

Forelesningsnotater: Faste Stoffers Fysikk

Sebastian Siljuholtet Johansen

Vår 2024

Ingress

Skrevet av studenter. Notater er tatt under forelesningene i TFY4220 Faste Stoffers Fysikk av Dag Werner Breiby. I tillegg har visse deler blitt utdypet og ekstra forklaringer har blitt lagt til visse deler.

Innhold

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Kapittel I: | 4 |
| 2 | Kapittel II: | 5 |
| 3 | Kapittel III: | 6 |
| 4 | Kapittel IV: | 7 |
| 5 | Kapittel V: | 8 |
| 6 | Kapittel VI: | 9 |
| 7 | Kapittel VII: Energibånd | 10 |
| 7.1 | Blocks Teorem | 10 |
| 7.1.1 | Oppsummering av Sentrallikningen | 10 |
| 7.1.2 | Å Bevise Teoremet | 10 |
| 7.1.3 | Konsekvensene til Block's teorem | 11 |
| 7.2 | Fyllingen av Elektronbåndene | 11 |
| 7.2.1 | Tomgitter Tilnærming | 11 |
| 7.2.2 | Litt høyre potensial(fortsatt svakt) | 11 |
| 7.2.3 | Parabolske bånd | 13 |
| | Krystall momentum | 13 |
| | Gruppehastighet og effektiv masse | 14 |
| 8 | Kapittel VIII: Halvledere | 15 |
| 8.1 | Hull | 15 |
| 8.1.1 | Båndstrukturen til GaAs og silikon | 16 |
| 8.1.2 | Å bruke absorpsjon til å forstå halvledere | 17 |
| 8.2 | Inneboende/Rene halvledere | 17 |
| 8.3 | Dopede/Urene halvledere | 17 |
| 9 | Kapittel IX: Nanoforskning | 18 |
| 9.1 | Kvantekorall | 18 |
| 9.2 | Halvleder-nanopartikler / Kvantepunkter ($r \leq 100nm$) | 19 |

1 Kapittel I:

2 Kapittel II:

3 Kapittel III:

4 Kapittel IV:

5 Kapittel V:

6 Kapittel VI:

7 Kapittel VII: Energibånd

7.1 Blocks Teorem

7.1.1 Oppsummering av Sentrallikningen

Så langt har vi funnet at for frie elektroner så følger de følgende energirelasjon:

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1)$$

Hvis vi plotter denne ser den ut som en parabol. Vi har funnet ut at i våre periodiske potensialer så kan vi finne energibåndgap, altså hakk i denne parabolen. Da bånd fra en y til en annen y , hvor vi ikke finner noen energier. Altså har vi ulovlige energibånd. Dette skaper ulike egenskaper i materialer

For et periodisk potensial fant vi at vi fikk Bragg spredning av elektronbølger. Videre fant vi også stående bølger i krystaller.

Vi fant også Block-Funksjonene. Disse så generelt slik ut:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2)$$

Disse var da løsningene til Schrödingerlikningen med et periodisk potensial. Videre ser Schrödinger likningen slik ut for et potensial:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (3)$$

$$u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R}) \quad (4)$$

Altså blir potensialet her \vec{R} -periodisk. Ved å nå bruke foriertransformer så kan vi gjøre om denne differensiallikningen til en algebraisk likning. Fouriertransformene er definert slik:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_k c_k e^{ikx} \\ u(x) &= \sum_G u_g e^{iGx} \end{aligned}$$

Disse gir oss sentrallikningen:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \sum_G u_g c_{k-G} = 0 \quad (5)$$

Denne likningen kobler hver ukjente koeffisient c_k til et lite undersett av alle andre c_k . Dette ser vi fra at k er definert fra periodiske grensebetingelser som gir oss at $k = \frac{2\pi}{L}$, mens g er definert ut i fra krystallgitteret vårt. Altså: $G = \frac{2\pi}{a}$. Siden $a \gg L$ så blir stegene mellom G -ene enormt mye større enn de mellom k -ene. Da ser vi at vi har veldig mange flere k -er for hver g . Dermed kobles bare hver c_k til et lite undersett av alle k -ene. Her blir da G -rommet et underrom av k -rommet.

Mer matematisk så kobler for eksempel c_{k_0} til $\{..., c_{k_0-2g}, c_{k_0-g}, c_{k_0}, c_{k_0+g}, c_{k_0+2g}\}$

7.1.2 Å Bevise Teoremet

La oss nå anta at vi har en løsning til bølgefunksjonen $\psi(\vec{r})$. Her kan vi da gjøre:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Gjennom sentrallikningen får vi:

$$\begin{aligned} \psi_k(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\cdot\vec{r}} \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \end{aligned}$$

Summen over \vec{G} til slutt kan vi se at er \vec{R} periodisk. Altså kunne vi ha kalt hele summen for en funksjon som er periodisk. Ved å sammenligne med definisjonen av Bloch-funksjonene, så har vi faktisk bevist at de er gyldige løsninger. Vi trenger bare å kalle summen for $u(\vec{r})$ som vi brukte i definisjonen deres:

$$u_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

7.1.3 Konsekvensene til Bloch's teorem

Vi antar at vi har $\psi_{k'}(\vec{r})$ for en gitt \vec{k}' . Da kan vi skrive fra Bloch's teorem, at: $\psi_{k'}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} u_{k'}(\vec{r})$. Nå lar vi: $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{G}$, hvor \vec{G} er en resiprokalgittervektor. Nå kan vi da skrive:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}-\vec{G}}(\vec{r}) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u'_{\vec{k}-\vec{G}} \end{aligned}$$

Hvor: $u'_{\vec{k}-\vec{G}} = u_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}$. Denne nye Blochfunksjonen er like god på alle måter som den originale. Konsekvensen her er at bølgevektoren \vec{k} er vilkårlig med hensyn til addisjonen av en resiprokalgittervektor.

7.2 Fyllingen av Elektronbåndene

Fra de periodiske grensebetingelsene så får vi at: $\Delta k = \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{Na}$. Hvis vi nå sier at \vec{k} -verdiene innenfor Brillouinsonen (enhetscellen i k-rommet) $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$, skaper et bånd, så ser vi at hvert bånd har N mulige k-verdier. Men hver av disse verdiene kan enten ha spin opp (\uparrow) eller ned (\downarrow). Altså har vi N tilstander per slikt bånd, med totalt $2N$ elektroner.

Hvis vi har et valenselektron i hver primitive enhetscelle så vil materialet vårt være et metall. Hvis det er to valenselektroner per primitive enhetscelle så kan et bånd være helt fylt, men ikke nødvendigvis. I 3 dimensjoner så kan båndene krysse over hverandre. Ved at disse båndene krysser hverandre mener jeg at:

7.2.1 Tomgitter Tilnærming

I denne tilnærmingen lar vi potensialet $u \rightarrow 0$. Da blir alle Fourier-koeffisientene $u_{\vec{G}} \rightarrow 0$. Konsekvensen her blir klart da at båndgapene forsvinner. Da blir sentrallikningen forenklet til at vi får frie elektroner igjen, som forventet. Det som er spennende å se på i denne frie modellen er hvordan vi får energibånd for hver eneste \vec{G} . Dette er fordi alle løsninger med \vec{k} vil også skape løsningene $\vec{k} + n\vec{G}$, $\vec{G} \in \mathbb{Z}$ Altså vil vi få veldig mange energinivåer: $E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2(\vec{k} + \vec{G}_n)^2}{2m}$. Dette kan vi se i bildet under:

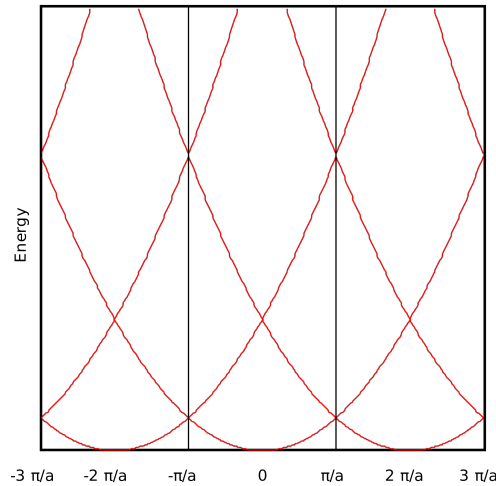
7.2.2 Litt høyre potensial(fortsatt svakt)

Fra kapittel 6 fant vi en dispersasjonsrelasjon for frie elektroner: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. I denne modellen så er alle materialer metaller siden vi alltid har et nytt nivå vi kan dytte elektroner opp i så de kan bevege seg fritt. I kapittel 7 introduserte vi Bloch-funksjoner og fant ulike energibånd. I tillegg deriverte vi sentrallikningen: $\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) c_K + \sum_{\vec{G}} u_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$.

Videre så vi at i grensen $u_{\vec{G}} \rightarrow 0$ så kunne disse parabolene overlappe slik som i figuren over i tomgittertilnærmingen 1.

La oss nå øke potensialet (forstatt svakt) og anta at: $u(x) = 2u_g \cos(\frac{2\pi x}{G}) = \sum_{\vec{G}} u_{\vec{G}} e^{i\vec{G}x}$, hvor $u_{\vec{G}}$ er reell. Vi har også at $u_{\vec{G}} = u_{-\vec{G}}$ fra tidligere. Vi definerer nå at $u_g = u_{-g} = u$ hvor alle andre $u_{\vec{G}} = 0$. La oss nå se på

Figur 1: 1D - Overlappende Tomgitter Tilnærming: [1]



sentrallikningen:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \sum_G u_G c_{k-G} &= 0 \\ \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \dots & \\ &+ u_{-2g} c_{k-(-2g)} \\ &+ u_{-g} c_{k-(-g)} \\ &+ u_0 c_k \\ &+ u_g c_{k-g} \\ &+ u_{2g} c_{k-2g} = 0 \end{aligned}$$

Her kan vi simplificere dette uttrykket siden alt annet enn u_g og u_{-g} blir lik null siden vi antok det før vi begynte. Altså får vi:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \dots & \\ &+ u_{-2g} c_{k-(-2g)} \\ &+ u_{-g} c_{k-(-g)} \\ &+ u_0 c_k \\ &+ u_g c_{k-g} \\ &+ u_{2g} c_{k-2g} = 0 = \\ \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \dots & \\ &+ u_{-g} c_{k-(-g)} \\ &+ u_g c_{k-g} = 0 \end{aligned}$$

Men nå vet vi jo at $k \rightarrow k - g$ også er en løsning. Altså gjelder også:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \dots & \\ &+ u_{-g} c_{k-g-(-g)} \\ &+ u_g c_{k-g-g} = 0 \end{aligned}$$

Videre så er jo også $k \rightarrow k + g$ og $k \rightarrow k + 2g$ og så videre for evig. Vi kan få dette i matrisform. Vi skriver derfor at: $\lambda_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ og får:

$$\begin{bmatrix} \lambda_{k-2g} - E & u_g & 0 & 0 & 0 \\ u_g & \lambda_{k-g} - E & u_g & 0 & 0 \\ 0 & u_g & \lambda_k - E & u_g & 0 \\ 0 & 0 & u_g & \lambda_{k+g} - E & u_g \\ 0 & 0 & 0 & u_g & \lambda_{k+2g} - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{k-2g} \\ c_{k-g} \\ c_k \\ c_{k+g} \\ c_{k+2g} \end{bmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \lambda_{k-2g} - E & u_g & 0 & 0 & 0 \\ u_g & \lambda_{k-g} - E & u_g & 0 & 0 \\ 0 & u_g & \lambda_k - E & u_g & 0 \\ 0 & 0 & u_g & \lambda_{k+g} - E & u_g \\ 0 & 0 & 0 & u_g & \lambda_{k+2g} - E \end{bmatrix} = 0$$

Vi kan trekke ut en mindre determinant av denne med dominante termer. Vi velger firkanten 11-22:

$$\begin{vmatrix} u_g & \lambda_{k-g} - E & u_g \\ u_g & \lambda_k - E & u_g \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow (\lambda_{k-g} - E)(\lambda_k - E) - u_g^2 = 0$$

$$\Rightarrow E(k) = \frac{1}{2}(\lambda_k + \lambda_{k-g}) \pm \left[\frac{1}{4}(\lambda_{k-g} - \lambda_k) + u_g^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

Ved å nå ta for oss sone-grensen $k = \frac{g}{2} = \frac{\pi}{a}$ så får vi at:

$$\lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{g^2}{4}$$

$$\lambda_{k-g} = \frac{\hbar^2 (k-g)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (\frac{g}{2} - g)^2}{2m} = \lambda_k$$

$$\Rightarrow E(B.Z) = E\left(\frac{g}{2}\right) = \lambda_{\frac{g}{2}} \pm u_g = \frac{\hbar^2 (\frac{1}{2}g)^2}{2m} \pm u_1 = \underbrace{\frac{\hbar^2 (\frac{\pi}{a})^2}{2m}}_{\text{Fritt elektron } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \pm \underbrace{u_1}_{\text{Båndgap av størrelse } 2u_1}$$

Vi kan også vise at:

A: $\psi_{k=\frac{g}{2}}(x) = e^{ig\frac{x}{2}} \pm e^{-ig\frac{x}{2}}$, som er en stående bølge. Se kapittel 7

B: $u_g = 0$, på grensen til B.Z-en

C: Nær nok grensen til B.Z-en så er båndstrukturen parabolisk.

7.2.3 Paraboliske bånd

For et fritt elektron hadde vi jo da: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, som er parabolisk, men hvordan gjør vi de andre elektronene paraboliske også? Vel vi vil introdusere en effektiv masse m^* . Men hvorfor ville massen ha endret seg? Den vil endre seg fordi elektronet vil vekselvirke med omgivelsene (ionene rundt seg), og dermed vil bevegelsen dens være vanskeligere å idusere. Altså øker treghetsmomentetdens og dermed "massen" og den effektive massen.

Krystall momentum

\vec{k} kan enten bli tolket som en bølgevektor eller som 3 kvantetall. $\hbar\vec{k}$ er ikke det reelle/fysiske momentumet til elektronene. Vi har at $\hat{p} = -i\hbar\nabla$. For en Bloch-tilstand: $\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\vec{r})$. La oss nå bruke \hat{p} på denne:

$$\hat{p}\psi_k(\vec{r}) = -i\hbar\nabla\psi_k(\vec{r}) = \underbrace{\hbar\vec{k}\psi_k(\vec{r}) - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}i\hbar\nabla u_k(\vec{r})}_{\text{Ingen skarp egenverdi}}$$

Selv om vi ikke har noen skarp egenverdi så er $\hbar\vec{k}$ fortsatt nyttig. Det er kalt krystall-momentum.

Gruppestastighet og effektiv masse

Vi husker at gruppestastighet er definert som: $v_g = \frac{d\omega(k)}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$.

Som gir oss aksellerasjonen: $a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE(k)}{dk} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{d^2 E(k)}{dk^2} \frac{dk}{dt} \right)$.

Hvis vi nå ser på et eksternt felt fra newtons lov: $\hbar \frac{dk}{dt} = -e\varepsilon$

Som fører til at: $a = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} e\varepsilon$.

Hvis vi nå definerer at $m^* = \left(\hbar^2 \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$ så får vi at $m^* a = -e\varepsilon$.

For frie elektroner blir jo da $m^* = m$, fra: $\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{d^2}{dk^2} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) = \frac{\hbar^2}{m}$

8 Kapittel VIII: Halvledere

Ved null temperatur vil halvledere bli til insulatorer. Dette er fordi ved null temperatur vil et system ha falt ned i alle orbitalene så alle elektronene sitter fast". Altså kreves det mye energi og et stort potensial over stoffet for å få til at elektroner hopper ut av disse orbitalene og begynner å bevege seg. Altså kan vi si for halvledere at:

- Konduktivitet øker når temperatur øker. Dette blir da fordi fler elektroner eksiteres til ledningsbåndene eller nærmere dem ved en høyere temperatur. Da er det lettere å bevege dem og dermed har vi som sagt at konduktiviteten øker.
NB!: I metaller vil en økende temperatur føre til mer og mer fononvekselsvirkninger som forstyrrer elektronene og dermed minker konduktiviteten.
- De har et båndgap på $\leq 3\text{eV}$.
- De har en ladningsbærerkonsentrasjon som er mye lavere enn for metaller. Altså har vi for metaller at $n \propto 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ elektroner, mens vi har opp til $n \propto 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ for halvlederen Germanium ved romtemperatur. Grunnen til at jeg spesifiserer romtemperatur er fordi metallene vil være fylt opp med elektroner, mens de ikke er det for halvlederene. Altså vil antall elektroner i ledningsbåndene minke ved temperatur. Ladningsbærerkonsentrasjonen er jo da antall elektroner per volum i disse ledningsbåndene, og vil dermed også minke for halvledere ved lavere temperatur.

Nå definerer jeg at n er antall elektroner i ledningsbåndene, mens p er antall hull i valensbåndene. Da kan vi definere at:

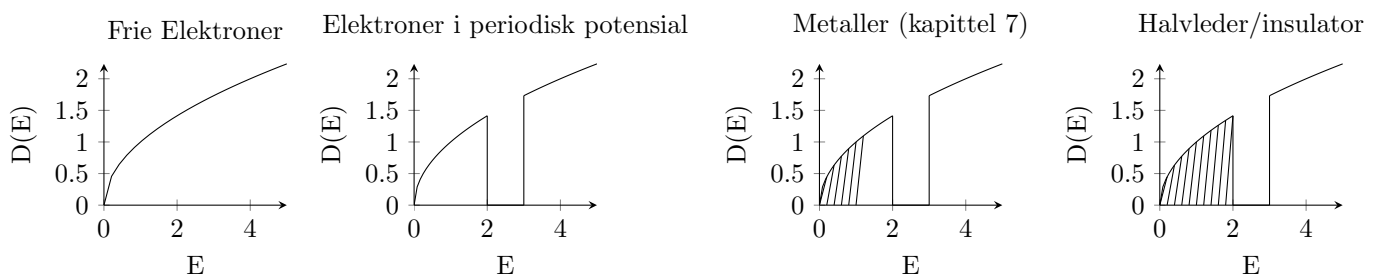
En iboende eller ren halvleder har $n = p$:

- En slik halvleder må være veldig ren. Derfor blir de ofte bare av akademisk interesse.

På den motsatte siden har vi ytte eller urene halvledere, som har $n \neq p$:

- Her har vi Doping: "urene" og andre typer atomer i krystallstrukturen som har en tendens til å ta eller gi elektroner til omgivelsene.

Så kan vi tegne frie elektroner og elektroner i et periodisk potensial, i tillegg til hvordan elektronene ville vært fylt opp i disse i metaller i motsetning til halvledere eller insulatorer:



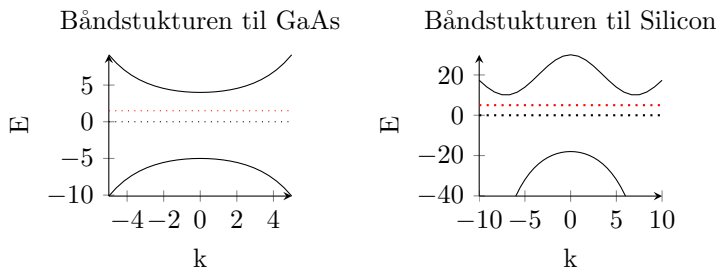
Noter at det kjemiske potensialet μ er i midten av båndgapet. ...

8.1 Hull

Et hull er en ledig orbital (tilstand") i et ellers fylt bånd. Det oppfører seg som en partikkel med motsatt ladning til elektronene i båndene. Den effektive massen til et slikt hull vil også være motsatt. Altså $m_h^* = -m_e^*$.

Fra før visste vi at effektiv masse $m^* \stackrel{\text{def}}{=} \left(\hbar^2 \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$. Har vi huller i båndene våre kan elektronene bevege seg i motsatt retning i forhold til det man hadde forventet når man legger til et potnesial. Altås får man da en slags negativ effektive masse på elektronene, mens hullene får en positiv masse.

8.1.1 Båndstrukturen til GaAs og silikon



Her blir båndet under valensbåndet og båndet over er ledningsbåndet. I tillegg representerer linjen i mitten energien $E = 0$, og den røde linjen er det kjemiske potensialet μ . Vi ser også at fermi-fordelingen faller av fort. Altså er de mest interessante elektronene plassert på steder hvor vi har høyest aksellerasjon. På grafen til venstre har vi et direkte båndgap. Får å hoppe over må vi ha et foton med $E = E_g$ for å eksitere et elektron fra valensbåndet til ledningsbåndet. Energien her er neglisjerbar og er en vertikal prosess hvor elektroner hopper opp i energi med samme k .

I tillegg har vi her et Indirekte båndgap på høyresiden fordi elektroner må endre k mer. Altså er fononassistentet krav og da er det mindre sannsynlig. Her til høyre får vi et båndgap på $E_g = 1.11\text{eV}$. For å eksitere elektronene trenger de et foton med $E = E_g$, i tillegg ødelegger eller skaper man et fonon med Δk krystall momentum for å få til eksitasjonen.

For solpaneler vil man ha et direkte båndgap som for eksempel GaAs fordi det gir bedre ytelse men der dyrere. Altså bruker satellitter GaAs mens hus bruker Si.

Videre vil jeg definere Radierende Rekombinasjon”:

- Fotoner er emittert når elektroner går fra ledningsbåndet til valensbåndet.
- LED (light emitting diodes) (lys emitterende dioder)

Hvis vi ser på et foton som har lik energi som båndgapet har vi:

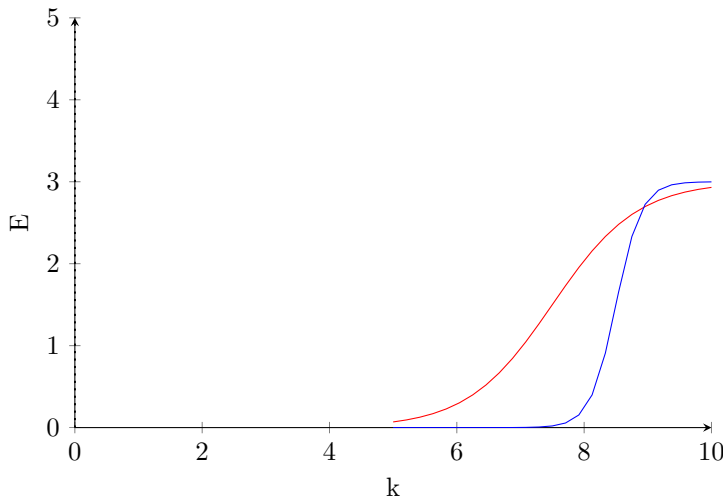
$$\begin{aligned}\hbar\omega_{optisk} &= E_g \\ \omega &\propto \frac{E_g}{\hbar} \propto 10^{14}\text{s}^{-1} \\ k_{optisk} &= \frac{\omega_{optisk}}{c} \propto 10^6\text{m}^{-1}\end{aligned}$$

Sammenlign med $g_1 = \frac{2\pi}{a} \propto 10^{10}\text{m}^{-1}$.

Altså ser vi at endringen man ville hatt i momentum ikke er i nærheten av nok til å komme seg ut av B.S-en. Altså er prosessen her en vertikal prosess til en veldig god approksimasjon.

8.1.2 Å bruke absorpsjon til å forstå halvledere

Vi kan bruke lys til å forstå halvledere. La oss se på hvor mye lys som er absorbert i forhold til energi:
Lys absorpsjon



Her er de to fargene direkte versus indirekte absorpsjon. Altså ser vi at de to tilfellene gir forskjellige grafer.

$$I(\lambda) = I_0(\lambda)e^{-\mu(\lambda)s}$$

8.2 Inneboende/Rene halvledere

8.3 Dopede/Urene halvledere

Som vi har utledet i forrige delkappittel hadde vi at:

$$n = \frac{1}{V} \int_{E_g}^{\infty} D_c(E) f_c(E, T) dE = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\left(\frac{m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}}_{\propto 10^{25} m^{-3} \text{ for } T \approx T_{\text{romtemp}}} e^{-\frac{(E_g - \mu)}{k_B T}}$$

$$p = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^0 D_v(E) (1 - f_e) dE = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_h^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\mu}{k_B T}}$$

$$\Rightarrow np = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

Altså har vi ingen μ -avhengighet. Ved inneboende halvledere har vi at $n = p$ (noter at $np = \text{konstant}$), som gir oss (ved å løse likningene over for μ):

$$\mu = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right)$$

Nå har vi da at dopede halvledere deles inn i to grupper. N og P-type.

- N-Type:
 - Det er donor-urenheter i dem. Altså atomer som vil donere vekk elektroner til omgivelsene.
 - Ved å bruke Si og Ge så brukes oftest gruppe 5 elementer for å dope. Hovedbæreren i halvlederene er elektroner
- P-Type:
 - Det er motager-urenheter. Altså atomer som gjerne tar imot elektroner fra omgivelsene.

- Igjen er det Si og Ge som brukes, men for å dope her bruker mann som oftest gruppe 3 elementer. Hovedbæreren i disse halvlederene er hull.

Typiske tall her er da at man har mellom 0.0000001% - 0.001% med urenheter i et stoff. Å notere seg her er at Si har $5 \cdot 10^{28}$ atomer per m^3 , og en inneboende Ladningsbærerkonsentrasjon på $\approx 10^{16}$ per m^3 ved romtemperatur. Oppsummert kan vi da se at vi bruker elementer fra gruppe 4 som Si og Ge og doper dem med donorer eller motagere av elektroner fra gruppe 3 og 5. Slike små addisjoner av stoffer kan faktisk øke konduktiviteten til et stoff med hele 10 000x!

Denne dopingen gir nye tilstander i båndgapet og endrer det kjemiske potensialet. Disse ligger mellom ledningsbåndet og valensbåndet og for en n-type halvleder ligger den over, mens for en p-type halvleder ligger den under. Da flyttes det kjemiske potensialet fra halvveis til mellom disse donortilstandene og ledningsbåndet for n-type halvledere mens for p-type halvledere ligger de da nede mellom donortilstandene og valensbåndet.

Ved en lav temperatur har man for donorer at μ må være mellom donortilstandene og ledningsbåndet. Ved en høyere temperatur vil alle donorelektroner gå i ledningsbåndet mens μ vil bevege seg mot $\frac{E_g}{2}$ fordi man da må ta elektroner fra valensbåndet for å eksitere dem til ledningsbåndet.

9 Kapittel IX: Nanoforskning

Hvorfor er folk så interesserte i nanoforskning? Vel. Vi kan begynne med å se på endelige faste stoffer (nanostrukturer). Når vi er i disse små skaalaene får vi kvanteinnesperring, endring av bulken, og vi har et stort overflateareal med reaksjoner.

Så langt i kurset har vi snakket om periodiske grensebetingelser. Vi har gjort dette for å fjerne alle overflateeffektene. Altså er vi uavhengige av hvor vi er på overflaten ved at vi har et potensial $u(x, y, z) = u(x+L, y+L, z+L)$. På grunn av disse periodiske grensebetingelsene får vi at momentumet til partikler i systemet er kvantiserte: $k = \frac{2\pi}{a}n$. Vi har også da at N atomer vil gi N normalmoder av vibrasjon. For lange men endelige kjeder vil tilstandstettheten være høy. Når vi har en film av tykkelse $d \propto \lambda$, vil vi ha kvanteeffekter gjennom dimensjonen til denne tykkelsen. Altså kan man få fripartikkelø tilstander langs den lengden som er veldig lang $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, men kvantiserte tilstander langs den tynne lengden.

Områder man kan bruke dette er hvis man har en halvleder og et vakuum. Hvis man setter en tynn film over halvlederen, vil vi få en slags brønn i potensialet mellom halvlederen og vakuumet. Da kan vi gjøre en Ansatz: $\psi_{tot}(r) = \psi(z)\psi_{side}(x, y)$ hvor: $\psi(z) = Ae^{ik_z z} + Be^{-ik_z z}$. Hvis man da har en uendelig brønn, må bølgefunksjonen være null ved overgangen mellom disse tre stoffene. Da får vi det som kalles for en De-Broglie-betingelse: $2d = n\lambda \Rightarrow 2k_z d = 2\pi n$, som gir oss at:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2md^2}$$

For en endelig brønn kan man vise at: $2k_z d + \Phi_i + \Phi_v = 2\pi n$.

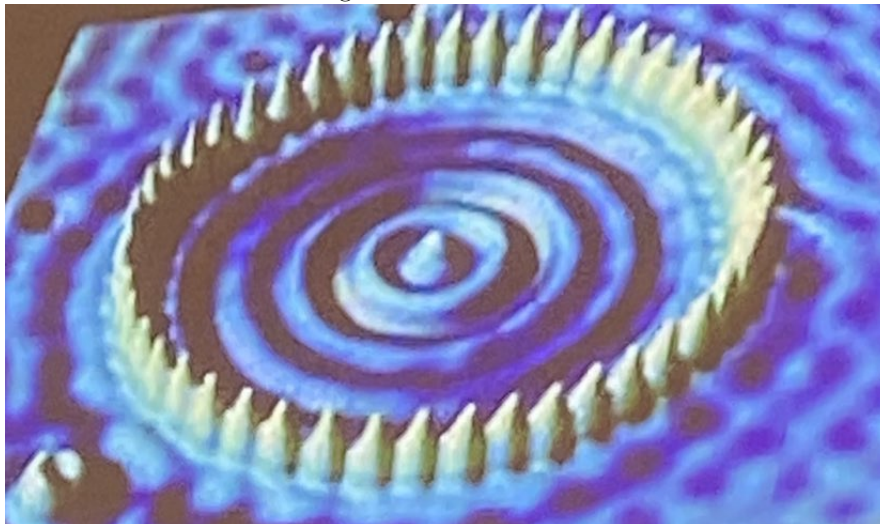
9.1 Kvantekorall

En kvantekorall har en diameter på $\approx 70\text{\AA}$. Man før frie elektroner på overflaten denne ligger på. Den er også bygget opp av cirka 50 jernatomer på en kobberoverflatefilm. Se bildet for hvordan de ser ut:

Den letteste måten å modellere denne er ved å velge et potensial som er uendelig utenfor korallen og 0 innenfor. Altså blir dette en sfærisk uendelig brønn. Med dette potensialet får vi løsninger i formen til Bessel-funksjonene:

$$\psi_{ix}(R) = AJ_m(kr) + \underbrace{BY_m(kr)}_{=0 \text{ fordi } Y_m \text{ divergerer når } r \rightarrow 0}, \text{ med betingelsen } J_m(ka) \text{ og } \varepsilon = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2ma^2}$$

Figur 2: Kvantekorallen



9.2 Halvleder-nanopartikler / Kvantepunkter ($r \leq 100\text{nm}$)

For å lage et elektron-hull par må du ha like mye energi som båndgapet i halvlederen. I en halvleder nano-krystall vil vi få:

$$E_{\min}^{\text{nano}} = E_{\text{gap}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu r^2}}_{\text{Kvanteinnespering av elektronet og hullet som begge er lokalisert mer enn i bulken.}} - \underbrace{\frac{1.8e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{Coloumb-vekselsvirkning mellom hullet og elektronet}} \quad (6)$$

Hvor her μ er den reduserte massen til elektronet og hullets effektive masser. Noter her også at det første leddet har med dreieimpulsen til dette paret å gjøre og avhenger av $1/r^2$. Disse kvantepunktene vil også endre på båndgapet. Jo mindre de er, jo større er båndgapet. I tillegg endrer jo da fargen til disse kvantepunktene seg til å bli blåere ved en høyere energi. Her kan man se kvanteeffektene i et bilde som viser slike kvantepunkter i et stoff preparert i ulike størrelser:

Figur 3: Kvantepunktstoff

