

Energiband i krystallar

YF 42.4

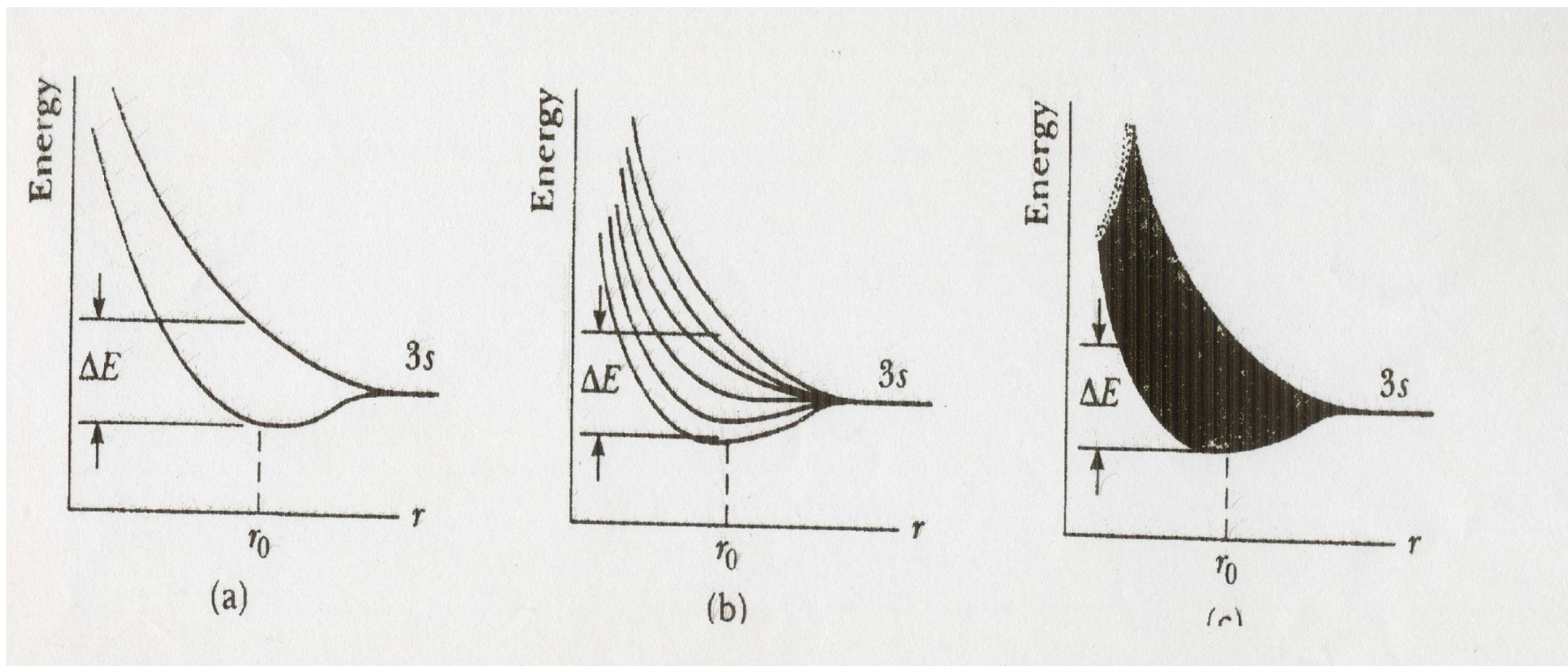
Energibandstrukturen avgjer om krystallen er ein leiar (metall), halvleiar, eller isolator

Diskrete degenererte energinivå for individuelle atom splittar opp når atoma blir bringa nær kvarandre og elektrona i atoma vekselverkar via Coulomb-krafta.

(a) 2 atom bringa nær kvarandre

(b) 6 atom bringa nær kvarandre

(c) eit stort antal atom bringa nær kvarandre (dannar krystall)



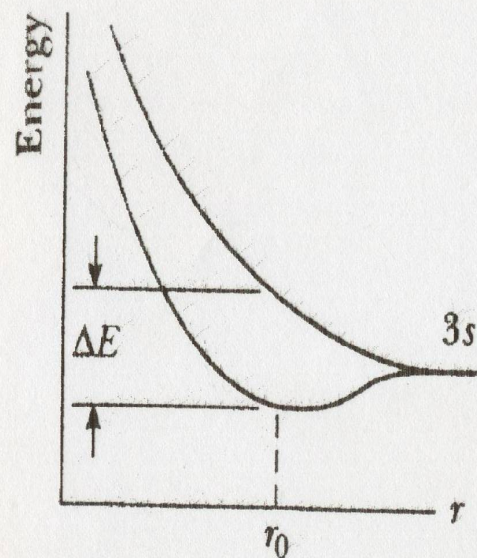
(r er midlere avstand mellom naboatom,
 r_0 er den faktiske verdien av r i krystallen)

(c) Energiband med
breidde ΔE i krystallen

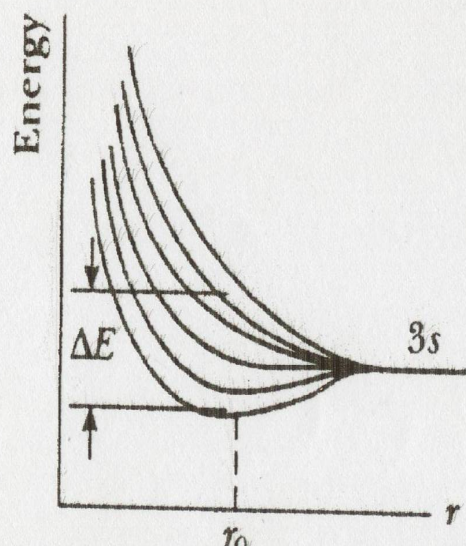
Dersom eit energinivå har degenerasjon g i eit isolert atom, og vi bringer N atom nær kvarandre, vil nivået gi opphav til eit energiband med gN tilstander. Når N er veldig stor vil energiane i bandet liggje så tett at vi for mange formål kan sjå på dei som kontinuerlege. (Merk at energinivå i bandet kan også ha degenerasjon.)

Det totale antalet tilstander summert over alle atom er bevart i prosessen med å bringe atoma nær kvarandre.

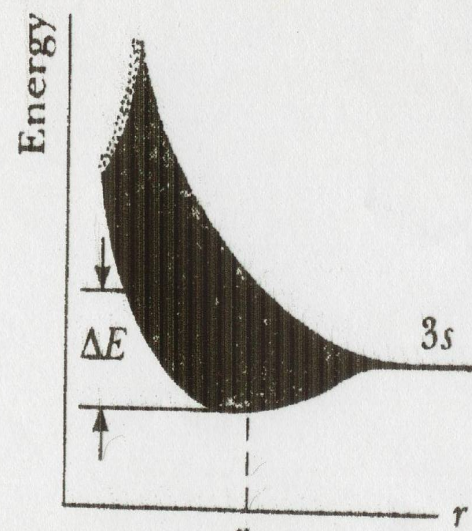
Eit energinivå med kvantetal n og l i eit isolert atom har degenerasjon $2(2l+1)$. F.eks. eit $3s$ nivå har degenerasjon $2(2 \cdot 0 + 1) = 2$. Dermed har eit band danna frå eit $3s$ nivå $2N$ elektrontilstander, der N er antal atom. Eksklusjonsprinsippet gjeld: Max eitt elektron kan vere i kvar tilstand.



(a)



(b)

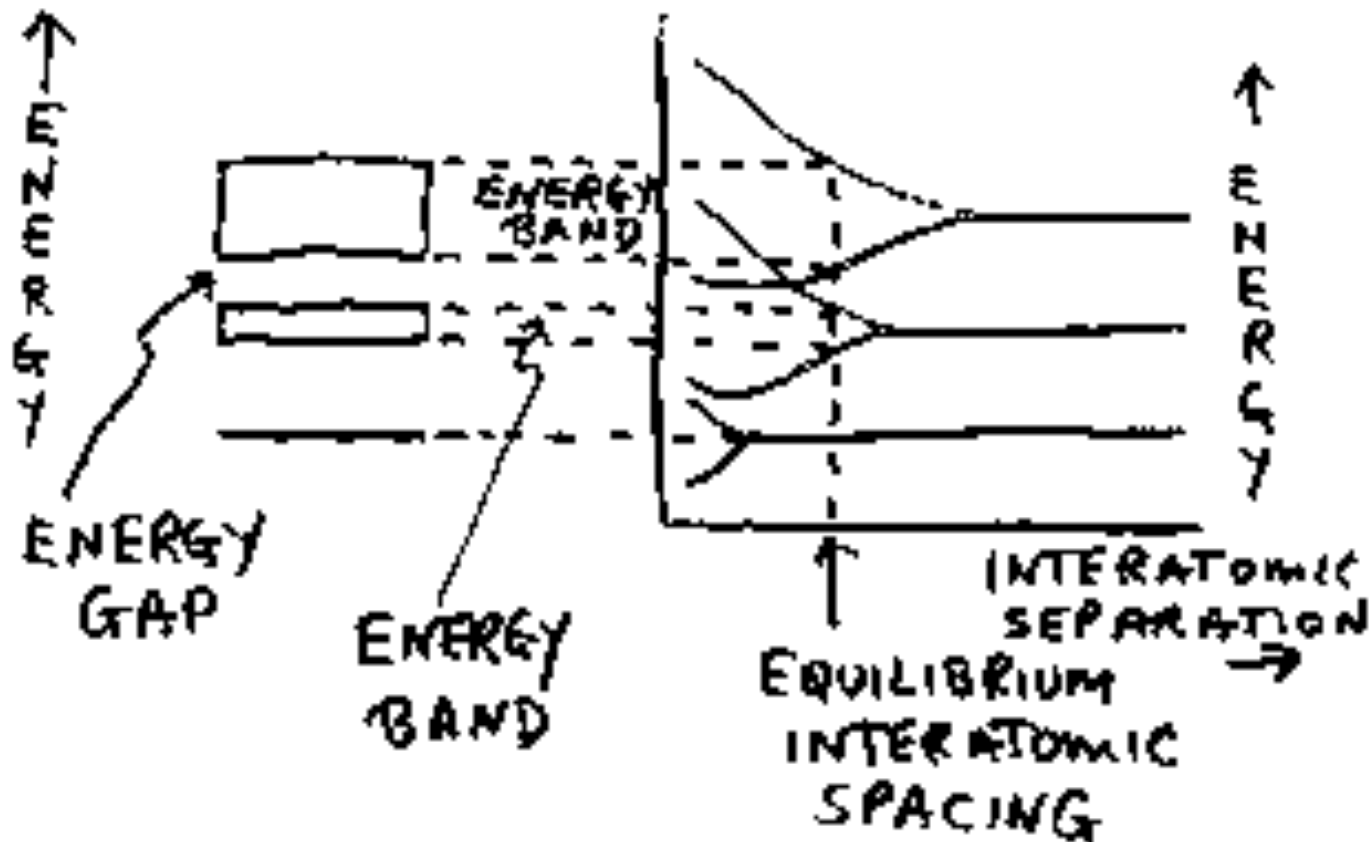


(c)

I eit isolert atom er elektron i høgare energinivå i middel lengre frå atomkjernen enn elektron i lågare energinivå (f.eks. midlere avstand frå kjernen aukar med n).

Når ein bringer atoma nærare kvarandre, vil dei ytterste elektronen bli påverka av elektron i naboatom før (dvs. for større avstand mellom atoma) elektron nærare kjernen. Dermed vil energisplittinga bli større for band med høgare energi. Band som ligg høgare i energi blir difor breiare enn band som ligg lågare i energi.

“Naboband” er separerte av energigap (energiintervall utan tillatte energiar)



Ein krystall ved null temperatur ($T = 0$)

- Ved den lågast mogelege temperaturen ($T = 0$) har den totale energien den minste verdien som det er mogeleg å ha.
- Anta at krystallen har M elektron. Elektronkonfigurasjonen ved $T = 0$ består i at dei M lågaste (i energi) tilstandene har 1 elektron kvar, mens alle andre tilstander har 0 elektron. Dette gir den minste mogelege totalenergien konsistent med eksklusjonsprinsippet. Vi seier at tilstandene med elektron er fylte, tilstandene utan elektron er tomme.
- Ein fyller altså tilstander i energibanda ved å starte på botnen av det lågaste energibandet. Dersom ein har fylt alle tilstander i eit band, og framleis treng å fylle fleire, blir den neste fylte tilstanden i botnen av neste band.
- (Ein kallar ofte denne elektronkonfigurasjonen for krystallen som heilheit for grunntilstanden til krystallen. Vi snakkar altså då om ein tilstand for eit mange-elektron-system, og ikkje om ein tilstand for eitt enkelt elektron, som er den betydninga av ordet “tilstand” vi har brukt før.)

Valensbandet (engelsk: valence band): Det øverste bandet som er **fullstendig fylt** ved null temperatur.

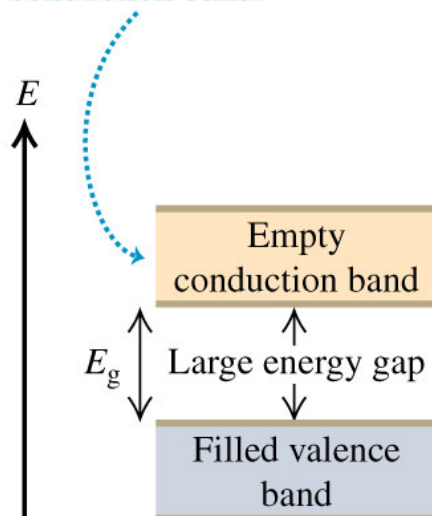
Leiingsbandet (engelsk: conduction band): Bandet som kjem etter (over) valensbandet i energi. Ved null temperatur er det **tomt** i isolatorar og halvleiarar, og **delvis fylt** i metall.

Evne til å leie elektrisk straum

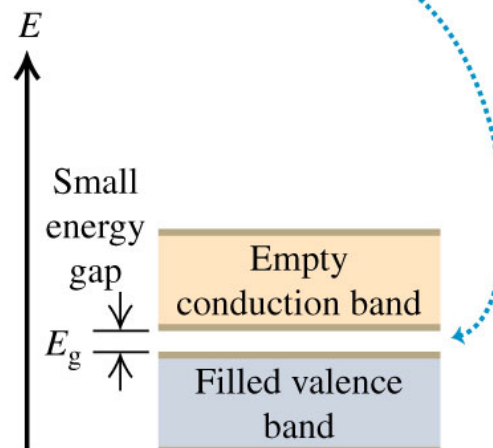
For at eit material skal leie elektrisitet må det finnast elektron som kan respondere til eit ytre elektrisk felt ved å “forflytte seg” til tilstander som ligg nær i energi. For at dette skal vere mogeleg må det finnast tomme tilstander som er nær i energi til tilstander som er fylte. Ved null temperatur er dette ikkje tilfelle for situasjonane (a) og (b) under, sidan dei lågaste tomme tilstandene ligg i leiingsbandet, som er skilt frå dei fylte tilstandene med ein betydeleg energi (minst lik energigapet). Kun for situasjon (c) finst det tomme tilstander som ligg nær i energi til fylte tilstander.

Material karakterisert som (a) = isolator, (b) = halvleiar, (c) = leiar (metall).

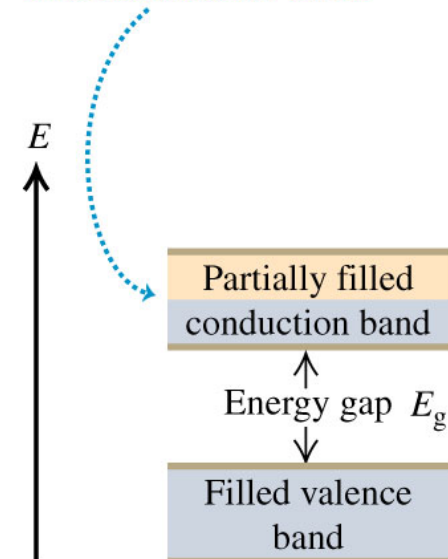
(a) In an insulator at absolute zero, there are no electrons in the conduction band.



(b) A semiconductor has the same band structure as an insulator but a smaller gap between the valence and conduction bands.



(c) A conductor has a partially filled conduction band.

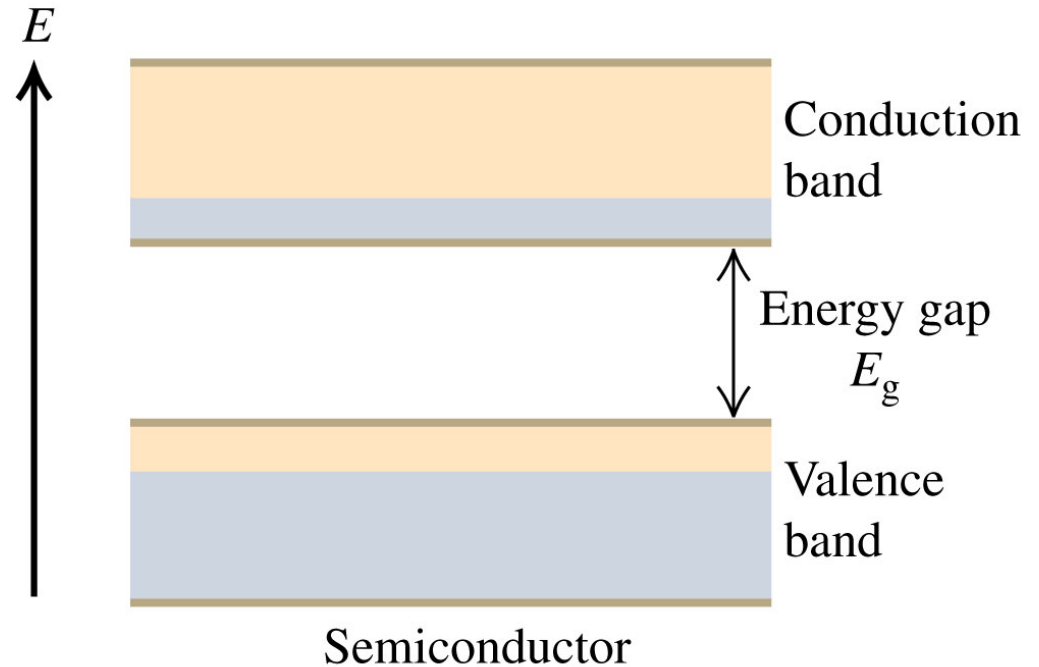


Isolatorar og halvleiarar:

Temperatur $T = 0$: tomt leiingsband

Temperatur $T > 0$: Termisk energi tilgjengeleg som gir ein viss (liten) sannsynlegheit for at elektron kan "hoppe" fra ein tilstand høgt i valensbandet til ein tilstand lågt i leiingsbandet.

Dette gir ein viss (liten) sannsynlegheit for at tilstander lågt i leiingsbandet er fylte og tilstander høgt i valensbandet er tomme.



I tur gir dette ein viss (liten) elektrisk konduktivitet for isolatorar og halvleiarar, som aukar med temperaturen. Konduktiviteten er rett nok mykje mindre enn for metall. Den er enno mindre for isolatorar enn for halvleiarar pga. forskjellen på energigapet (typisk energigap er ~ 5 eV for isolatorar og ~ 1 eV for halvleiarar). Ved romtemperatur kan forhold mellom konduktivitetar typisk vere rundt

$$\frac{\sigma_{\text{metall}}}{\sigma_{\text{halvleiar}}} \sim 10^{10}$$

$$\frac{\sigma_{\text{halvleiar}}}{\sigma_{\text{isolator}}} \sim 10^{10}$$