بنام خدا

فصل دوم: مدلسازی باربرها

مدل → پیوند
مدل → نوار انرژی

وضعیت الکترون‌ها ← اعداد کوانتومی

n, l, m, s

هر الکترون ← یک وضعیت کوانتومی ← اعداد کوانتومی

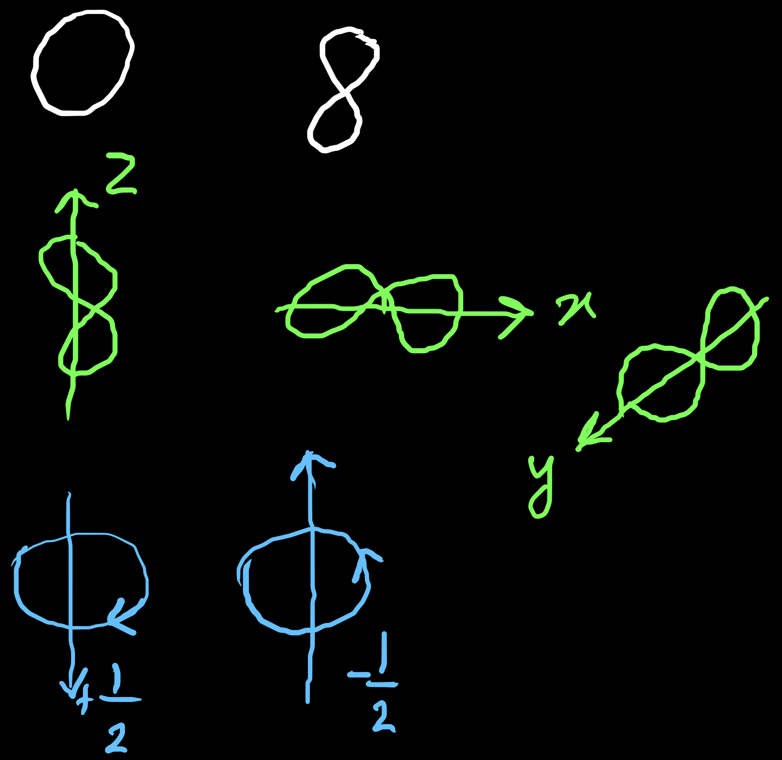
عدد کوانتومی اصلی $n = 1, 2, \ldots\ldots$

تکانه زاویه‌ای مداری l $0 \leq l \leq n-1$

تکانه مغناطیسی m $-l \leq m \leq l$

اسپین s $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

$l=0 \rightarrow s$ $l=1 \rightarrow p$ $l=2 \rightarrow d$ $l=3 \rightarrow f$ $l=4 \rightarrow g$



$Si \rightarrow 14$

$$n=1 \begin{cases} \ell=0,\ m=0,\ s=+\frac{1}{2} \\ \ell=0,\ m=0,\ s=-\frac{1}{2} \end{cases}$$

$$n=2 \begin{cases} \ell=0 \Rightarrow m=0 \rightarrow \begin{cases} +\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{cases} \\ \ell=1 \rightarrow \begin{cases} m=-1 \rightarrow +\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2} \\ m=0 \rightarrow +\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2} \\ m=1 \rightarrow +\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2} \end{cases} \end{cases}$$

$$n=3 \begin{cases} \ell=0 \\ \ell=1 \\ \ell=2 \end{cases}$$

الکترون اول $\{1, 0, 0, +\frac{1}{2}\}$

الکترون دوم $\{1, 0, 0, -\frac{1}{2}\}$

$n \rightarrow 1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^2$

جاذبه

$+ \quad -$

$NaCl$

$[Ne]3s^1$

$[Ne]3s^2 3p^5$

$Na \rightarrow [Ne]3s^1$

الکترون → ذره → باربر → حرکت

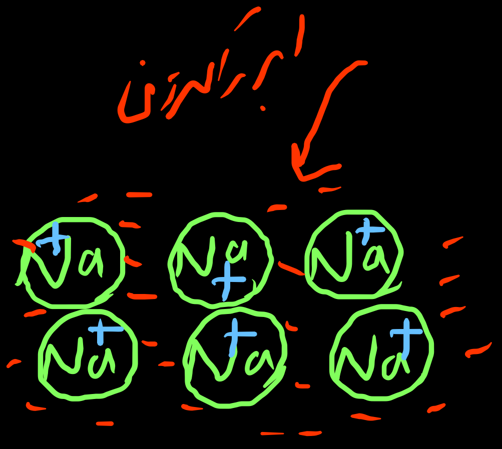
هسته → ثابت → یون

پیوند → یونی

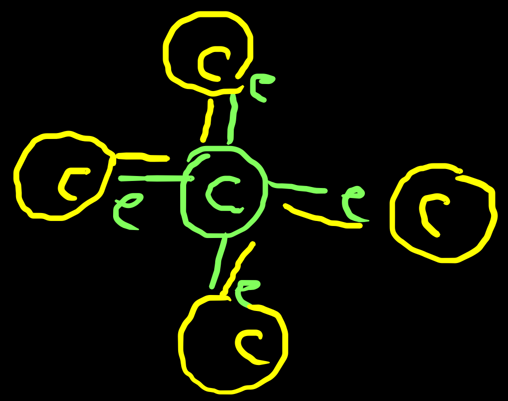
پیوند → فلزی

پیوند → کووالانسی → اشتراک

پیوند → شبکه



$C \quad [He]2s^2 2p^2$



H $1s^2$ $-13.6\,eV$

H $1s^2$ $-13.6\,eV$

$\boxed{H — H} \rightarrow$ H_2 انرژی محصول $\downarrow \rightarrow$ پایداری بیشتر

Si → کووالانسی

مخلوط → کووالانسی / یونی

GaAs

III

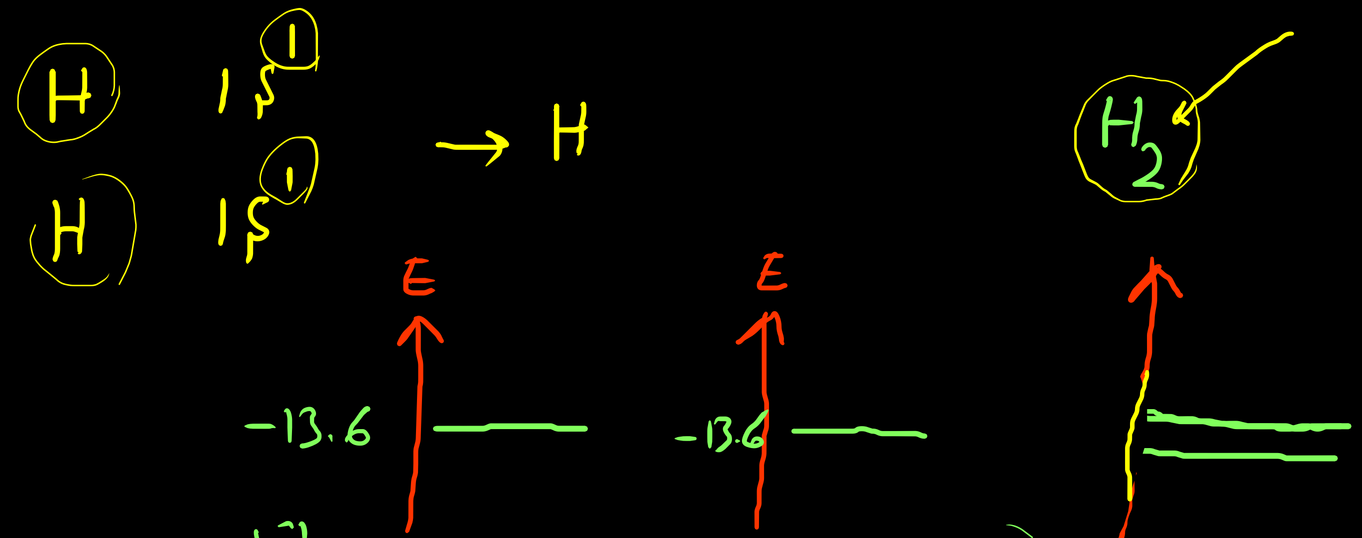
Ga $[Ar]\,3d^{10}\,\boxed{4s^2\,4p^1}$

As $[Ar]\,3d^{10}\,\boxed{4s^2\,4p^3}$

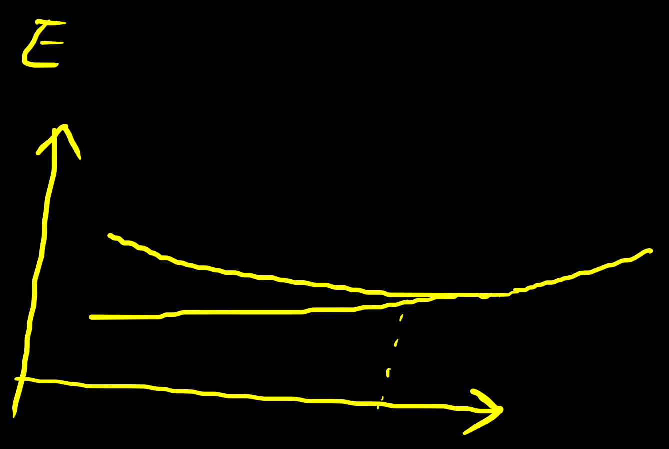
V

$\bar{Ga}\ As^{+}$

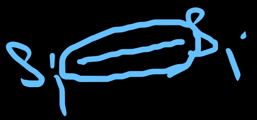
نوار انرژی

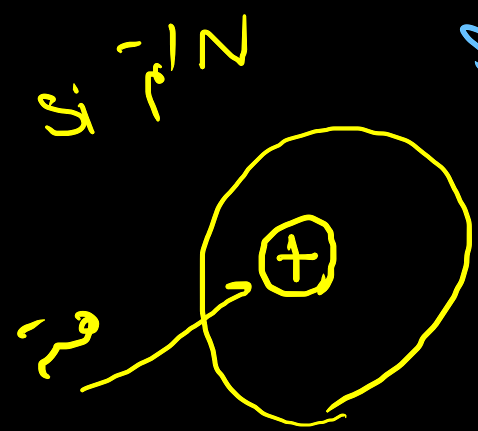


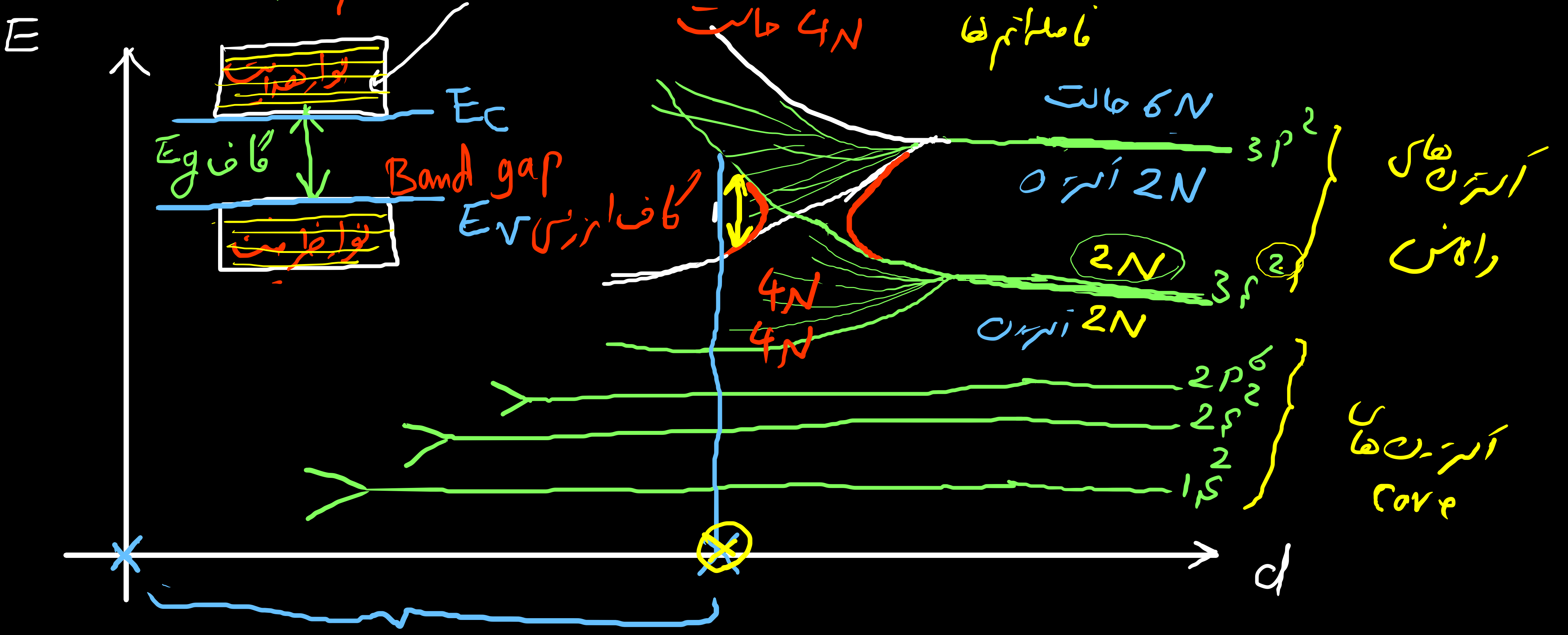
اتم اول



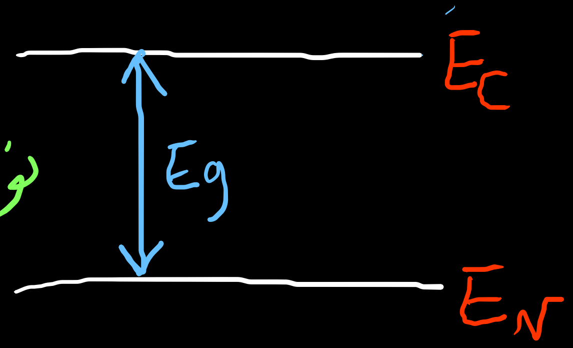
$Si = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$







نوار هدایت



نوار ممنوع

نوار ظرفیت

مدل حقیقی → l ، m ، t

طول ، جرم ، زمان

اجزاء

مدل موهومی → کمک به حل مسائل

اعداد مختلط

فرکانس انرژی

ω

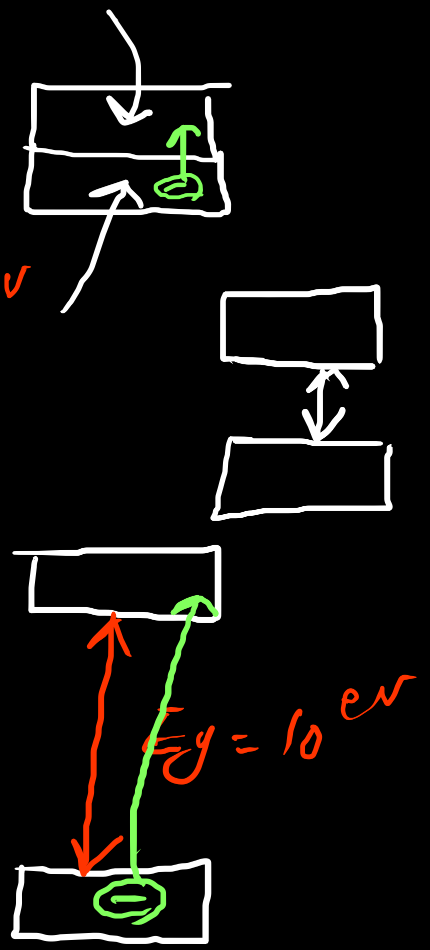
دنیای وارون

$\boxed{\dfrac{h}{2\pi} = \hbar}$ $E = \hbar\omega$

فلزات $E_g \simeq 0$

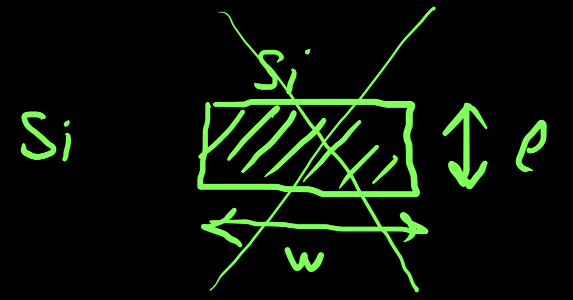
نیم رسانا $E_g = 1.12^{eV}$

عایق $E_g = 10^{eV}$



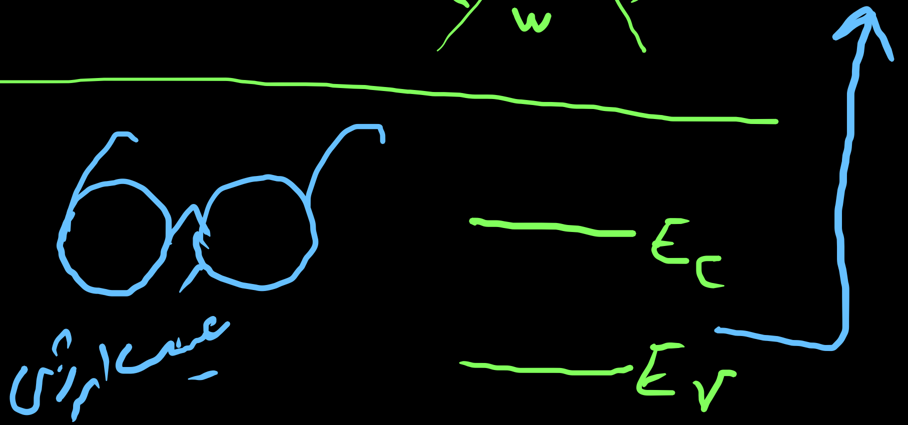
گاف انرژی ← رسانایی

مدل ← انرژی



ریاضیات → تبدیلات خوب

ریاضی

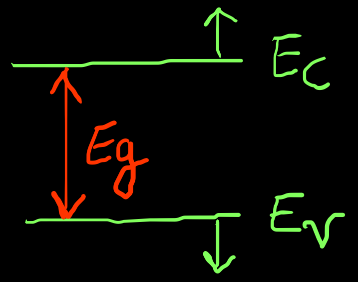


عینک انرژی

به نام خدا

نوارهای انرژی → مستقیم

نوارهای انرژی → غیرمستقیم



Si: $E_g = 1.12\ eV$

GaAs: $E_g = 1.43\ eV$

Ge: $E_g = 0.67\ eV$

$$E = K + V$$

$$E = \underbrace{\frac{1}{2}mv^2}_{\text{مستقل از زمان}} + \underbrace{V(r, \overset{\downarrow}{v})}_{\text{تابع مکان}}$$

$$v = \frac{dx}{dt}$$

بردار موج

$$E = \frac{P^2}{2m} + V$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + V(r,k)$$

$$V(r,k) \longrightarrow V(r)$$

$$E - V(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

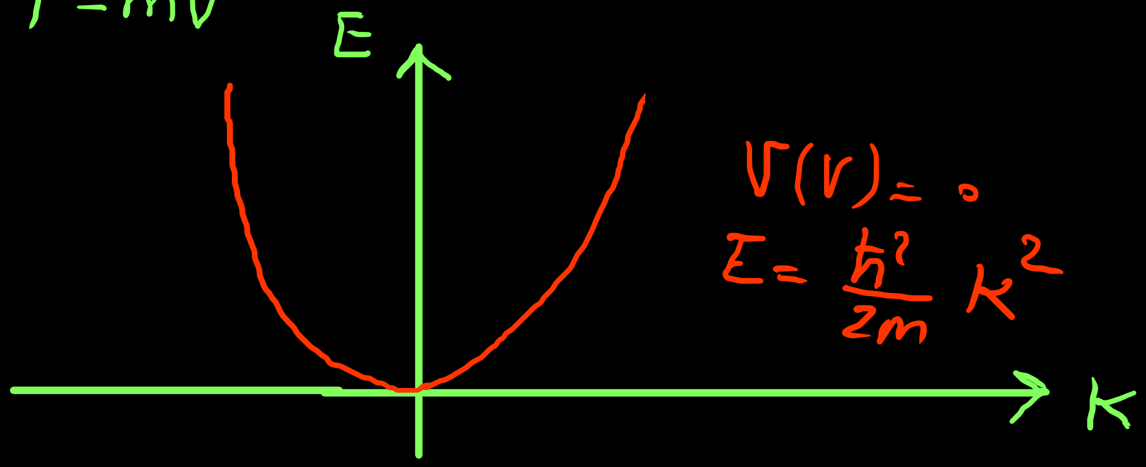
$\frac{1}{T}$

$$\omega \nearrow \quad \omega \rightarrow \boxed{E} = \hbar\omega$$

$$x \rightarrow \boxed{K} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

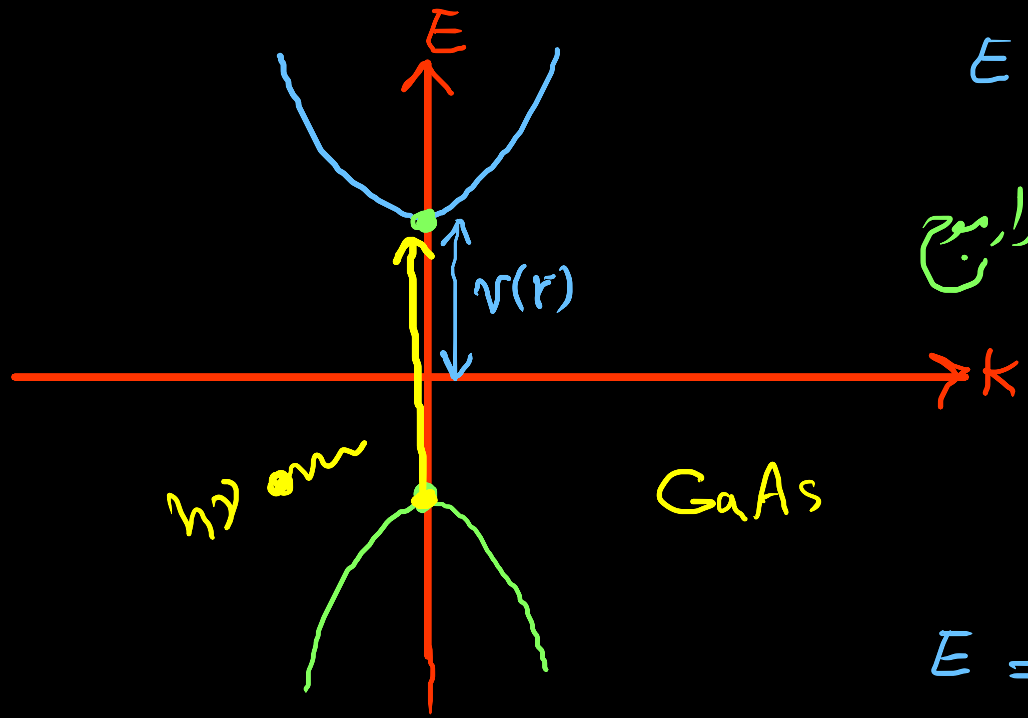
$$\lambda = \frac{h}{P} \leftarrow \qquad P = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k$$

$$P = mv$$



$$V(r) = 0$$

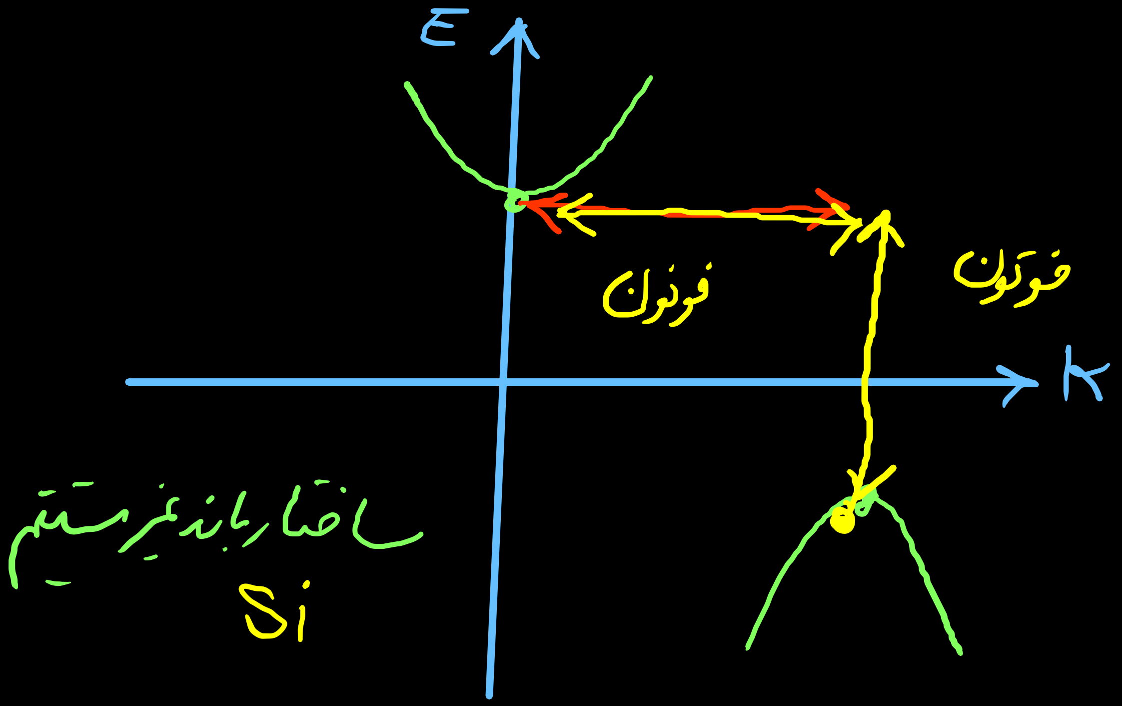
$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$



$$E = v(r) + \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

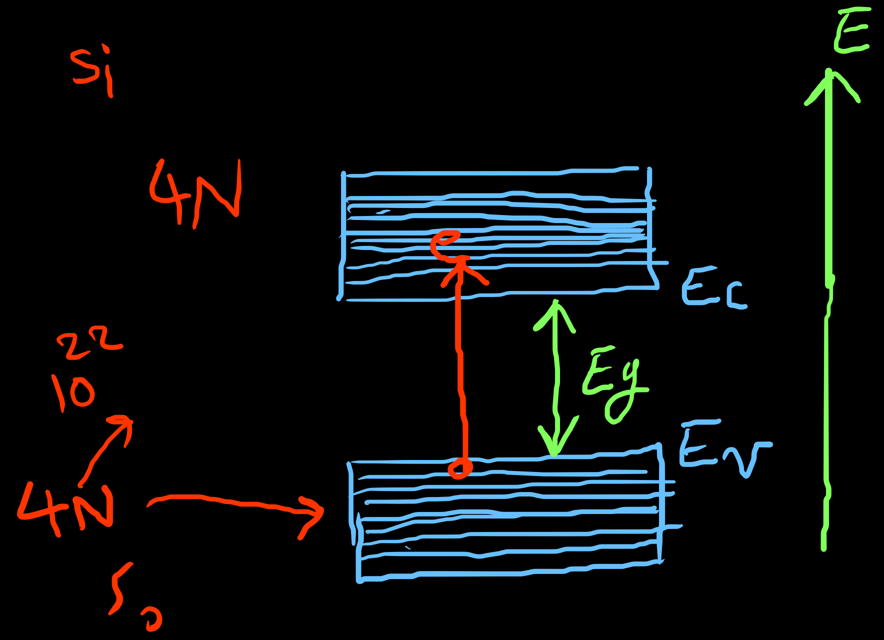
مستقل از بردار موج

ساختار باند انرژی مستقیم



ساختار باند غیر مستقیم

$$E = \overbrace{v(r,k)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



کلاس → 20 صندلی

تراز انرژی ← صندلی

انرژی الکترون‌ها ← دانشجو

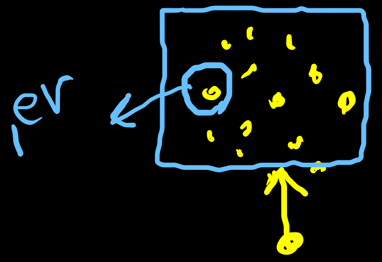
جریان ← رسانایی

۲ شرط

تراز خالی مجاز

انرژی الکترون - اندازه انرژی تراز خالی

$$k_BT = \frac{1.38\times10^{-23}\ J/K \times 300k}{1.6\times10^{-19}} = 0.025\ eV$$



توزیع ماکسول بولتزمن

$$f(E) = \frac{1}{k_BT}\, e^{\frac{-E}{k_BT}}$$

$$f(1) = \frac{1}{k_BT}\, e^{\frac{-1}{0.025}}$$

حرکت

تعداد

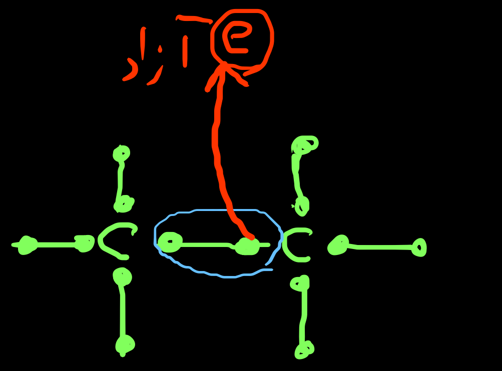
$1.6\times10^{-19}\ c$

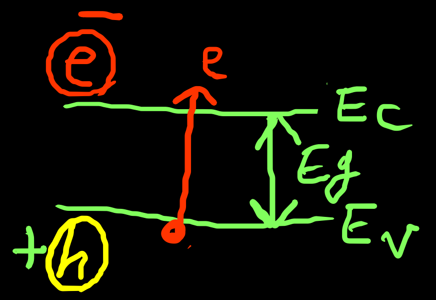
$$I = \frac{q}{t} = \frac{ne}{t}$$

تعداد الکترون ها

① ترازهای انرژی ← معادله شرودینگر

② انرژی الکترون ← دما



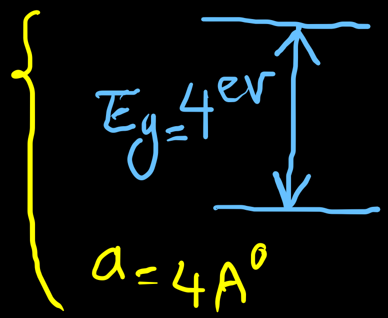


رسانایی → پیوند

رسانایی → نوار انرژی

رسانای الماس :

→ تعداد الکترون ها → $C \rightarrow 4$ الکترون

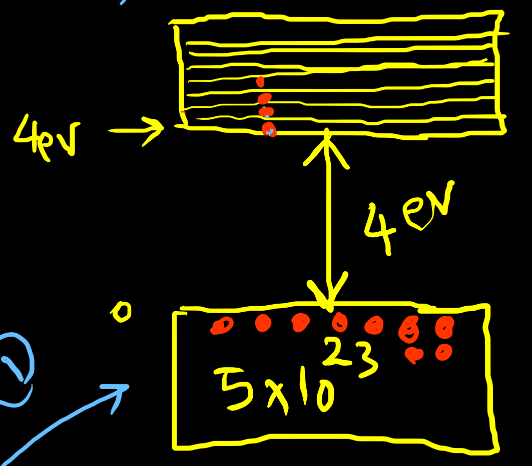


$$\frac{8 \text{ atom}}{(4\times10^{-8})^3} = 1.25\times10^{23}\ \frac{\text{اتم}}{cm^3}$$

تعداد الکترون ها در نوار ظرفیت در cm^3 $= 4\times 1.25\times10^{23} = 5\times10^{23}\ \frac{\text{الکترون}}{cm^3}$

$$I = \frac{n e}{t}$$

احتمال اینکه الکترون به نوار هدایت برود



① تعداد الکترون های نوار ظرفیت

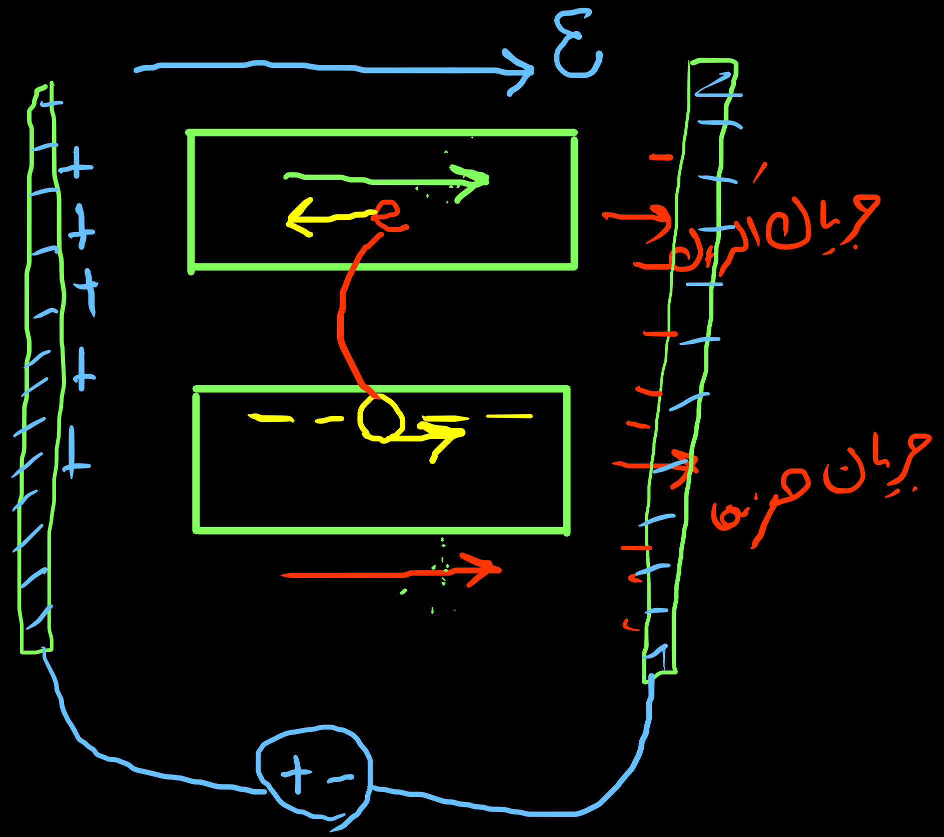
② احتمال

③ → n تعداد الکترون ها در نوار هدایت

$$P(E>E_g) = \int_{E_g}^{\infty} \frac{1}{k_B T} e^{\frac{-E}{k_B T}}\, dE = e^{\frac{-E_g}{k_B T}} = e^{\frac{-4}{0.025}}$$

$$= 3\times10^{-70} \simeq 0$$

تعداد الکترون های نوار هدایت $= 5\times10^{23}\times 3\times10^{-70} = 1.5\times10^{-46} \simeq 0$

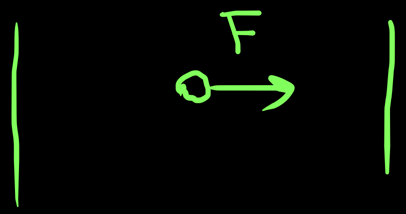


جریان : بارها

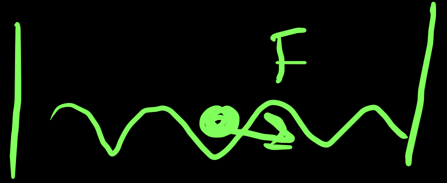
الکترون ⊖ Negative

حفره‌ها ⊕ Positive

$$F = m\,a$$



$$m^* = \text{جرم موثر}$$



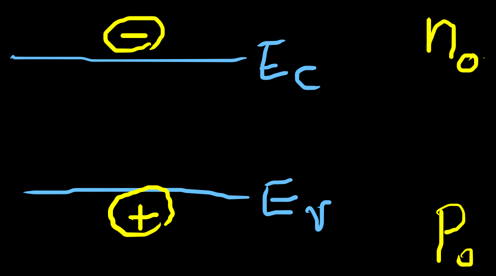
به نام خدا

انواع نیم رسانا ← نیم رسانای ذاتی یا خالص intrinsic
انواع نیم رسانا ← نیم رسانای آلایش یافته Doped

نیم رسانای آلایش یافته ← نوع n negative
نیم رسانای آلایش یافته ← نوع p positive

نوع n ← Donor یا دهنده الکترون

نوع P ← Acceptor یا گیرنده الکترون



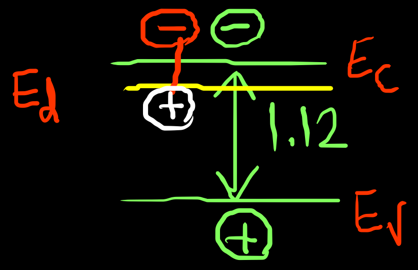
$n_o = P_o$

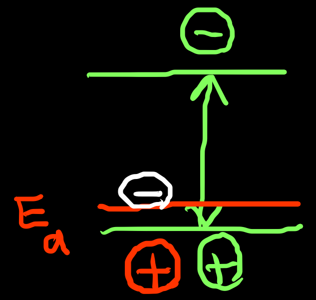
$4s^2 4p^3$
$3s^2 3p^3$

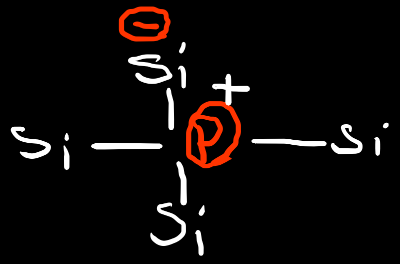
Si IV   V P As

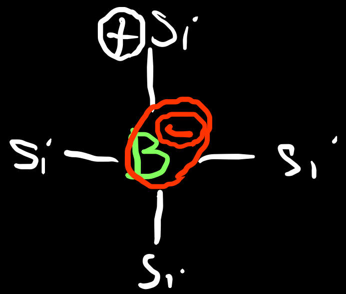
$3s^2 3p^1$

Si IV   III B Ga









Be Mg acceptor II

S, Se donor VI

$$\overset{\text{III}}{\text{Ga}}\ \overset{\overset{\text{V}}{\uparrow}}{\text{As}}$$

Si IV

انرژی بارها

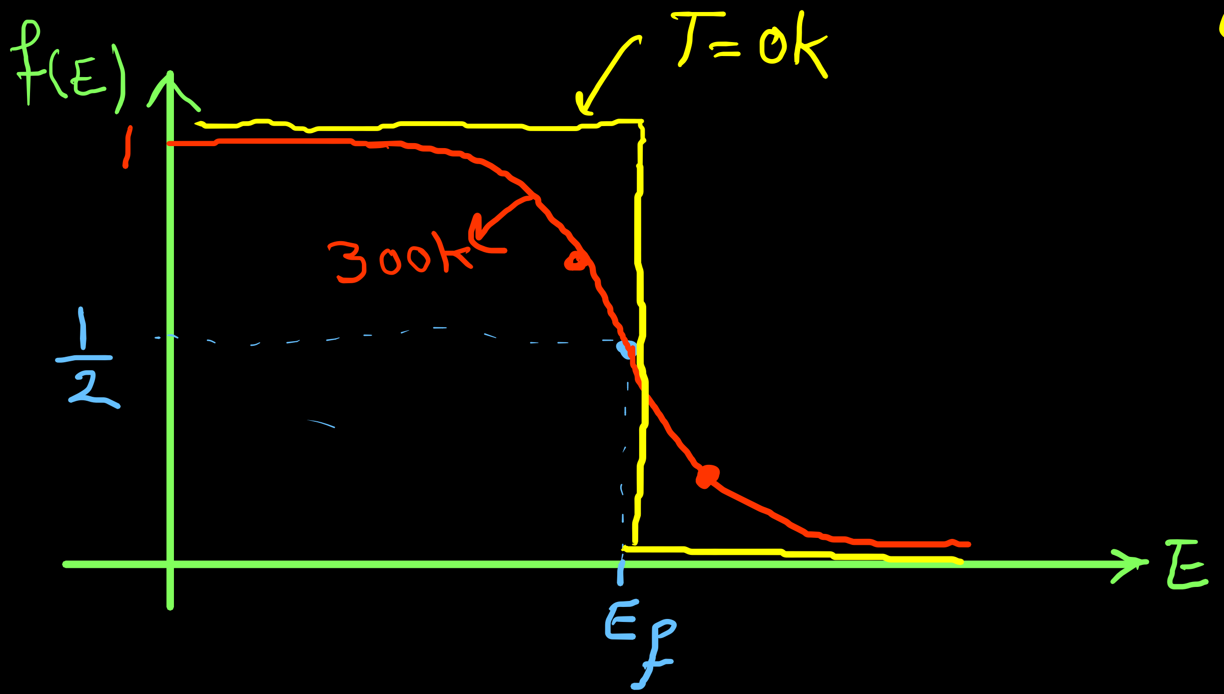
$$\text{بارها} \to \begin{cases} \text{بوزون} \to \text{بوز-اینشتین} \\ \text{فرمیون} \to \text{فرمی دیراک} \end{cases}$$

$$f(E)=\frac{1}{1+e^{\frac{E-E_f}{k_BT}}}$$

@ 300k

$$0.1^{eV} \longrightarrow f(0.1)$$

T=0k



$$f(\overset{\downarrow}{E}) = \frac{1}{1+e^{\frac{E-E_f}{k_BT}}} \longrightarrow f(E_f) = \frac{1}{1+e^{\frac{E_f-E_f}{k_BT}}} = \frac{1}{2}$$

$$f(E_f+E_x) = \frac{1}{1+e^{\frac{E_f+E_x-E_f}{k_BT}}} = \frac{1}{1+e^{\frac{E_x}{k_BT}}}$$

$$1-f(E_f-E_x) = 1-\frac{1}{1+e^{\frac{-E_x}{k_BT}}} = \frac{e^{\frac{-E_x}{k_BT}}}{1+e^{\frac{-E_x}{k_BT}}} = \frac{1}{1+e^{\frac{E_x}{k_BT}}}$$

$$f(E_f+E_x) = 1-f(E_f-E_x)$$

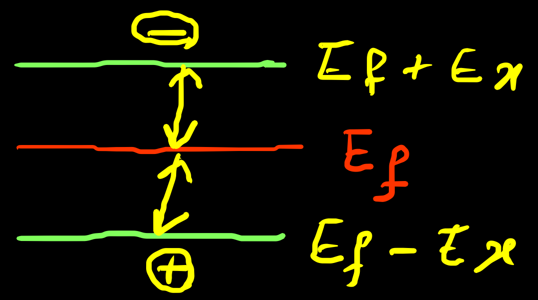
نکات مهم:

① $E_f \leftarrow$ در این تراز انرژی، حالت نیمه پر است.

② تابع فرمی دیراک در راستای E_f متقارن است.

$f(E) \longrightarrow$ احتمال حضور الکترون در تراز E

$1-f(E) \longrightarrow$ احتمال حضور حفره در تراز E



③ نکته: $E >> E_f$ ← توزیع ماکسول بولتزمن

$$E - E_f \geq 3k_BT \longrightarrow f(E) = e^{\frac{-(E-E_f)}{k_BT}}$$

$$f(E) = \frac{1}{\cancel{1} + \boxed{e^{\frac{E-E_f}{k_BT}}}} = \frac{1}{e^{\frac{E-E_f}{k_BT}}} = e^{\frac{-(E-E_f)}{k_BT}}$$

$$\boxed{e^{\frac{E-E_f}{k_BT}}}$$

$$f(E) = \frac{1}{k_BT} e^{\frac{-E}{k_BT}}$$ ماکسول بولتزمن

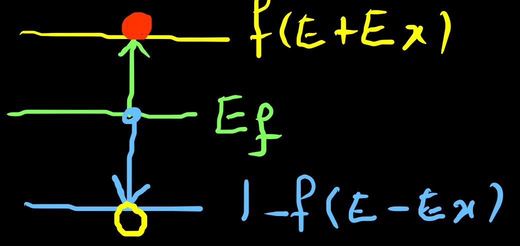
بنام خدا

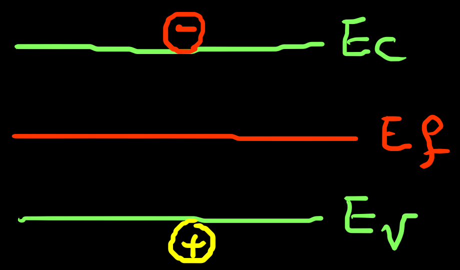
مدل سازی نیم رسانای نوع ذاتی، n, P با تابع فرمی-دیراک

$n_0 = p_0$

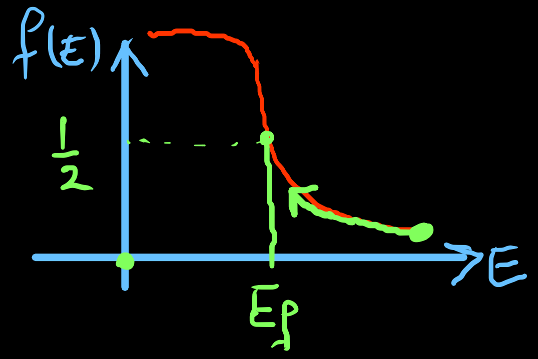
$f(E+E_x)$

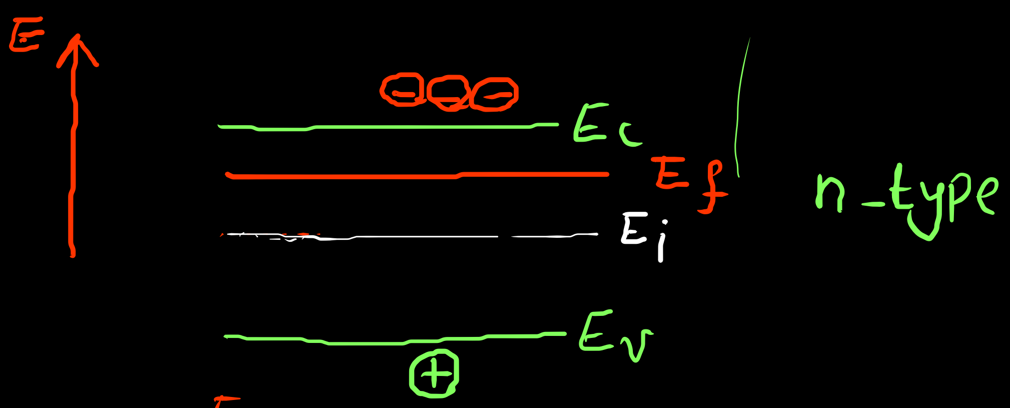
$1-f(E-E_x)$

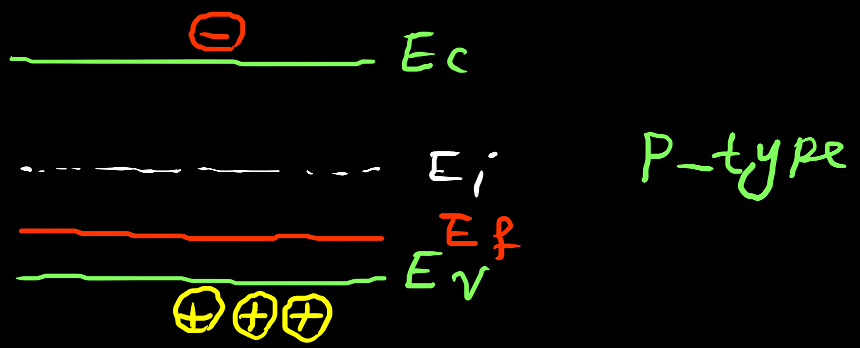


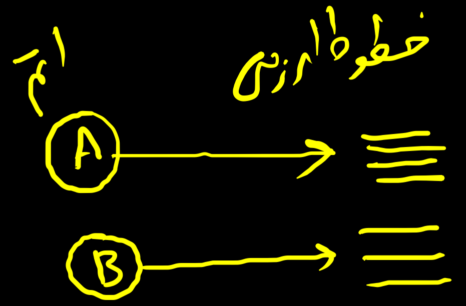


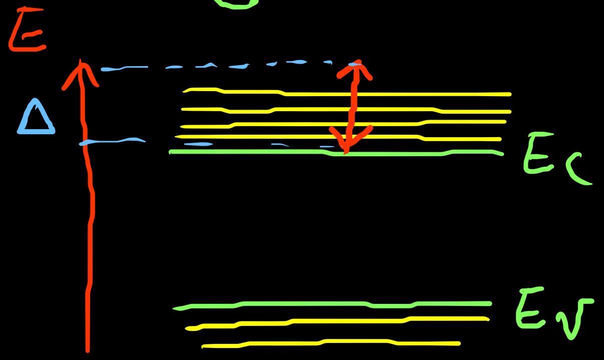
$n_0 = p_0$









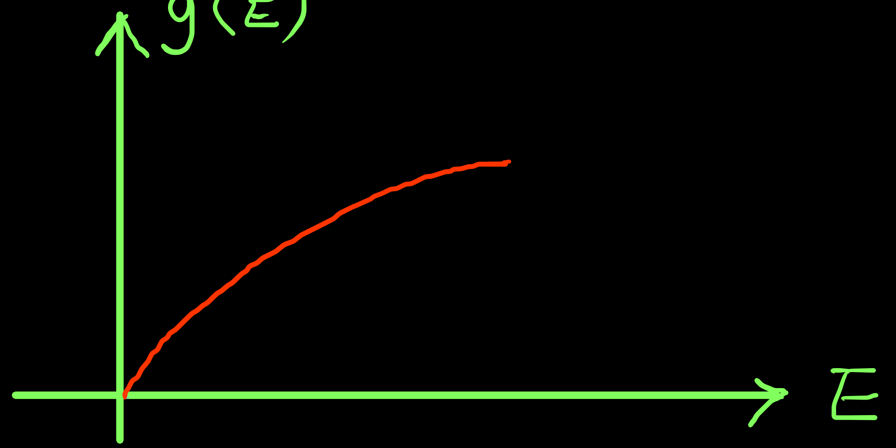


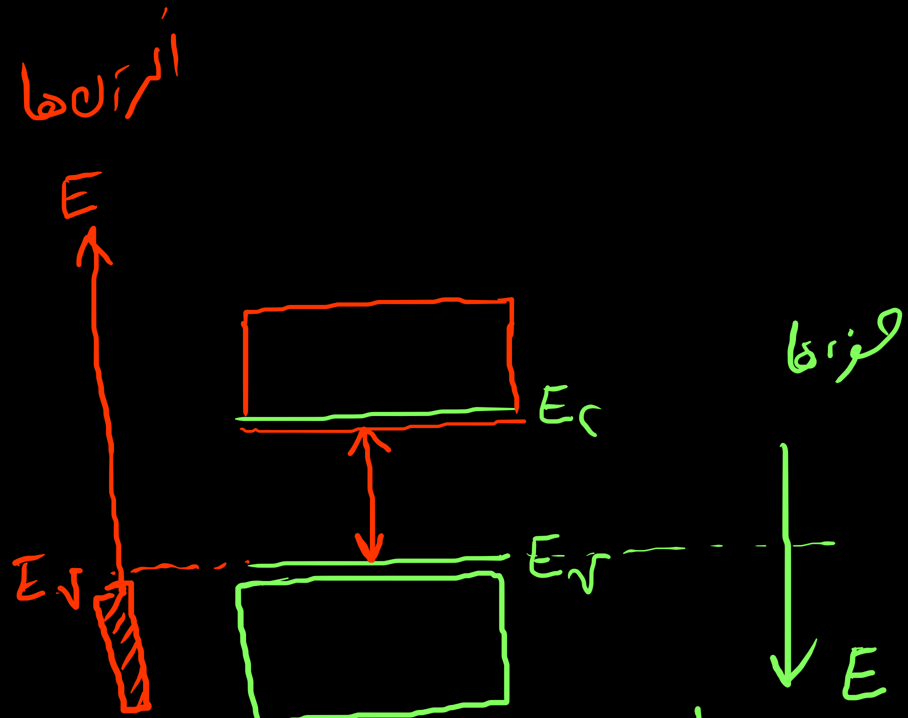
توزیع ترازهای انرژی - چگالی حالات DoS

$$\text{چگالی حالات} = \frac{\text{تعداد حالات}}{\text{بازه انرژی}}$$

تعداد حالات در واحد انرژی = چگالی حالات

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left[\frac{m^*}{\hbar^2}\right]^{3/2}\boxed{\sqrt{E}}$$





توزیع انرژی الکترون‌ها ← تابع فرمی دیراک $f(E)$

توزیع ترازهای انرژی ← $g(E)$

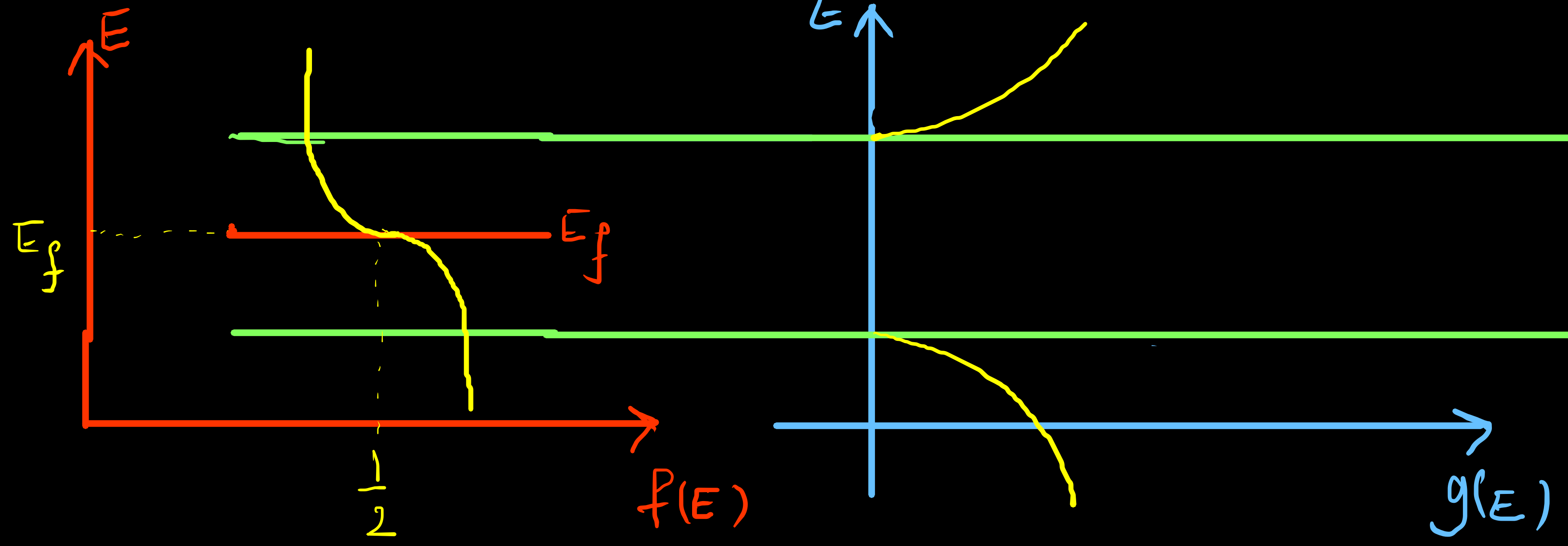
توزیع حالات پر و حالات خالی: $f(E)\,g(E)$

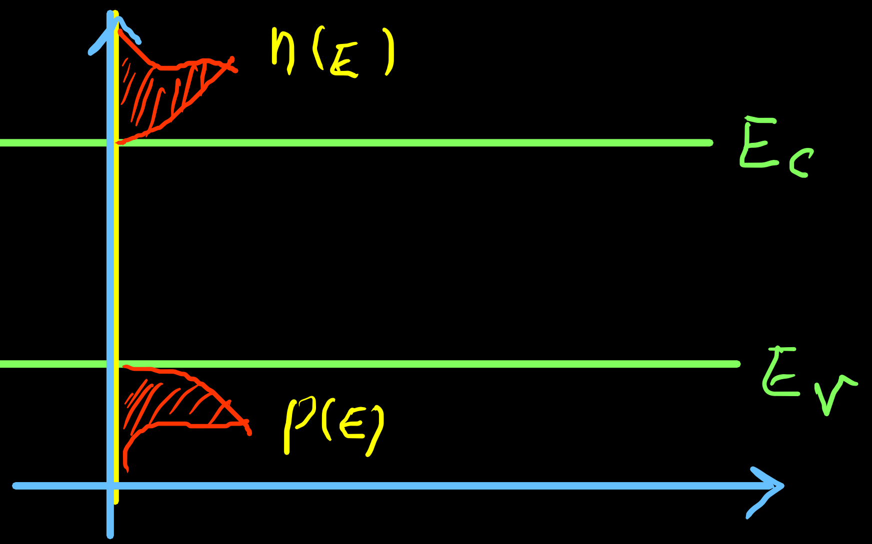
تابع توزیع الکترون‌ها در نوار هدایت:

$$n(E) = f(E)\cdot g_c(E) = \frac{1}{1+e^{(E-E_f)/k_BT}} \times \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left[\frac{m^*}{\hbar^2}\right]^{3/2}\sqrt{E-E_c}$$

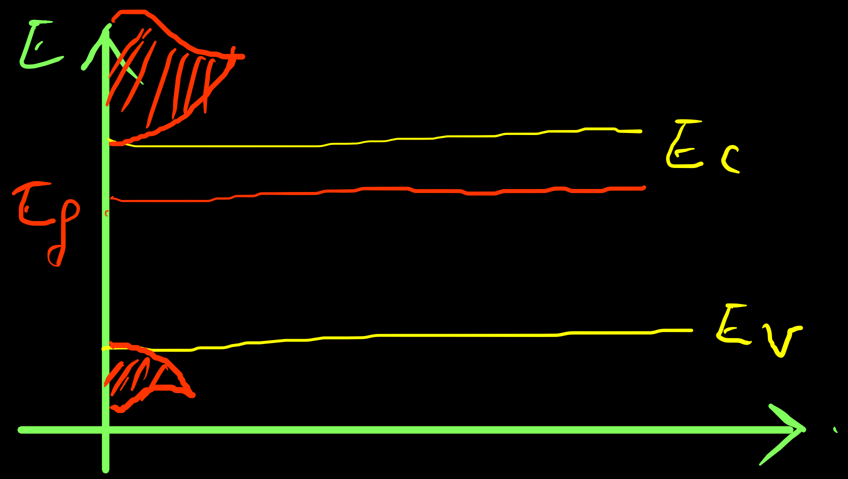
تابع توزیع حفره‌ها در نوار ظرفیت

$$p(E) = [1-f(E)]\,g_v(E) = \left[1-\frac{1}{1+e^{\frac{E-E_f}{k_BT}}}\right]\frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left[\frac{m^*}{\hbar^2}\right]^{3/2}\sqrt{E_v-E}$$

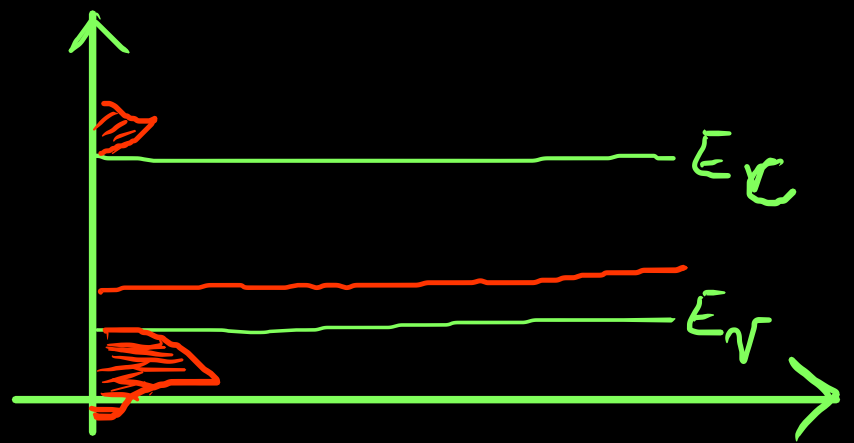




نیم‌رسانای ذاتی



نیم‌رسانای نوع n



نیم‌رسانای نوع p

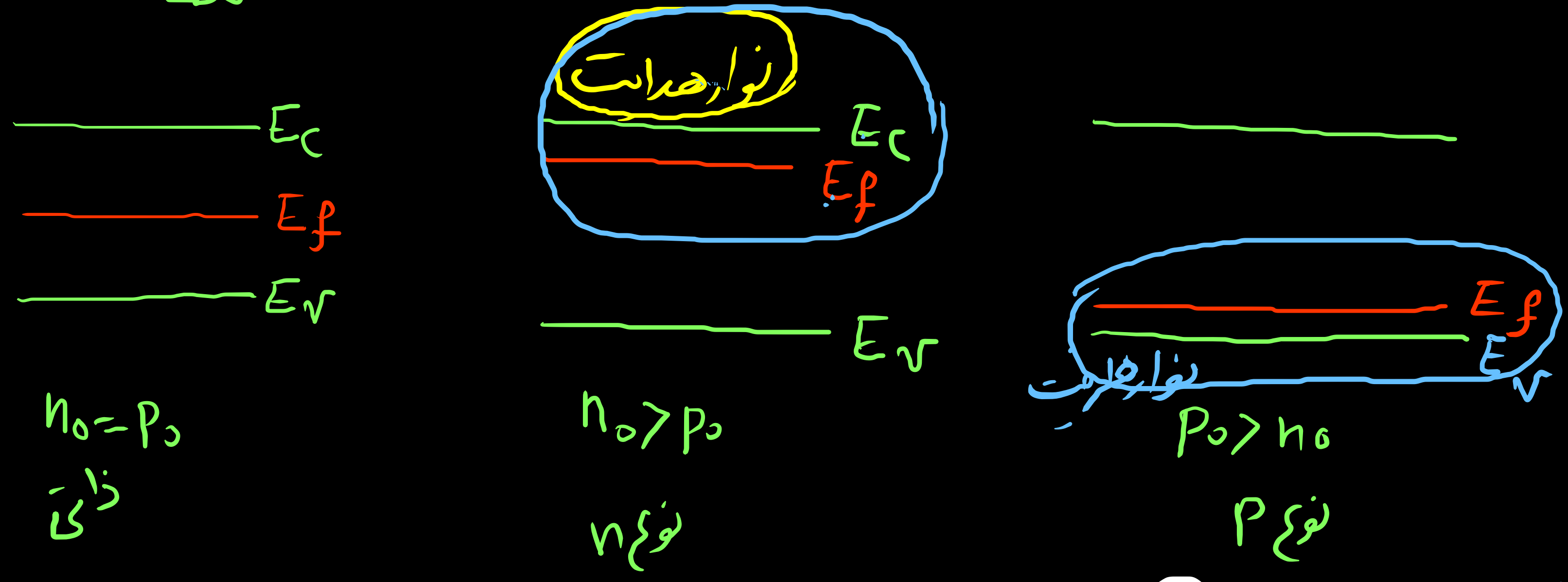
$$n_0=\int_{E_c}^{\infty} f(E)g_c(E)dE=\int_{E_c}^{\infty}\frac{1}{1+e^{\frac{E-E_f}{k_BT}}}\times\frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left[\frac{m_n^*}{\hbar^2}\right]^{3/2}\sqrt{E-E_c}\,dE$$

$$\int_{E_c}^{\infty} e^{\frac{-(E-E_f)}{k_BT}}\times g(E)dE\simeq \boxed{2\left[\frac{m_n^* k_BT}{2\pi\hbar^2}\right]^{3/2}}\, e^{\frac{-(E_c-E_f)}{k_BT}}$$

$$\boxed{n_0\approx \boxed{N_c}\, e^{\frac{-(E_c-E_f)}{k_BT}}}$$

چگالی موثر حالات در نوار هدایت

$$p_0 = \int_{-\infty}^{E_v} [1-f(E)]\, g_v(E)\, dE = 2\left[\frac{m_p^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right]^{3/2} e^{\frac{-(E_f-E_v)}{k_B T}} = N_v\, e^{\frac{-(E_f-E_v)}{k_B T}}$$



① $n_0 = N_c\, e^{\frac{-(E_c-E_f)}{k_B T}}$

② $p_0 = N_v\, e^{\frac{-(E_f-E_v)}{k_B T}}$

④ نیمرسانای ذاتی

E_i , $n_0 = n_i = p_0$

ذاتی

$$\begin{cases} n_i = N_c\, e^{\frac{-(E_c-E_i)}{k_B T}} \\ p_i = n_i = N_v\, e^{\frac{-(E_i-E_v)}{k_B T}} \end{cases}$$

$$p_i = n_i = N_v\, e^{\frac{-(E_i-E_v)}{k_B T}}$$

$$p_0 = N_v\, e^{\frac{-(E_f-E_v)}{k_B T}}$$

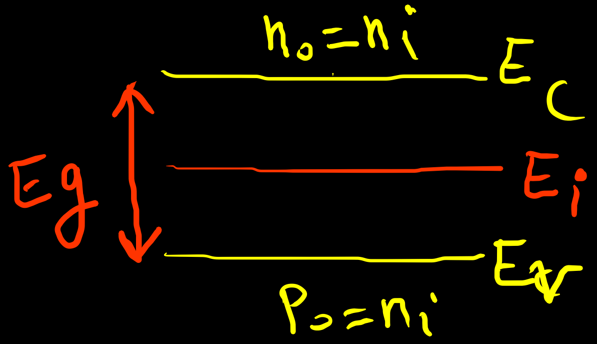
$$\rightarrow \frac{p_0}{p_i} = e^{+\frac{-E_f+\cancel{E_v}+E_i-\cancel{E_v}}{k_B T}} = e^{\frac{E_i-E_f}{k_B T}}$$

$$\boxed{p_0 = n_i\, e^{\frac{E_i-E_f}{k_B T}}}$$

ذاتی $\rightarrow n_i = N_c e^{-\frac{(E_c-E_i)}{k_BT}}$

$\rightarrow n = N_c e^{-\frac{(E_c-E_f)}{k_BT}}$

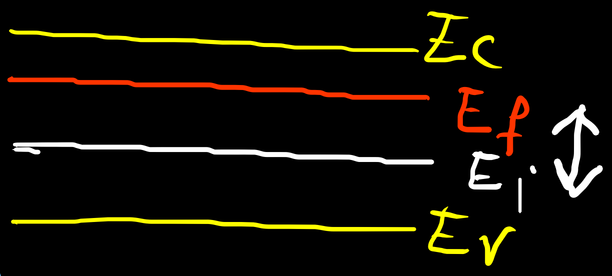
$$\frac{n}{n_i} = e^{\frac{E_f-E_i}{k_BT}} \rightarrow n_0 = n_i e^{\frac{E_f-E_i}{k_BT}}$$



ذاتی

n_i, E_f

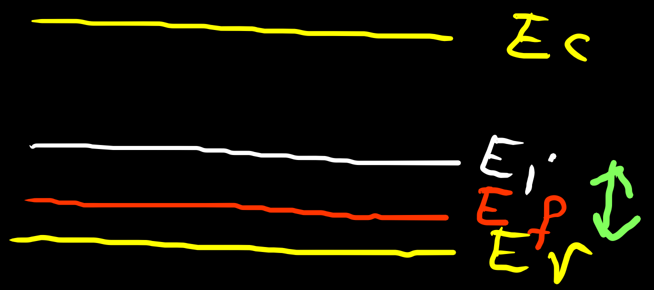
n نوع



(۳)

$$n_0 = \boxed{n_i} e^{\frac{(E_f-\boxed{E_i})}{k_BT}}$$

p نوع



(۴)

$$p_0 = \boxed{n_i} e^{\frac{(\boxed{E_i}-E_f)}{k_BT}}$$

①,②

$$n_0p_0 = N_cN_v e^{-\frac{(E_c-E_v)}{k_BT}} = N_cN_v e^{-\frac{E_g}{k_BT}}$$

ذاتی $\boxed{n_i^2 = N_cN_v e^{-\frac{E_g}{k_BT}}}$

(۳),(۴) $\boxed{n_0p_0 = n_i^2}$

به نام خدا

① $n_0 = N_c e^{\frac{-(E_c - E_f)}{k_B T}}$

② $P_0 = N_v e^{\frac{-(E_f - E_v)}{k_B T}}$

$\xrightarrow{\text{برحسب ذاتی}}$

$$n_0 = n_i e^{\frac{(E_f - E_i)}{k_B T}}$$
$$P_0 = n_i e^{\frac{(E_i - E_f)}{k_B T}}$$

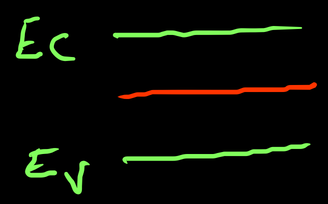
$$\xrightarrow{\otimes} n_0 P_0 = n_i^2$$

نیم‌رسانای ذاتی

$$n_i^2 = N_c N_v e^{\frac{-E_g}{k_B T}} \rightarrow \boxed{n_i = \sqrt{N_c N_v}\, e^{\frac{-E_g}{2 k_B T}}}$$

$$n_0 = P_0 \rightarrow N_c e^{\frac{-(E_c - E_f)}{k_B T}} = N_v e^{\frac{-(E_f - E_v)}{k_B T}} \rightarrow \frac{N_c}{N_v} = e^{-(\overset{E_i}{E_f} - E_v) + (E_c - \overset{E_i}{E_f})}$$

$$\frac{N_c}{N_v} = e^{\frac{E_v + E_c - 2E_i}{k_B T}} \rightarrow \ln\left(\frac{N_c}{N_v}\right) = \frac{E_v + E_c}{k_B T} - \frac{2E_i}{k_B T} \rightarrow E_i = \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right)$$



$$N_{c,v} = 2\left[\frac{m^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right]^{3/2}$$

$$\boxed{E_i = \underbrace{\frac{E_v + E_c}{2}}_{\frac{E_g}{2}} + \frac{k_B T}{2}\left[\frac{m_p^*}{m_n^*}\right]^{3/2}}$$

محاسبه حامل‌های بارها n_0 , p_0

① $n_0 p_0 = n_i^2$

کل بار ② $p_0 + N_D^+ = n_0 + N_A^-$

نوع n :

نوع p :

$$\frac{n_i^2}{n_0} + N_D^+ = n_0 + N_A$$

$$n_0^2 + (N_A^- - N_D^+)\, n_0 - n_i^2 = 0$$

①′

$$\boxed{n_0 = \frac{N_D^+ - N_A^-}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2}}$$

②′

$$\boxed{p_0 = \frac{n_i^2}{n_0}}$$

نوع n

$$n_0 = n_i e^{\frac{(E_f - E_i)}{k_B T}} \rightarrow \frac{n_0}{n_i} = e^{\frac{E_f - E_i}{k_B T}} \rightarrow \ln\left(\frac{n_0}{n_i}\right) = \frac{E_f - E_i}{k_B T} \rightarrow$$

③′

$$\boxed{E_f = k_B T \ln\left(\frac{n_0}{n_i}\right) + E_i}$$

$$\begin{cases} n_0 p_0 = n_i^2 \\ p_0 + N_D = \frac{n_i^2}{p_0} + N_A \end{cases}$$

①″

$$\boxed{p_0 = \frac{N_A - N_D}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2}}$$

③″

$$\boxed{n_0 = \frac{n_i^2}{p_0}}$$

نوع p

$$p_0 = n_i e^{\frac{E_i - E_f}{k_B T}} \qquad \frac{p_0}{n_0} = e^{\frac{E_i - E_f}{k_B T}} \rightarrow \ln\frac{p_0}{n_0} = \frac{E_i - E_f}{k_B T}$$

③″

$$\boxed{E_f = E_i - k_B T \ln\left(\frac{p_0}{n_i}\right)}$$

① نیمرسانای ذاتی:

$$N_A = N_D = 0 \longrightarrow n_0 = p_0 = n_i$$

② نیمرسانای نوع n:

$$\sqrt{(N_D - N_A)^2 + \cancel{4n_i^2}}$$

$$\boxed{|N_D - N_A| \gg n_i} \to |N_D - N_A|$$

$$\boxed{n_0 \simeq N_D - N_A}$$

$$\boxed{p_0 \simeq \frac{n_i^2}{N_D - N_A}}$$

③ نیمرسانای نوع p:

$$\sqrt{\underbrace{(N_A - N_D)^2}_{} + 4n_i^2}$$

$$|N_A - N_D| \gg n_i \longrightarrow \boxed{\begin{aligned} p_0 &\simeq N_A - N_D \\ n_0 &\simeq \frac{n_i^2}{N_A - N_D} \end{aligned}}$$

④

$$|N_A - N_D| \simeq n_i \longrightarrow$$ حل معادله درجه دوم

بنام خدا

$m_p^* = 0.56 m_0$, $m_n^* = 1.08 m_0$, $E_g = 1.11\ eV$, $T = 300K$

مثال: یک نمونه Si آلایش شده با بوران به میزان ناخالصی $10^{16}\ cm^{-3}$ در دمای اتاق موجود است.

آ) n_i ب) n_0, p_0 پ) $E_i - E_f$ ت) $E_f - E_v$ ث) ساختار نوار انرژی

$$آ)\ n_i = \sqrt{N_c N_v}\, e^{\frac{-E_g}{2k_BT}}$$

$$N_c = 2\left[\frac{m_n^* k_BT}{2\pi\hbar^2}\right]^{3/2} = 2\left[\frac{1.08 \times 9.11\times10^{-31} \times 1.38\times10^{-23} \times 300}{2\pi \times (1.05\times10^{-34})^2}\right]^{3/2} = \underbrace{2.8\times10^{25}}_{m^{-3}} = 2.8\times10^{19}\ cm^{-3}$$

$$N_v = 2\left[\frac{m_p^* k_BT}{2\pi\hbar^2}\right]^{3/2} = 1.05\times10^{19}\ cm^{-3}$$

$$n_i = \sqrt{2.8\times10^{19} \times 1.05\times10^{19}} \times e^{-\frac{1.11\ eV}{2\times 0.025\ eV}} \Longrightarrow \underline{n_i = 2.3\times10^{9}\ cm^{-3}}$$

$$ب)\ N_A = 10^{16},\ N_D = 0 \qquad N_A - N_D \gg n_i \qquad p_0 \simeq N_A = 10^{16}\ cm^{-3},\quad n_0 = \frac{n_i^2}{p_0} = \frac{[2.3\times10^{9}]^2}{10^{16}} = 529$$

$$پ)\ p_0 = n_i e^{\frac{E_i - E_f}{k_BT}} \longrightarrow E_i - E_f = k_BT \ln\frac{p_0}{n_i} = 0.025^{eV} \times \ln\frac{10^{16}}{2.3\times10^{9}} = 0.38\ eV$$

$$ت)\ p_0 = N_v e^{\frac{-(E_f - E_v)}{k_BT}} \longrightarrow E_f - E_v = k_BT \ln\frac{N_v}{p_0} = 0.025^{eV} \times \ln\frac{1.05\times10^{19}}{10^{16}} = 0.17\ eV$$