

# Föreläsning 10, Fysik B för D2

Thomas Nilsson

December 3, 1997

## 35 Bandstruktur hos fasta ämnen

Vad händer med energinivåerna hos atomer när de närmar sig varandra som i ett fast ämne? Så länge atomerna befinner sig på långt avstånd från varandra kommer de atomära nivåerna att vara oförändrade, men då avståndet minskar kommer elektronorbitalerna att börja överlappa varandra. Vi får då en **energiuppsplittring** av nivån enligt fig. 43.15a. Med fler och fler atomer kommer uppsplittringen att vara den samma, men med större nivåtäthet. För ett makroskopiskt prov av ett fast ämne är antalet atomer mycket stort, i storleksordningen  $10^{23} \text{cm}^{-3}$ , och nivåtätheten blir då så stor att vi kan föreställa oss att de bildar ett **band**. Se fig. 43.15c.

Banden uppkallas efter den atomär nivå som de bygger på, vi pratar om  $2s$ -,  $3p$ -band etc. Tidigare har vi sett hur många elektroner som ryms i de olika atomära nivåerna, på samma sätt kan vi generalisera detta till antalet elektroner som ryms i ett band då vi har  $N$  atomer i vår kristall,  $2(2\ell + 1)N$ . På så sätt kan  $1s$  och  $2s$ -banden innehålla  $2N$  elektroner och  $2p$ - och  $3p$ -banden  $6N$  elektroner och så vidare, tills dess antalet elektroner är utarmat. Vi kommer att se senare hur betydelsefullt det är om det översta bandet då är fullständigt eller partiellt fyllt. Se fig. 43.16.

## 36 Fri elektronteori för metaller

I metaller är valenselektronerna (typiskt 1 - 2 per atom) relativt fria och kan röra sig i materialet. Metalliska material kan föreställas som ett gitter av atomer som omsluter en elektrongas, där bindningen sker genom attraktionen mellan de positiva

jonerna och elektrongasen.

Analogin mellan en normal gas och en elektrongas har ett fel; elektronerna är **fermioner** och deras energifördelning följer inte Maxwell-Boltzmanns fördelningsfunktion. På grund av Pauliprincipen kommer inte flertalet elektroner att ha låg energi, utan vi får den så kallade **Fermi-Dirac fördelningen**:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \quad (1)$$

I fig. 43.17 är denna plottad för  $T = 0K$  och  $T > 0K$ , vi ser att i det förra fallet fördelar sig elektronerna med konstant sannolikhet från  $E = 0$  upp till **Fermienergin**. Över denna är sannolikheten noll. Detta kan förstås genom att studera gränsvärdet för exponentialdelen av (1) då  $T \rightarrow 0$ :

$$\lim_{T \rightarrow 0} e^{(E-E_F)/k_B T} = \begin{cases} 0, & \text{då } E < E_F \\ \infty, & \text{då } E > E_F \end{cases} \quad (2)$$

För  $T > 0$  fås en mer diffus övre gräns, se fig. 43.17b, alltså har vi ett fåtal tillstånd ovanför Fermienergin som är upptagna och ett fåtal under som är tomma. Fermienergin definieras som den energi där  $f(E) = 1/2$ .

### 36.1 Tillståndstäthet

Elektrongasen i ett metalliskt material rör sig i en **periodisk potential** skapad av gitterets atomer. Vi kan anta att den periodiska delen är liten, och att man kan förenkla den till en lådpotential med sidan  $L$  där  $\psi = 0$  vid  $x, y, z = 0$  och  $x, y, z = L$ . Till att börja med studerar vi problemet i en dimension:

### 36.1.1 Endimensionell lådpotential

För en endimensionell lådpotential med oändligt höga väggar hade vi den generella lösningen

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (3)$$

För de tillåtna tillstånden fås då energierna:

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2 \quad (4)$$

Vi använder här att  $E$  är elektronernas energi **relativt lådpotentialens botten**. Vi såg tidigare att för ett stort antal atomer kommer avståndet mellan de tillåtna tillstånden att krympa, så vi kan behandla  $n$  som en kontinuerlig variabel trots att den egentligen är kvantiserad.

För en given energi  $E$ , hur många elektron-tillstånd är då besatta? Vi löser ut  $n$  ur (4) och multiplicerar med ytterligare en faktor 2 från att varje tillstånd  $n$  har två elektroner, med spinn-upp respektive spinn-ner:

$$N(E) = 2 \frac{2\sqrt{2mE}}{h} L \quad (5)$$

För att få fram antalet tillstånd i intervallet  $[E, E + dE]$  differentieras (5):

$$dN(E) = \frac{2\sqrt{2m}}{h\sqrt{E}} L dE \quad (6)$$

Vi får alltså en tillståndstäthet som **minskar** för ökande  $E$ .  $n^2$ -beroendet gör att det blir allt glesare mellan tillstånden.

### 36.1.2 Tredimensionell lådpotential

I realiteten har vi oftast ett tredimensionellt problem med lösningar av typen:

$$\psi = C \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L} \quad (7)$$

med tillåtna energier:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \kappa^2 \quad (8)$$

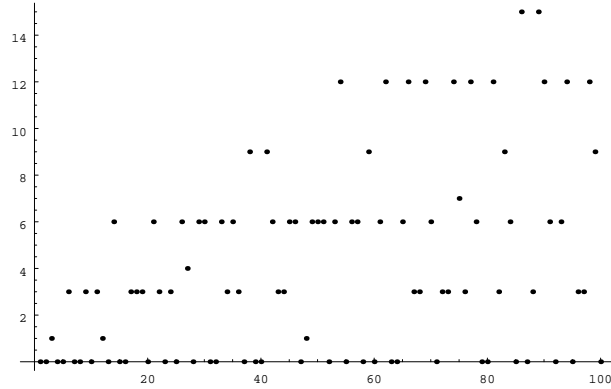


Figure 1: Antal lösningar av  $\kappa^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$  som en funktion av  $\kappa$ .

där  $\kappa = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ . För varje värde på  $E$  finns vanligtvis många kombinationer av  $n_x, n_y, n_z$ , energierna är **degenererade**. Antalet heltalskombinationer för de första 100 heltalen visas i fig 1.

Om vi ser  $n_x, n_y, n_z$  som kontinuerliga variabler och tänker oss att de kan representeras i tre dimensioner som späns upp av axlarna  $\xi, \eta, \zeta$ , se fig. 2, så kommer värdena av  $\kappa$  (och därigenom  $E$ , enligt (8)) att ligga på en åttöndel (endast positiva värden på  $n_x, n_y, n_z$  är tillåtna) av ett sfäriskt skal.

Om vi nu ska undersöka hur många tillstånd som är upptagna då alla energier i intervallet  $[0, E]$  är besatta så måste man beräkna volymen i rummet som späns upp av  $\xi, \eta, \zeta$ :

$$N(E) = \frac{1}{8} \left( \frac{4}{3} \pi \kappa^3 \right) \quad (9)$$

men  $\kappa$  är relaterat till  $E$  genom (skriv om (8))

$$\kappa = \sqrt{\frac{2mE}{\pi^2 \hbar^2}} L \quad (10)$$

Detta ger, där  $V = L^3$  och med elektroner som populerar tillstånden kommer ytterligare en faktor 2 från att varje tillstånd kan hysa två elektroner, med spinn-upp respektive spinn-ner:

$$N(E) = \frac{1}{6} \pi L^3 \left( \frac{2mE}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{8\pi V}{3h^3} (2m^3)^{1/2} E^{3/2} \quad (11)$$

För antalet tillstånd mellan  $E$  och  $E + dE$  fås genom differentiering:

$$dN(E) = \frac{8\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} dE \quad (12)$$

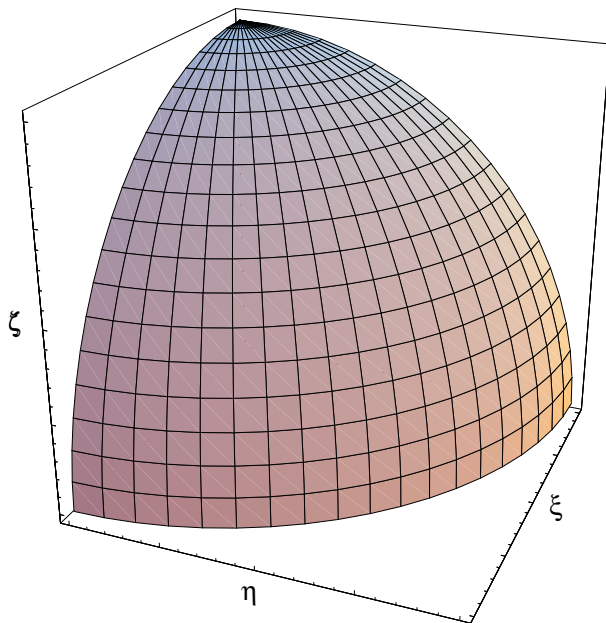


Figure 2: Degenererade värden på  $n_x, n_y, n_z$  med  $\kappa = \text{konstant}$

Vi kan uttrycka detta som en **tillståndstäthet** per volymsenhet,  $g(E)$ :

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{8\pi(2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} \quad (13)$$

Den slutliga elektronfördelningen i termisk jämvikt fås genom att multiplicera med Fermi-Dirac fördelningen (1) vilket ger:

$$N_e(E) = C \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \quad (14)$$

med

$$C = \frac{8\pi(2m^3)^{1/2}}{h^3} \quad (15)$$

I fig. 43.18 visas  $N(E)$  för  $T = 0K$  och  $T = 300K$ , i det förra fallet betar sig tillståndstätheten som  $E^{1/2}$  upp till Fermienergin  $E_F$  där den abrupt går till noll, i det senare fallet är tillståndstätheten "utsmetad" vid Fermienergin. Antalet tillstånd per volymsenhet  $n$  kan då skrivas:

$$n = \int_0^\infty N(E) dE = C \int_0^\infty \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \quad (16)$$

Vi kan nu ta fram ett samband mellan Fermienergin och antalet elektroner per volymsenhet. Vid  $T = 0$  gäller:

$$n = C \int_0^{E_F} E^{1/2} dE = \frac{2}{3} C E_F^{3/2} \quad (17)$$

Vi löser ut  $E_F$  och sätter in (15):

$$E_F = \left(\frac{3}{2} \frac{n}{C}\right)^{2/3} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3} \quad (18)$$

Med ökande elektrontäthet ökar alltså Fermienergin då elektronerna måste populera allt högre tillstånd enligt Pauliprincipen.

Vidare kan vi definiera en **Fermitemperatur**  $T_F$  enligt

$$k_B T_F = E_F \quad (19)$$

## 37 Elektrisk ledning

Elektrisk ledning varierar drastiskt mellan olika material. Vi ska nu se hur **bandstrukturen** och **Fermienergin** är relaterade till detta.

### 37.1 Metaller

Om vi har en metall vid  $0K$  så kommer alla tillstånd upp till Fermienergin att vara upptagna, och alla ovanför lediga. För att ledning ska kunna ske, måste elektroner kunna exciteras lätt över Fermienergin. Metaller har **halvfyllda band**, vilket innebär att Fermienergin befinner sig inuti ett band. Se fig. 43.19. Då ett yttre fält läggs över metallen så krävs det bara lite energi för att excitera elektroner nära Fermienergin till högre liggande, tomma tillstånd. Vi får många **laddningsbärare** och metaller är goda ledare.

### 37.2 Isolatorer

Isolatorer har ett fyllt **valensband** som befinner sig på ett relativt stort energiintervall, **bandgapet**, ifrån nästa band, **ledningsbandet**. Fermienergin befinner sig någonstans i bandgapet, se fig. 43.20. Då valensbandet är helt fullt, kan inte ett yttre fält excitera elektroner till högre tillstånd inom bandet, utan dessa måste ske över bandgapet vilket är mycket energikrävande. Vid  $T = 0$  är då ledningsbandet helt tomt, och även vid  $300K$  är

$k_B T = 0.025 eV$  vilket typiskt är mycket mindre än bandgapet i en isolator. Det finns alltså mycket få elektroner i ledningsbandet vilket ger en dålig ledningsförmåga.

### 37.3 Halvledare

Isolatorer som har ett litet bandgap ( $\approx 1 eV$ ) kallas för **halvledare**. Typiska halvledare är **Si** och **Ge** och så kallade **III - IV** föreningar som **GaAs** och **InP**. Vid  $T = 0K$  gäller som för isolatorer att valensbandet är helt fyllt och ledningsbandet tomt, halvledaren har dålig ledningsförmåga, men vid högre temperaturer så gör det lilla bandgapet att elektroner kan exciteras termiskt upp till ledningsbandet. Dessa elektroner, tillsammans med de **hål** som bildas i valensbandet, är laddningsbärare och ger en **intrinsisk** ledningsförmåga. Hål kan behandlas som partiklar med laddning  $+e$ , de kan "förflytta sig" genom att en elektron hoppar från en upptagen plats till den vakanta och i sin tur skapar en ny vakans.

Halvledares enorma användningsområde kommer sig av att det är möjligt att relativt enkelt och mycket kontrollerat förändra deras ledningsegenskaper genom **dopning**. Detta innebär att man adderar ett främmande material till halvledaren som antingen ger en extra valenselektron, en **donator** eller en valenselektron mindre, en **acceptor**.

#### 37.3.1 Dopning av n-typ

Då en halvledare dopas med en donatoratom med fem valenselektroner (som **As**), kommer fyra av elektronerna att ingå i den kovalenta bindningen, men den femte kommer att befinna sig i bandgapet, i en donatornivå strax under (typiskt  $0.05 eV$ ) ledningsbandet. Se fig. 43.23. Det är alltså mycket lätt att termiskt excitera elektronerna upp till ledningsbandet, och ledningsförmågan ökar drastiskt. Då laddningsbärarna här är de negativa elektronerna, kallas materialet **n-typ**.

#### 37.3.2 Dopning av p-typ

Om dopatomerna istället dopas med en donatoratom med tre valenselektroner (som **In**), kommer en elektron att saknas. Dessa **acceptornivåer** befinner sig i bandgapet strax ovanför

valensbandet, så det är mycket enkelt att excitera en elektron därifrån till dessa nivåer så att ett hål skapas i valensbandet. Se fig. 43.24. Här är laddningsbärarna positiva hål, och materialet kallas **p-typ**.

Hur man skapar elektroniska komponenter utifrån dessa två typer av halvledarmaterial är ett ämne för **Fysik del C**.