

Elektronikai anyagtudomány

3. előadás

Dr. Bonyár Attila, egyetemi docens

bonyar.attila@vik.bme.hu

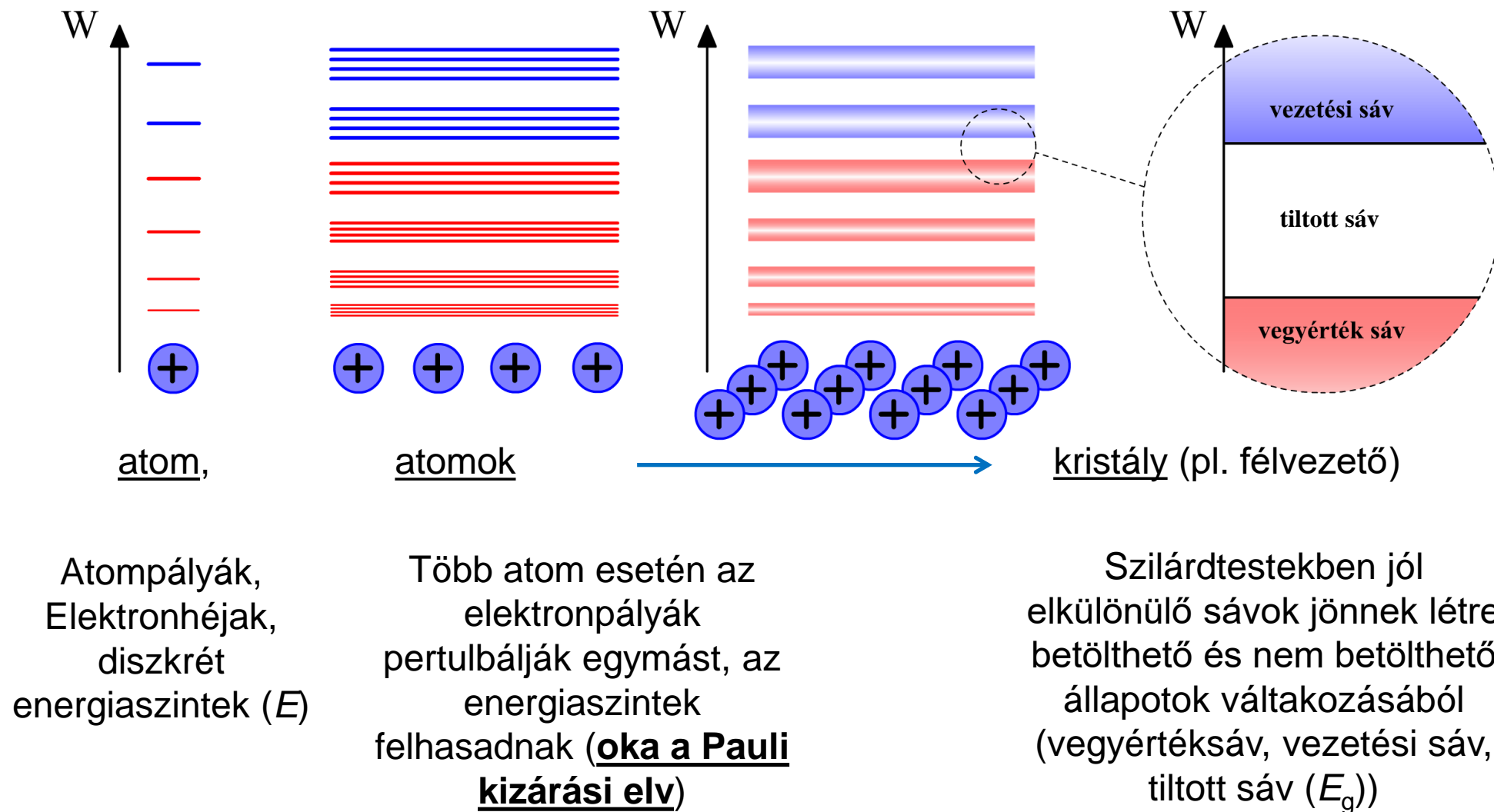
Budapest, 2023.03.16.

Áttekintés (az első három előadás)

1. Bevezetés: A négy alapelemtől a standard modelling
2. Az atom felépítése – atommodellek
3. Az elemek periódusos rendszere
4. Kémiai kötések és a makroszkopikus fizikai tulajdonságok kapcsolata
5. **Az anyagok elektronszerkezete – innen folytatjuk ma**

5. Az anyagok elektronszerkezete

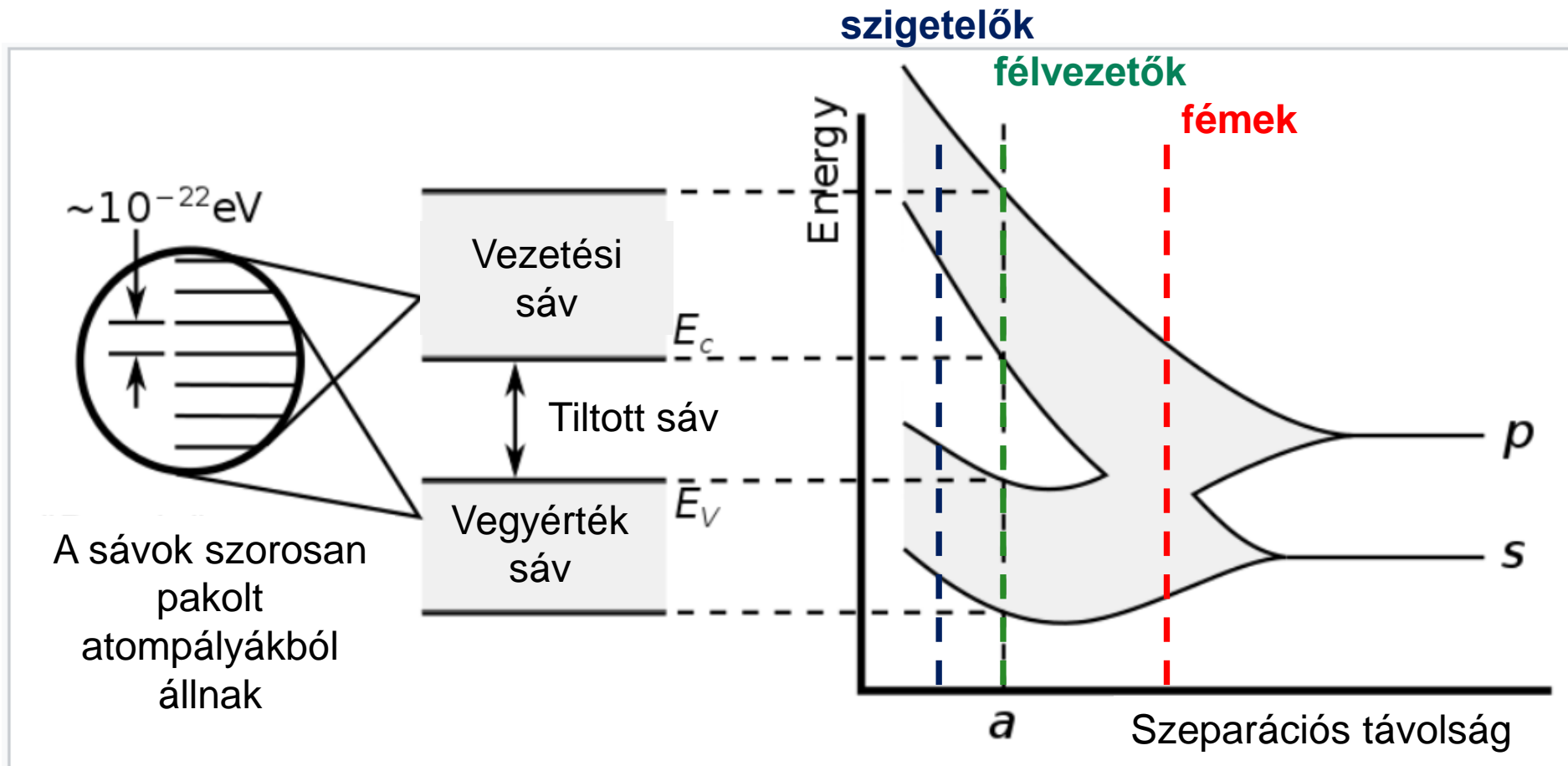
A sávszerkezet kialakulása



5. Az anyagok elektronszerkezete

A sávszerkezet kialakulása – az atompályák felhasadása

Egymás potenciálterében az atompályák energiaszintjei felhasadnak az atomok közötti távolság függvényében.



Egyedi atomok diszkrét energiaszintjei

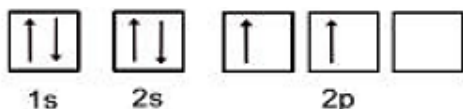
5. Az anyagok elektronszerkezete

A sávszerkezet kialakulása – az atompályák felhasadása

Gyémánt

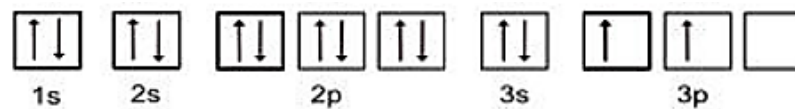
(kovalens szén, szigetelő)

Egyedi atomok
kiindulási
elektronszerkezete:



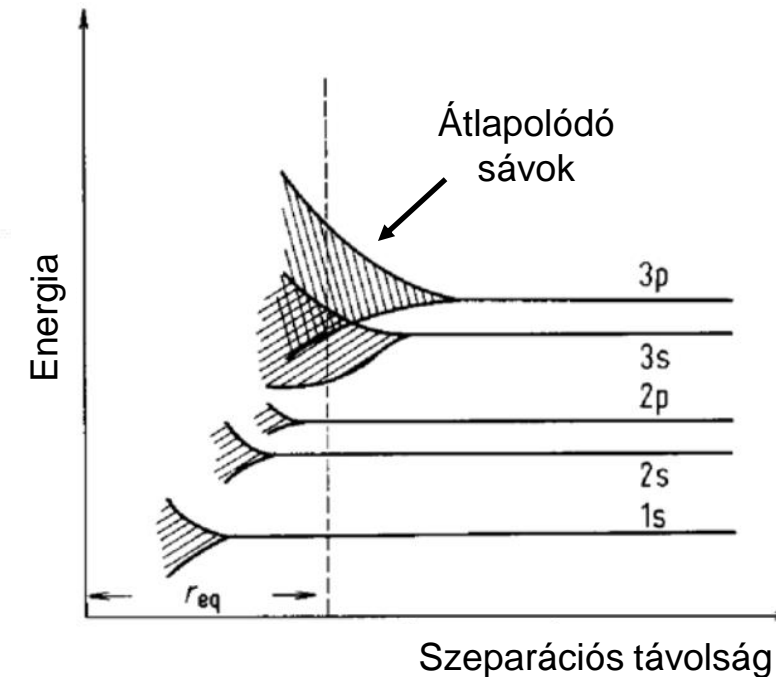
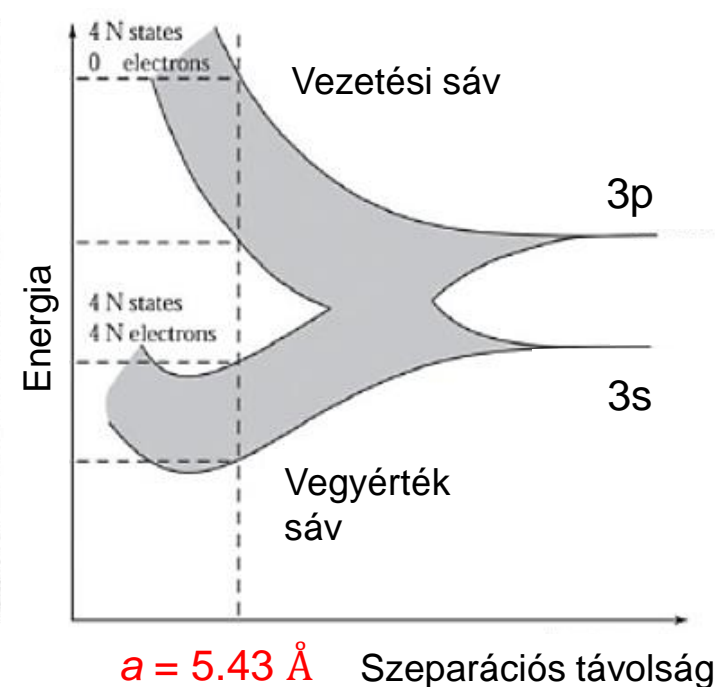
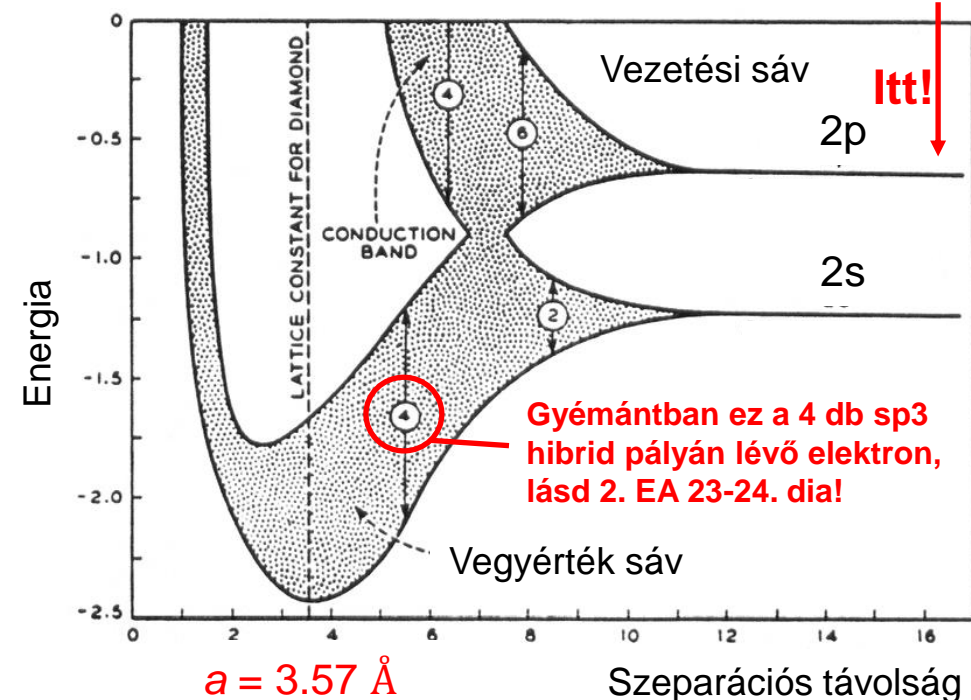
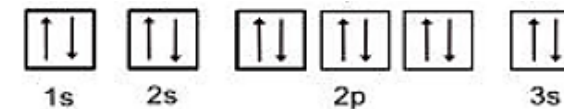
Szilícium

(kovalens, félvezető)



Magnézium

(fém, vezető)



BMEETT

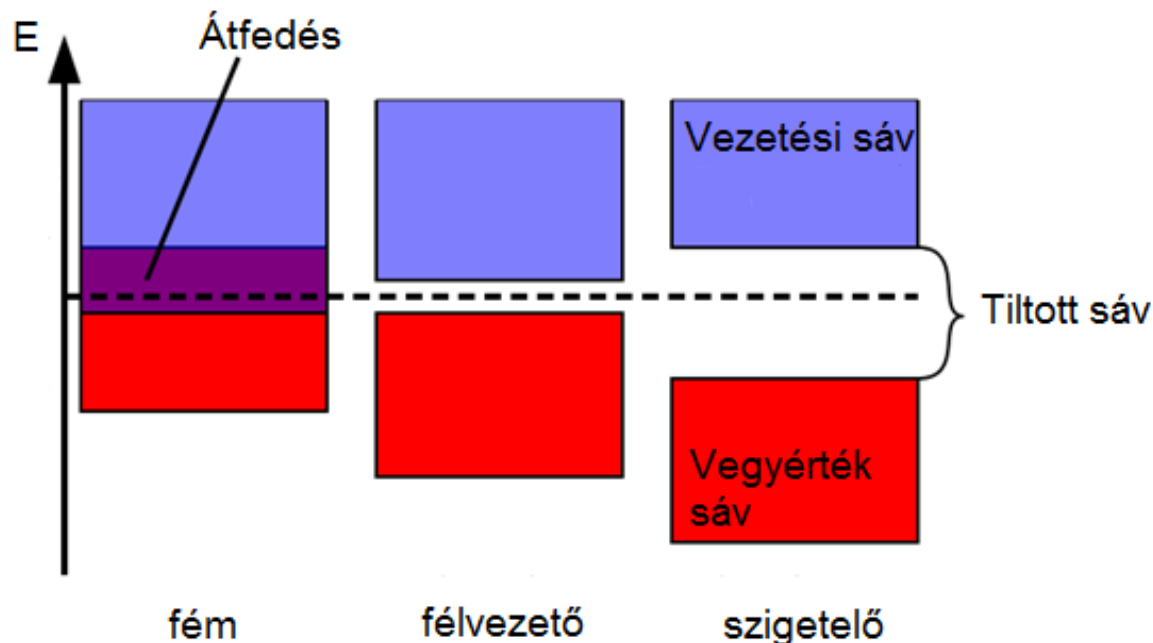
$$E_g = 5.47 \text{ eV}$$

$$E_g = 1.1 \text{ eV}$$

Nincs E_g

5. Az anyagok elektronszerkezete

A különböző sávszerkezetek



Klasszikus (kevésbé precíz) definíciók:

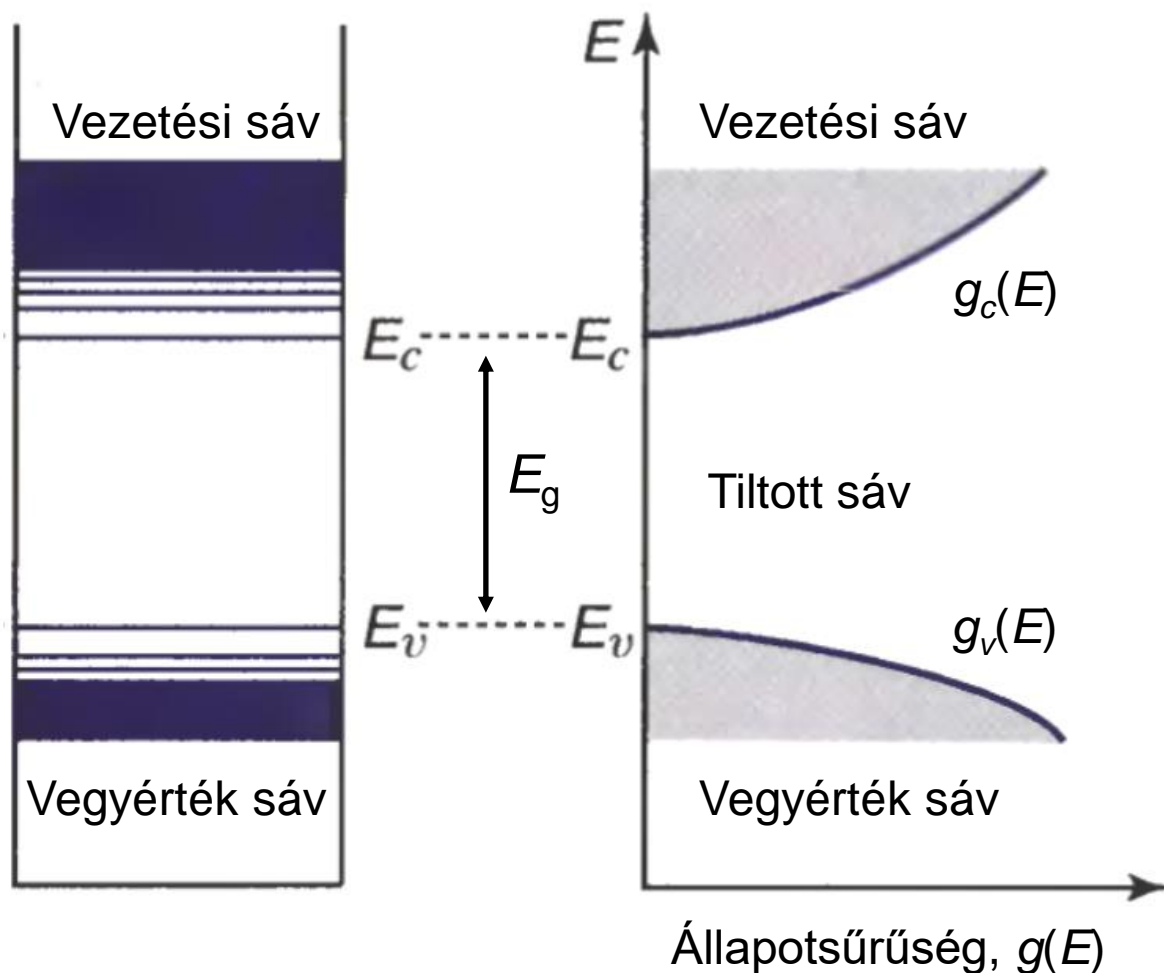
- **Szigetelők:** $E_g > 2 \text{ eV}$
- **Félvezetők:** $E_g < 2 \text{ eV}$
(pl. Si: 1.1 eV, Ge: 0.67 eV, GaAs: 1.43 eV)
- **Vezetők:** nincs tiltott sáv, a vezetési és a vegyérték sávok „átlapolódnak”.

Érdekesség: Vessük össze a tiltott sávok szélességét a látható fény energiatartományával! (1. előadás, 24. dia)

Szilárdtestekben az elektromos tulajdonságokat az elektronok száma, az elfoglalható energiaállapotok eloszlása ($g(E)$) és az ezek közötti lehetséges átmenetek, azaz az **elektronszerkezet** határozza meg.

5. Az anyagok elektronszerkezete

Az állapotsűrűség függvény, $g(E)$



Az állapotsűrűség függvény, $g(E)$, **potenciálisan betölthető elektronállapotok** számát (sűrűségét) adja meg az energia függvényében.

A legegyszerűbb közelítésben (parabolikus sávszél közelítés) az állapotok sűrűsége a tiltott sáv széleitől $g_c(E) = \text{const} * \sqrt{(E - E_c)}$ szerint nő.

Az állapotsűrűség függvény **nem** az elektronok sűrűségét adja meg az energia függvényében, pusztán a **lehetséges állapotokat** definiálja.

Az elektronok (általánosan töltéshordozók) sűrűségének meghatározásához ismernünk kell a rendelkezésre álló energia mennyiségét, valamint azt, hogy ez hogyan oszlik el az elektronok között.

5. Az anyagok elektronszerkezete

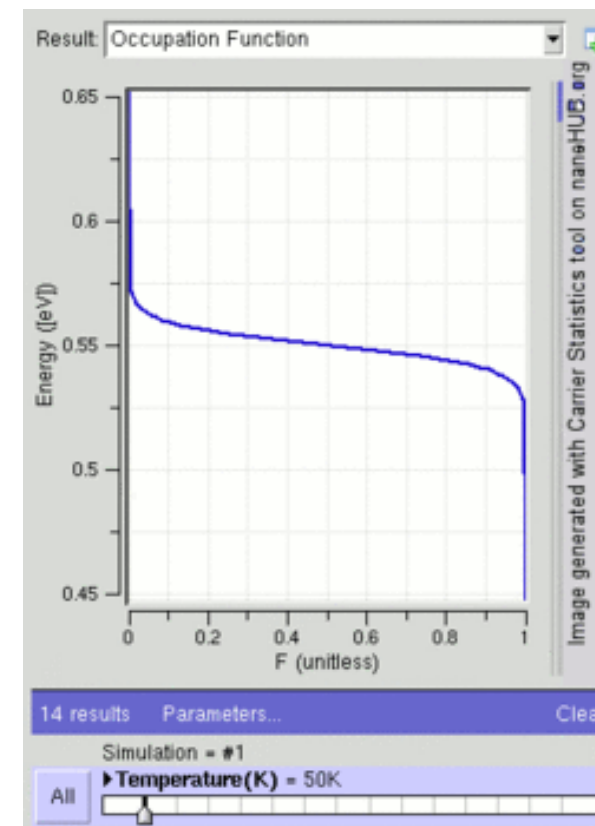
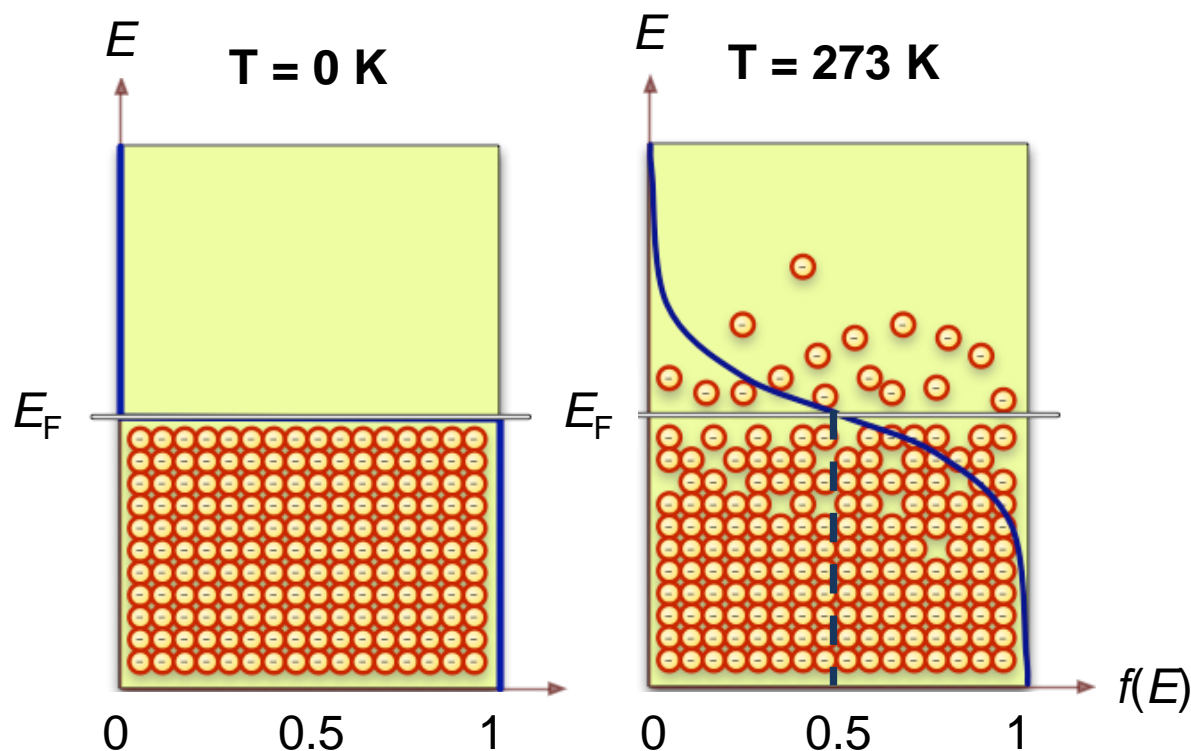
A Fermi-Dirac statisztika, $f(E)$

Az elektronok, mint fermionok, a **Fermi-Dirac statisztika** alapján töltik be a lehetséges energiaállapotokat, a rendelkezésre álló termikus energiának megfelelően.

- A **Fermi-szint**: a) $T=0\text{K}$ hőmérsékleten a legmagasabb betöltött energiaállapot.
b) $T=0\text{K}$, az 50 %-os betöltési valószínűséghez tartozó energiaszint.

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}}$$

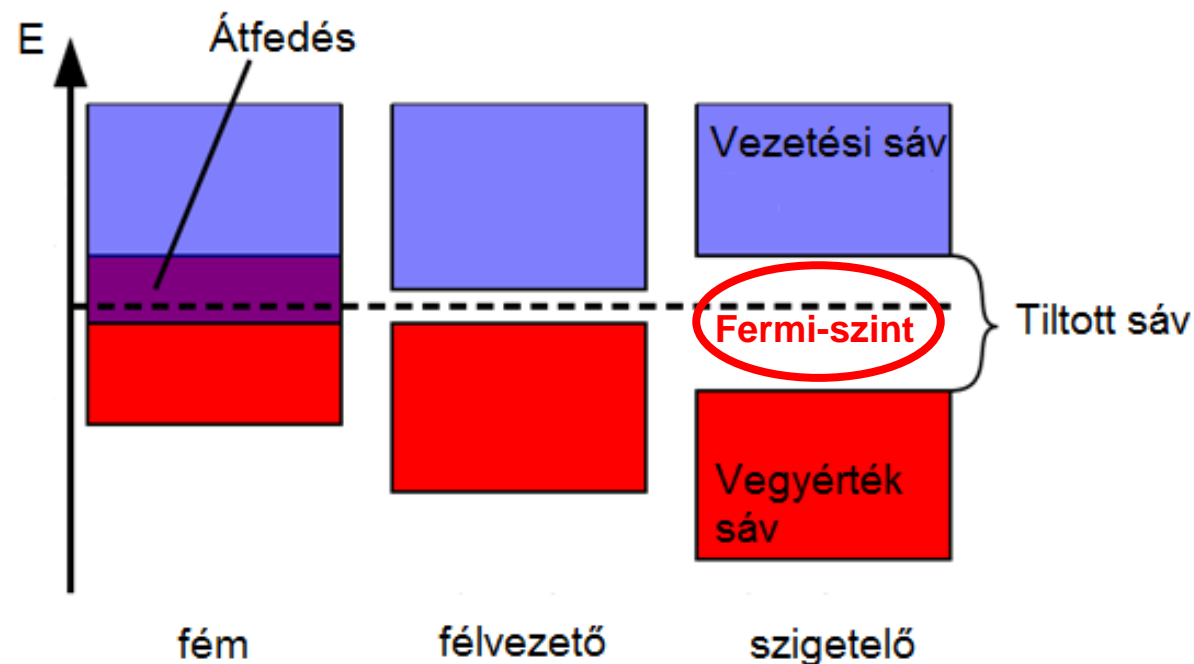
E_F : Fermi-szint,
 k : Boltzmann-állandó,
 $\frac{1}{2} kT$: termikus
átlagenergia
szabadságfokonként.



5. Az anyagok elektronszerkezete

A különböző sávszerkezetek

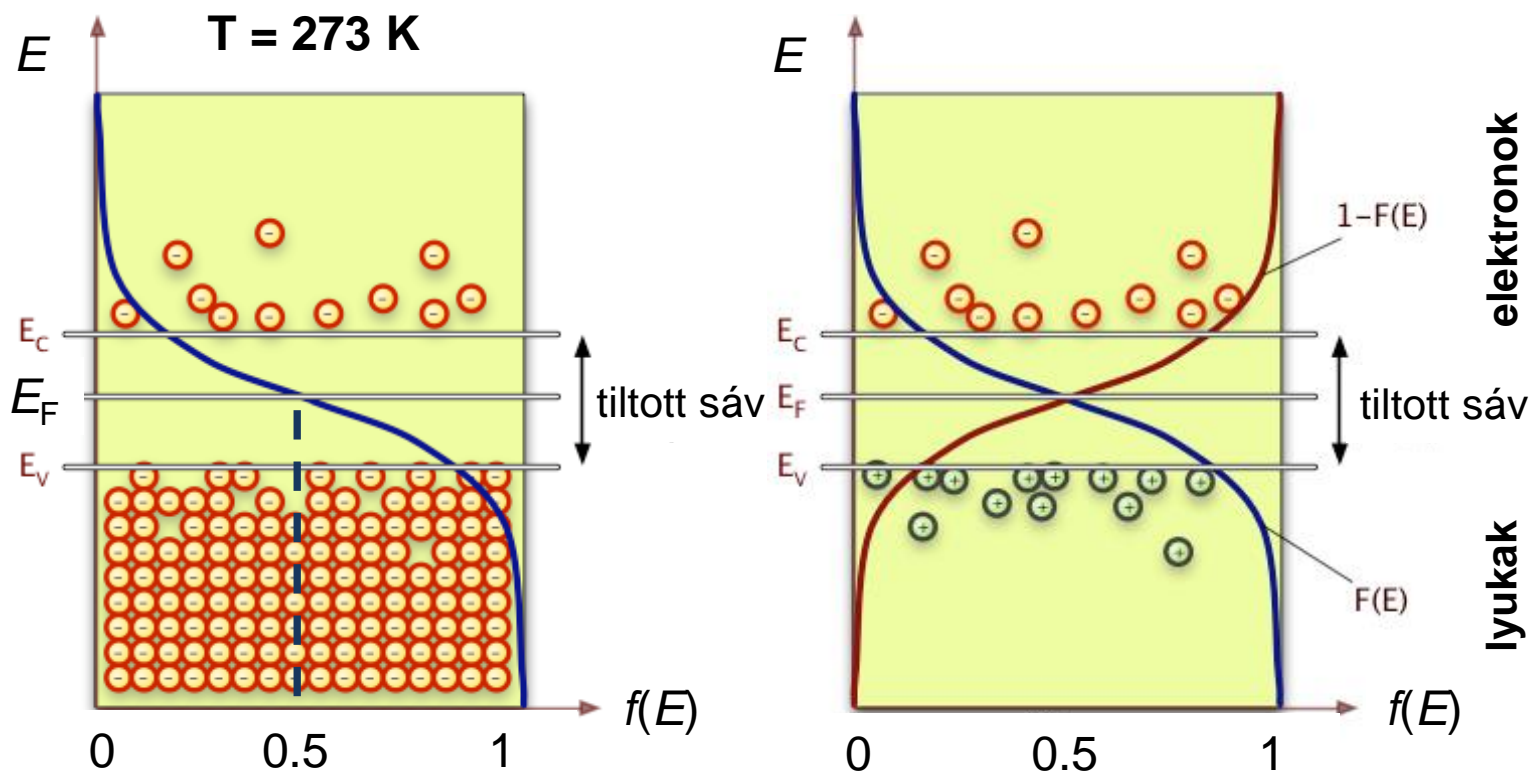
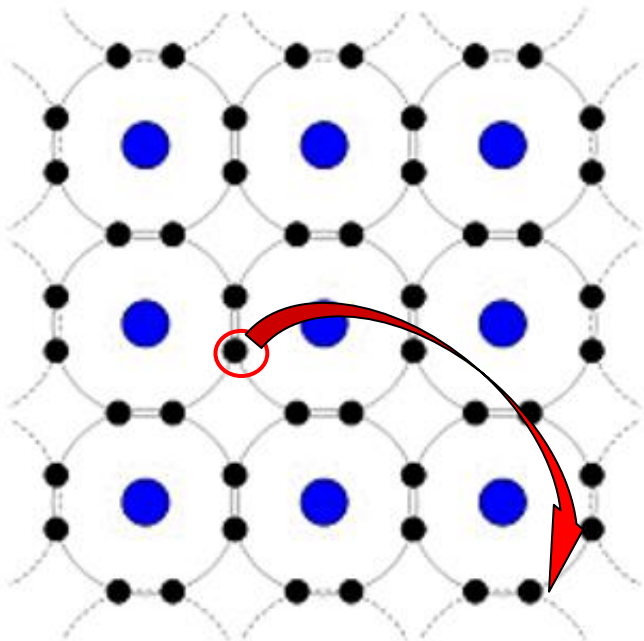
- Egy **precízebb definíció** alapján a fémek esetén a **Fermi-szint** egy megengedett sáv belsejében található, míg szigetelők és félvezetők esetében egy tiltott sávba esik.
- A különbség utóbbi kettő között, hogy szigetelők esetén a tiltott sáv túl nagy ahhoz, hogy szobahőmérsékleten számottevő elektron generálódjon a vezetési sávban (termikus generáció).
- **Termikus töltéshordozó generáció:** a rendelkezésre álló szabadenergia (egy adott hőmérsékleten) következtében, a Fermi-Dirac statisztika által definiált módon, az elektronok egy része akkora energiára tehet szert, hogy felkerül a vezetési sávba. A megüresedett helyüket (be nem töltött állapotok) a vegyértéksávban “elektronlyukaknak” vagy röviden **lyukaknak** hívjuk.



5. Az anyagok elektronszerkezete

A termikus generáció félvezetőknél: elektronok és lyukak

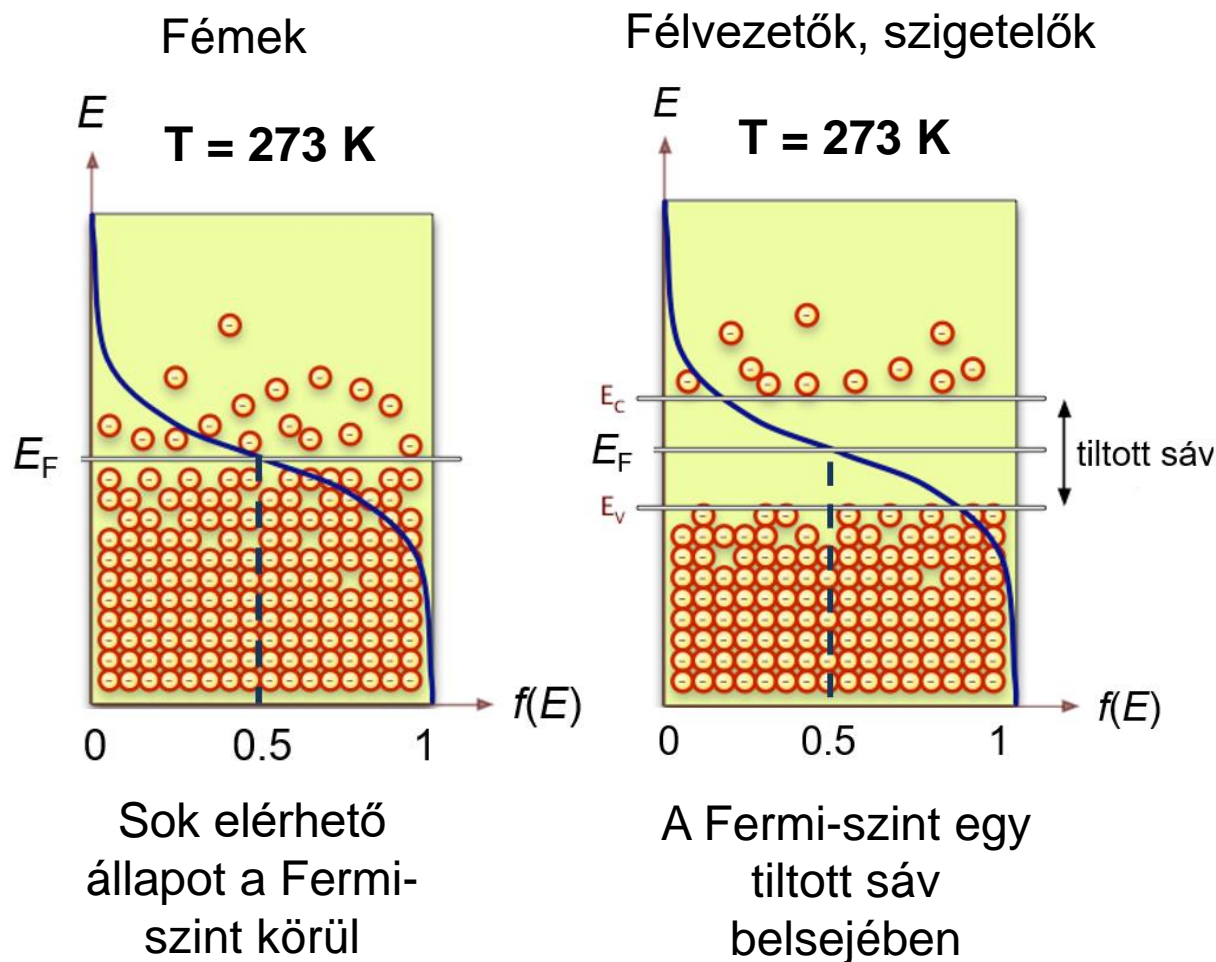
● Si atom



Egy szemléletes megközelítés szerint magyarázhatjuk a félvezetők szobahőmérsékletű vezetését úgy, hogy a termikus szabadenergia révén az elektronok egy része akkora energiára tehet szert, hogy a kovalens kötésből kiszakadva delokalizálttá (elmozdulásra képessé) válik. Ez a “**szabadelektron**” modell.

5. Az anyagok elektronszerkezete

A fémek és félvezetők összehasonlítása



Egy precízebb magyarázat a vezetési tulajdonságokra:

- Az elektronok mozgatása során (pl. gyorsításuk külső elektromos térrel) megváltozik az energiájuk (ΔE -vel),
- vagyis a mozgatásukhoz nagyobb energiaállapotba kellene kerülniük, de
- nem vehetnek fel már betöltött energiaállapotot, és
- nem vehetnek fel tiltott sávban lévő energiaállapotot.
- A fémekben sok az elérhető szabad állapot.
- A félvezetőkben a termikus generáció révén kerülnek elektronok szabad állapotok közelébe a vezetési sávban, illetve hagynak maguk után betöltetlen (=szabad) állapotokat a vegyérték sávban.
- Fizikailag a vegyérték sávban is az elektronok vezetnek, de vezetést itt leírhatjuk a lyukak mozgásával is.

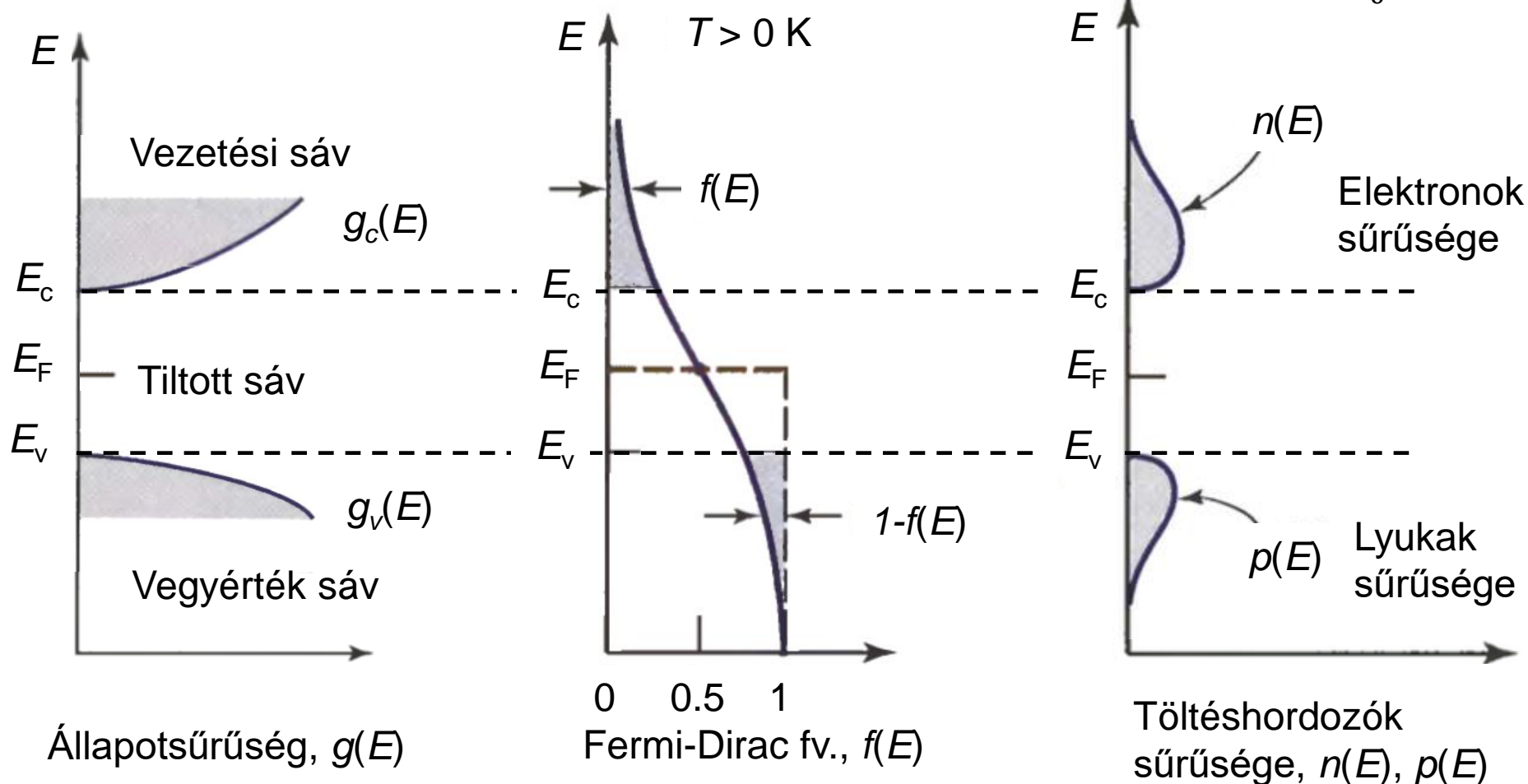
$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{2m_e} p^2$$

5. Az anyagok elektronszerkezete

A töltéshordozó koncentráció meghatározása félvezetőkben

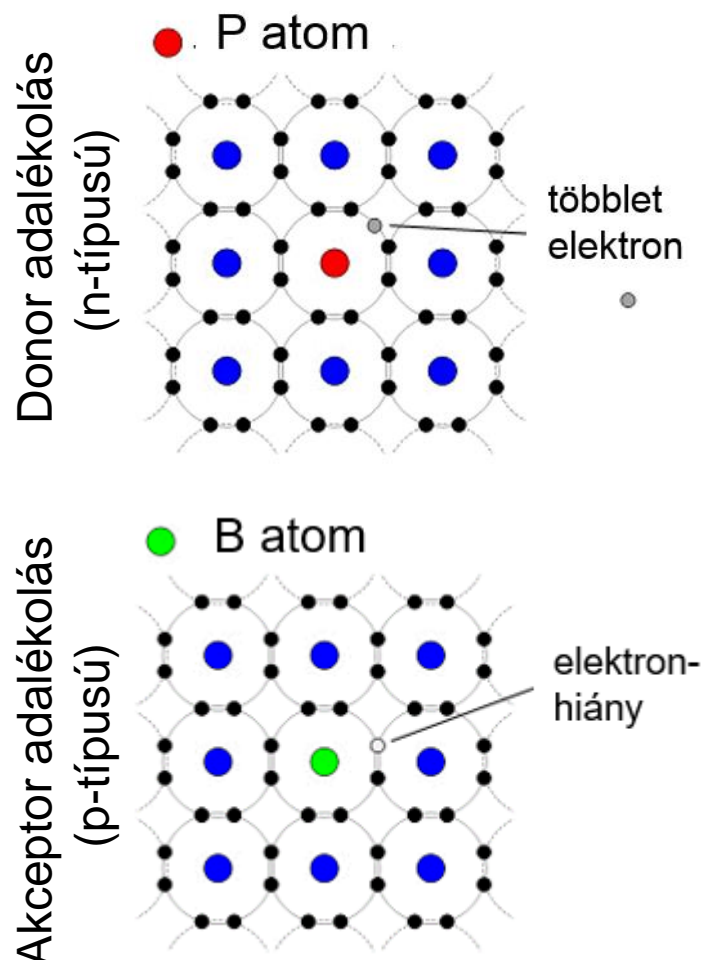
$$n(E) = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E) f(E) dE$$

$$p(E) = \int_0^{E_v} g_v(E) (1 - f(E)) dE$$

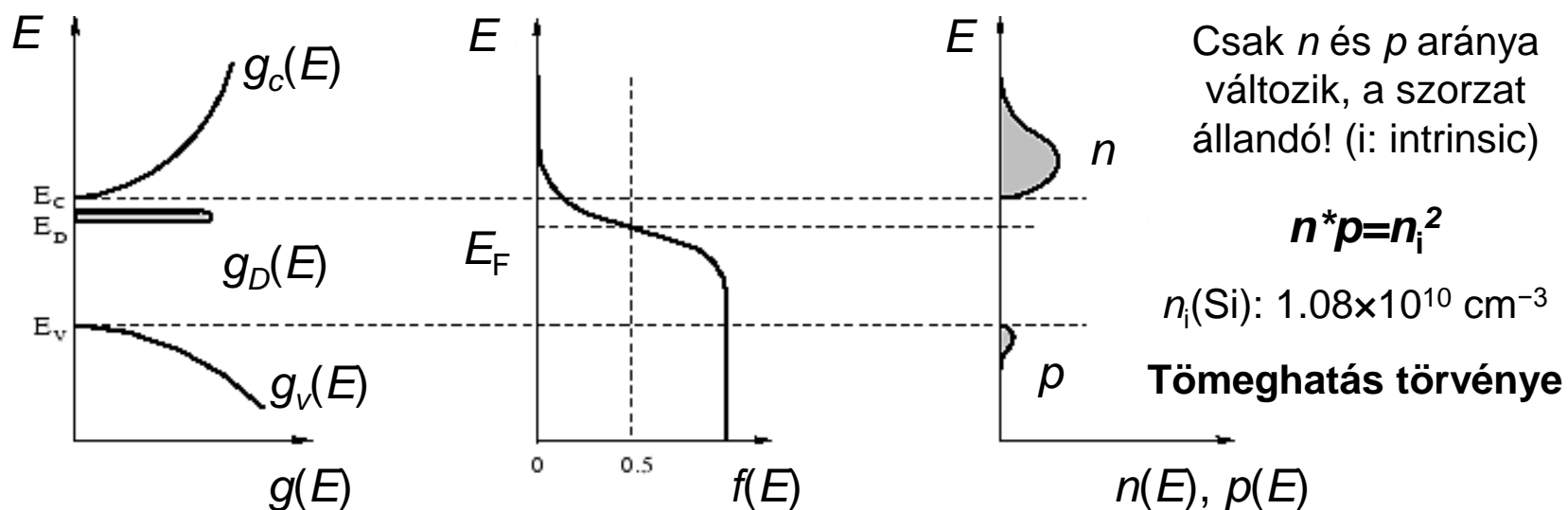


5. Az anyagok elektronszerkezete

A félvezetők sáv szerkezete és az adalékolás hatása:



Az **adalékolást** a félvezetők vezetési tulajdonságainak javítására használjuk. Az adalékatomok **semlegesek**, de mivel a vegyértékük magasabb (donorok), ill. alacsonyabb (akceptorok) a kristályt alkotó atomoknál (pl. Si), így többlet elektronokat, ill. elektronhiányt (többlet lyukakat) vezetnek be a kristályba. Példa a töltéshordozók számának alakulására donor adalékolás esetén:



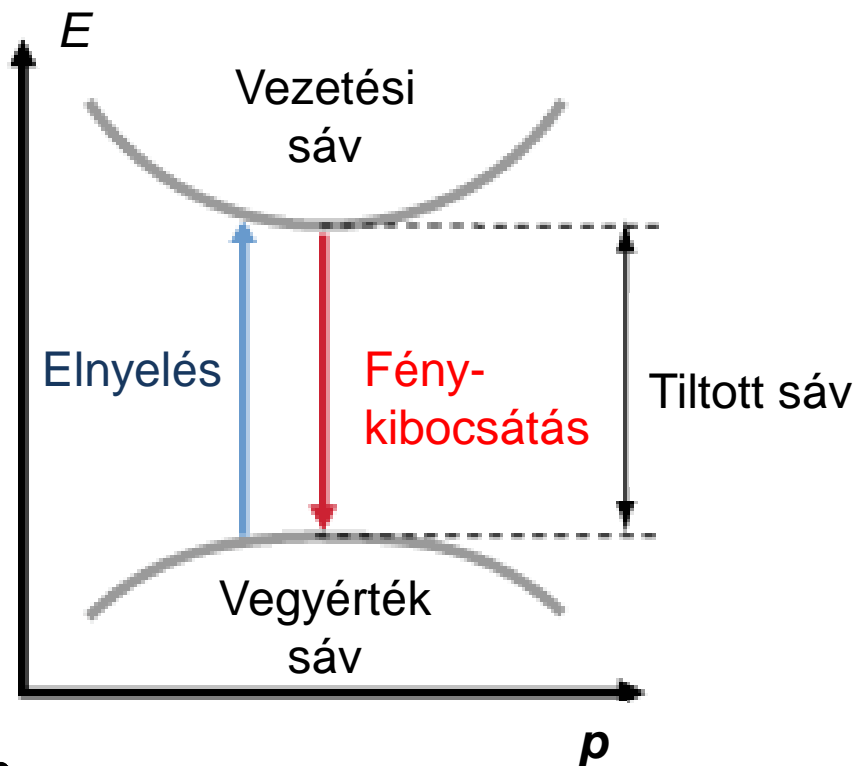
Új megengedett energiaszintek ($g_D(E)$) jönnek létre a tiltott sávban, ahonnan könnyebben felgenerálódnak az elektronok. *Figyeljük meg a Fermi-szint eltolódását.*

5. Az anyagok elektronszerkezete

Elektronszerkezet és optikai tulajdonságok (félvezetőknél)

Fényelnyelés (abszorpció): E_g -nél nagyobb energiájú foton elektront **generál** a vegyérték sávból a vezetési sávba. Alkalmazás: napelemek.

Fénykibocsátás (emisszió): az elektronok **rekombinációj**akor az energiakülönbség fény formájában távozik.



Color	Wavelength	Frequency	Photon energy
violet	380–450 nm	668–789 THz	2.75–3.26 eV
blue	450–495 nm	606–668 THz	2.50–2.75 eV
green	495–570 nm	526–606 THz	2.17–2.50 eV
yellow	570–590 nm	508–526 THz	2.10–2.17 eV
orange	590–620 nm	484–508 THz	2.00–2.10 eV
red	620–750 nm	400–484 THz	1.65–2.00 eV

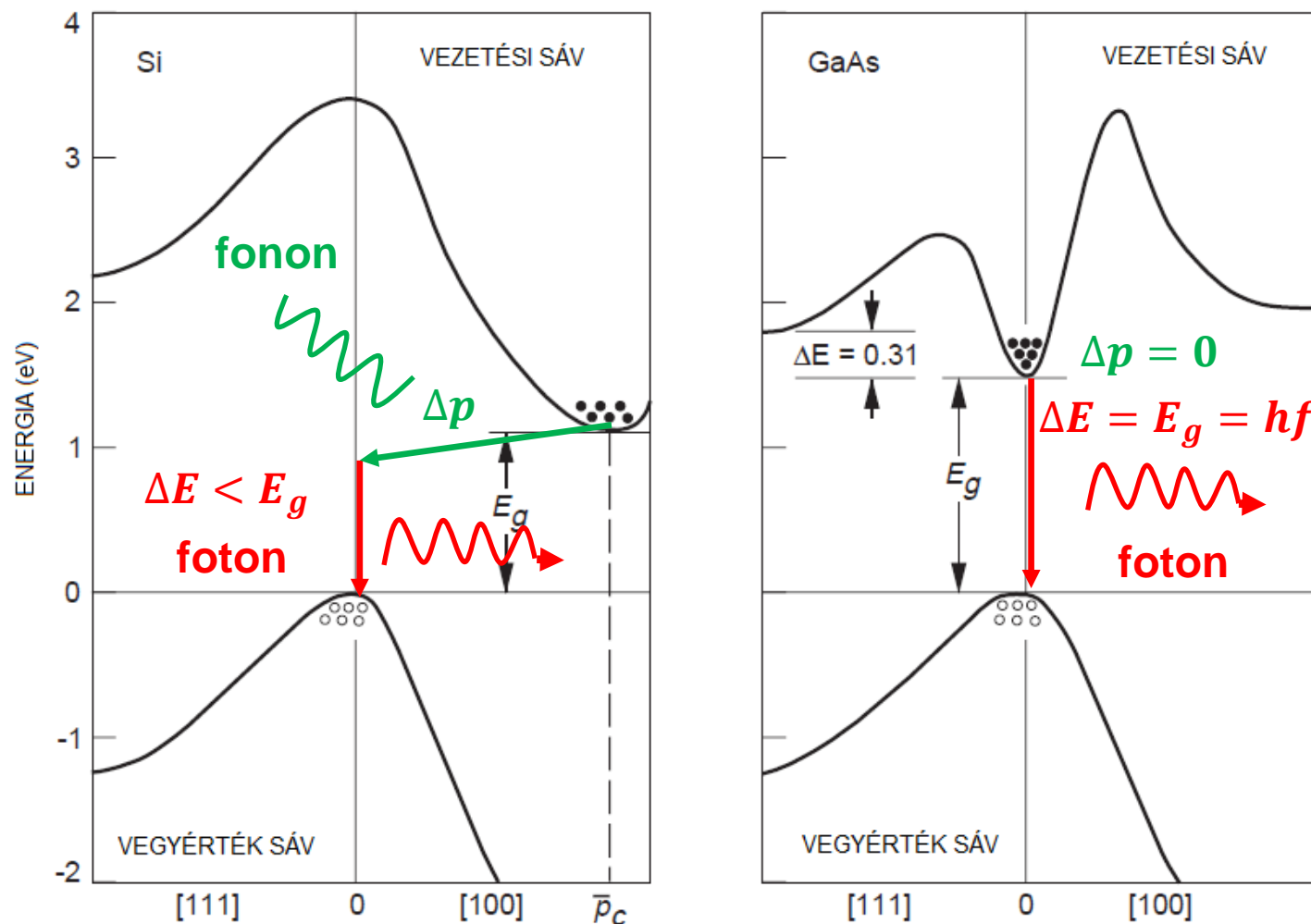
Ezért is fontos a tiltott sáv szélessége, amit optikai emissziós alkalmazásoknál (pl. LED-ek) szabályozni kell pl. az összetétellel.
Lásd később: félvezetők és optikai anyagok előadások.

$$\Delta E = E_g = hf = h \frac{c}{\lambda}$$

5. Az anyagok elektronszerkezete

Indirekt és direkt sávszerkezet – rekombináció és emisszió

Lásd később: félvezetők és optikai anyagok előadások.



Klasszikusan

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

De itt diszperziós reláció írja le a rácsban p és E kapcsolatát.

Rekombinációhoz az **energia és az impulzus megmaradásnak** is teljesülnie kell.

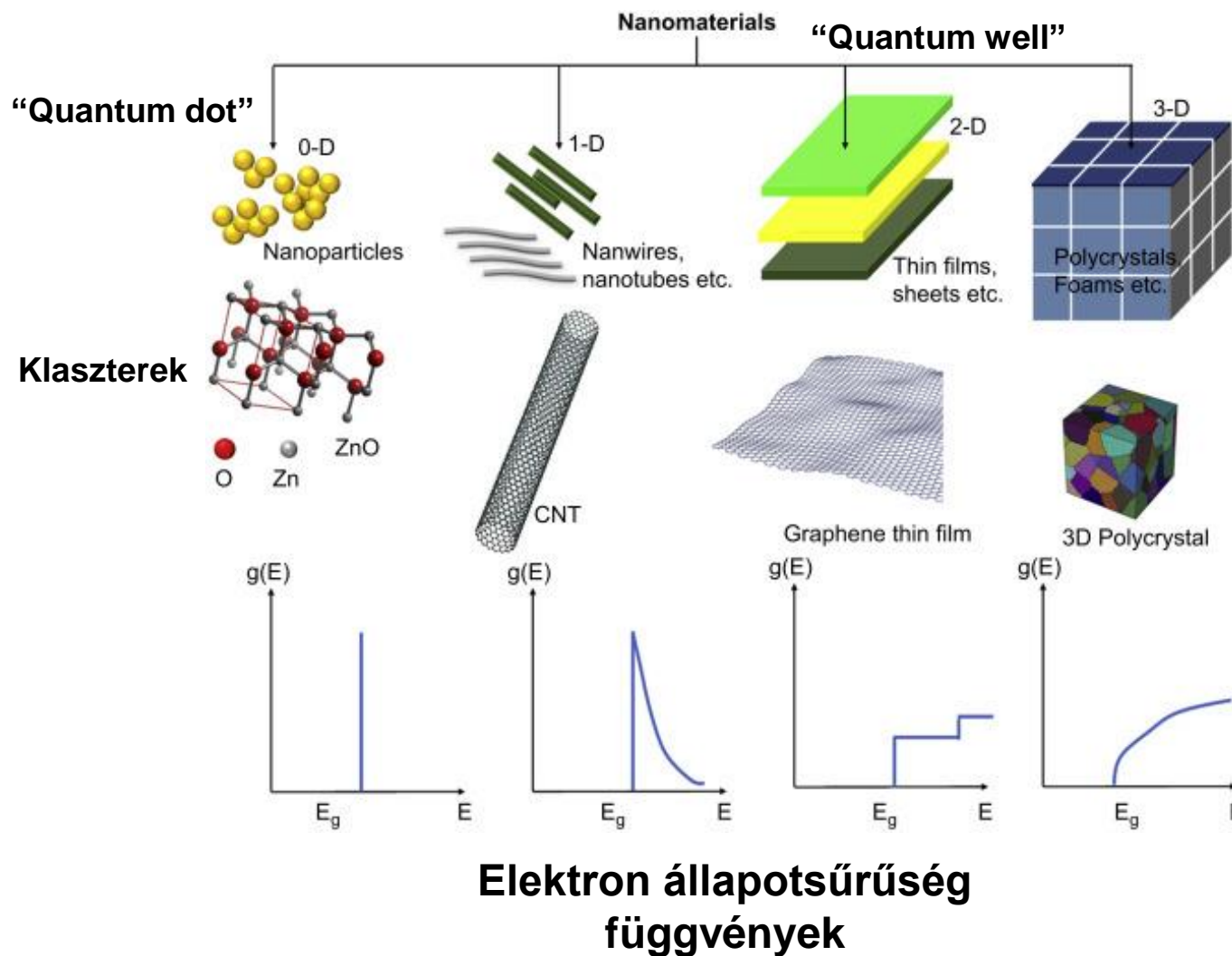
5. Az anyagok elektronszerkezete

Érdekesség: A nanoanyagok elektronszerkezete: kvantum korlátozottság (quantum confinement)

Nanoanyagok: legalább egy dimenzió mentén 100 nm alatti méret, attól függően, hogy hány dimenzió mentén teljesül (vagy sem) ez a korlátozás megkülönböztetünk 0D, 1D, 2D és 3D-s nanoanyagokat.

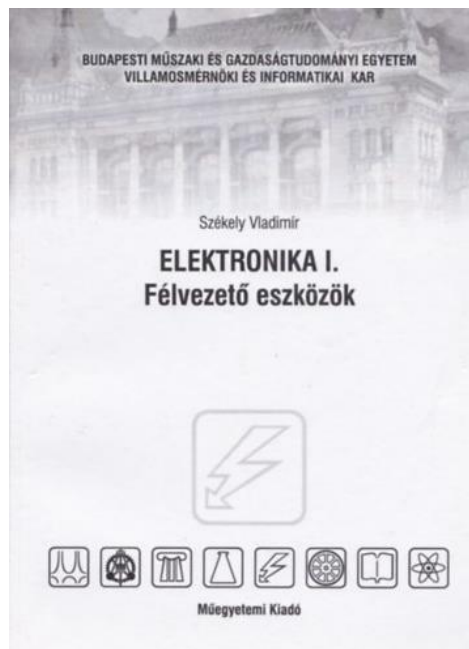
Egyre kisebb anyagokat vizsgálva az állapotsűrűség függvény pont az ellentétes irányba alakul, a folytonos állapotok felszakadoznak.

Különleges fizikai tulajdonságok!



5. Az anyagok elektronszerkezete

Könyvajánló: Az anyagrészhez kapcsolódóan



Székely Vladimír

Elektronika I: Félvezető Eszközök
Műegyetemi Kiadó (2006)
1-14. oldal



Prohászka János

Bevezetés az anyagtudományba I.
Nemzeti Tankönyvkiadó (1997)
211-224. oldal
(Sokkal részletesebb, mint nekünk kell!!)

**A számonkérés alapja
csak az, ami a diasorban
szerepel, és ami az
előadáson elhangzott!**

Ellenőrző kérdések

- Alapfogalmak definiálása (pl. elektron állapotsűrűség függvény, Fermi-szint, elektronlyukak, termikus generáció, rekombináció stb.)
- A szigetelők, félvezetők, vezetők definíciói.
- Az elektromos vezetés alapmechanizmusa félvezetők esetén. A töltéshordozó-sűrűség kiszámítása félvezetők esetén.

Példák igaz-hamis kérdésekre:

- Az elektron állapotsűrűség függvény a vezetési sávban lévő elektronok számát adja meg (H).
- Szigetelő anyagoknak van tiltott sávja, amelynek a szélessége maximum 2 eV (H).
- A félvezetők tiltott sávja meghatározza, hogy milyen optikai tartományban képesek fotonok abszorpciójára (I).
- A Fermi szint szobahőmérsékleten a legmagasabb betölthető energiaállapotnak felel meg (H).
- Félvezetők adalékolásakor a Fermi szint eltolódik (I).