

ΑΠΟ ΤΑ ΑΤΟΜΑ ΣΤΑ ΣΤΕΡΕΑ: ΜΕΤΑΛΛΑ – ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ

To ΕΑΠ είναι υπεύθυνο για την επιμέλεια έκδοσης και την ανάπτυξη των κειμένων σύμφωνα με τη Μεθοδολογία της εξ Αποστάσεως Εκπαίδευσης. Για την επιστημονική αρτιότητα και πληρότητα των συγγραμμάτων, την αποκλειστική ενθύνη φέρουν οι συγγραφείς, κριτικοί αναγνώστες και ακαδημαϊκοί υπεύθυνοι που ανέλαβαν το έργο αυτό.



ΕΛΛΗΝΙΚΟ ΑΝΟΙΚΤΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας

*Πρόγραμμα Σπουδών
ΠΡΟΧΩΡΗΜΕΝΕΣ ΣΠΟΥΔΕΣ ΣΤΗ ΦΥΣΙΚΗ*

*Θεματική Ενότητα
ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΤΑΞΕΩΝ*

ΤΟΜΟΣ Α'

Από τα Άτομα στα Στερεά: Μέταλλα – Ήμιαγωγοί

Ε. Ν. ΟΙΚΟΝΟΜΟΥ

*Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Πανεπιστημίου Κρήτης
Πρόεδρος Δ.Σ. του Ιδρύματος Τεχνολογίας και Έρευνας*

ΠΑΤΡΑ 2000

ΕΛΛΗΝΙΚΟ ΑΝΟΙΚΤΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας

Πρόγραμμα Σπουδών
ΠΡΟΧΩΡΗΜΕΝΕΣ ΣΠΟΥΔΕΣ ΣΤΗ ΦΥΣΙΚΗ

Θεματική Ενότητα
ΔΟΜΗ ΤΗΣ ΥΛΗΣ ΚΑΙ ΤΟΥ ΣΥΜΠΑΝΤΟΣ

Τόμος Α'
Από τα άτομα στα στερεά: μέταλλα – ημιαγωγοί

Συγγραφή
Ε. Ν. ΟΙΚΟΝΟΜΟΥ
Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Πανεπιστημίου Κρήτης
Πρόεδρος Δ.Σ. του Ιδρύματος Τεχνολογίας και Έρευνας

Κριτική Ανάγνωση
ΕΥΘΥΜΙΟΣ ΚΑΞΙΡΑΣ
Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Πανεπιστημίου Harvard

Ακαδημαϊκός Υπεύθυνος για την επιστημονική επιμέλεια των τόμων
ΑΡΙΣΤΕΙΔΗΣ ΖΔΕΤΣΗΣ
Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Πανεπιστημίου Πατρών

Επιμέλεια στη μέθοδο της εκπαίδευσης από απόσταση
ΙΩΑΝΝΗΣ ΠΑΡΘΕΝΙΟΣ

Γλωσσική Επιμέλεια
ΛΙΑΝΑ ΠΕΡΡΑΚΗ

Τεχνική Επιμέλεια – Καλλιτεχνική Επιμέλεια – Στοιχειοθεσία
ΣΟΦΙΑ ΒΛΑΧΟΥ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΕΣ ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΚΡΗΤΗΣ – ΙΔΡΥΜΑ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ & ΕΡΕΥΝΑΣ

Συντονισμός ανάπτυξης εκπαιδευτικού υλικού και γενική επιμέλεια των εκδόσεων
ΟΜΑΔΑ ΕΚΤΕΛΕΣΗΣ ΕΡΓΟΥ ΕΑΠ / 1997-2000

ISBN 960-538-006-4
Κωδικός Έκδοσης: ΠΣΦ 62/1

Copyright 2000 για την Ελλάδα και όλο τον κόσμο
ΕΛΛΗΝΙΚΟ ΑΝΟΙΚΤΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
Οδός Παπαφλέσσα & Υψηλάντη, 262 22 Πάτρα – Τηλ.: 061 314094, 314206 Fax. 061 317244

Σύμφωνα με το Ν. 2121/1993, απαγορεύεται η συνολική ή αποσπασματική αναδημοσίευση
των βιβλίου αντού ή η αναπαραγωγή του με οποιοδήποτε μέσον χωρίς την άδεια του εκδότη.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Πρόλογος του συγγραφέα	xi
Πίν. ΙΙ.1: Τιμές ατομικών ενέργειών	xiii
Πίν. ΙΙ.2: Περιοδικός πίνακας των στοιχείων	xiv
ΜΕΡΟΣ ΠΡΩΤΟ: ΤΟ MONTEΛΟ JELLΙUM	1
Κεφ. 5. ΚΙΝΗΣΗ ΤΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ	
5.1. Κυματαιοθυμός, επιφάνεια, ενέργεια Fermi και ολική κινητική ενέργεια	6
5.2. Δυναμική ενέργεια και ολική ενέργεια	13
5.3. Θεωρητικός υπολογισμός του \bar{r}_s και των λοιπών συναφών φυσικών μεγεθών	14
5.4. Πυκνότητα καταστάσεων	19
5.5. Σύνοψη	24
Κεφ. 6. ΚΙΝΗΣΗ ΤΩΝ ΙΟΝΤΩΝ	
6.1. Τα ηχητικά κύματα ως ιδιοταλαντώσεις του ιοντικού υποστρώματος	30
6.2. Κβαντική θεώρηση	33
6.3. Πυκνότητα φωνονιακών καταστάσεων (ΠΦΚ)	35
6.4. Σύνοψη	39
Κεφ. 7. ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΕΣ ΠΟΣΟΤΗΤΕΣ	
7.1. Πειραματικά δεδομένα	42
7.2. Υπόμνηση μερικών θερμοδυναμικών σχέσεων	44
7.3. Θερμοδυναμικές ποσότητες για ηλεκτρόνια και φωνόνια	45
7.4. Υπολογισμός της θερμοχωρητικότητας	47
7.5. Υπολογισμός του συντελεστή θερμικής διαστολής	56
7.6. Σύνοψη	58
Κεφ. 8. ΑΠΟΚΡΙΣΗ ΣΕ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΠΕΔΙΟ	
8.1. Αγωγιμότητα, επιδεκτικότητα, διηλεκτρική συνάρτηση	62
8.2. Θερμοκρασιακή εξάρτηση της ηλεκτρικής αγωγιμότητας	68

8.3. Η διηλεκτρική συνάρτηση: χρήσεις	73
8.4. Γενικές ιδιότητες της διηλεκτρικής συνάρτησης	79
8.5. Εφαρμογές στα πλαίσια της MJ	82
8.6. Απορρόφηση ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων	90
8.7. Σύνοψη	95
Κεφ. 9. ΑΠΟΚΡΙΣΗ ΣΕ ΆΛΛΕΣ ΔΙΑΤΑΡΑΧΕΣ	
9.1. Πειραματικός προσδιορισμός της κρυσταλλικής δομής	100
9.2. Πειραματικός προσδιορισμός σχέσης διασποράς, $\omega_s = \omega_s(\mathbf{k})$	103
9.3. Θερμική αγωγιμότητα	106
9.4. Θερμοηλεκτρική ισχύς	110
9.5. Σύνοψη	112
Κεφ. 10. ΑΠΟΚΡΙΣΗ ΠΑΡΟΥΣΙΑ ΣΤΑΤΙΚΟΥ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ	
10.1. Φαινόμενο Hall και μαγνητοαντίσταση	116
10.2. Υπολογισμός του συντελεστή Hall στα πλαίσια του MJ	118
10.3. Κβαντικό φαινόμενο Hall	120
10.4. Συντονισμοί	123
10.5. Μαγνητική επιδεκτικότητα	127
10.6. Φαινόμενο de Haas - Van Alphen	132
10.7. Σύνοψη	133
10.8. Συμπληρωματική μελέτη	134
Κεφ. 11. ΕΠΙΛΟΓΟΣ ΣΤΟ ΠΡΩΤΟ ΜΕΡΟΣ	
11.1. Ανεπάρκειες του MJ	135
11.2. Ο όρος ενός ασθενούς περιοδικού δυναμικού	138
11.3. Σύνοψη	141
11.4. Συμπληρωματική μελέτη	142
ΜΕΡΟΣ ΔΕΥΤΕΡΟ: Η ΜΕΘΟΔΟΣ LCAO	
Κεφ. 12. ΓΕΝΙΚΑ ΓΙΑ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ LCAO	
12.1. Πώς η διαφορική εξίσωση του Schrödinger καταλήγει σε ένα γραμμικό ομογενές σύστημα εξισώσεων;	146
12.2. Η βασική σχέση της μεθόδου LCAO	150
12.3. Προσεγγιστικοί τύποι για τα μη διαγώνια στοιχεία	152
12.4. Άλλαγές δάσης	155
12.5. Άλλαγή δάσης μέσω υδριδισμού	159
12.6. Συμπεράσματα	164
12.7. Μονοδιάστατο μοντέλο “ημιαγωγού” με ετεροπολικό χαρακτήρα	166
12.8. Πόσα και ποια ατομικά τροχιακά	169
12.9. Σύνοψη	171
Κεφ. 13. ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ I	
13.1. Εισαγωγικές παρατηρήσεις	174
13.2. Κρυσταλλική δομή τετρασθενών ημιαγωγών	175

13.3. Αλλαγές βάσης (υδριδικά τροχιακά, δεσμικά και αντιδεσμικά τροχιακά)	178
13.4. Ενεργειακές ζώνες και χάσματα	185
13.5. Δομή των ενεργειακών ζωνών	195
13.6. Αρνητικές ενεργές μάζες	203
13.7. Οπές	204
13.8. Διηλεκτρική συνάρτηση	206
13.9. Σύνοψη	212
Κεφ. 14. ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ ΙΙ	
14.1. Σημειακά ελαττώματα	216
14.2. Σημειακές προσμίξεις και ηλεκτρονική δομή	218
14.3. Συγκέντρωση φορέων	226
14.4. Ηλεκτρική αγωγιμότητα και ευκινησία φορέων	232
14.5. Φαινόμενο Hall και μαγνητοαντίσταση	235
14.6. Σύνοψη	237
ΑΠΑΝΤΗΣΕΙΣ ΣΤΙΣ ΑΣΚΗΣΕΙΣ ΑΥΤΟΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ	
Κεφ. 5	243
Κεφ. 6	246
Κεφ. 7	250
Κεφ. 8	253
Κεφ. 9	257
Κεφ. 10	261
Κεφ. 11	263
Κεφ. 12	264
Κεφ. 13	272
Κεφ. 14	279
ΔΥΣΕΙΣ ΤΩΝ ΑΣΚΗΣΕΩΝ	
Κεφ. 5	287
Κεφ. 6	290
Κεφ. 7	291
Κεφ. 8	294
Κεφ. 9	298
Κεφ. 12	299
Κεφ. 13	305
Κεφ. 14	308
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	309
ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ	313

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Όπως ήδη αναφέρθηκε στον πρόλογο του πρώτου τόμου, ο παρόν δεύτερος τόμος απευθύνεται κυρίως προς εκείνους τους φοιτητές που προσανατολίζονται προς το “τρίγωνο” φυσική-χημεία-επιστήμη υλικών και περιέχει τη μελέτη των βασικότερων στερεών δηλαδή των μετάλλων και των ημιαγωγών.

Για τη θεωρητική μελέτη των μετάλλων χρησιμοποιείται το απλοϊκότερο δυνατό μοντέλο, το μοντέλο Jellium (MJ). Το MJ βασίζεται στην απλοποιητική παραδοχή ότι τα ιόντα του μετάλλου έχουν “πολτοποιηθεί” (εξ ου και Jellium) ώστε να παρέχουν ένα ομοιόμορφο θετικό υπόστρωμα που εξουδετερώνει το ηλεκτρονιακό φορτίο το οποίο θεωρείται και αυτό ομοιόμορφα κατανεμημένο. Έτσι το κάθε ηλεκτρόνιο σθένους του μετάλλου δεν δέχεται κατά μέσον όρο καμία δύναμη και κινείται ελεύθερα με σταθερή ορμή και κινητική ενέργεια. Στα πλαίσια του MJ η κίνηση των ιόντων δεν είναι τίποτε άλλο παρά συνήθη ηχητικά κύματα (εγκάρσια ή διαμήκη). Γνωρίζοντας, έστω και προσεγγιστικά, τις κινήσεις των ηλεκτρονίων σθένους και των ιόντων, από τα οποία αποτελείται ένα μέταλλο, είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε τα θερμοδυναμικά μεγέθη του μετάλλου καθώς και την απόκρισή του σε εξωτερικά ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία και σε θερμοκρασιακές διαφορές. Η απόκριση αυτή του μετάλλου σε εξωτερικές διαταραχές απαιτεί την εξοικείωση του φοιτητή με έννοιες όπως η διηλεκτρική συνάρτηση, η ηλεκτρική αγωγιμότητα, η ηλεκτρική ή η μαγνητική επιδεκτικότητα, η μαγνητική διαπερατότητα, η θερμική αγωγιμότητα, η θερμοηλεκτρική ισχύς, η μαγνητοαντίσταση, η τάση Hall, κ.λπ. Οι έννοιες αυτές έχουν ίσως αναφερθεί σε μαθήματα Γενικής Φυσικής ή Ηλεκτρομαγνητισμού. Η πείρα όμως δείχνει ότι ο φοιτητής δεν τις έχει αφομοιώσει και κατά συνέπεια συναντά σημαντικές δυσκολίες. Θα πρέπει λοιπόν να καταδάλει πιο έντονη και εστιασμένη προσπάθεια για τη μελέτη των Κεφ. 8, 9 και 10 και να αναζητήσει πιθανότατα τη βοήθεια ενός έμπειρου συμβούλου.

Το δεύτερο μέρος του παρόντος τόμου αφορά στη θεωρητική μελέτη των ημιαγωγών. Η μέθοδος που ακολουθείται εδώ είναι γνωστή με το όνομα Γραμμικός Συνδυασμός Ατομικών Τροχιακών (Linear Combination of Atomic Orbitals, LCAO) και πιθανόν να την έχει συναντήσει ήδη ο φοιτητής στο μάθημα για μόρια. Πάντως θεωρήθηκε σκόπιμο να παρουσιασθεί στο Κεφ. 12 η μέθοδος εξαρχής και να εφαρμοσθεί πρώτα σε μονοδιάστατα μοντέλα “στερεών” ώστε να μην προσθέσουμε στις σύμφυτες εννοιολογικές δυσκολίες της μεθόδου τις δυσχέρειες που προκύπτουν από τον τριδιάστατο χαρακτήρα των πραγματικών

στερεών. Είναι σημαντικό να ξεκαθαρίσει ο φοιτητής την έννοια της “αλλαγής βάσης” που με τη διαδοχική εφαρμογή της οδηγεί στα λεγόμενα υβριδικά τροχιακά και στη συνέχεια στα δεσμικά και αντιδεσμικά τροχιακά.

Στο επόμενο κεφάλαιο (Κεφ. 13) η μέθοδος LCAO εφαρμόζεται στους τετραεδρικούς ημιαγωγούς (είτε μονοστοιχειακούς όπως το πυρίτιο, είτε σύνθετους, όπως το GaAs) και υπολογίζονται θεαλιστικά τα στοιχεία του πίνακα της χαμιλτονιανής στις διάφορες βάσεις τροχιακών. Οι υπολογισμοί είναι κάπως μακροσκελείς και ενδεχομένως απωθητικοί και δύσκολοι για τον φοιτητή. Κρίνονται όμως απαραίτητοι προκειμένου αυτός να ξεκαθαρίσει τις έννοιες, να αισθανθεί ότι κατανόησε το θέμα και να εκτιμήσει την αξία της μεθόδου LCAO.

Στο κείμενο, φυσικά, περιλαμβάνονται ασκήσεις αυτοαξιολόγησης καθώς και άλλες ασκήσεις. Και για τις μεν και για τις δε υπάρχει απάντηση ή λύση –χωριστά για κάθε μία από τις δύο κατηγορίες – στο τέλος του βιβλίου. Οι ασκήσεις αυτοαξιολόγησης απαιτούν συνήθως μια απλή επανάληψη ή μια απλή εφαρμογή των σχέσεων του κειμένου. Οι άλλες ασκήσεις απαιτούν συχνά μια πιο συνθετική προσπάθεια εκ μέρους του αναγνώστη. Είναι περιττό να τονίσω τη σημασία της επίλυσης των ασκήσεων αυτοαξιολόγησης ή και των ασκήσεων. Όπως είπε ο μεγάλος φυσικός Richard Feynman, “Δεν γνωρίζεις τίποτε μέχρις ότου εξασκηθείς σε αυτό”.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Ε. Καξίδα, ο οποίος, με την ιδιότητά του ως κριτικού αναγνώστη, μου έκανε πολλές εύστοχες παρατηρήσεις. Ευχαριστίες επίσης οφέλω στην κ. Σοφία Σαβδάκη για την εξαίρετη στοιχειοθεσία του κειμένου και στους Θ. Μίχο και Tony Rogers για τον ηλεκτρονικό σχεδιασμό των γραφημάτων.

Παρ’ όλες τις προσπάθειες, είναι πιθανόν να έχουν ξεφύγει τυπογραφικά και άλλα λάθη. Ο συγγραφέας θα είναι ευγνώμων στον προσεκτικό αναγνώστη που θα κάνει τον κόπο να του τα επισημάνει.

Ηράκλειο, Φεδρουάριος 2000
E.N. Οικονόμου
economou@admin.forth.gr