

Energibånd i faste stoffer.

Et prosjekt i emnet FY1303 elektrisitet og magnetisme,
skrevet av Tord Hompland og Sigbjørn Vindenes Egge.

Innholdsfortegnelse.

Sammendrag.....	3
Innledning.....	4
Hvorfor kvantemekanisk beskrivelse av elektroner i atomer?.....	5
Kvantemekaniske tilstander.....	5
Eksklusjonsprinsippet.....	6
Energinnivåene i atomer med flere elektroner.....	7
Energigap.....	8
Elektrisk ledningsevne.....	9
Isolator.....	10
Halvleder.....	11
Leder.....	12
Doping.....	13
Konklusjon.....	14
Referanser.....	15

Sammendrag

Den klassiske beskrivelsen av atomet er ikke tilstrekkelig for en rekke fenomener på atomært nivå, og det blir nødvendig med en kvantemekanisk beskrivelse. Energien og dreieimpulsen (både bane- og spinn) for elektroner i et atom er da kvantisert. Vi beskriver elektronene med såkalte kvantetall, som angir elektronets energi og dreieimpuls. Eksklusjonsprinsippet sier oss at to elektroner ikke kan ha alle kvantetallene like. For en samling av elektroner medfører dette at vi bare kan ha et visst antall i hvert energinivå. For et enkelt atom er energinivåene diskrete, men i faste stoffer vil eksklusjonsprinsippet føre til tilsynelatende kontinuerlige energibånd. Disse båndene er nøkkelen til å forstå elektrisk ledningsevne i faste stoffer. Vi får en oppdeling av stoffene basert på ledningsevnen. To av disse, isolatoren og lederen, er godt kjent fra hverdagen, og utgjør de to ytterpunktene for elektrisk ledningsevne. Mellom disse kommer halvlederen som ikke er så godt kjent fra dagliglivet. På grunn av den temperaturavhengige ledningsevnen og muligheten til å manipulere ledningsevnen med atomer av andre stoffer, blir halvlederen stadig mer brukt i teknologiindustrien.

Innledning.

Prosjektet begynte som et forsøk på å finne ut mer om energibånd i faste stoffer. Vi fikk en kort introduksjon til emnet i en forelesning, men følte den ga opphav til langt flere spørsmål enn den ga svar på. Det skulle vise seg at det ikke var så enkelt å feste noe fornuftig på papiret om disse mystiske båndene. I hvert fall ikke uten solid bakgrunnsteori. Vi har derfor gitt en grundig innføring i kvantemekaniske tilstander og følgene av Paulis eksklusjonsprinsipp. Dette er nødvendig for å gi en ikke altfor overfladisk presentasjon av båndteorien. Nå hadde også fokus til en viss grad skiftet fra *hvorfor* til *hvordan*, da vi heller vil gi et godt fysisk *bilde* av teorien istedenfor å forklare den ved matematiske utledninger. Dette er etter vår oppfatning den fremstillingen som er lettest å forstå, og ikke minst lettest å huske.

Vi mener leserne vil få mest utbytte av oppgaven dersom de har kjennskap til grunnleggende elektronikk og kvantemekanikk. Dette er i midlertidig ikke noe absolutt krav, da vi starter teksten med en oppsummering av *relevante*, grunnleggende resultater for å gi et best mulig fundament for forståelse av teorien om energibånd. Vi ser derfor på teksten som en *introduksjon* til emnet.

I teksten skrives vektorer med **fete** typer.

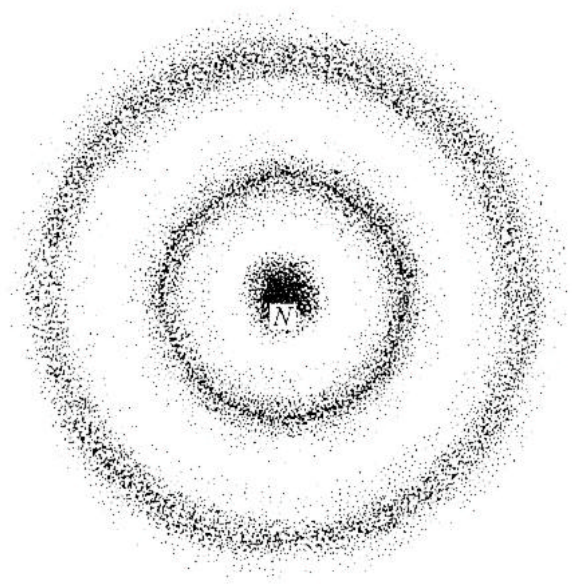
Hvorfor kvantemekanisk beskrivelse av elektroner i atomer?

I den klassiske atommodellen sirkler elektronene rundt kjernen i bestemte baner, men dette mye brukte bildet av atomet er ukorrekt. Heisenbergs usikkerhetsrelasjon i tre dimensjoner er gitt ved $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$, $\Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2$, og $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$, der Δx , Δy og Δz er usikkerhetene i posisjon i henholdsvis x -, y - og z -retning, og Δp_x , Δp_y , og Δp_z er usikkerhetene i impuls. Disse relasjonene gir en nedre grense for presisjonen i målingene av posisjon og impuls for elektronet. På en stor skala vil disse grensene være forsvinnende små, og det er derfor vi kan regne klassisk for elektroner i for eksempel et TV-rør. Men på en liten skala, som størrelsen til atomet, vil usikkerhetene for posisjon og impuls være betydelige. Som følge av denne store relative usikkerheten kan vi ikke beskrive elektronet som partikler med bestemte baner, dvs vi kan ikke bruke klassisk fysikk. Vi trenger en kvantemekanisk beskrivelse. Da ser vi på elektronet som en bølge, gitt ved bølgefunksjonen $\Psi(x, y, z, t)$. $|\Psi|^2$ er sannsynlighetstettheten for å finne elektronet i posisjonen (x, y, z) ved tiden t . Dermed gir $|\Psi|^2 dx dy dz$ sannsynligheten for å finne elektronet i området $(x, x + dx; y, y + dy; z, z + dz)$ ved tiden t .

Vi kan altså ikke med sikkerhet lokalisere elektronet, og har således ikke grunnlag for å snakke om bestemte baner for det. Vi må ta til takke med å finne sjansen for at elektronet er i et visst område rundt kjernen. Se figur 1.

Kvantemekaniske tilstander.

For å gi en fullstendig beskrivelse av elektroner i bane rundt atomkjernen må vi oppgi fire tall, såkalte kvantetall. Disse bestemmer energi og dreieimpuls (både bane- og spinn) for elektronet. Kvantetallene kan bare ha visse verdier og kvantiserer dermed størrelsene de representerer, derav navnet. Ved hjelp av kvantemekanikken, som vi har sett er nødvendig for å gi korrekte bilder av mikroskopiske system, kan vi finne sammenhengen mellom kvantetallene og de tilhørende fysiske størrelsene. Vi starter med å se på atomer med atomnummer Z (og derfor Z protoner i kjernen) med ett elektron.



Figur 1: Sannsynlighetsfordeling for et elektron i et atom. N er kjernen og mørkhetsgraden er proporsjonal med $|\Psi|^2$. (Figur hentet fra ref 2)

Totalenergien til elektronet er da gitt ved

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} \approx -\frac{13,6Z^2}{n^2} \text{ eV}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

Her er m_e elektronmassen, e elementærladningen og ϵ_0 vakuumpermittiviteten.

Bane-dreieimpulsen er gitt ved

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \text{ der } l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1) \quad (2)$$

Til hvert energinivå (bestemt ved n) kan elektronet ha flere verdier av bane-dreieimpulsen (og dermed l). For gitt n ser vi av (2) at l kan ha n forskjellige verdier. For å forenkle notasjonen er det vanlig å tilordne bokstaver for de første verdiene av l :

Tabell 1: Tilordning av bokstavsymboler for kvantetallet l .

l	0	1	2	3	4
Bokstavsymbol	s	p	d	f	g

I tillegg til at størrelsen av bane-dreieimpulsen er kvantisert, er også retningen av den kvantisert. Det betyr at orienteringen av bane-dreieimpulsen L i forhold til en bestemt akse er begrenset til visse retninger. Dette kalles rom-kvantisering, og hvis den bestemte akse i rommet kalles z , får vi følgende tillatte z -komponenter av L :

$$L_z = m_l \hbar, m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm (l-1), \pm l \quad (3)$$

Av (3) ser vi at for en gitt verdi av l kan m_l ha $2l + 1$ forskjellige verdier.

Størrelsen av spinnet S til elektronet er konstant, men ikke retningen. I forhold til z -aksen kan spinnet bare ha to forskjellige retninger som kalles "spinn opp" og "spinn ned". Ligning (2) for bane-dreieimpulsen L gjelder også for spinnet S . Da bruker vi s som kvantetall istedenfor l , og det kan vises at fordi vi bare kan ha to retninger på spinnet i forhold til z -aksen, må vi ha $s = \frac{1}{2}$. Vi får relasjonen:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar, s = \frac{1}{2} \Rightarrow \sqrt{\frac{3}{4}}\hbar \quad (4)$$

For å finne z -komponenten av spinnet bytter vi ut kvantetallene m_l og l i ligning (3) med henholdsvis m_s og s . Vi ser da at $m_s = 0, \pm 1, \dots, \pm s = s, s-1, \dots, -s$. Setter vi inn $s = \frac{1}{2}$ får vi $m_s = \pm \frac{1}{2}$, og relasjonen blir:

$$S_z = m_s \hbar, m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (5)$$

Eksklusjonsprinsippet.

I forrige avsnitt viste vi at for å gi en fullstendig beskrivelse av tilstanden som et elektron er i, trenger vi de fire kvantetallene l, n, m_l og m_s . Paulis eksklusjonsprinsipp sier at *to elektroner i samme system (dvs at de påvirker hverandre med krefter) ikke kan ha samme kvantetall*. Med andre ord kan ikke *alle* kvantetallene til et elektron i systemet være like kvantetallene til et annet. Men *noen* kan være like. De kan for eksempel ha samme verdi av l , men forskjellige verdier av n, m_l og m_s .

Når elektronene i et atom har minst mulig energi, sier vi at de er i grunntilstanden. Hadde det ikke vært for eksklusjonsprinsippet ville da alle elektronene hatt den samme energien. Men fordi antall elektroner i et bestemt energinivå nå er sterkt begrenset, vil elektronene bli tvunget opp i høyere liggende nivåer.

Energinnivåene i atomer med flere elektroner.

La oss nå se på atomer med flere elektroner. Da blir det betydelig vanskeligere å regne ut energinivåene for et elektron, fordi vi må ta hensyn til vekselvirkninger elektronene imellom. Det kan vises at for en gitt verdi av n , er totalenergien til et elektron bestemt av bane-dreieimpulsen, og energien blir større med økende l . Energien kan også være avhengig av orienteringen av spinnet, men bare i mindre grad. Med god tilnærming kan vi derfor si at energien til elektronet avhenger bare av n og l . Hver kombinasjon av disse kvantetallene blir identifisert ved symbolet nl , som kalles en nl -tilstand. Som eksempel har vi $3p$, som står for energinivået med $n = 3$ og $l = 1$.

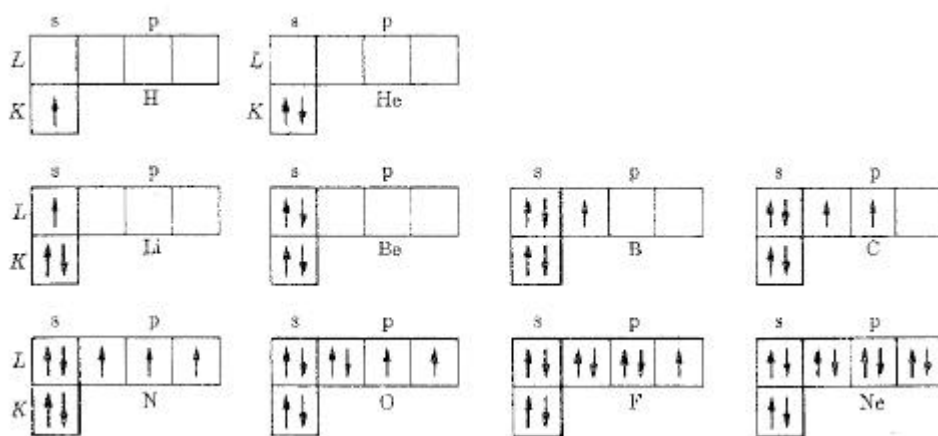
For å spesifisere energitilstanden til et atom må vi oppgi antall elektroner i hver nl -tilstand. Dette kalles en *konfigurasjon*. For hver nl -tilstand skriver vi $(nl)^x$, der x indikerer antall elektroner i tilstanden. Grunntilstanden til helium har eksempelvis konfigurasjonen $(1s)^2$, men dersom et av elektronene eksiteres til et høyere energinivå kan vi få $(1s)(2s)$ eller $(1s)(2p)$, avhengig av hvilket nivå elektronet eksiteres til.

Vi kan bruke eksklusjonsprinsippet til å bestemme konfigurasjonen til atomet. Først finner vi antall kombinasjoner av kvantetallene m_l og m_s som er mulige for hver verdi av l . Dette gir det maksimale antallet av elektroner som kan være i hver nl -tilstand. Vi vet fra tidligere i teksten at for en gitt verdi av l er det $2l + 1$ mulige verdier av m_l , og 2 mulige verdier av m_s . I hver nl -tilstand kan det dermed maksimalt være $2(2l + 1)$ elektroner. Tabell 2 viser dette for de første verdiene av l .

Tabell 2: Maksimalt antall elektroner for hver nl -tilstand.

l	0	1	2	3	4
Bokstavsymbol	s	p	d	f	g
$2(2l + 1)$	2	6	10	14	18

Konfigurasjonen til et atom i grunntilstanden er gitt ved at elektronene fyller opp de laveste energinivåene. Når en nl -tilstand har fått sitt maksimale antall elektroner, fylles neste tilstand opp. Se figur 2, som viser konfigurasjonen for de ti første grunnstoffene i grunntilstanden.



Figur 2: Konfigurasjonen for de ti første grunnstoffene i grunntilstanden. Pilene viser retning på spinnet for hvert elektron i atomet. (Figur hentet fra ref 2)

Den generelle rekkefølgen for hvordan nl -tilstandene fylles opp i grunntilstanden, ser man i figur 3. Det kan være små forandringer for enkelte atomer, men figuren stemmer med god

tilnærming. Fordi energinivåene er diskrete, vil det være områder med forbudte energiverdier, såkalte *energigap*, mellom nivåer som ligger attmed hverandre. På figuren kan vi observere visse energigap som er større enn både gapet over og gapet under. Dette skjer mellom 1s og 2s, 2p og 3s, 3p og 4s osv. Energinivåer grupperte mellom to slike energigap utgjør et *skall*. Disse skallene merkes med K, L, M, N osv, der K er det minst energetiske skallet. Merk at de første skallene impliserer en gitt verdi av n : K har $n = 1$, L har $n = 2$ og M har $n = 3$. Men i skall over disse gjelder ikke denne sammenhengen, da vi i ett skall har flere verdier av n .

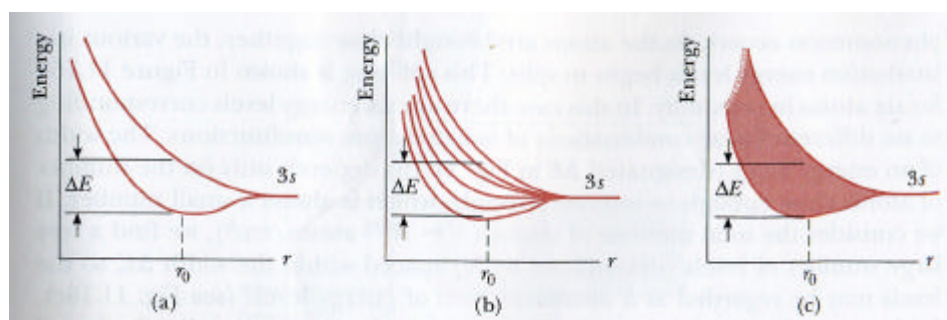
Et skall består av flere nl -tilstander, som vi i denne sammenhengen kaller for et *delskall*. Elektronene i det ytterste delskallet (det med høyest energi) kalles *valenselektroner*. Det er disse elektronene som bestemmer de fleste egenskapene til atomet. De deltar i kjemiske reaksjoner og bindinger, og vi skal snart se at det er slike elektroner som deltar i ledning av elektrisk strøm.

Level designation	Electrons in shell	Total number of electrons at each shell completion
7p 6d 5f 7s	6 10 14 2	32
6p 5d 4f 6s	6 10 14 2	32
5p 4d 5s	6 10 2	18
4p 3d 4s	6 10 2	18
3p 3s	6 2	8
2p 2s	6 2	8
1s	2	2
		2 (He)
		10 (Ne)
		18 (Ar)
		36 (Kr)
		54 (Xe)
		86 (Rn)
		118(?)

Figur 3: Den generelle rekkefølgen for hvordan nl -tilstandene fylles opp i grunntilstanden (figur hentet fra ref 2).

Energigap.

Vi har nå sett på et atom i fri (isolert) tilstand. Dersom atomet ikke er isolert, blir situasjonen annerledes. La oss se på to identiske atomer som er uendelig langt fra hverandre. Vi lar dem så nærme seg hverandre. Når avstanden mellom atomene er stor, vil de tillatte energinivåene være kvantiserte og tilnærmet like for de to atomene. Etter hvert som de to atomene nærmer seg hverandre, vil vekselvirkningen mellom de to atomene føre til at energinivåene deles i to nærliggende nivåer. Dette er fordi ikke mer enn to elektroner kan okkupere samme energinivå, ifølge eksklusjonsprinsippet. Viss de to atomene er natrium (Na) i grunntilstanden, vil valenselektronene være i 3s-tilstanden. Da viser figur 4a splittelsen av dette energinivået. Dersom 6 atomer bringes sammen, vil hvert energinivå splittes opp i 6 forskjellige nivåer med litt forskjellige verdier (figur 4b).



Figur 4: a) Delingen av 3s-tilstanden når to natriumatomer blir satt sammen.
b) Delingen når seks natriumatomer blir satt sammen.
c) Delingen når stort antall atomer satt sammen til et fast stoff.
(Figur hentet fra ref 4.)

Antall undernivåer som hvert opprinnelige energinivå blir delt opp i, er åpenbart det samme som antall atomer som bringes sammen for å danne stoffet. Dersom vi setter sammen et stort antall atomer for å danne et fast stoff, vil vekselvirkningene mellom atomene dele energinivåene opp i mange nivåer som legger seg tett inntil hverandre. Dette resulterer i et essensielt kontinuerlig bånd av energier for makroskopiske objekter (figur 4c).

Merk at hvert energibånd vil dannes i et *begrenset* område rundt (ovenfor og nedenfor) et delskall for et enkelt elektron. Dette medfører områder mellom energibåndene som er uten tillatte energinivåer for elektronene. Så for elektronene i faste stoffer vil vi ha tillatte og forbudte energibånd. Disse forbudte energibåndene kalles *energigap*, som også brukes om avstanden mellom diskrete nivåer i enkeltatomer ble kalt.

I grunntilstanden ($T = 0$ K) er som sagt alle elektroner i laveste tillatte energinivåer. Det høyeste fylte energibåndet i grunntilstanden kalles *valensbåndet*. Et elektron som deltar i ledning av elektrisk strøm vil være i *ledningsbåndet*, som er det første tillatte båndet som ligger over valensbåndet.

Ordet *båndgap* brukes gjerne om forskjellen i energi mellom det energinivået som har høyest energi i valensbåndet og det energinivået som har lavest energi i ledningsbåndet. Vi skal ved å se på størrelsen av båndgapet forklare de enorme forskjellene i elektrisk ledningsevne som vi har mellom visse stoffer.

Elektrisk ledningsevne.

En viktig egenskap for faste stoffer er evnen til å lede elektrisk strøm, det vil si muligheten for elektronene til å bevege seg i stoffet under påvirkning av et påtrykt elektrisk felt.

Et tillatt energibånd som er tomt for elektroner kan ikke delta i elektrisk ledning fordi det ikke er elektroner der som kan lede. Overraskende nok kan heller ikke et bånd som er fullstendig fylt opp med elektroner delta i elektrisk ledning. Hvorfor? Hvis et elektron skal være et ledningselektron, må det bevege seg når det blir påvirket av et lite elektrisk felt. Og hvis elektronet flytter på seg pga et elektrisk felt, så har det fått energi fra feltet. Har et elektron fått energi fra feltet, så har det blitt flyttet opp i en høyere energitilstand enn det opprinnelig var i, dvs det har flyttet høyere opp i energibåndet. I et fullstendig fullt energibånd med et energigap over, kan dette ikke skje fordi hvis et elektron er på toppen av båndet så er det ingen tillatte tilstander rett over. Et forbudt bånd ligger rett over toppen av et tillatt bånd. Viss et elektron er et stykke fra toppen i et fullt bånd, så kan det heller ikke motta energi fra det elektriske feltet og flytte oppover i båndet. Dette er fordi alle tillatte tilstander over det båndet er fylt opp, som følger av definisjonen på et fullt bånd.

Vi har spesialtilfeller, såkalte *halvmetaller*, der valens- og ledningsbåndet *overlapper* hverandre. Ikke nå heller er det mulig for et fullt valensbånd å lede, for da må det overføre elektroner til ledningsbåndet, og valensbåndet vil ikke lenger være fullt.

Faste stoffer kan deles i to hovedklasser, metaller og ikke-metaller. Ved det absolutte nullpunktet ($T = 0$ K) har de følgende makroskopiske kjennetegn:

- Metall: Et svakt påtrykt elektrisk felt medfører en strøm gjennom metallet.
- Ikke-metall: Et svakt påtrykt elektrisk felt gir ingen strøm.

De mikroskopiske forklaringene av kjennetegnene er som følger:

- Metall: De kvantemekaniske tilstandene i minst ett energibånd er bare delvis besatte, dvs besatte tilstander er separerte bare med infinitesimale energiforskjeller fra ubesatte tilstander. Ethvert påtrykt felt kan derfor forfremme elektroner til høyere energinivåer.
- Ikke-metall: Alle energibåndene er enten fulle eller tomme, slik at det vil være et energigap som forhindrer elektroner i å innta mer energirike tilstander under påvirkning av et svakt elektrisk felt.

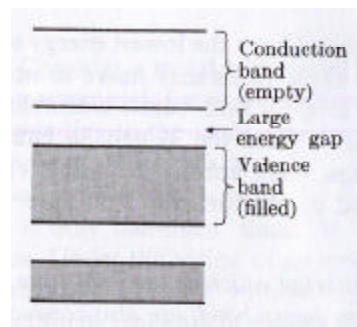
Metaller ledere strøm godt, og kalles ledere. Når $T = 0$ K er ikke-metaller ensbetydende med ikke-ledere. Men for $T > 0$ K er det en mulighet for at ikke-metaller kan føre en liten strøm i forhold til metaller. Ikke-metaller klassifiseres etter størrelsen E_g på båndgapet. Vi har følgende inndeling:

- Isolator: Når E_g er så stor at få elektroner eksiteres termisk over energigapet.
- Halvleder: Når E_g er så liten at et betydelig antall elektroner eksiteres termisk over energigapet.

Vi har altså definert tre typer faste stoffer innenfor elektrisk ledningsevne: ledere, halvledere og isolatorer. Et eksempel på ledere er kobber og sølv. Som kjent fra dagliglivet, leder disse svært godt elektrisk strøm. Diamant og kvarts er eksempler på isolatorer. Disse leder strøm dårlig. Ved romtemperatur er ledningsevnen til kobber 10^{20} ganger større enn lederevnen til kvarts. Midt i mellom disse kommer halvlederne. De leder dårlig ved romtemperatur, men ledningsevnen øker med temperaturen. Evnen til å lede elektrisk strøm avhenger av båndstrukturen. Vi vil her ved hjelp av båndstrukturen forklare årsaken til denne voldsomme forskjellen i konduktivitet.

Isolator.

I en isolator, for eksempel silisiumdioksid (SiO_2), danner valenselektronene sterke bindinger mellom atomene. Disse bindingene er vanskelige å bryte, og det er ingen frie elektroner som bidrar til å lede elektrisk strøm. Det skal svært mye energi til for å frigjøre elektroner. Dette fører til et stort sprang mellom de tillatte energinivåene i valensbåndet og ledningsbåndet. Vi har et stort båndgap, som gjør at det kreves mye energi for å eksitere elektroner til ledningsbåndet, og derfor leder isolatoren strøm bare i ekstreme tilstander. Det er det store båndgapet som kjennetegner isolatorene.



Figur 5: Energibånd for en isolator (figur hentet fra ref 2).

Et eksempel på isolatorers båndstruktur ser vi i figur 5.

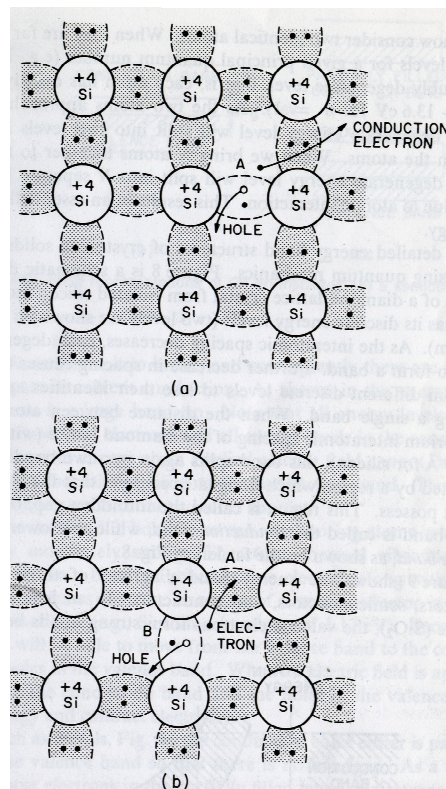
Valensbåndet er fullt og overlapper ikke det neste båndet som er tomt. Siden alle energinivåene i valensbåndet er okkupert, er elektronbevegelsen frosset. Elektronene kan ikke forandre nivå i båndet uten å bryte med eksklusjonsprinsippet. Den eneste måten å eksitere et elektron på, er å overføre det til et tomt ledningsbånd, men dette krever mye energi. UV-stråling og fotoner med høyere energier kan eksitere elektronet over båndgapet. Så isolatorer er ikke alltid isolerende. Ved svært sterke elektriske felt eller ved svært høye temperaturer, kan noen elektroner i valensbåndet bli eksitert til ledningsbåndet og gjøre en elektrisk strøm mulig. Dette kaller vi et elektrisk sammenbrudd av isolatoren. Mange isolatorer er imidlertid isolerende ved så høye temperaturer som smeltepunktet for stoffet.

Isolatorer er altså stoffer der øverste valensbånd er fullstendig fylt og separert av et båndgap på noen få elektronvolt fra det neste båndet. Eksempel på en isolator er diamant. Diamant har et båndgap på hele 6 eV og er derfor en god isolator.

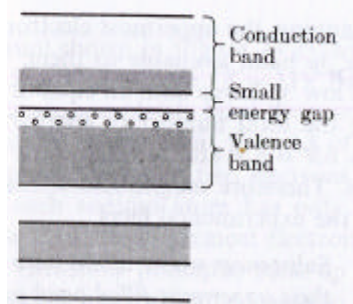
Halvleder.

I halvledere er atomene bundet sammen av valenselektronene i moderat sterke bindinger. Ettersom bindingene er moderat sterke kan termiske vibrasjoner bryte noen av bindingene. Når en binding blir brutt, blir det frigjort et elektron. Dette elektronet kan delta i strømføring. Det kreves mindre energi enn i en isolator, og derfor har vi et mye mindre båndgap. Eksempler på halvledere er silisium og germanium, med båndgap på henholdsvis 1,1 eV og 0,7 eV. Dette gjør det enklere å eksitere elektroner opp i ledningsbåndet enn for en isolator.

Ved å tilføre energi, vil flere elektroner bli eksitert opp til høyere energinivåer. Dette resulterer i at valenselektronene som deltar i bindingene mellom atomene frigjøres til ledningsbåndet. Disse elektronene som blir frigjort, kan ved et påtrykt elektrisk felt få kinetisk energi og bevege seg i stoffet. Dette fører til en elektrisk strøm. Når elektroner blir eksitert, danner dette *hull* i valensbåndet. Hullet kan ses på som en partikkel på linje med elektronet. Forskjellen er at det har en positiv ladning (ladningen er $+e$ i forhold til elektronene i valensbåndet) og vil derfor bevege seg i motsatt retning av elektronene. Når dette hullet oppstår i valensbåndet, kan hullet flytte seg bortover i stoffet ved at hele tiden et elektron flytter seg fra et atom til et annet (se figur 6).



Figur 6: En enkel figur av silisium. a) En binding er brutt i posisjon A, og resulterer i et hull og et ledningselektron. b) Hullet beveger seg ved at en binding blir brutt i posisjon B. (Figur hentet fra ref 8.)



Figur 7: Energibånd for halvleder (figur hentet fra ref 2).

Ledningsevnen i en halvleder øker raskt med temperaturen fordi flere elektroner blir termisk eksiterte til ledningsbåndet. Det vil si at termiske vibrasjoner bryter bindinger slik at det blir frigjort elektroner som kan bidra til ledningsevnen. I silisium øker antall eksiterte elektroner med en faktor 10^6 når temperaturen øker fra 250K til 450K.

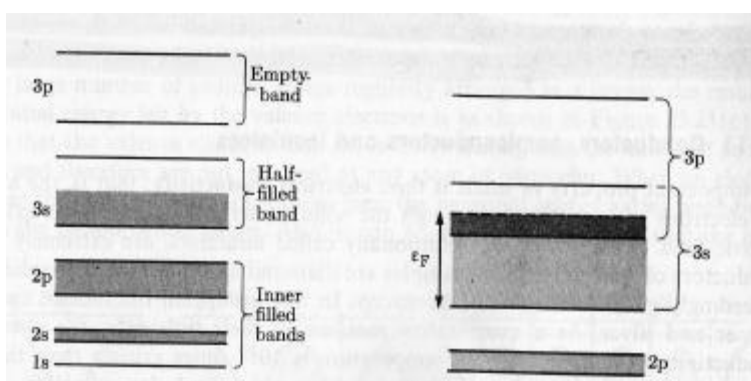
Halvledere er altså stoffer som har et energigapet mellom valensbånd og ledningsbånd på omtrent 1 eV eller mindre, slik at det er relativt enkelt å eksitere elektroner termisk fra valensbåndet til ledningsbåndet. Også et moderat påtrykt elektrisk felt kan eksitere elektronene og løsrive dem fra bindingene.

Fotoner i den nær-infrarøde delen av spekteret og mer energetiske kan eksitere elektroner til ledningsbåndet.

Når elektronet forlater valensbåndet, vil det etterlate et hull, dvs en ledig tilstand i valensbåndet. Dette hullet vil også bidra i ledning av elektrisitet. Med påtrykt elektrisk spenning, vil både hullet og elektronet få kinetisk energi og lede elektrisk strøm.

Leder.

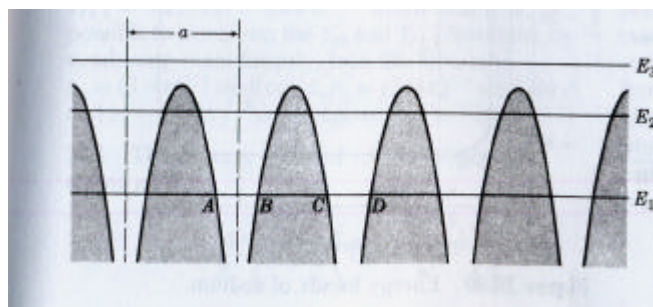
I ledere kan energibåndene være ordnet på to ulike måter. Enten er lederbåndet delvis fylt, eller så overlapper valensbåndet og ledningsbåndet hverandre. I de to tilfellene illustrert i figur 8a og 8b er båndene 1s, 2s og 2p fullstendig fylte, mens 3s båndet som kan ha opptil to elektroner pr atom (som i figur 3) bare er halvfullt. Dersom et elektrisk felt blir påtrykt, kan elektronene plukke opp små mengder energi. Denne ekstra energien vil tillate dem å passere til hvilken som helst av de mange nærliggende nivåene. Elektroner eksitert av et elektrisk felt får impuls i motsatt retning av det elektriske feltet. Dette resulterer i en felles bevegelse gjennom krystallen, og utgjør en elektrisk strøm. Gode ledere er de stoffene der det øverste båndet i atomene ikke er fullt. Dette er en svært enkel beskrivelse som strengt tatt ikke stemmer helt. I figur 8b ser vi et halvmetall: 3s (valensbåndet) og 3p-båndet (ledningsbåndet) overlapper hverandre. Dette fører til at stoffet alltid vil ha elektroner tilgjengelige for ledning i ledningsbåndet, og det vil være en god leder.



Figur 8a: Energibånd i metaller (figur hentet fra ref 2).

Figur 8b: Energibånd i ledere.

Positive ioner i metaller er arrangert i et periodisk mønster, formet i tredimensjonale krystallgittere. Ledningselektroner som beveger seg gjennom stoffet beveger seg derfor gjennom et periodisk potensial. Denne periodisiteten i det elektriske potensial tillater oss å



Figur 9: Energienivåer i periodisk potensial (figur hentet fra ref 2).

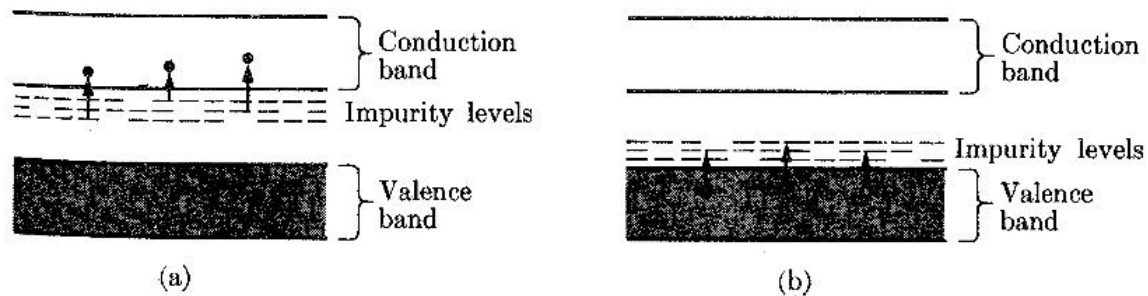
estimere de mulige elektronenergiene uten å løse Schrødingerglikningen. For å forenkle eksempelet ser vi på potensialet i et endimensjonalt gitter (se figur 9). Et elektron med energi E_1 kan ikke fritt bevege seg gjennom gitteret, men er hovedsaklig innesperret i ett av de klassiske regionene AB, CD osv. Elektronet kan gå fra AB til CD ved å trenge gjennom den potensielle barrieren mellom de to tillatte

områdene, men barrieren er så høy og bred at det er liten sjanse for at dette skjer. Det er derfor de innerste elektronene i en krystall hovedsaklig er lokalisert, og deres energier og bølgefunksjoner kan bli ansett som det samme som i et isolert atom. Et elektron med energi E_2 er ikke så sterkt bundet til ett ion, og ved å trenge gjennom den potensielle barrieren kan det bevege seg i gitteret. Et elektron med energi E_3 er ikke bundet til et spesielt ion. Det har

stor bevegelsesfrihet gjennom gitteret. Disse frie elektronene, som er karakteristiske for metaller, er avgjørende for den elektriske ledningsevnen.

Doping.

En halvleder kan få nye egenskaper ved å tilføre små mengder av et annet stoff. Ved å legge til slike urenheter kan vi øke lederegenskapen til stoffet betraktelig. Vi sier da at halvlederen har blitt *dopet* med dette andre stoffet. En måte å øke ledningsevnen på er å tilføye atomer som har flere elektroner enn atomene i halvlederen. Vi kan for eksempel tilføye arsenikk (As) til silisium (Si). Arsenikk har fem valenselektroner og silisium har fire. Arsenikkatomet danner bindinger med de fire nærmeste silisiumatomene. Det femte elektronet deltar ikke i disse bindingene og er derfor ikke så sterkt bundet til atomet. Som følge av eksklusjonsprinsippet kan elektronet ikke bli lagt til i valensbåndet og blir tvunget opp i energinivåer rett under ledningsbåndet. Avstanden mellom disse energinivåene og ledningsbåndet er lite, og disse elektronene kan lett slippe fra atomet sitt og bli eksitert opp i



Figur 10: Urenheter i halvledere. a) Donorer eller n-type. b) Akseptorer eller p-type. (Figuren hentet fra ref 2.)

ledningsbåndet (se figur 10a). Halvlederen får da et overskudd av negativ ladning i ledningsbåndet. Disse frie elektronene kan da delta i ledning av elektrisk strøm i halvlederen. Halvledere dopet på denne måten, sies å være av *n-type* (negativ). Arsenikkatomet gir fra seg et elektron og blir derfor kalt en *donor*.

En annen måte å øke evnen til å lede elektrisk strøm, er å legge til atomer med færre elektroner enn atomene i halvlederen. Da vil atomene vi tilføyer introdusere ledige diskrete energinivåer rett over toppen av valensbåndet (se figur 10b). Elektronene med høyest energi i valensbåndet kan da lett bli eksitert opp i de nye tilførte energinivåene, og det blir ledige nivåer i valensbåndet. Disse energinivåene er nevnt tidligere under halvledere og kalles hull. De bidrar i den elektriske ledningen. En halvleder dopet på denne måten sier vi er av *p-type* (positiv). Et eksempel på denne typen doping er å tilføre et bohratom (B) til silisium som har tre valenselektroner. Vi får da et ekstra hull i valensbåndet. Da er Bohr en *akseptor*. For at doping skal ha en vesentlig effekt, må antall atomer fra dopingmaterialet være vesentlig større enn antall ledningselektroner fra grunnstoffet. I silisium er for eksempel antall frie elektroner per atom ca 10^{-13} . Det er derfor ikke mye urenheter som skal tilføres før doping gir store utslag på den elektriske lederevnen. For å heve den elektriske lederevnen nevneverdig er det nok å tilføre ett urent atom pr million av halvlederatomer.

Konklusjon.

Vi ville beskrive bandteorien til faste stoffer. Vi var ikke ute etter å gjengi den matematiske beskrivelsen av teorien, men heller gi en kvalitativ fremstilling av den. Vi fant ut at emnet var langt mer komplekst enn slik det ble presentert i forelesingen, og at det krever mer avansert kvantemekanikk enn vår foreløpige kunnskap for å gi en fullstendig beskrivelse. Men vi greide likevel å finne svar på en del av spørsmålene som vi satt igjen med etter forelesningen.

Referanser.

1. Lillestøl, Hunderi og Lien: Generell fysikk bind 2: Varmelære og elektromagnetisme
2. Alonso og Finn: Physics
3. Parker: Introductory Semiconductor Device Physics
4. Serway, Moses og Moyer: Modern Physics
5. Hemmer: Faste stoffers fysikk
6. Hemmer: Innføring i kvantemekanikk
7. Kittel: Introduction to Solid State Physics
8. Wiley: Semiconductor Devices Physics and Technology