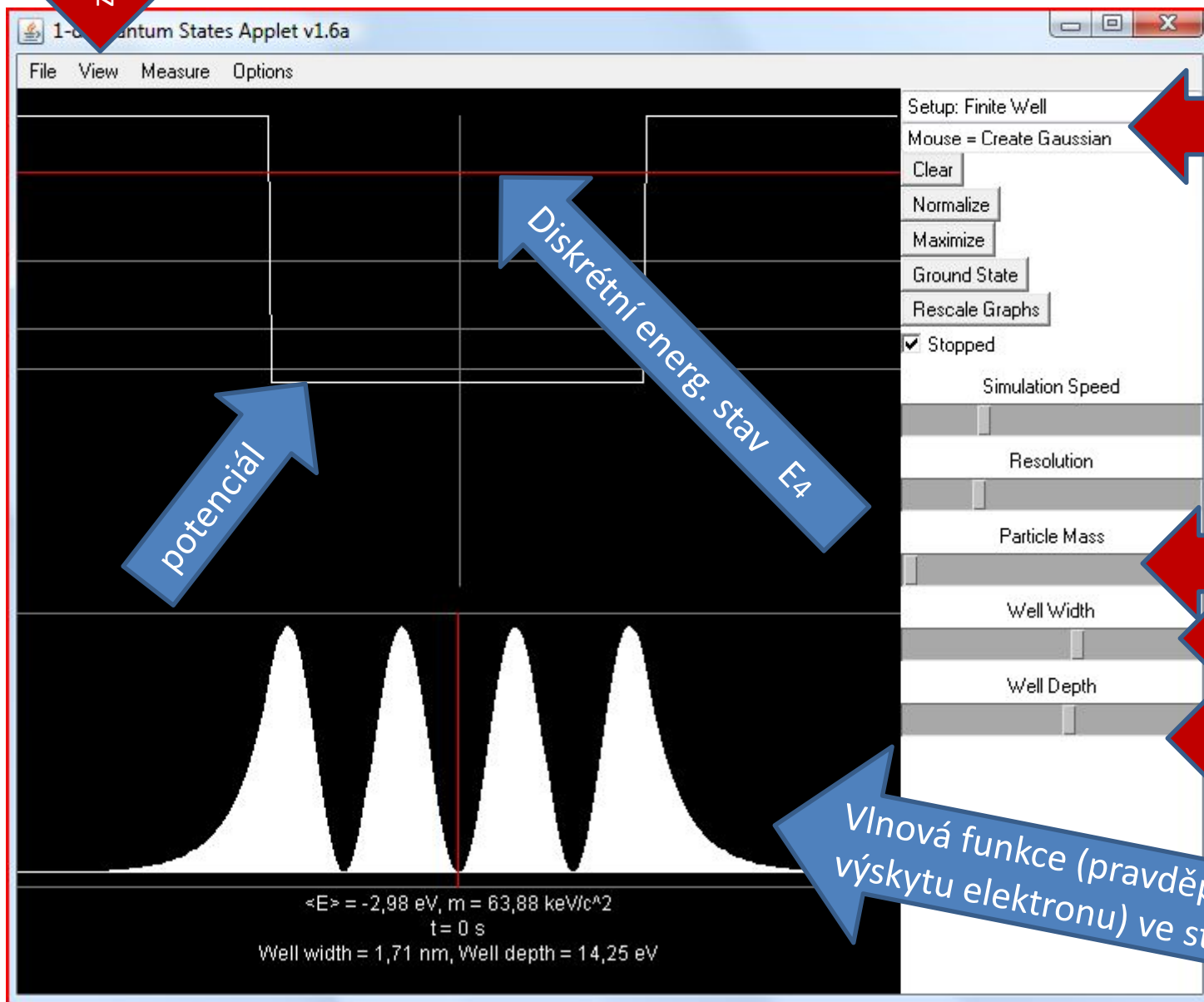
$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{\pi n}{d} x\right) \quad \text{pre } n = 1, 2, 3, \dots$$

# Tvar vlnových funkcí



# Řešení Schrödingerovy rovnice (applet)

zobrazení



Tvar potenciálu

potenciál

Diskrétní energ. stav  $E_4$

hmotnost částice

Šířka jámy

Hloubka jámy

Vlnová funkce (pravděpodobnost výskytu elektronu) ve stavu  $E_4$

$\langle E \rangle = -2,98 \text{ eV}$ ,  $m = 63,88 \text{ keV}/c^2$   
 $t = 0 \text{ s}$   
Well width = 1,71 nm, Well depth = 14,25 eV

# Elektrony v krystalu

- Schrödingerova rovnice pro 1 elektron v krystalu:

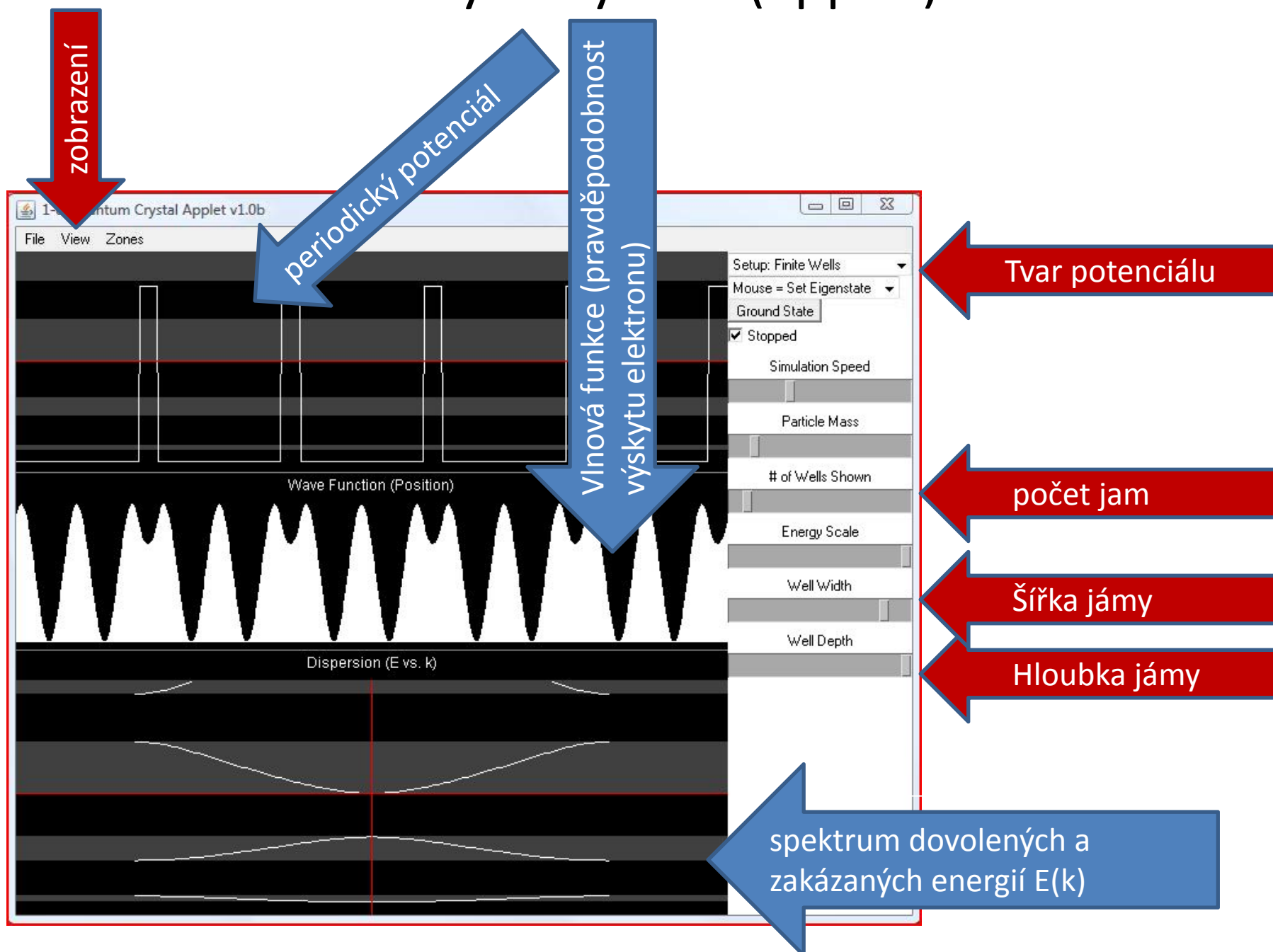
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] \psi_k(\mathbf{r}) = E \psi_k(\mathbf{r})$$

- periodický potenciál:  $U(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = U(\mathbf{r})$   
 $\mathbf{a}_n$  ... vektor krystalické mříže
- řešení: Blochova funkce

$$\psi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_k(\mathbf{r})$$

- spektrum dovolených a zakázaných energií  $E(\mathbf{k})$

# Elektrony v krystalu (applet)

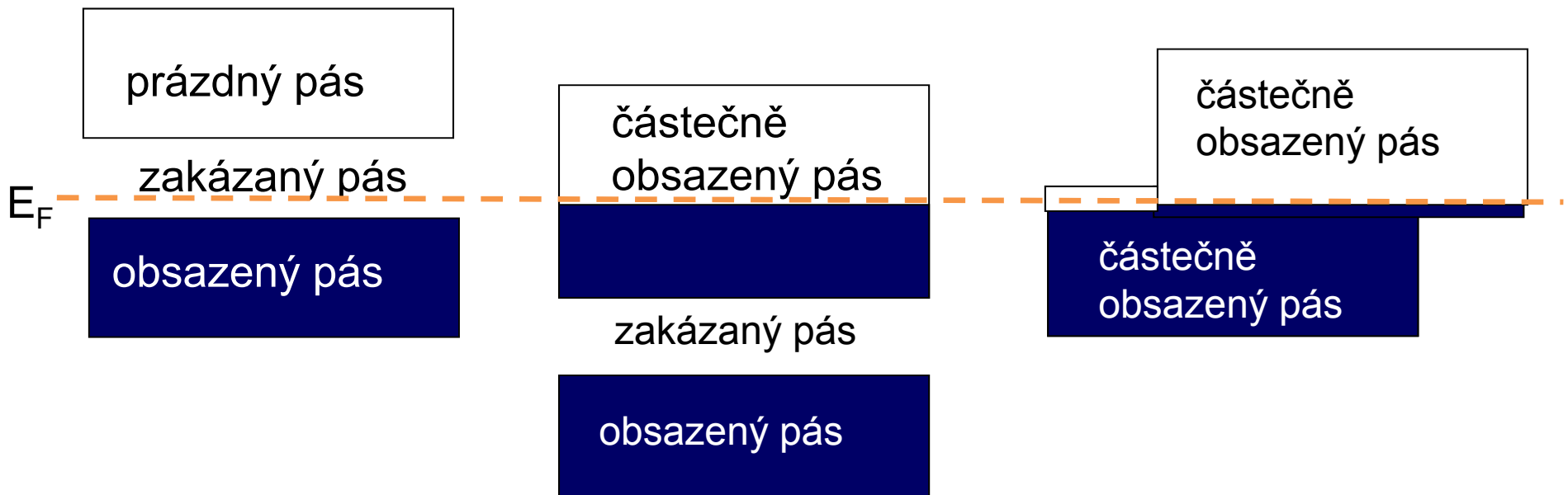
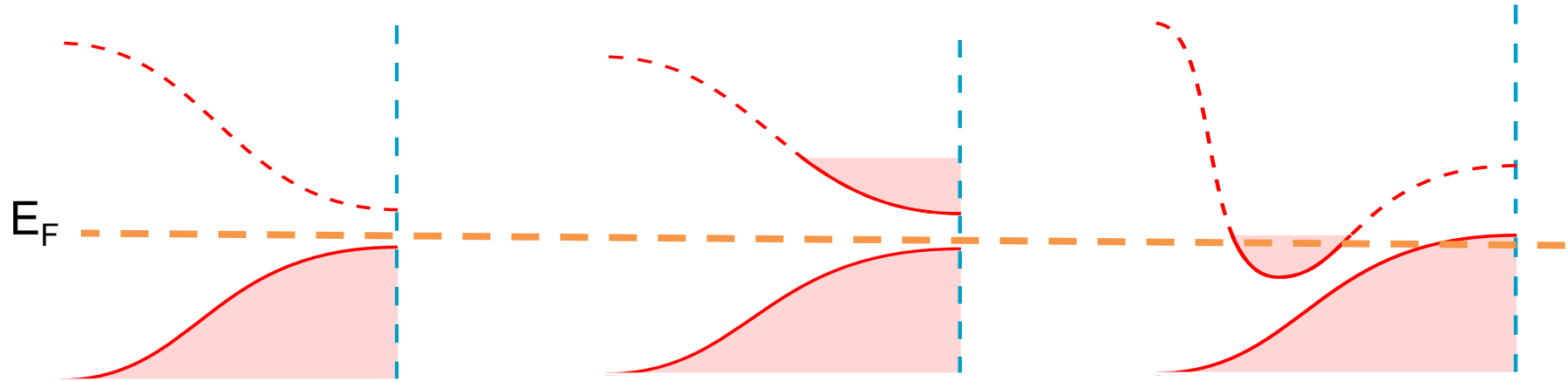




IZOLANT  
POLOVODIČ

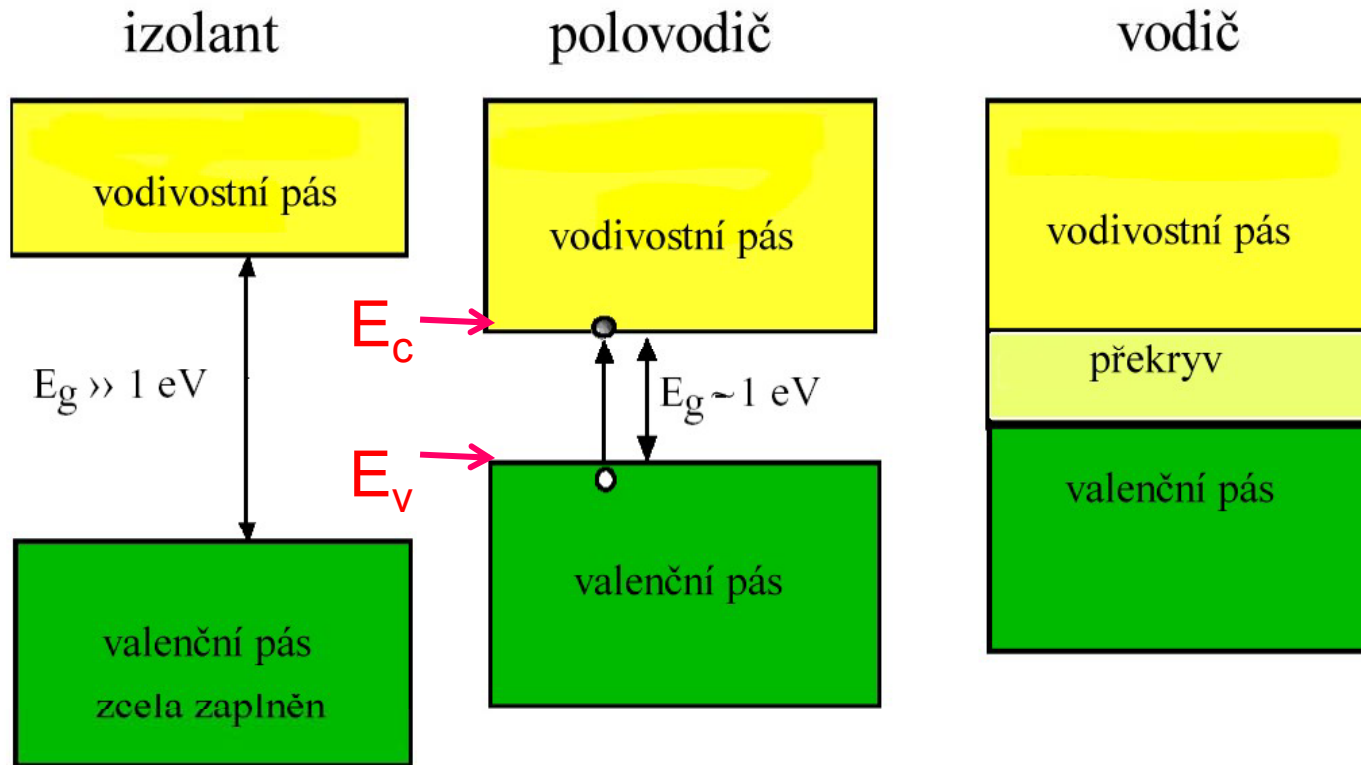
KOV

KOV  
POLOKOV

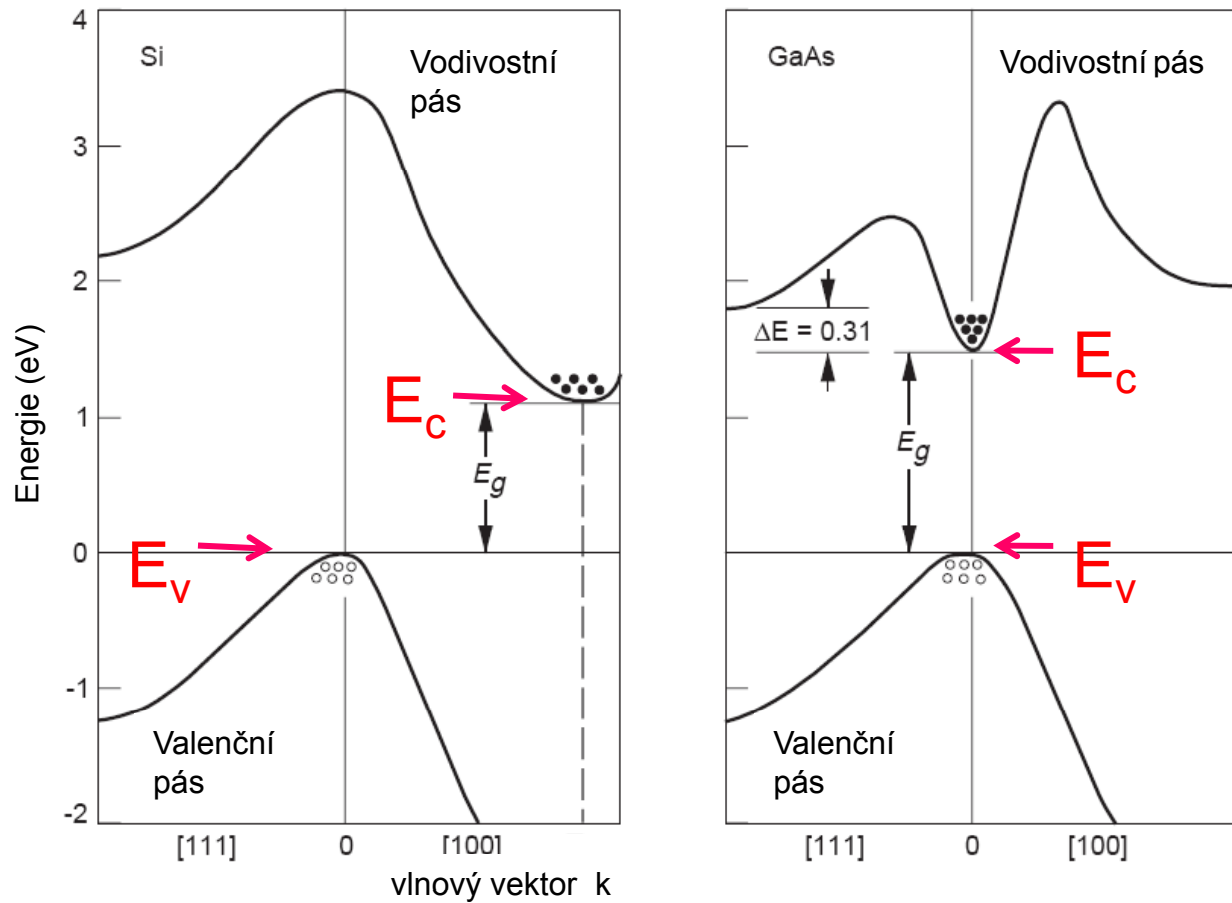


# Izolant – polovodič - kov

- šířka zakázaného pásu  $E_g = E_c - E_v$



# Pásový diagram Si a GaAs



Nepřímý polovodič

přímý polovodič

# PŘÍKLAD 4

Vypočtete maximální vlnovou délku světla, které bude absorbováno v GaAs díky mezipásové generaci párů elektron-díra. Určete hybnost fotonu s touto vlnovou délkou. Rychlost světla  $c = 3 \cdot 10^8$  m/s,  $h = 6,6 \cdot 10^{-34}$  Js,  $E_{gGaAs} = 1,42$  eV. Bylo by toto záření absorbováno v Si bez přítomnosti dalšího mechanismu?

Vlnová délka:

$$\lambda = c.T = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E} = \frac{hc}{e.E[eV]} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,602 \cdot 10^{-19} \cdot 1,42} \cong 870 \text{ nm}$$

Hybnost fotonu:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{e.E[eV]}{c} = \frac{1,602 \cdot 10^{-19} \cdot 1,42}{3 \cdot 10^8} \cong 7,6 \cdot 10^{-28} \text{ kg.m.s}^{-1}$$

V Si je minimum vodivostního pásu u hrany Brillouinovy zóny, tj. hybnost elektronu se (dle předchozího grafu) musí změnit alespoň o polovinu hodnoty  $p = \hbar k = h/a = 6,6 \cdot 10^{-34} / 0,543 \cdot 10^{-9} = 1,2 \cdot 10^{-24} \text{ kg.m.s}^{-1}$  kde  $a$  je mřížková konstanta Si.

Tato změna musí být zajištěna přídatným mechanismem - interakcí elektronu s kmity mřížky (fonony), protože hybnost fotonu je mnohem menší.

# Nosiče náboje v polovodiči

- hustota energetických stavů ve vodivostním pásu

$$g(E) = \frac{1}{\pi^2} \frac{mk}{\hbar^2} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$$

- Fermiho-Diracova a Maxwelllova-Boltzmannova statistika
- (pravděpodobnost obsazení energetických stavů)

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

pro  $E_F - E > 4kT$ :



$$f_{MB}(E) = \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)$$

- koncentrace volných nositelů náboje.

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E) \cdot f_{FD}(E) \cdot dE \quad p_0 = \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E) \cdot [1 - f_{FD}(E)] \cdot dE$$

# Nedegenerovaný polovodič

- použití Maxwellovy-Boltzmannovy rozdělovací funkce:

$$f_{MB}(E) = \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)$$

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E) \cdot f(E) \cdot dE = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi (2m_n)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E - E_c} \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) dE$$

- substitucí  $\eta = (E - E_c)/(kT)$  :

$$n_0 = \frac{4\pi (2m_n kT)^{3/2}}{\hbar^3} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{kT}\right) \int_0^{\infty} \eta^{1/2} \exp(-\eta) d\eta$$

# Nedegenerovaný polovodič

integrál má tvar gama funkce:  $\int_0^{\infty} \eta^{1/2} \exp(-\eta) d\eta = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}$

pro elektrony:

$$n_0 = 2 \left( \frac{2\pi m_n kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left( \frac{E_F - E_c}{kT} \right)$$

$$n_0 = N_C \cdot \exp\left( \frac{E_F - E_C}{kT} \right)$$

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_n kT}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

pro díry:

$$p_0 = N_V \cdot \exp\left( \frac{E_V - E_F}{kT} \right)$$

$$N_v = 2 \left( \frac{2\pi m_p kT}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

# Nedegenerovaný polovodič

součin koncentrací elektronů a děr nezávisí na  $E_F$ :

$$n_0 \cdot p_0 = N_c N_v \exp\left(\frac{E_F - E_c}{kT}\right) \exp\left(\frac{E_v - E_F}{kT}\right) = n_i^2$$

$$n_i = (N_c N_v)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad \rightarrow \quad n_0 \cdot p_0 = n_i^2$$

$$n_0 = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{kT}\right) = N_c \exp\left(\frac{(E_i - E_c) + (E_F - E_i)}{kT}\right)$$

pro elektrony:

$$n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{kT}\right)$$

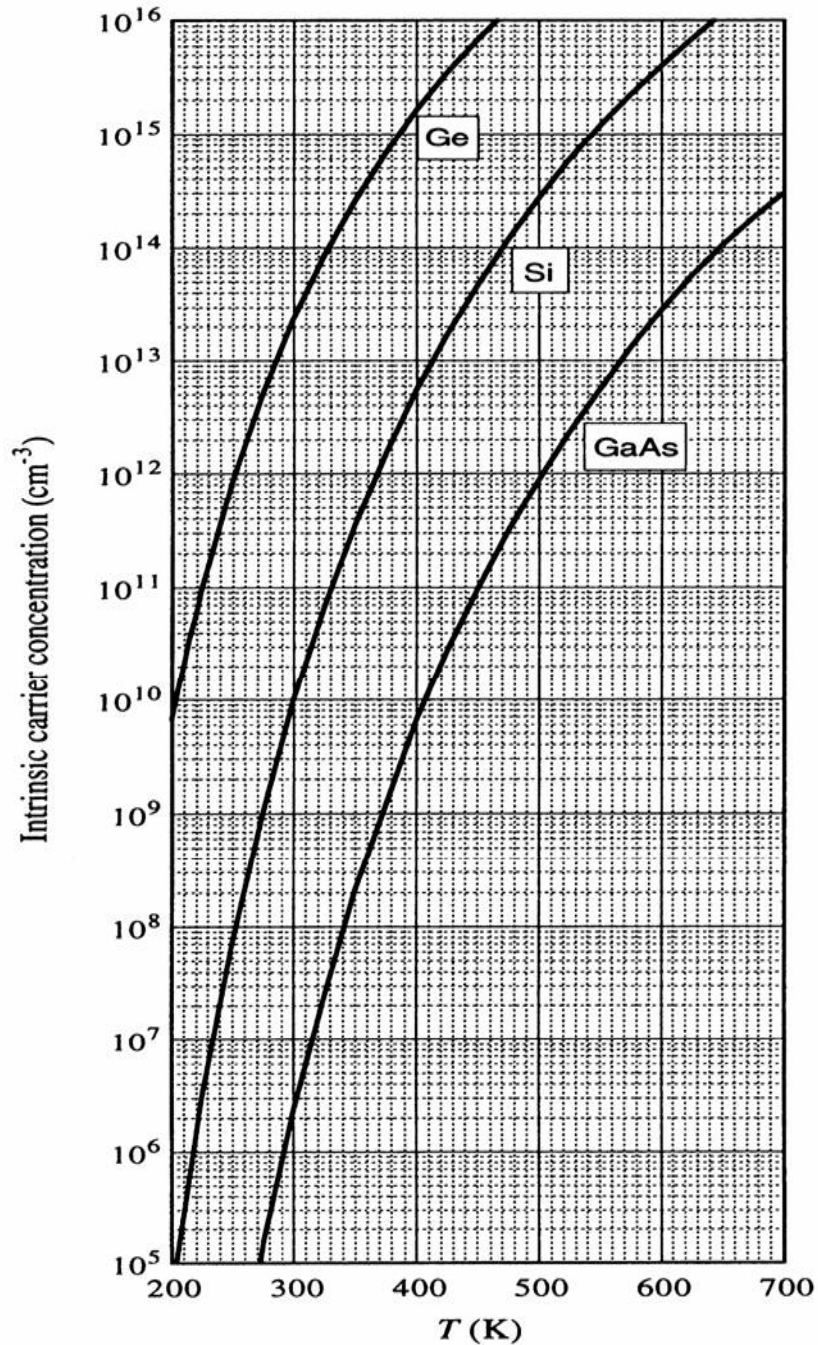
pro díry:

$$p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right)$$



# Intrinsický polovodič

$$p_o = n_o = n_i$$



$$T = 300 \text{ K}$$

$$n_i = 2 \times 10^6 / \text{cm}^3 \text{ v GaAs}$$

$$1,5 \times 10^{10} / \text{cm}^3 \text{ v Si}$$

$$2 \times 10^{13} / \text{cm}^3 \text{ v Ge}$$

## PŘÍKLAD 5

Vypočtete vzdálenost  $E_F - E_i$  v Si při  $n_0 = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  v rovnováze při teplotě 300 K, určete  $p_0$ .

$$E_F - E_i = kT \ln \frac{n_0}{n_i} = 0.0259 \ln \frac{10^{17}}{1,5 \cdot 10^{10}} = 0,407 \text{ eV}$$

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{2,25 \cdot 10^{20}}{10^{17}} = 2,25 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3}$$

Ověřte pomocí následujícího appletu

# Nosiče náboje v polovodiči (applet)

