



پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد
رشته‌ی فیزیک ماده چگال

عنوان

محاسبه‌ی ساختار نواری نانو ساختارهای
سیلیکان متخلخل به روش بستگی قوی
تعمیم یافته

استاد راهنما

رضا ثابت داریانی

استاد مشاور

سید اکبر جعفری

دانشجو

مولود کاویانی باغبادرانی

فروردین ۱۳۸۹

تقدیم به پدر و مادرم که عمق محبت
پاکشان مشوق گامهایم بوده است
و خواهر و برادر عزیزم که وجودشان برایم
همه مهر است.

قدردانی و تشکر

هرگز نمی دانیم چه میزان توان اوج گرفتن داریم

مادام که برنخواسته ایم

هرگز نخواهیم دانست اندازه ی قامتمان چقدر است

و آنگاه

اگر بلند شویم و بایستیم

می بینیم که حتی می توانیم تا آسمان ها اوج بگیریم

سپاس بی کران پروردگاریکتا را که هستی ام بخشید و به طریق علم و دانش رهنمونم شد و به همنشینی

رهروان علم و دانش مفتخرم نمود و خوشه چینی از علم و معرفت را روزیم ساخت.

و سپاس فراوان از پدر و مادر عزیزم به پاس زحمتهای بی دریغشان.

از جناب آقای دکتر داریانی به خاطر کمک های ارزشمندشان

همچنین از استاد بی نظیرم، جناب آقای دکتر سید اکبر جعفری چرا که ایشان نه تنها استاد درس و کتاب

بنده بلکه به جد استاد زندگی من نیز بوده و هستند. در هر برخورد با استاد، ایشان را همچون آینه صاف و

شفاف یافته ام و این حدیث شریف در ذهنم تداعی شد که : «المومن مرات المومن».

از جناب آقای دکتر *AlexanderWeisse* از دانشگاه *Greifswald* که در تمام طول این دوره صبورانه

راهنمای من بودند.

همچنین لازم می دانم از جناب آقای دکتر حسین حکیمی پژوه به خاطر راهنمایی های عالمانه و

دقت های موشکافانه اشان و آقای کاوه حقیقی و سرکار خانم آسیه کرمی به خاطر راهنمایی های بسیار

ارزشمندشان که در طول این دوره از محبت های ایشان بهره مند بودم تشکر کنم.

چکیده

محاسبه‌ی ساختار الکترونیکی مواد مختلف، و توابع طیفی مختلف این مواد برای اندازه‌های بزرگتر موضوع مطالعات گسترده بوده است. در این پژوهش روش چند جمله‌ای مغزی (*Kernel Polynomial Method*) که به اختصار *KPM* می‌نامیم را برای بررسی حالت‌های الکترونی تهی‌جاها با ابعاد مختلف در شبکه‌ی سیلیکان به کار می‌بریم. مزیت این روش در آن است که بدون آنکه نیاز به قطری کردن ماتریسی باشد، با روش‌های کاتوره‌ای چگالی حالات به دست می‌آید. معمولاً این روش برای مدل‌های تنگ‌بست تک الکترونی به کار رفته است. در این پژوهش ما این روش را برای سیلیکان که در آن حداقل چهار ارییتال به ازای هر سایت شبکه دخیل هستند تعمیم می‌دهیم. پارامترهای تنگ‌بست مورد استفاده در این پژوهش چنان انتخاب شده اند که ساختار نواری حاصل از روش *KPM* با محاسبات اصل اولیه منطبق باشد. این تعمیم می‌تواند به عنوان بستری برای بررسی اثرات بی‌نظمی و تخلخل برای هر ماده‌ی معین در نظر گرفته شود.

ایده‌ی وارد کردن تهی‌جاها می‌تواند برای تشریح نانو ساختارها مورد توجه قرار گیرد. چنانچه در این پایان‌نامه سعی شده با افزودن تعداد تهی‌جاها یک شبکه‌ی بلوری را به یک ساختار متخلخل به ابعاد نانو تبدیل کرد. اندازه‌گیری چگالی حالات ساختارهای بدست آمده تاییدی بر عملیات انجام شده می‌باشد.

فهرست

چکیده ۵

۱ نیم رساناها

۱.۱ ساختار الماسی ۳

۲.۱ عناصر نیم رساناها ۴

۱.۲.۱ پیوند های چهار وجهی در بلور سیلیکان ۶

۲.۲.۱ نوارهای انرژی سیلیکان ۱۰

۳.۲.۱ سیلیکان متخلخل ۱۲

۲ ساختار نواری بلورها

۱.۲ روش بستگی قوی برای جامدات ۱۵

۲.۲ تقریب دو مرکزی ۱۸

۳.۲ مثال ها ۲۱

۱.۳.۲ زنجیره ی یک بعدی با اربیتال های s یا p ۲۱

۲۵	شبکه ی مربعی دوبعدی با اربیتال های s و p	۲.۳.۲
۲۸	رابطه ی پاشندگی انرژی برای نوارهای s و p در گرافیت $2D$	۳.۳.۲
۳۵	تعمیم تقریب بستگی قوی	۴.۲
۴۱	اربیتال ها با زوج شدگی دلخواه	۱.۴.۲
۴۲	ماتریس همپوشان غیر قطری:	۲.۴.۲
۴۲	اربیتال های برانگیخته	۳.۴.۲

۳ چند جمله ای های مغزی

۴۳	بسط چیشف	۱.۳
۴۸	محاسبه ی گشتاورها	۲.۳
۵۱	فاکتورهای گیس	۳.۳
۵۳	کاربردهای KPM	۴.۳

۴ محاسبه ی چگالی حالات سیلیکان و سیلیکان متخلخل به روش KPM

۷۰	نتیجه و جمع بندی	
----	----------------------------	--

فصل اول

نیم رساناها

جامدات از نظر آرایش بلوری به سه دسته تقسیم می‌شوند. دسته‌ی اول جامدات بلوری^۱ دسته‌ی دوم جامدات بس بلوری^۲ یا نیمه بلوری و دسته‌ی سوم جامدات بی‌شکل^۳ می‌باشند. یک جامد بلوری دارای این خصوصیت است که اتم‌های تشکیل دهنده‌ی آن در یک شکل تناوبی قرار گرفته‌اند که این آرایش متناوب در یک بلور را شبکه می‌نامند [۱]. در فضای سه بعدی گروه‌های تقارنی نقطه‌ای وجود چهارده نوع شبکه‌ی گوناگون سه بعدی براوه را ایجاد می‌کند. شکل (۱-۱) [۲]. در بین این چهارده شبکه‌ی براوه در فضای سه بعدی سه شبکه‌ی مکعبی وجود دارد:

(a) شبکه‌ی مکعبی ساده^۴، که تعداد همسایه‌های اول در آن ۶ می‌باشد. شکل (الف-۱-۲).

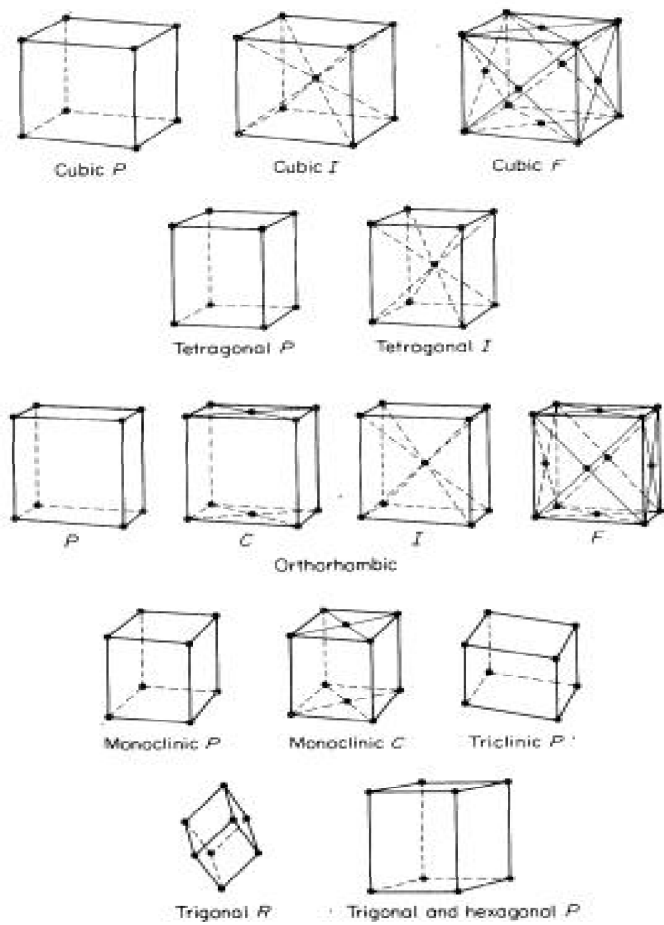
(b) شبکه‌ی مکعبی مرکز حجمی^۵، که تعداد همسایه‌های اول در آن ۸ می‌باشد. شکل (ب)

— (۱-۲).

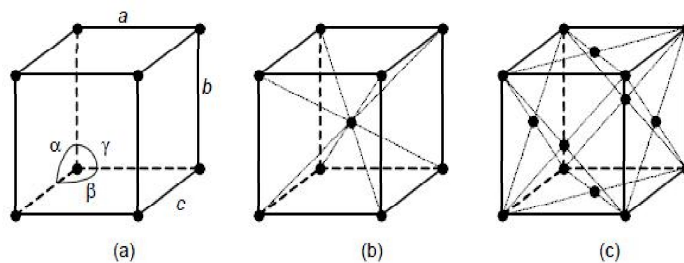
(c) شبکه‌ی مکعبی مرکز وجهی^۶، که تعداد همسایه‌های اول در آن ۱۲ می‌باشد. شکل (ج)

— (۱-۲).

-
- Crystal^۱
 - Polycrystalline^۲
 - Amorphous^۳
 - Simple Cubic^۴
 - Body Center Cubic^۵
 - Face Center Cubic^۶



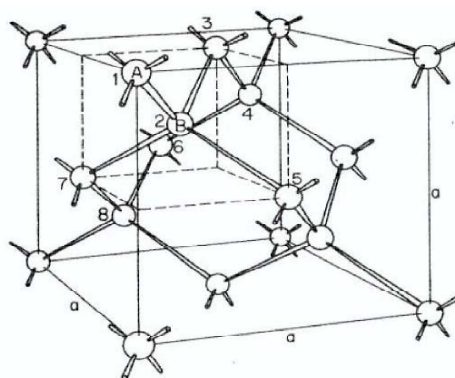
شکل ۱-۱ شبکه‌های براوهی سه بعدی [۳].



شکل ۱-۲ (a) شبکه‌ی مکعبی ساده (b) شبکه‌ی مکعبی بدنه مرکز دار (c) شبکه‌ی مکعبی وجه مرکز دار [۴].

۱.۱ ساختار الماسی

ساختارهای بلوری همیشه به وسیله‌ی شبکه‌های براوه توجیه نمی‌شوند بلکه گاهی ساختار شبکه‌ی پایه ترکیبی از این شبکه‌های براوه می‌باشد. مثلاً در شبکه‌ی الماسی چنین حالتی رخ می‌دهد. در واقع شبکه‌ی الماسی از تداخل دو شبکه‌ی fcc به وجود آمده که به اندازه‌ی $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$ ، $(\frac{3a}{4}, \frac{3a}{4}, \frac{3a}{4})$ نسبت به هم در راستای قطر اصلی جابه‌جا شده اند شکل (۱-۳).

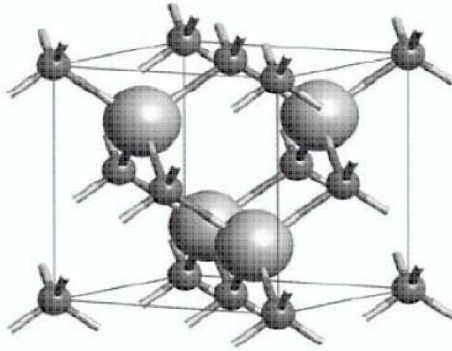


شکل ۱-۳ شبکه‌ی الماسی [۴].

در این نوع ساختار اگر اتم‌های fcc اول از یک نوع و fcc دوم از نوع دیگری باشند ساختار را بلند روی γ گویند شکل (۱-۴).

شبکه‌ی الماسی ساختار شبکه‌ی اغلب نیم رساناهای مهم از جمله Si و Ge است. در واقع نیم رساناها گروهی از مواد هستند که رسانایی الکتریکی آنها بین فلزات و عایق‌ها قرار دارد. ویژگی مهم این مواد این است که رسانایی آنها با تغییر دما، برانگیزش نوری و میزان ناخالصی به نحو قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند.

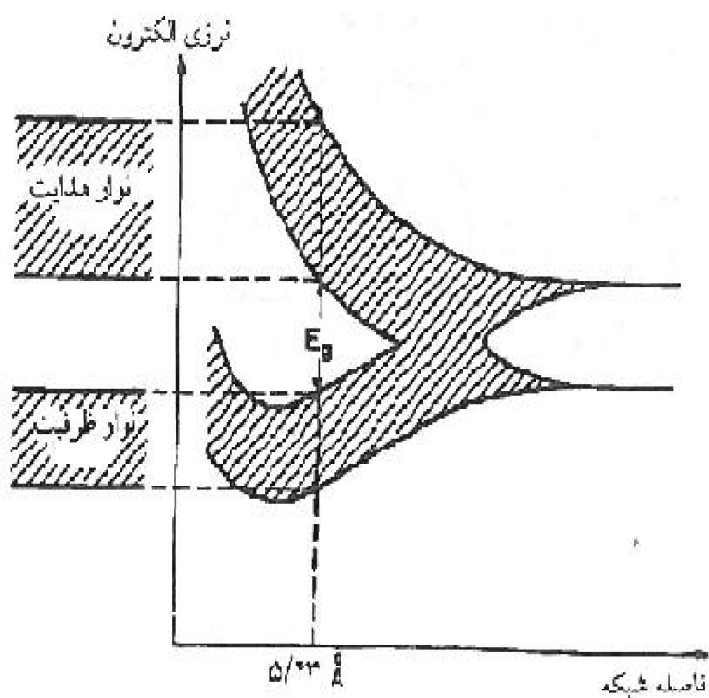
Zinc Blend γ



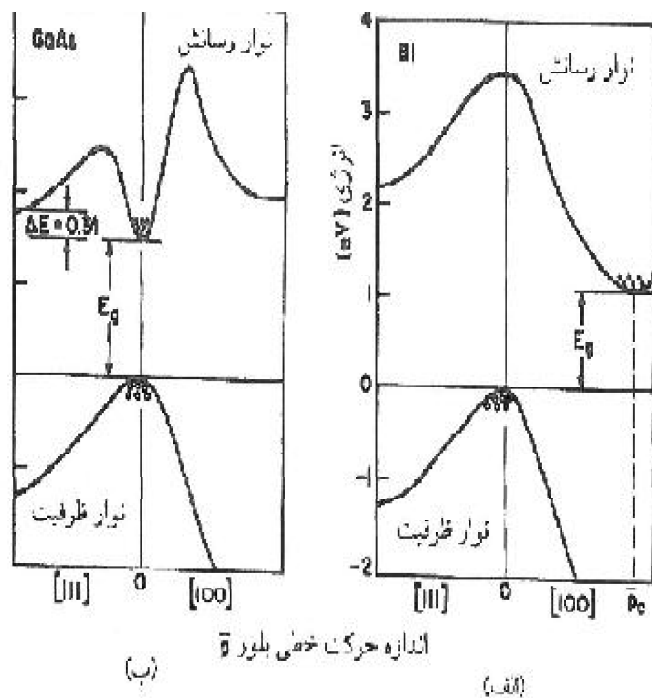
شکل ۱-۴ شبکه‌ی سولفید روی [۴].

۲.۱ عناصر نیم رساناها

مواد نیم رسانا عناصر ستون چهارم جدول تناوبی یا ترکیبی از عناصر ستون های مجاور آن هستند. در واقع نیم رساناها جزو عناصری هستند که ساختار بلوری دارند و ساختار شبکه برای اغلب نیم رساناهای مهم شبکه‌ی الماسی است. البته در بسیاری از نیم رساناهای ترکیبی همانند $GaAs$ پیوندهای مختلطی وجود دارد که در آن هر دو نیروی پیوندی یونی و کووالانسی مشارکت دارند. برای تشکیل یک جامد بلوری اتم ها به گونه ای کنار هم قرار می‌گیرند که ترازهای انرژی تقسیم شده نوارهای پیوسته ی انرژی را تشکیل می‌دهند. در فاصله ی بین این نوارهای انرژی مناطقی قرار دارد که حضور الکترون ها در آن مناطق غیر مجاز است و الکترونی در آن نواحی وجود ندارد. به این مناطق ، مناطق ممنوعه یا گاف انرژی گفته می‌شود. در واقع الکترون در جامد فقط می‌تواند مقادیر معینی از انرژی را بپذیرد. هر نوار انرژی مجاز شامل تعداد محدودی حالت است که می‌تواند تعداد معینی الکترون را در خود جای دهد. در نیم رساناها الکترون های ظرفیت ترازهای انرژی موسوم به نوار ظرفیت را اشغال می‌کنند. نوار انرژی مجاز بعدی موسوم به نوار رسانش ، به اندازه ی گاف انرژی E_g از نوار قبلی فاصله دارد (شکل (۱-۵)). در نیم رساناها کوچک بودن E_g سبب می‌شود که در دمای اتاق برخی از الکترون های ظرفیت انرژی گرمایی کافی دریافت کنند و بر گاف ممنوعه غلبه کرده و به نوار رسانش برسند [۵].



شکل ۱-۵ تشکیل نوارهای انرژی وقتی که، بلور شبکه‌ی الماسی با نزدیک کردن اتم‌های مجزای سیلیکان تشکیل می‌شود [۶].



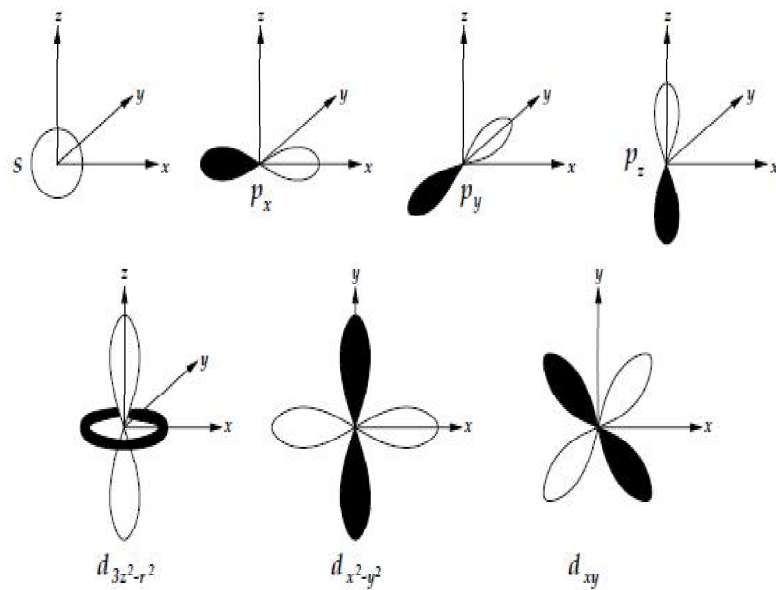
شکل ۱-۶ شکل سمت راست نیم رسانایی با گاف غیر مستقیم و شکل سمت چپ نیم رسانای با گاف مستقیم را نشان می‌دهد [۶].

معمولاً نیم رساناها را به دو دسته‌ی با گاف مستقیم و غیر مستقیم تقسیم بندی می‌کنند. وقتی در فضای k کمینه نوار رسانایی منطبق با بیشینه نوار ظرفیت گردد، نیم رسانا را نیم رسانای با گاف مستقیم می‌گویند. در گذار مستقیم همانطور که در شکل (۱-۷) دیده می‌شود فقط تغییر انرژی رخ می‌دهد و عدد موج k (یا مومنتوم $p = \hbar k$) تغییر نمی‌کند. از طرف دیگر وقتی کمینه نوار رسانایی در فضای k منطبق با بیشینه نوار ظرفیت نباشد دارای نیم رسانایی با گاف غیر مستقیم هستیم. شکل (۱-۶) در این نوع از نیم رساناها برای رفتن الکترون از نوار رسانش به ظرفیت و بر عکس احتیاج به تغییر در عدد موج k داریم [۶].

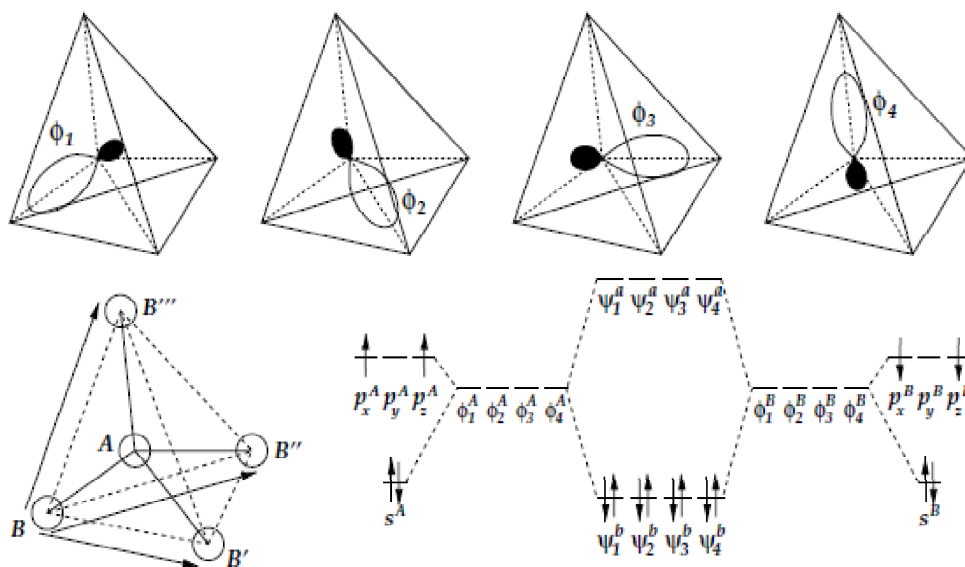
۱.۲.۱ پیوند های چهار وجهی در بلور سیلیکان

پیکربندی الکترونی اتم کربن منزوی $1s^2, 2s^2, 2p^2$ است. در بلور الماس در هر یاخته ی یکه ی بسیط دو اتم کربن و در نتیجه هشت الکترون ظرفیت موجود است. در واقع عناصر ستون های سمت راست جدول تناوبی دارای چهار اربیتال اتمی ظرفیت هستند. یک حالت s که متقارن کروی است و سه حالت p که دارای تقارن x و y و z -گونه هستند. چنین اربیتال هایی در شکل (۱-۷) نشان داده شده اند. که در آن سطحی که روی آن دامنه ی هر اربیتال اتمی مقدار ثابتی دارد، رسم شده است [۱۰].

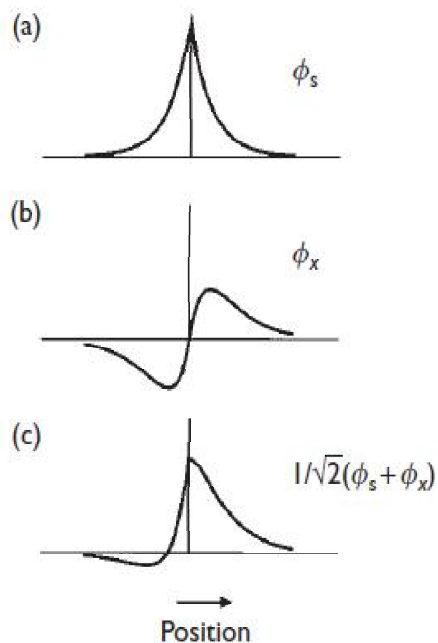
برای این که فهم ساده ای از نحوه ی پیوند در نیم رساناهای چهار وجهی مانند Si حاصل کنیم از پایه ی اربیتال های اتمی به پایه ی اربیتال های هیبریدی جهت دار متشکل از یک اربیتال s و سه اربیتال p که به اربیتال های sp^3 معروف اند، تغییر پایه می‌دهیم. حالت های هیبریدی از ترکیب خطی اربیتال های یک اتم خاص تشکیل می‌شوند و می‌توان این ترکیب خطی را چنان برگزید که اربیتال هایی کاملاً جهت دار به دست آوریم که دامنه ی آنها در راستای نزدیک ترین همسایه ها بیشینه باشد. به عنوان مثال یک حالت s -گونه φ_s و یک حالت p_x -گونه φ_x که دامنه ی آنها در راستای محور x مطابق شکل ۱-۹ (a) و (b) تغییر می‌کند را در نظر می‌گیریم جمع این دو اربیتال به صورت $(\varphi_s(r) + \varphi_x(r)) * \frac{1}{\sqrt{2}}$ ، حالت هیبریدی شکل ۱-۸ (c) را به دست می‌دهد که بیشینه دامنه ی آن برای $x > 0$ است. و مقدار دامنه ی این بیشینه ی از هر دو اربیتال تشکیل دهنده اش بیشتر است.



شکل ۷-۱ نمایشی از اربیتال های اتمی s و p و d . لب های با علامت مخالف اربیتال های p_x و p_y و p_z و d_{xy} و $d_{x(2)-y(2)}$ با رنگ مشکی و سفید سایه خورده اند. اربیتال های d_{yz} و d_{zx} و مشابه با اربیتال d_{xy} هستند با این تفاوت که در صفحات yz و zx قرار گرفته اند [۱۰].



شکل ۸-۱ نمایش دهنده ی پیوندهای والانس در الماس. قسمت بالا: نمایشی از ترکیب خطی sp^3 از اربیتال های اتمی s و p برای ساختار الماسی. قسمت پایین: در سمت چپ، اتم A در مرکز چهاروجهی تشکیل شده از چهار اتم یکسان B, B', B'', B''' است و در سمت راست دیاگرام تراز انرژی برای حالت های اتمی s و p و ترکیب خطی sp^3 آنها [۱۰].



شکل ۱-۹ دامنه‌ی یک اربیتال هیبریدی (c) متشکل از ترکیب خطی یک حالت s و یک حالت p_x (b) در راستای x ، از هر دوی حالت‌های تشکیل دهنده آن بیشتر است [۷].

چهار اربیتال هیبریدی مناسب برای اتم Si عبارتند از:

$$\psi_1 = \frac{1}{2}[\varphi_s(r) + \varphi_x(r) + \varphi_y(r) + \varphi_z(r)]$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2}[\varphi_s(r) - \varphi_x(r) - \varphi_y(r) - \varphi_z(r)]$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2}[\varphi_s(r) + \varphi_x(r) + \varphi_y(r) - \varphi_z(r)]$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2}[\varphi_s(r) - \varphi_x(r) - \varphi_y(r) + \varphi_z(r)]$$

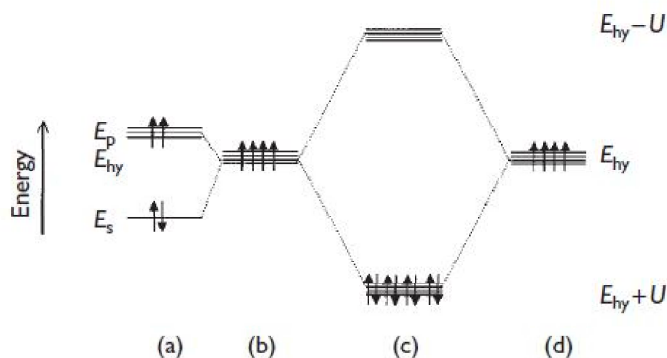
یک اتم Si منزوی دارای چهار الکترون ظرفیت است که دوتای آنها در اربیتال اتمی s در انرژی E_s ، و دوتای در حالت‌های p با انرژی بالاتر E_p ، قرار دارند. اربیتال‌های هیبریدی ویژه حالت‌های (ویژه

توابع) یک اتم ایزوله نمی‌باشند، انرژی آنها E_h است که می‌توان آن را به عنوان مثال برای حالت هیبریدی $\psi_1(r)$ محاسبه کرد:

$$\begin{aligned}
 E_p &= \int d^3r \psi_1^*(r) H_0 \psi_1(r) \\
 &= \frac{1}{4} \int d^3r [\varphi_s^*(r) + \varphi_x^*(r) + \varphi_y^*(r) + \varphi_z^*(r)] \times H_0 [\varphi_s(r) + \varphi_x(r) + \varphi_y(r) + \varphi_z(r)],
 \end{aligned}
 \tag{۱}$$

که در آن H_0 هامیلتونی اتم ایزوله می‌باشد. از آنجایی که اربیتال های s و p ترازهای انرژی مجاز اتم ایزوله می‌باشند، و لذا به هم متعامدند، بسیاری از جملات صفر می‌شوند و آنچه باقی می‌ماند عبارت است از

$$\begin{aligned}
 E_h &= \frac{1}{4} \int d^3r [\varphi_s^*(r) H_0 \varphi_s(r) + \varphi_x^*(r) H_0 \varphi_x(r) + \varphi_y^*(r) H_0 \varphi_y(r) + \varphi_z^*(r) H_0 \varphi_z(r)], \\
 &= \frac{1}{4} (E_s + 3E_p).
 \end{aligned}
 \tag{۲}$$



شکل ۱-۱۰ (a) یک اتم ایزوله ی Si دارای دو الکترون در یک تراز s گونه (با انرژی E_s) می‌باشد و دو الکترون p گونه نیز در حالت‌های p (واقع در انرژی E_p) دارد. (b) تشکیل چهار اربیتال هیبریدی در انرژی E_{hy} که هر اربیتال یک الکترون در خود جای داده باشد مستلزم پرداخت هزینه ی انرژی است. اما هر اربیتال هیبریدی قادر خواهد بود که با اربیتال هیبریدی اتم Si مجاور خود برهم کنش کند (d) تا یک حالت قویا پیوندی در انرژی $E_{hy} - |U|$ تشکیل دهد (c) [۷].

انرژی چهار الکترون در پایین ترین ترازهای اتمی $2E_s + 2E_p$ بود، در حالی که انرژی آنها در اربیتال

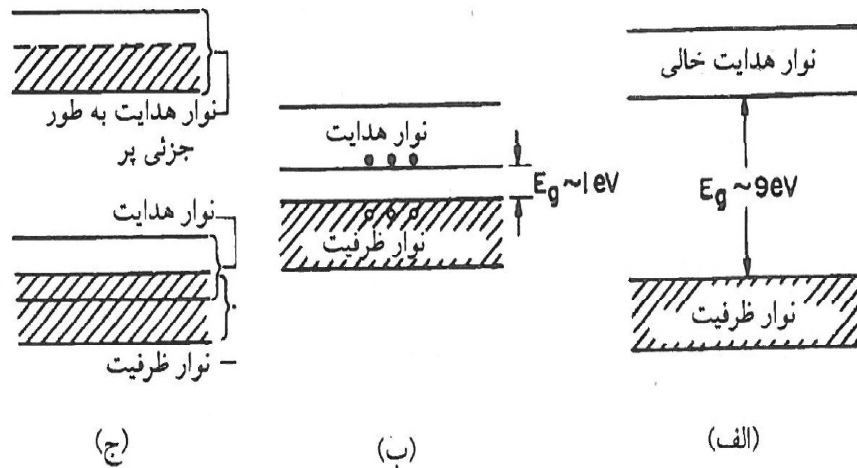
های هیبریدی sp^3 برابر $E_s + 3E_p$ است که در شکل (۱-۱۰) نمایش داده شده است. بنابراین تشکیل

اربیتال های هیبریدی sp^3 نیاز به انرژی دارد، ولی وقتی که چنین اربیتال هایی تشکیل می شوند، هر کدام از آنها با یک اربیتال هیبریدی اتم مجاور قویا برهمکنش می کند و این امر منجر به تشکیل حالت های پیوندی پر و حالت های پاد پیوندی خالی می گردد که از این طریق انرژی هر اتم به اندازه $4|U|$ کاهش می یابد، که در آن U انرژی برهمکنش هیبریدی است و لذا افزایش خالص انرژی پیوندی در Si چهار وجهی $|E_s| - |E_p| + 4|U|$ به ازای هر اتم خواهد بود. البته، علاوه بر برهمکنش بین دو اربیتال هم-راستا که در نظر گرفته ایم، برهم کنش های بسیاری بین اربیتال های هیبریدی مختلف وجود دارند. این برهم کنش هایی که از آنها صرف نظر شده ترازهای پر پیوندی را به نوار ظرفیت متشکل از حالت های خالی تبدیل می کند. با این حال، تصویر اربیتال هیبریدی که در اینجا ارائه شد، توضیح قانع کننده ای از ساختار بلوری نیم رساناهایی که دارای پیوند چهار وجهی هستند ارائه می کند و همچنین اطلاعاتی در مورد روند تغییرات برخی از خواص نیم رساناها فراهم می کند [۷].

۲.۲.۱ نوارهای انرژی سیلیکان

برای بررسی بیشتر نوارهای انرژی در Si می توان دو اتم یکسان را در نظر گرفت. وقتی این اتم ها خیلی از هم دور باشند، ترازهای انرژی مجاز برای یک عدد کوانتومی اصلی معین (مثلا $n = 1$) شامل یک سطح تبهگن دوگانه می باشد. وقتی دو اتم به یکدیگر نزدیک می شوند، ترازهای انرژی تبهگن دوگانه در اثر برهم کنش بین اتم ها به دو تراز تقسیم خواهد شد. حال وقتی N اتم را برای تشکیل بلور به هم نزدیک می کنیم، تراز انرژی تبهگن N تایی به خاطر برهم کنش اتمی به N تراز اما با فواصل خیلی نزدیک تقسیم می شود. این به تراز انرژی اساسا پیوسته منجر می شود. هر اتم مجزا دارای سطوح انرژی مجزای خود می باشد (دو تراز که در منتهی الیه راست نمودار (۱-۵) نشان داده شده اند). ضمن کاهش فواصل بین اتمی هر تراز انرژی تبهگن برای تشکیل نوار تقسیم می شود. وقتی فاصله ی بین اتم ها به فواصل بین اتمی، در حال تعادل شبکه ی الماسی (با ثابت شبکه ی $5/43 \text{ \AA}$ برای سیلیکان) نزدیک می شود، این نوار مجدداً به دو نوار تقسیم می شود. این نوارها توسط ناحیه ای با انرژی های خاص که الکترون های جامدات نمی توانند دارای آن انرژیها باشند از یکدیگر جدا می شوند. این ناحیه،

شکاف ممنوعه یا گاف نواری E_g نامیده می‌شود. نوار بالاتر، نوار رسانش نامیده می‌شود، در حالی که نوار پایینی نوار ظرفیت نامیده می‌شود.



شکل ۱۱-۱ نمایش طرح نوارهای انرژی: (الف) نارسانا، (ب) نیمرسانا، (ج) رسانا [۶].

شکل ۱۱ نمودارهای نوار انرژی سه دسته جامدهای نارسانا، نیم رسانا و رسانا را نشان می‌دهد. در نارساناهایی نظیر اکسید سیلیکان (SiO_2)، الکترون‌های ظرفیت بین اتم‌های همسایه پیوند‌های قوی تشکیل می‌دهند. این پیوندها به سختی می‌شکنند و در نتیجه هیچ الکترون آزادی برای شرکت در جریان رسانش وجود ندارد. همانطور که در نمودار نوار انرژی شکل (الف-۱۱) نشان داده شده گاف نواری بزرگی وجود دارد. در واقع تمام ترازهای انرژی در نوار ظرفیت با الکترون‌ها اشغال شده است و تمام سطوح انرژی در نوار رسانش خالی هستند. انرژی گرمایی یا میدان الکتریکی اعمال شده نمی‌تواند بالاترین الکترون‌های تراز ظرفیت را به نوار رسانش منتقل کند. بنابراین (SiO_2) نارسانا است و نمی‌تواند جریان را هدایت کند. پیوندهای اتم‌های همسایه در نیم رسانا فقط به صورت متوسط قوی هستند. بنابراین، ارتعاشات گرمایی چنین پیوندهایی را خواهد شکست. وقتی پیوندی شکسته می‌شود یک الکترون آزاد همراه با یک حفره‌ی آزاد حاصل می‌شوند. شکل (ب-۱۱) نشان می‌دهد که گاف نواری نیم رسانا به بزرگی گاف نواری نارسانا نمی‌باشد. به همین خاطر، تعدادی الکترون قادر خواهند بود از نوار ظرفیت به نوار رسانش منتقل شوند. که در نتیجه در نوار ظرفیت حفره‌هایی به جا می‌گذارند. در رساناهایی همچون فلزات، شکل (ج-۱۱)، نوار رسانش یا به طور جزئی پر است یا با نوار ظرفیت روی هم می‌

افتند، به طوری که هیچ گاف نواری وجود ندارد. در نتیجه، بالاترین الکترون های واقع در نوار به طور جزئی پریا الکترون های واقع در قسمت بالای نوار ظرفیت وقتی انرژی جنبشی کسب می کنند می توانند به نوار مناسب بالاتر بعدی حرکت کنند [۶].

۳.۲.۱ سیلیکان متخلخل

یکی از مهمترین نیم رساناهایی که به دلیل کاربرد زیاد مورد بررسی قرار می گیرد Si است. این عنصر دارای خواص اپتیکی ضعیفی است و به همین دلیل جایگاهی در کاربردهای اپتیکی ندارد. معمولاً نیم رساناهایی چون $GaAs$ که از جمله نیم رساناهای ترکیبی، با گاف مستقیم است در ابزار اپتیکی مورد استفاده قرار می گیرد.

گسیل نور وقتی اتفاق می افتد که انرژی بازترکیب الکترون حفره به صورت یک فوتون پس داده می شود. در ضمن در طی فرایند بازترکیب بقای انرژی و تکانه نیز باید حفظ شود. در نیم رساناهای گاف مستقیم، از آنجائیکه کمینه نوار رسانش و بیشینه نوار ظرفیت در یک مقدار یکسان k (عدد موج) هستند، در بازترکیب الکترون حفره تکانه ثابت مانده و خواص اپتیکی در این نیم رساناها بارز است. اما در نیم رساناهای گاف غیر مستقیم کمینه نوار رسانش و بیشینه نوار ظرفیت در k های مختلف اتفاق می افتد. بنابراین تکانه در طی گسیل یا جذب فوتون به تنهایی نمی تواند ثابت باقی بماند، بلکه برای بقای تکانه به گسیل یا جذب ذره ی دیگری مثل فوتون احتیاج است. به همین دلیل گسیل نوار از Si حجمی خالص در شرایط عادی خیلی ضعیف تر از نیم رساناهای ترکیبی گاف مستقیم است.

یک راه برای رسیدن به احتمال بازترکیب بین نواری همراه با تشعشع خیلی ضعیف در Si ، وارد کردن ناخالصی های فعال اپتیکی است. روش دیگر کوچک کردن ساختار Si به حدی که اثرات کوانتومی در ساختار نواری به کار آید که به آن ساختار سیلیکان متخلخل می گویند.

به زبان ساده، سیلیکان متخلخل مجموعه ای از منطقه های سیلیکان در اندازه های نانومتر است که به وسیله ی فضای خالی محصور شده اند. لایه های سیلیکان متخلخل معمولاً به وسیله ی آندیزاسیون الکتروشیمیایی سطح یک ویفر سیلیکان تهیه می شود. به این ترتیب که درون یک سلول تفلون الکترولیت که مخلوطی از اسید هیدروفلوریک، آب و اتانول است، اسید به عنوان ماده ی اصلی سونش (خوردگی)

است و اتانول برای کاتالیزور به کار می‌رود، کاتد از جنس پلاتین (مقاوم در برابر اسید) و آند نیز ویفر سیلیکان است که به عنوان زیر لایه از آن استفاده می‌شود. درصد تخلخل و شکل خلل وابسته به شرایط آندیزاسیون است [۸].

فصل دوم

ساختار نواری بلورها

در نظریه‌ی نواری بلورها، معادله‌ی شرودینگر تک الکترونی به صورت زیر است:

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(r)\right)\psi(r) = E\psi(r),$$

$$V(r + t_n) = V(r),$$

در روابط بالا V پتانسیل تناوبی بلورین و t_n بردار انتقال است و ویژه توابع از نوع بلاخ می‌باشند. معادله‌ی ویژه مقدراری بالا به طور ضمنی شامل تعدادی فرضیات است که به صورت خلاصه بیان می‌شود.

(i) تقریب شبکه سخت^۱. هسته در موقعیت تعادلی اش ثابت است. در واقع اختلاف زیاد بین جرم های الکترون و هسته تصدیقی بر این مطلب است.

(ii) تقریب تک الکترونی در شکل موضعی^۲. ماهیت مسئله‌ی پیچیده‌ی چند الکترونی به مسئله‌ی تک الکترونی همراه با پتانسیل موضعی توصیف می‌شوند.

^۱ rigid lattice approximation

^۲ one-electron approximation