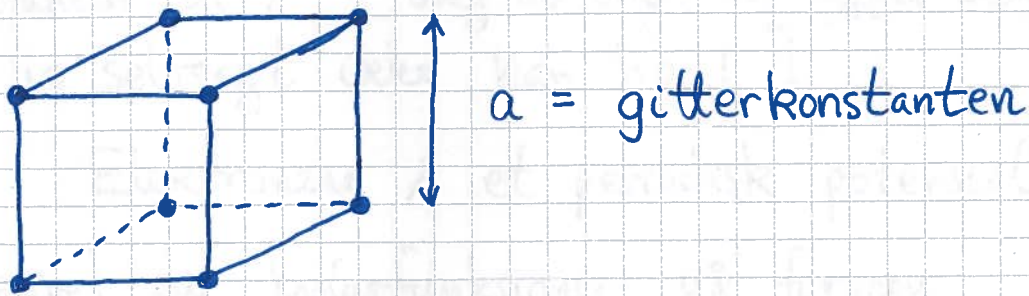


Faste stoffer: Elektroner i periodisk potensial

Antar perfekte krystaller med atomene i faste posisjoner i et regulært gitter.

Eks: Enkelt kubisk gitter



I slike krystaller må potensialet være det samme i en posisjon \vec{r} og en pos. $\vec{r} + \vec{R}$, der \vec{R} er en vilkårlig "gittervektor" fra ett atom til et annet:

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$$

Da må også elektrontettheten og sannsynlighetstettheten oppfylle

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{R}),$$

der $\rho(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2$; $\Psi(\vec{r}) = \text{bølgefunksjon}$

Må da generelt ha bølgefunksjoner på formen

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\alpha(\vec{r})} \cdot u(\vec{r})$$

med reell $\alpha(\vec{r})$ og $u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R})$.

Dessuten må α være en dimensjonsløs, skalar og lineær funksjon av \vec{r} , generelt på formen

$$\alpha(\vec{r}) = \vec{k} \cdot \vec{r}$$

[Ikke-lineær $\alpha(\vec{r}) \Rightarrow$ valg av origo får fysisk betydning, noe vi selvsagt ikke kan ha!]

Dvs: Elektronene i et periodisk potensial beskrives av bølgefunksjoner på formen

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

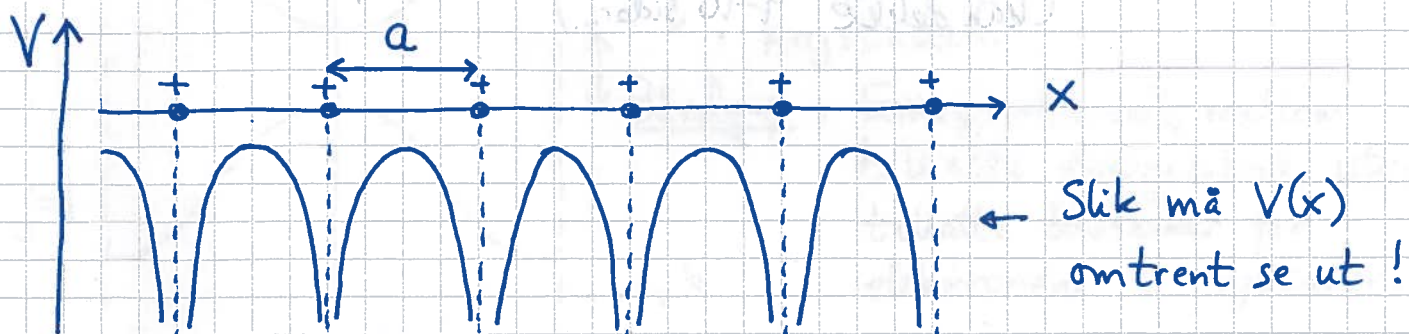
med $u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$

Dette er Blochs teorem; en grunnpillan i teorien for faste stoffer!

[Felix Bloch, NP 1952]

Foreløpig er \vec{k} kun en "nødvendig parameter", med enhet $1/m$. I mange situasjoner viser det seg at \vec{k} representerer elektronets impuls, dvs $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

Vi forenkler til 1D, og spør oss hva slags løsninger vi nå finner ved å løse TUSL.



N atomer, gitterkonstant a ; $N \rightarrow \infty$

$$V(x+a) = V(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_k(x) = E(k) \Psi_k(x)$$

$$\Psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

TUSL, for gitt k , gir energi-eigenverdier

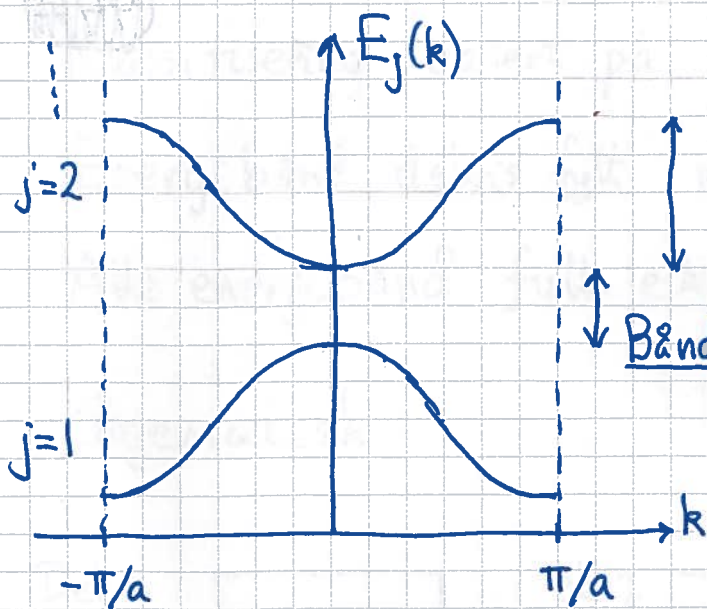
$E_1(k), E_2(k), E_3(k), \dots$ (som for partikkel i boks)

Endring av $k \Rightarrow$ endrede $E_j(k)$ ($j=1,2,3,\dots$)

Med N atomer er det N tillatte verdier av k mellom $-\pi/a$ og $+\pi/a$. Med stor N ($N \rightarrow \infty$) blir

hver $E_j(k)$ en kontinuerlig funksjon av k .

Kan se f.eks. slik ut:



Energibånd med tillatte energier for elektronene i krystallen.

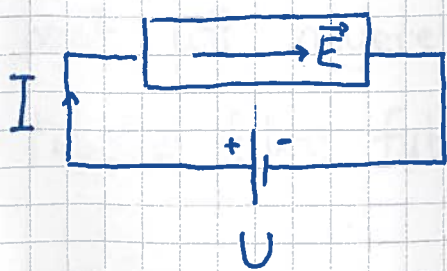
Båndgap: Energiintervall, mellom tillatte energibånd, uten tillatte tilstander for elektronene i krystallen.

Krystallens grunntilstand: Vi okkuperer tilstander, med to elektroner i hver (romlige) tilstand, i tråd med Pauliprinsippet, og fra lavest mulig energi og oppover.

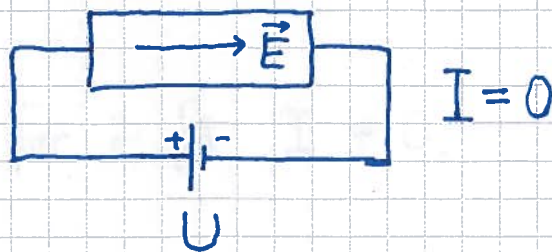
Metall, isolator eller halvleder?

Empirisk:

Metall hvis lite el. felt \vec{E} gir strøm I .



metall

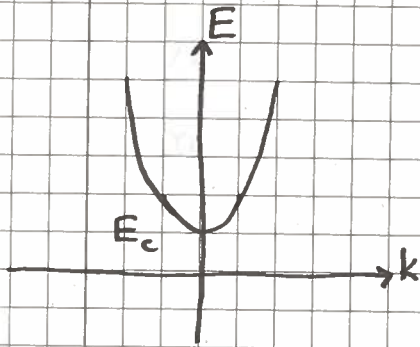


ikke-metall (isolator)

Effektiv masse

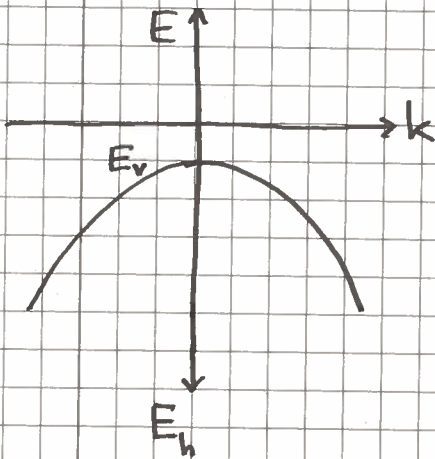
94A

- Nær båndkantene, dvs bunnen av ledningsbåndet og toppen av valensbåndet, er $E(k)$ med god tilnærming kvadratisk i k :



$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} = \text{elektronenergi i ledningsbåndet}$$

Elektronets effektive masse m_e^* gitt ved
invers krumning: $m_e^* = \hbar^2 \left[\frac{d^2 E}{dk^2} \right]^{-1} > 0$



$$E(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} = \text{elektronenergi i valensbåndet; positiv oppover}$$

$$\Rightarrow E_h(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} = \text{hullenergi i valensbåndet; positiv nedover}$$

Hullets effektive masse m_h^* gitt ved

invers krumning:

$$m_h^* = \hbar^2 \left[\frac{d^2 E_h}{dk^2} \right]^{-1} > 0$$

Partiklene (elektronene og hullene) beskrives av båndstruktur ($E(k)$ og $E_h(k)$) nær båndkantene som er "fri-partikkel-lignende", men de er ikke

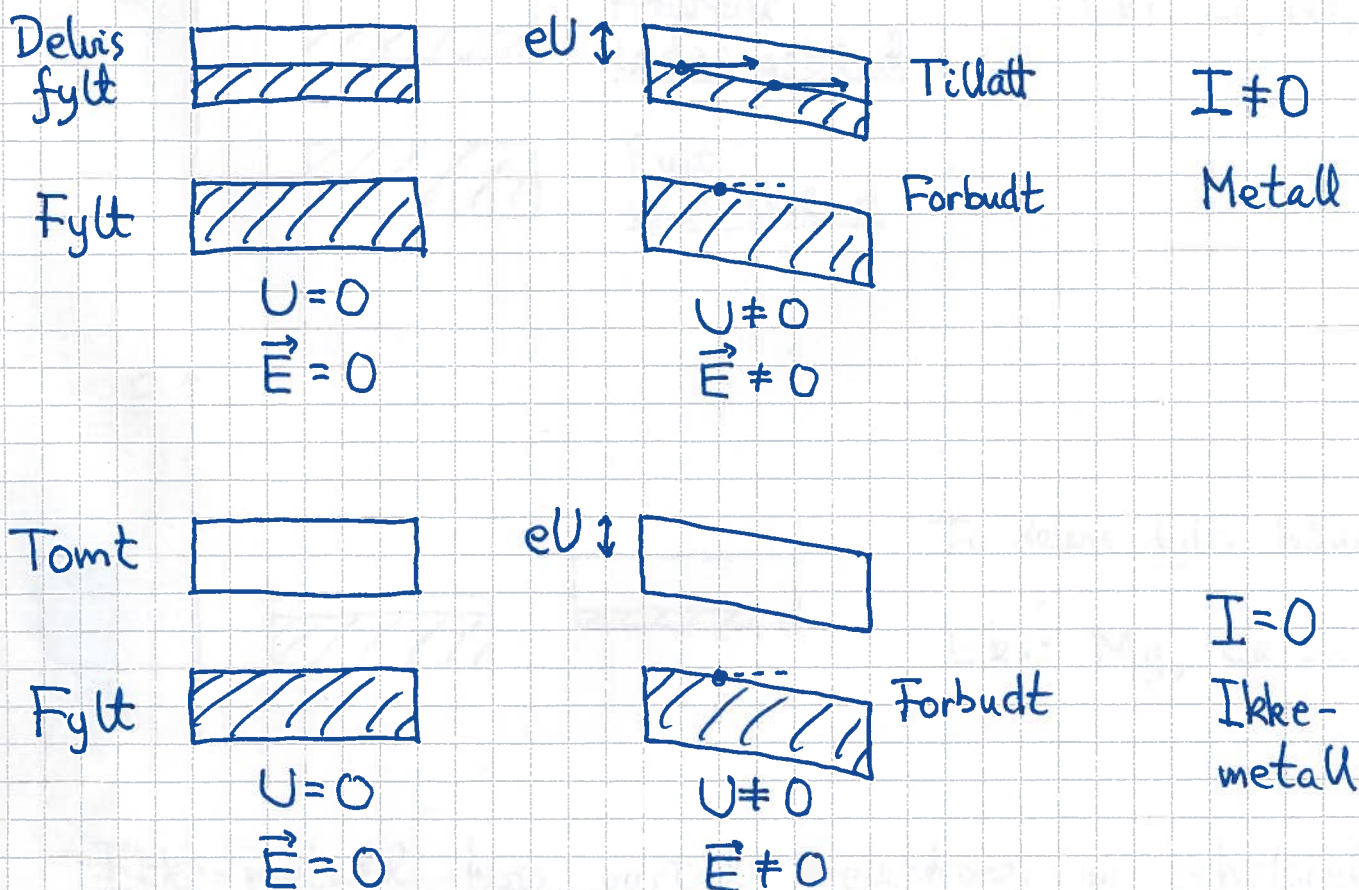
- frie partikler: Det periodiske potensialet påvirker partiklene på en slik måte at de effektivt oppfører seg som om de har masse forskjellig fra $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg. Typisk er $m^* \sim 0.1 m_e$.

Klassifisering basert på båndstruktur:

Energibånd delvis fylt med elektroner: Metall

Alle energibånd fulle eller tomme: Ikke-metall

Skjematisk:

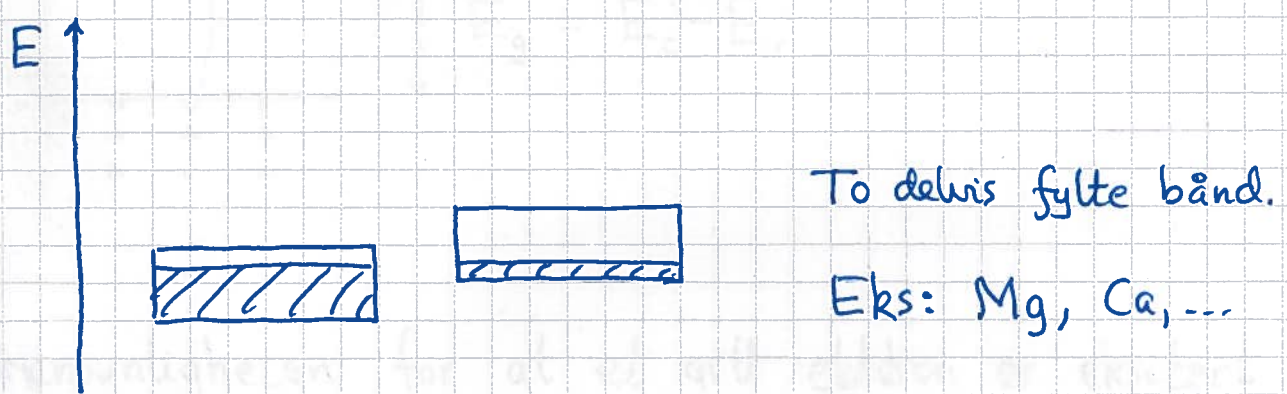
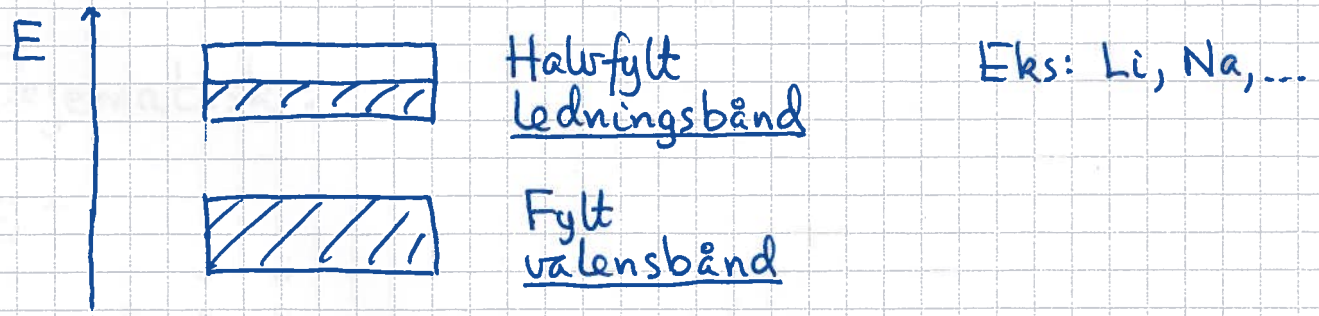


\vec{E} kan bare gi elektroner økt kinetisk energi, og dermed strøm I , dersom det er ledige tilstander med litt høyere energi.

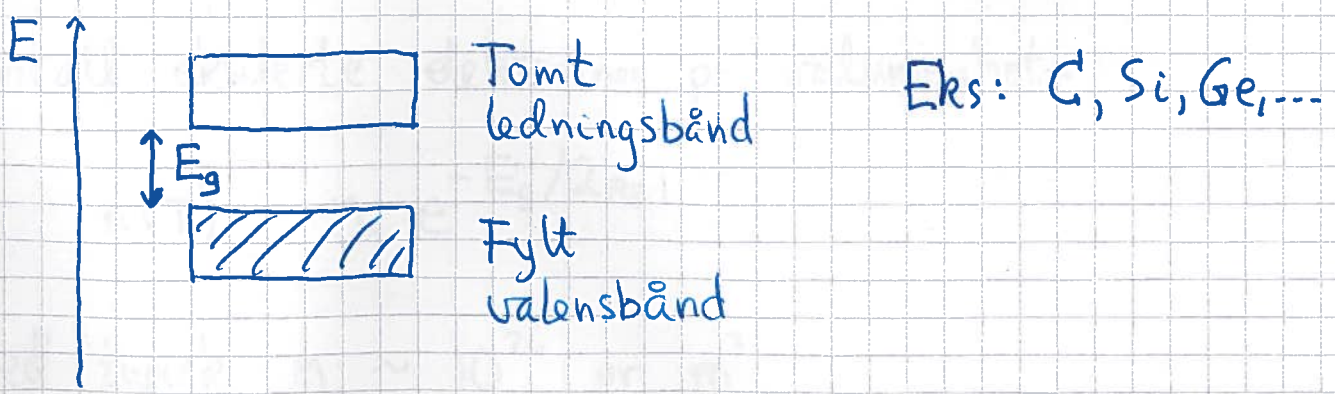
Må ha delvis fylt(e) bånd for å få $I \neq 0$.

Med N enhetsceller har vi $2N$ tilstander pr energibånd (faktor 2 pga spinn \uparrow eller \downarrow).

\Rightarrow Metall hvis oddetall elektroner pr enhetscelle (evt. overlappende energibånd):



Ikke-metall hvis partall elektroner pr enhetscelle (uten overlappende bånd):



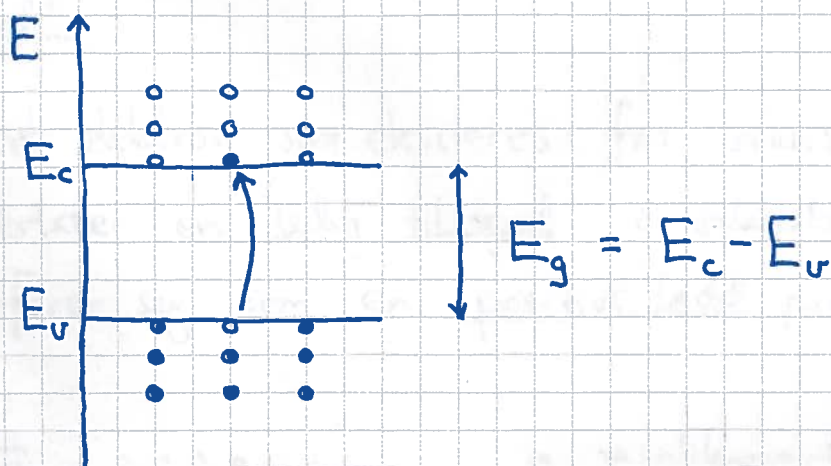
Størrelsen på båndgapet, E_g , avgjør om vi har isolator eller halvleder.

Halvledere

$T = 0$: isolator

$T = 300\text{K}$: en andel av elektronene er termisk eksitert fra toppen av valensbåndet til ledige tilstander ved bunnen av ledningsbåndet

Skjematisk :



Sannsynligheten for at et gitt elektron er eksitert fra E_v (toppen av valensbåndet) til (bunnen av ledningsbåndet) E_c ved temperatur T :

$$e^{-E_g/2k_B T}$$

Antall eksiterte elektroner pr volumenet:

$$n(T) = n_0 e^{-E_g/2k_B T}$$

med typisk $n_0 \sim 10^{26}$ pr m^3

Ek: Gruppe IV (evt. 14?), ved 300 K

C (diamant): $E_g = 5.47 \text{ eV} \Rightarrow n = 0 \Rightarrow$ isolator

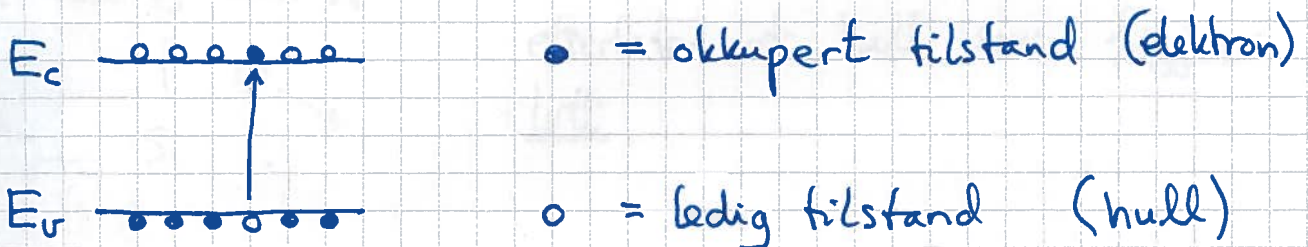
Si: $E_g = 1.12 \text{ eV} \Rightarrow n \approx 10^{16} \text{ m}^{-3} \Rightarrow$ halvleder

Ge: $E_g = 0.67 \text{ eV} \Rightarrow n \approx 10^{20} \text{ m}^{-3} \Rightarrow$ —" —

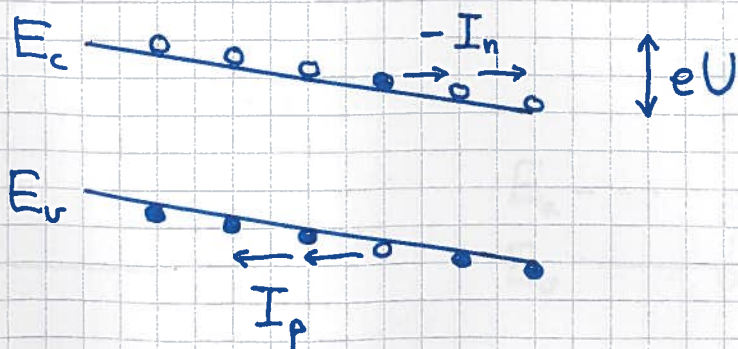
Belegnes halvleder dersom $E_g \lesssim 3 \text{ eV}$.

Hull

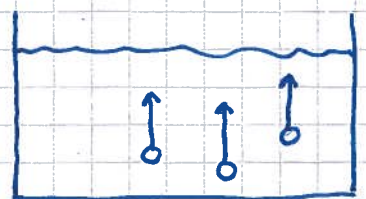
Hvert elektron som eksiteres fra valens- til ledningsbåndet etterlater en ledig tilstand i valensbåndet; denne oppfører seg som en positivt ladd partikkel; kalles et hull.



Påtrykt spenning U gir nå strøm av elektroner (I_n) og hull (I_p):



Analogi:
Gassbobler i vann

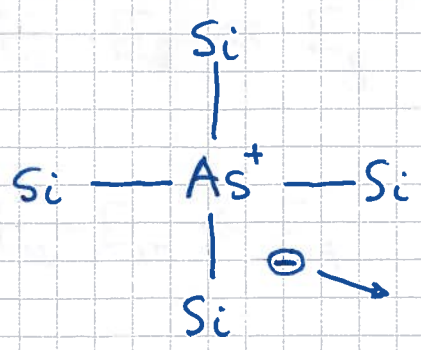


Gass opp $\hat{=}$
Vann ned

Total strøm: $I = I_n + I_p$

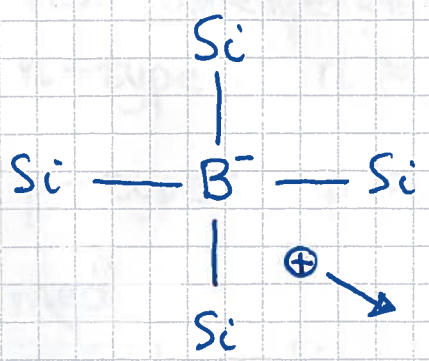
Doping av halvledere

n-type Si: Noen Si erstattes av As (ert P), som har 5 valenselektroner, mot 4 i Si.



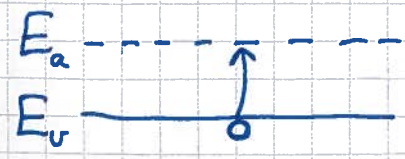
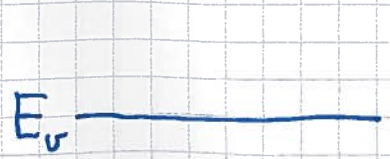
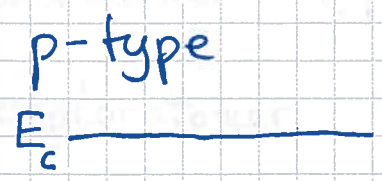
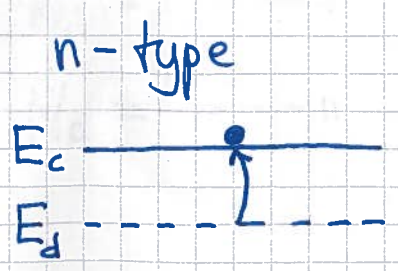
"Det femte" valenselektronet i As frigjøres lett og etterlater As^+

p-type Si: Noen Si erstattes av B (ert Al), som har 3 valenselektroner, mot 4 i Si.



B "plukker opp" ett elektron fra valensbåndet i Si ($\Rightarrow B^-$), etterlater et hull som frigjøres lett

Energidiagram:



$E_d = \text{donornivå} = \text{energi til 5. valenselektron i As}$ (100)

$E_a = \text{akseptornivå} = \text{energi til ledig tilstand i B}$

$E_c - E_d \ll E_g \Rightarrow$ Mye lettere å frigjøre elektron fra As enn å eksitere ett fra E_v til E_c

$E_a - E_v \ll E_g \Rightarrow$ Mye lettere å skape hull i valensbåndet ved å eksitere elektron fra E_v til E_a , enn å eksitere fra E_v til E_c

Ved romtemperatur:

n-type: $n \approx N_d \gg p \Rightarrow I \approx I_n$

p-type: $p \approx N_a \gg n \Rightarrow I \approx I_p$

med

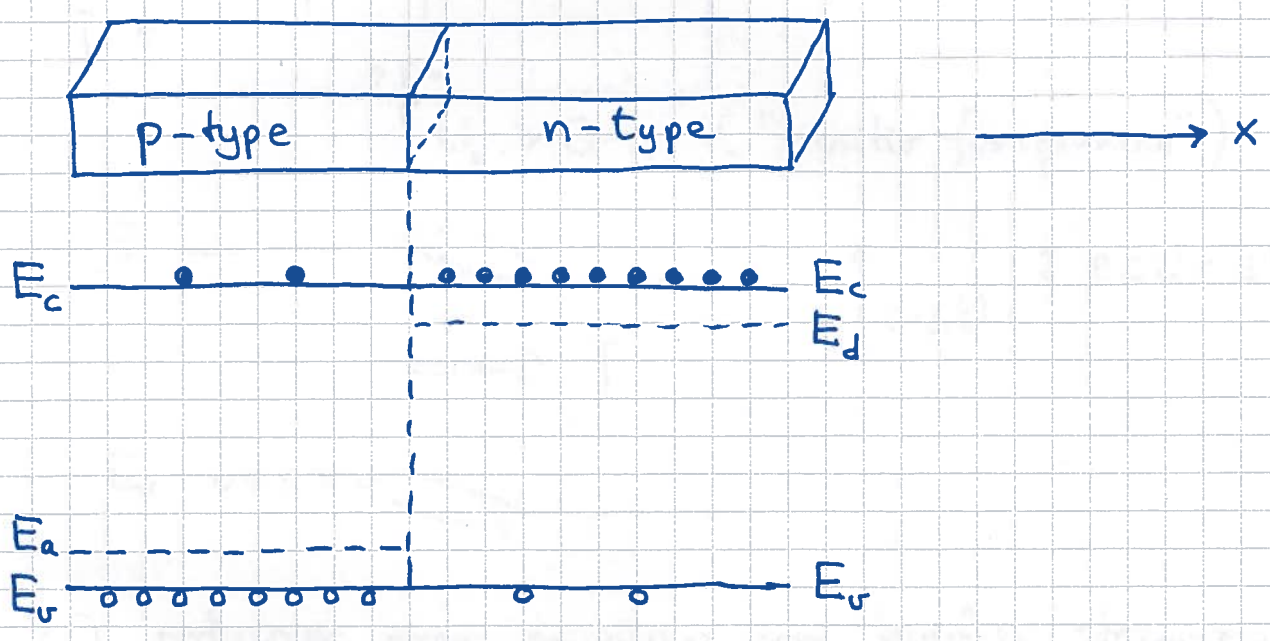
$n =$ konsentrasjon av elektroner i ledningsbåndet

$p =$  hull i valensbåndet

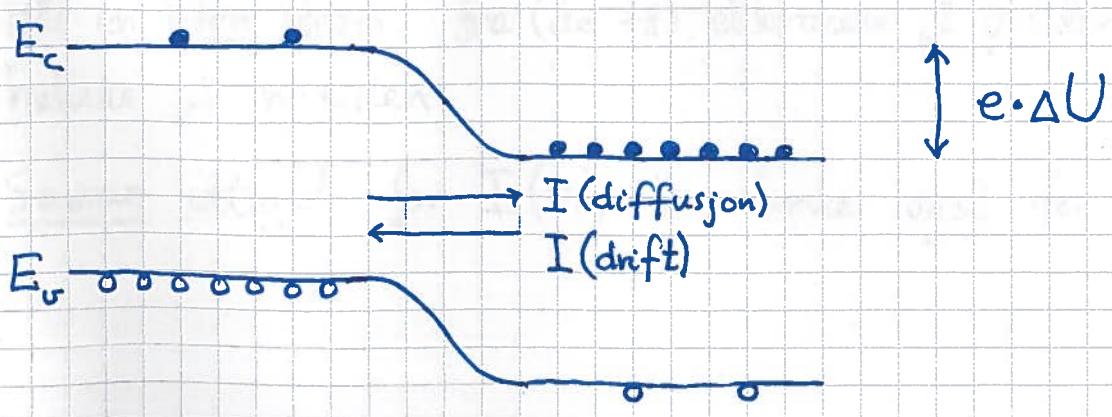
$N_d =$  donoratomer (f.eks. As)

$N_a =$  akseptoratomer (f.eks. B)

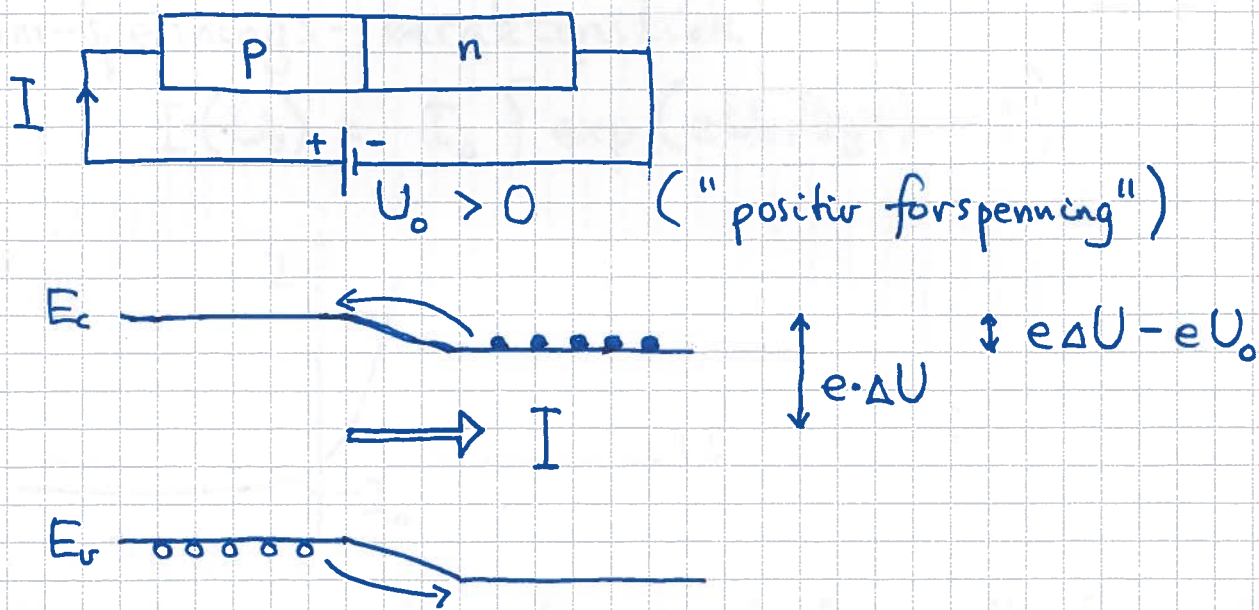
pn-overgangen (dioden!)



- ⇒ Får en diffusjonsstrøm av elektroner fra n til p og hull fra p til n.
- Gir negativt ladet p-side og positivt ladet n-side.
- Gir "innebygd" elektrisk felt \vec{E} og potensial $U(x)$, med $\vec{E} = -\hat{x} dU/dx$; \vec{E} fra n-siden mot p-siden
- Får en driftsstrøm pga \vec{E}
- Likevekt når $I(\text{diffusjon}) + I(\text{drift}) = 0$
- Energi bånd i likevekt:



Vi kobler til en spenningskilde U_0 :



• $U_0 > 0$ reduserer energibarrieren som hindrer strømmen, fra $e\Delta U$ til $e\Delta U - eU_0$

• Strømmen øker proporsjonalt med Boltzmann-faktoren $\exp\{-(-eU_0)/k_B T\} = \exp\{eU_0/k_B T\}$

• Likevekt, dvs $I=0$, hvis $U_0 = 0$.

• Dermed må $I(U_0)$ være på formen

$$I(U_0) = I_0 \{ \exp(eU_0/k_B T) - 1 \}$$

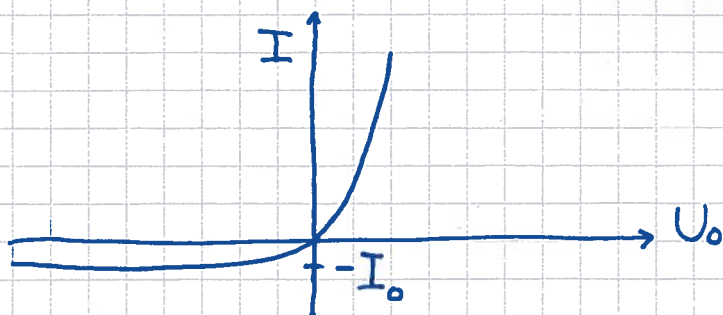
• Hvis $U_0 < 0$ ("negativ forspenning") øker energibarrieren med $e \cdot |U_0|$, dvs fra $e\Delta U$ til $e\Delta U + e|U_0|$

• Får en liten strøm, fra (de få) elektronene på p-siden og (de få) hullene på n-siden

• Samme uttrykk for $I(U_0)$ kan brukes også for $U_0 < 0$

Vi har et nytt kretselement - dioden - med strøm-spennings-karakteristikk

$$I(U_0) = I_0 \{ \exp(eU_0/k_B T) - 1 \}$$



Fungerer som en likeretter: Leder godt fra p til n, leder dårlig fra n til p.

Kretssymbol:



Selve grunnlaget for moderne elektronikk!

Mye mer om dette i FY6018 etter jul!

