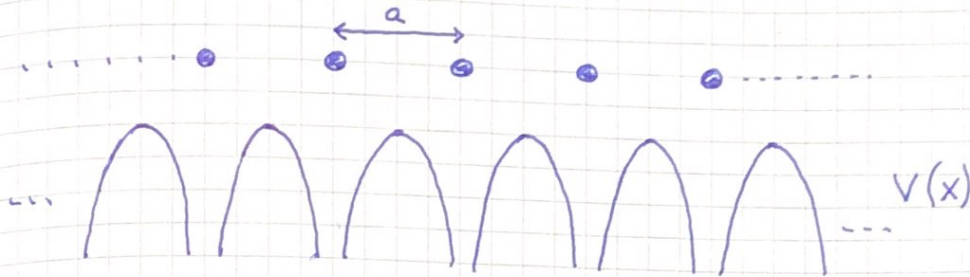
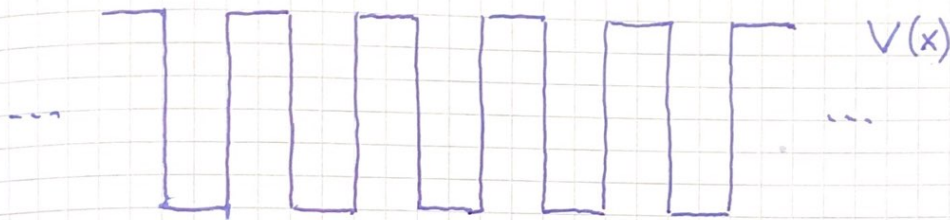


Motivasjon for stykkevis konstante potensialer:

Elektroner i faste stoffer (krystaller), 1D modell



Eller med enda enklere modellpotensial:



Regulær krystall \Rightarrow Periodisk potensial:

$$V(x + j \cdot a) = V(x)$$

a = gitterkonstanten

j = heltall

Gir periodisk sannsynlighetstetthet (og ladningstetthet):

$$|\Psi(x + j \cdot a)|^2 = |\Psi(x)|^2$$

Og bølgefunksjoner på formen (Blochs teorem)

$$\Psi(x) = e^{ikx} \cdot u(x) \quad \text{med} \quad u(x + j \cdot a) = u(x)$$

dvs nesten plane bølger og nesten frie elektroner!

(49)

Vi kan bruke vår diskretiserte TUSL (§32-35) til å vise at vi får kontinuerlige energibånd $E(k)$. For en makroskopisk krystall er $N \approx \infty$, og vi setter for enkelhets skyld $V_n = 0$ for alle n . Med $\varepsilon = \hbar^2/m(\Delta x)^2$ og $\Delta x = a$ har vi

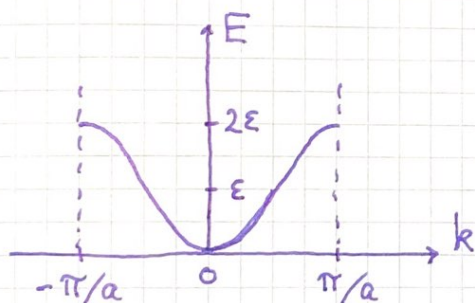
$$-\frac{\varepsilon}{2} \{ \psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1} \} = E \psi_n$$

med $\psi_n = e^{ikx_n} = e^{ikna}$. (Dvs, vi har satt den periodiske faktoren $u_n = 1$; $u(x)$ er jo bare definert på atomenes (senter-)posisjoner $x_n = n \cdot a$.)

Innsetting gir nå:

$$-\frac{\varepsilon}{2} e^{ikna} \{ e^{ika} - 2 + e^{-ika} \} = E \cdot e^{ikna}$$

$$\Rightarrow E(k) = \varepsilon (1 - \cos ka)$$



Her: Ett energibånd, med båndbredde

$$2\varepsilon = 2\hbar^2/ma^2$$

Merk:

- Med stor bølgelengde, $\lambda \gg a$, "ser" partikkelen essensielt et konstant potensial. Da er $k \cdot a \ll 1$, og $E(k) \approx \varepsilon (1 - (1 - \frac{1}{2}k^2a^2)) = \hbar^2k^2/2m = p^2/2m$ (OK!)
- Hvis $k \rightarrow k + \frac{2\pi}{a}$: $\psi_n = e^{ikna} \rightarrow e^{i(k + \frac{2\pi}{a})na} = e^{ikna}$
Dvs: Nok å bruke $-\pi/a < k < \pi/a$ (1. Brillouinsone)

Reelle krystaller:

$$E(k) \rightarrow E(\vec{k}) \quad (\text{båndstrukturen})$$

Flere $\Psi(\vec{r})$ og flere elektroner Z pr atom

Flere (som regel!) atomer pr repeterende enhet, enhetscellen

Uansett: et helt antall orbitaler, N , pr energibånd, der N = antall enhetsceller i krystallen

Spinn: Partiklers kvantemekaniske indre dreieimpuls \vec{S} .

$$\text{Elektronet: } S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar ; \quad s = 1/2$$

$$S_z = m_s \hbar ; \quad m_s = \pm 1/2$$

Ortonormerte spinntilstander: $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\langle \chi_+, \chi_+ \rangle = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \langle \chi_-, \chi_- \rangle$$

$$\langle \chi_+, \chi_- \rangle = \langle \chi_-, \chi_+ \rangle = 0$$

Total bølgefunksjon (tilstand) for et elektron:

$$\Phi(\vec{r}, m_s) = \underbrace{\Psi(\vec{r})}_{\text{orbital}} \cdot \underbrace{\chi_{m_s}}_{\text{spinntilstand}}$$

Dvs: 10 tilstander pr orbital

$$\Rightarrow \boxed{2N \text{ tilstander pr energibånd}}$$

Paulis eksklusjonsprinsipp (Pauliprinsippet):

Maksimalt ett elektron i en gitt enpartikkeltilstand

Grunntilstand for atom, molekyl, krystall:

Lavest mulig total energi, i henhold til Pauliprinsippet.

Dermed ; for krystallens grunntilstand :

(51)

Med $2M$ (partall) elektroner pr enhetscelle :

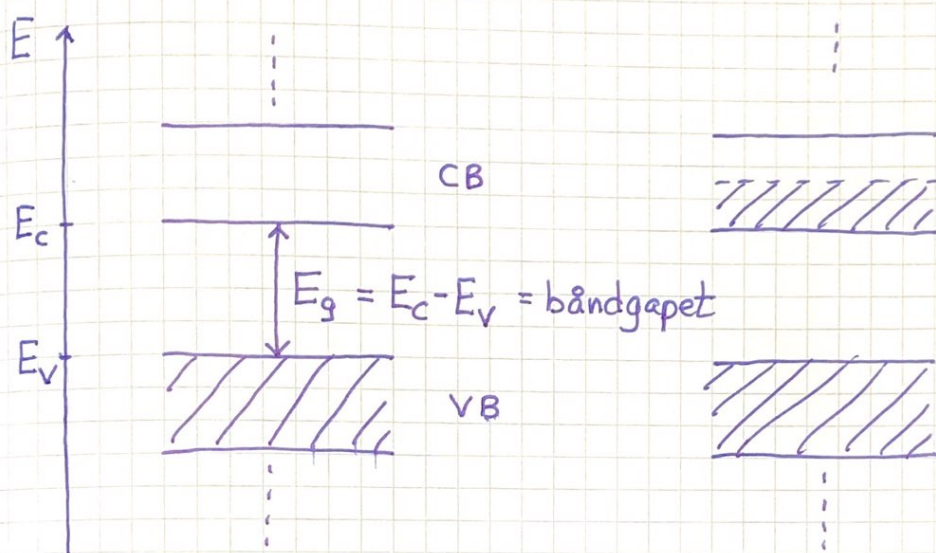
$2M \cdot N$ elektroner i alt $\Rightarrow M$ fylte energibånd, resten tomme

Med $2M+1$ (oddetall) elektroner pr enhetscelle :

$(2M+1) \cdot N$ elektroner i alt $\Rightarrow M$ fylte energibånd, ett halvfyllt

Valensbåndet : Fylt bånd med høyest energi

Ledningsbåndet : Neste bånd (tomt eller halvfyllt)
(conduction band)



Isolator: $E_g \approx 4 \text{ eV}$

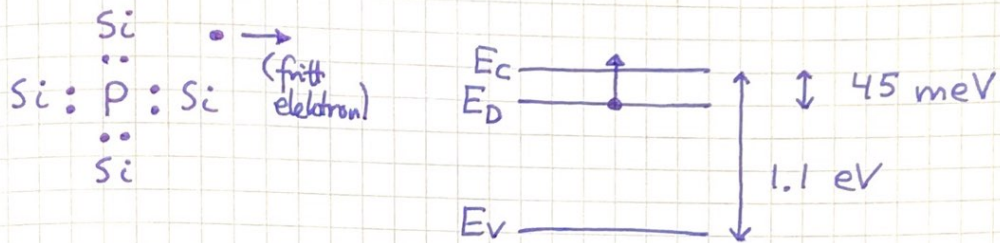
Halvleder: $E_g \lesssim 4 \text{ eV}$

Metall: $E_g = 0$

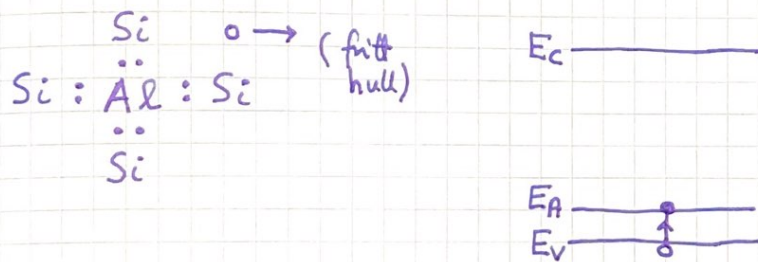
Halvledere : Isolator ved $T=0$. Når $T>0$, kan elektroner eksiteres fra fylte tilstander nær toppen av valensbåndet (VB), med $E \lesssim E_v$, til ledige tilstander nær bunnen av ledningsbåndet (CB), med $E \gtrsim E_c$.

Eksiterte elektroner etterlater seg tomme tilstander i VB med $E \lesssim E_v$, såkalte hull, som er "partikler" med positiv ladning $+e$. Siden $k_B T \approx 25 \text{ meV}$ ved 300 K , blir antall slike elektron-hull-par lite i en perfekt "ren" halvleder.

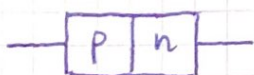
Doping: Anta Si (silisium), med 4 valenselektroner, og at en liten andel av Si erstattes av P (fosfor), med 5 valenselektroner. Da vil 4 av disse inngå i hver sin binding med 4 nabo-Si-atomer, mens det 5. doneres til Si-krystallens ledningsbånd:



Dopes Si med Al (aluminium), med 3 valenselektroner, aksepterer Al ett elektron fra Si-krystallens valensbånd og skaper et fritt hull:



Differansene $E_c - E_D$ og $E_A - E_v$ er av samme størrelsesorden som $k_B T$ ved romtemperatur slik at konsentrasjonenⁿ av frie elektroner i n-type halvledere og frie hull^p i p-type halvledere blir omlag lik konsentrasjonen av hvor donatorer og akseptoratomer: $n \approx N_D$ i n-type ; $p \approx N_A$ i p-type.



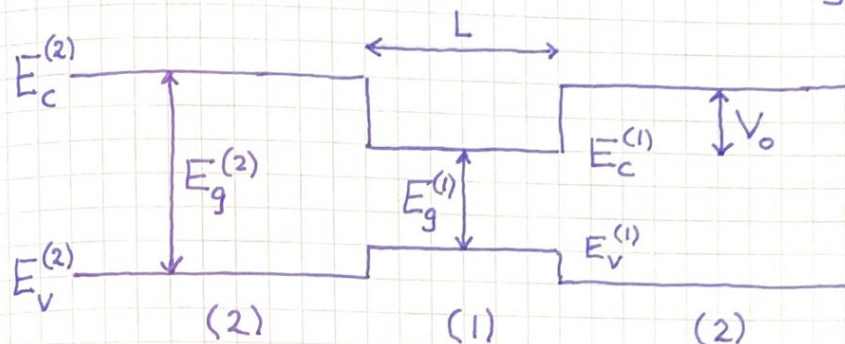
Diode



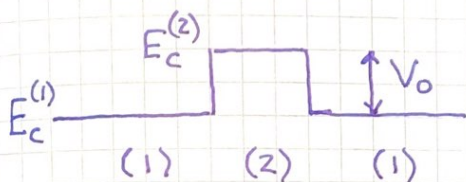
Transistor

Lagdelt halvledere (heterostrukturer):

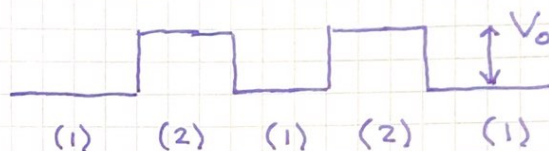
Halvledere med ulike båndgap $E_g = E_c - E_v$ kan skjøtes sammen og danne potensialbrønner og -barrierer:



Dvs potensialbrønn med dybde $V_0 = E_c^{(2)} - E_c^{(1)}$, bredde L .



Potensialbarriere



Dobbeltbarriere

Eks: (1) GaAs $E_g^{(1)} \approx 1.43 \text{ eV}$

(2) $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ $E_g^{(2)} \approx 1.84 \text{ eV}$

$V_0 \approx 0.23 \text{ eV}$

Lagtykkelser kontrolleres med atomær nøyaktighet i
"molecular beam epitaxy", MBE.

Effektiv masse: Elektroner og hull i hhv CB og VB opplever periodisk - dvs ikke konstant - potensial. De oppfører seg som frie partikler, med effektiv masse m_e^* .

Eks: GaAs, CB nær $k=0$: $E(k) = E_c + \hbar^2 k^2 / 2m_e^*$
 $m_e^* \approx 0.067 m_e$ $\left[m_e^* = \hbar^2 / (\partial^2 E / \partial k^2) \right]$