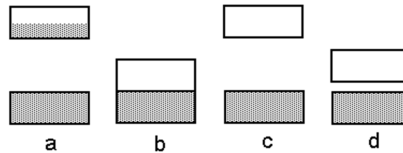


Kristályos anyagok vezetése, sávmodell

A továbbiakban röviden ismertetjük a kristályos anyagok vezetési tulajdonságaira vonatkozó sávmodell egy egyszerűsített, kvalitatív változatát.

Kvantummechanikai megfontolások alapján bizonyítható, hogy adott kristályszerkezetben található elektronok energiája csak egy meghatározott intervallumrendszerbe eső értékeket vehet fel. Ezt az intervallumrendszert *sáv szerkezetnek* nevezzük, struktúrája jellemző a kristály szerkezetére és függ az azt kialakító anyagoktól. A kristály építőkövein –az egységcellát alkotó atom-, ion- vagy molekulacsoportokon– az elektronok meghatározott energiájú nívókon helyezkednek el, ha ezek a csoportok izoláltak. A kristálybeli kölcsönhatás miatt azonban az izolált egységek azonos elektronállapotainak energiája eltolódik egymáshoz képest, az energiaszintek felhasadnak, mégpedig annyi állapotra, ahány ismétlődő egységből (cellából) épül fel a kristály. Így teljesülhet a Pauli-elv, mely szerint egy elektronállapotot legfeljebb két, ellentétes spinű elektron tölthet be. A felhasadás mértéke annál nagyobb, minél erősebb a kölcsönhatás az eredeti nívók között. A külső pályák energiái hasadnak fel leginkább, és a felhasadás mértéke fémeknél és kovalens kristályoknál sokkal nagyobb, mint a gyenge van der Waals-erővel kötött molekula-kristályoknál. A felhasadt nívók egy energiatarományt –sávot– alkotnak. A sávok közötti energiák tiltottak, ez a *tiltott sáv*, vagy angol szóval *gap*.

0 K hőmérsékleten az elektronok a legmélyebb nívókat töltik be. A szigetelők (1c. ábra) és a félvezetők (1d. ábra) sávjai vagy teljesen be vannak töltve, vagy teljesen üresek. A legfelső teljesen betöltött sávot *vegyértéksávnak*, a felette lévő üres sávot *vezetési sávnak* nevezzük. A fémek esetében a legfelső teljesen betöltött sáv felett egy részben betöltött vezetési sáv van, illetve a vegyértéksáv és a vezetési sáv átlapolódik. Az alkáli fémek pl. egyetlen vegyérték-elektronnal rendelkeznek, mely egy *s* pályán helyezkedik el. Az atomi *s* pályákból kialakuló sávban *N* atom esetén *2N* elektron számára van hely, így ez a sáv félig lesz betöltve (1a. ábra). Az alkáli földfémek esetében viszont, ahol mindkét *s* pálya be van töltve, a vegyértéksáv és a vezetési sáv átlapolódásáról van szó (1b. ábra).



Fémek (a,b), szigetelők (c), és félvezetők (d) vegyérték- és vezetési sávjai

Elektromos vezetésre az olyan nívókon elhelyezkedő elektronok képesek, melyek felett tetszőleges kis távolságban van üres szint. Csak ebben az esetben tud tetszőleges kis elektromos tér energiát közölni az elektronnal, a tér irányával párhuzamos sebességre felgyorsítani, ezzel elektromos áramot hozni létre. A vezetési sávban lévő *vezetési elektronok* szabadon mozoghatnak a kristályban, nincsenek meghatározott ionhoz, atomhoz vagy molekulához kötve. *Szabad elektronoknak* is hívjuk őket.

Szabad elektronokat szigetelőkben és félvezetőkben is kelthetünk, ha a kötött, vegyértéksáv-beli elektront a tiltott sáv szélességénél nagyobb energiával a vezetési sávba gerjesztjük. Az elektron gerjesztésével viszont egy üres nívó marad a vegyértéksávban. Ezt betöltheti egy másik elektron, de akkor annak a helye marad üres. Az üres hely *-lyuk-*úgy viselkedik, mint egy pozitív töltésű szabad részecske, és az elektronnal együtt hozzájárul az elektromos vezetéshez.

A félvezetők sáv szerkezete (1d. ábra) a szigetelőkétől annyiban különbözik, hogy a gap nagysága viszonylag kicsi (1c. ábra). A tiltott sáv szélessége germániumra 0,72 eV, szilíciumra 1,1 eV, gyémántra 6-7 eV.

Az elektronok gerjesztésére, azaz elektron-lyuk pár képzésére sok lehetőség van, pl. elektromágneses sugárzás (fény, röntgensugárzás, stb...) fotonjainak elnyelésével, ha ezek energiája meghaladja a tiltott sáv energiáját.

Tiszta (intrinsic) félvezetők

Félvezetőknel az elektron-lyuk pár keltéséhez szükséges energiát már a kristály hőenergiája fedezi. A véletlenszerű hőmozgás következtében egyes elektronok elég nagy energiára tesznek szert a gap leküzdésére és a vezetési sávba kerülnek, miközben a vegyértéksávban egy mozgékony lyukat hagynak maguk után. Ezt a folyamatot termikus egyensúlyban az elektronok és lyukak egymásra találásakor bekövetkező *rekombináció* ellensúlyozza, amikor az elektron "beleesik" a lyukba, az elektron-lyuk pár eltűnik. Az ilyen, a hőmozgás következtében bekövetkező gerjesztést *termikus gerjesztésnek* nevezzük. Emiatt egy szobahőmérsékletű *intrinsic* (nem szennyezett) félvezetőnek a vezetési sávja nem teljesen üres, a vegyértéksávja pedig nincs teljesen betöltve, hanem a vezetési sávban lévő elektronokkal megegyező számú elektronhiányt -lyukat- tartalmaz. Növelve a hőmérsékletet, a *tiszta félvezető egyre jobban vezet*, mert egyre több szabad töltéshordozó jön létre benne termikus gerjesztéssel. Ez ellen hat, hogy a szabad töltéshordozók egyre gyakrabban ütköznek a rács rezgő atomjaival vagy egymással. Egy ilyen ütközésben a szabad töltéshordozó elveszti az elektromos tértől szerzett többlet-sebességét, és felveszi az adott hőmérsékletre jellemző sebességeloszlásnak megfelelő véletlenszerű sebességet. A fémeknél a szabad elektronok száma adott, ezért itt a hőmérséklet növekedésével az ütközések száma nő, a fajlagos vezetés csökken.

Szennyezett (adalekolt) félvezetők

A szilícium kristály gyémántszerkezetű, a 4 vegyértékű atomok tetraédres kötéssel kapcsolódnak a körülöttük levő négy másik atomhoz. Helyettesítsük egy ilyen kristályban az

egyik Si atomot egy ötvegyértékű atommal (pl. arzénnel, antimonnal vagy foszforral)! A szennyező atom 4 vegyértékelektronja felhasználódik a négy szomszédos atommal való kötés kialakításához, az ötödik viszont felesleges. Ezt az elektront csak viszonylag gyenge Coulomb-erő köti a szennyező atom törzséhez, melyről könnyen leszakad, szabaddá válik. A sáv szerkezetben ezek a kötésben részt nem vevő ötödik elektronok a tiltott sávban megjelenő *donornívón* helyezkednek el, néhány század eV távolságban a vezetési sáv aljától (2a. ábra). Már a szobahőmérséklet elegendő ahhoz, hogy az összes donor –egy-egy elektront juttatva a vezetési sávba– ionizálódjon. A donorszennyezőt tartalmazó félvezetőt *n-típusúnak* nevezzük, mert az elektromos vezetést csaknem teljesen elektronok –negatív töltéshordozók– hozzák létre. A donoratom gerjesztésével csak szabad elektron keletkezik, a visszamaradt pozitív töltés most a donoratomhoz kötődik, lokalizált. Sőt, a donoroktól származó elektronok vissza is szorítják a lyukképződést. A szabad elektronok és lyukak koncentrációja között ugyanis a tömeghatás törvényével analóg összefüggés áll fenn:

$$n_e \cdot n_l = n_i^2,$$

ahol n_e a szabad elektronok, n_l a lyukak koncentrációja, n_i pedig a szennyezetlen félvezetőben az adott hőmérsékleten termikus gerjesztéssel létrejövő elektron-lyuk párok koncentrációja (intrinsic koncentráció).



4.B.2. ábra. a: n-típusú, b: p-típusú félvezető sáv szerkezete

Az intrinsic koncentráció erősen hőmérsékletfüggő. Adalékolat félvezetőkben viszont a donornívók szobahőmérsékleten már gyakorlatilag teljesen kiürülnek, a töltéshordozó-koncentráció gyakorlatilag megegyezik a szennyező koncentrációjával. Magasabb hőmérsékleten (néhány 100 °C) azonban az intrinsic koncentráció túlhaladhatja a donorkoncentrációt, és újból mindkét típusú töltéshordozó szerepet játszik a vezetésben.

Nemcsak 5 vegyértékű szennyezőket vihetünk be a kristályrácsba, hanem 3 vegyértékűeket is, mint pl. bór, gallium, indium. Ilyen esetben a tetraédres kötés kialakításához a szennyező atomról hiányzik egy elektron. A szennyező atom, hogy kötés kialakíthatson, elragad egy elektront valamelyik közeli Si atomról, így az elektronhiány -a lyuk- vándorolni fog a kristályban. Az ilyen típusú szennyezőket *akceptoroknak* nevezzük, a szennyezett félvezetőt pedig *p-típusúnak*, mely az előző, donorszennyezett kristálytól abban különbözik, hogy az elektronok és a lyukak szerepet cserélnek, a vezetést túlnyomórészt a pozitív töltéshordozók hozzák létre. Az anyag sáv szerkezetében ez a 2.b ábrán látható módon jelentkezik: a vegyértéksávhoz közel létrejön egy ún. *akceptorszint*, ami abszolút zéró Kelvin-fokon elvileg betöltetlen, szobahőmérsékleten pedig gyakorlatilag az akceptor-koncentrációval egyező számú elektron tölti be, azonos számú lyukat hozva létre a vegyérték sávban. A p-típusú félvezetőben a pozitív töltésű lyukak a többségi töltéshordozók.

A félvezető kristály donor illetve akceptor atomokkal történő szennyezését közös szóval *adalékolásnak* nevezzük. Az adalékolással az intrinsic koncentrációt több nagyságrenddel meghaladó töltéshordozó-koncentrációt biztosíthatunk a félvezetőben. A létrejövő n-vezetőben az elektronok, a p-vezetőben a lyukak vezeték túlnyomórészt az áramot, ezeket *többségi töltéshordozóknak* nevezzük. Az áram egy -bár jóval kisebb- részét az n-vezetőben a lyukak, a p-vezetőben az elektronok szállítják. Ezek az ún. *kisebbségi töltéshordozók*.