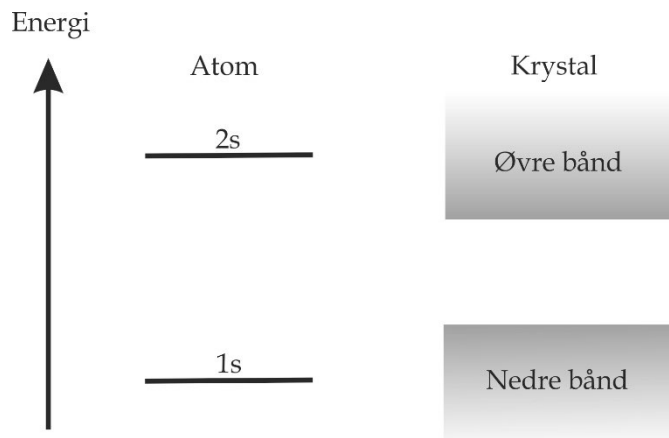


## Halvlederes optiske egenskaber: lysdioder og lasere

I dette SRP oplæg kan du få inspiration til et projekt med fokus på halvledere, spektroskopi og moderne lyskilder. Du får her en kort gennemgang af relevant teori, eksperiment, anvendelser og supplerende litteratur. Der er også en teoretisk øvelse, som ud fra elektroners bølgeegenskaber forklarer begrebet "energibånd". På AAU's SRP dage kan du (1) udføre eksperimentet, (2) få måledata med hjem og (3) høre et foredrag om teorien på gymnasieniveau. En AAU forsker vil hjælpe med eksperiment og dataopsamling, samt holde foredraget.

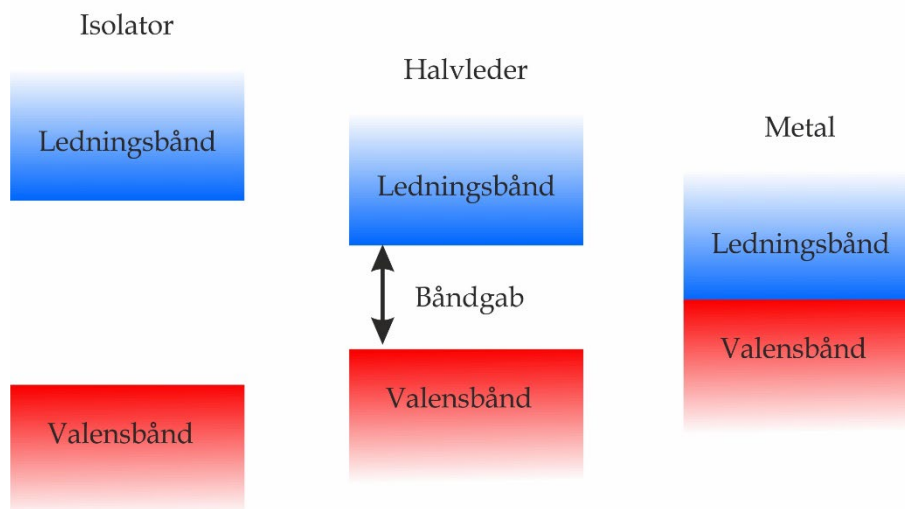
### Teori:

Vi inddeler materialer i tre hovedgrupper: metaller, isolatorer og halvledere. For at forstå forskellen skal man bruge elementær kvantemekanik og "Pauli-princippet". Fra atomer vides det, at elektroner findes i skallerne 1s, 2s, 2p etc. I f. eks. et kulstofatom har vi konfigurationen  $1s^2 2s^2 2p^2$ , som siger, at der er to elektroner i 1s-skallen etc. Disse to elektroner har den laveste energi, og man kan spørge, hvorfor ikke alle elektronerne befinder sig i denne



skal. Svaret ligger i Pauli-princippet, som siger, at der i en given skal (som f.eks. 1s) kun er "plads" til to elektroner, som desuden skal have modsatrettede spin. Det samme princip gælder for krystaller med den forskel, at der er mange flere skaller, som ligger ekstremt tæt i energi. Når man sammenligner med et atom, ligger energierne så tæt, at de danner sammenhængende "energibånd", med huller ("båndgab") imellem, som vist herover. I øvelsen er vist, hvordan energibånd opstår, når atomer i et gitter bringes tættere og tættere.

Herunder: **RØDE** tilstande er besatte, mens **BLÅ** er tomme.



Metaller, isolatorer og halvledere adskiller sig ved, hvilke af disse energibånd, der er fyldt af elektroner. Her er det vigtigt at forstå, at selvom et energibånd findes, er der ikke nødvendigvis elektroner i det. Elektronerne fordeler sig nemlig sådan, at deres energi er mindst mulig. Sagt på en anden måde kan man tænke sig, at krystallen består af mange mulige pladser eller "skaller". Vi tænker os nu, at elektronerne tilføjes én ad gangen. Den første finder pladsen med lavest energi. Denne plads er også ledig for den næste elektron forudsat, at den har modsat spin af den første. Men den tredje elektron skal nødvendigvis i en skal med højere energi. Når alle elektroner er placeret, har vi en situation som på figuren ovenfor, hvor skaller op til en vis energi er fyldte ("røde"), mens dem ovenover er tomme ("blå"). Et helt fyldt "rødt" bånd kaldes et valensbånd, mens et tomt "blåt" er et ledningsbånd.

Forskellen mellem de tre situationer ovenfor bliver tydelig, når man ser på, hvad det "koster" at flytte en elektron fra en fyldt til en tom plads. Eftersom alle de "røde" pladser allerede er fyldte, skal en "rød" elektron flyttes til en "blå" plads. For isolatorer og halvledere koster dette mindst båndgabet i energi. I praksis betyder det f.eks., at lys med stor bølgelængde ikke har energi nok til at flytte en elektron. Dette lys kan derfor ikke absorberes af elektronerne, og isolatorer som glas er af samme grund gennemsigtige. Til gengæld kan isolatorer godt absorbere ultraviolet lys med kort bølgelængde, hvilket er forklaringen på, at man ikke bliver solbrændt bag en glasrude. Halvledere har ligesom isolatorer et båndgab mellem de fyldte og tomme pladser. For halvledere er gabet blot så lille, at selv synligt lys kan delvis absorberes. Grænsen mellem halvledere og isolatorer er ikke veldefineret, men som en tommelfingerregel kan man sige, at isolatorer har så store båndgab, at de ikke absorberer synligt lys. Endelig kendetegnes metaller ved, at de ikke har noget båndgab. De absorberes derfor alle bølgelængder, og er fuldstændig ugenomsigtige. Faktisk kan man selv med et almindeligt batteri give elektroner energi nok til hoppe mellem tomme pladser, hvilket er forklaringen på, at metaller er gode elektriske ledere.

### **Eksperiment:**

SRP projektet kan indeholde eksperimentelle undersøgelser af halvlederens optiske egenskaber. Man kan måle en halvleders båndgab med relativt simpel spektroskopi. I en absorptionsmåling sendes et spektrum af lys igennem en halvlederkrystal, og det måles, hvor meget der transmitteres af de forskellige bølgelængder. Lys med stor bølgelængde  $\lambda$  har ikke energi nok til at flytte en elektron fra valens- til ledningsbåndet. Ved benyttelse af sammenhængen mellem energi  $E$  og bølgelængde  $E = hc / \lambda$ , hvor  $h$  er Planck's konstant, bestemmes hermed båndgabet ud fra den største bølgelængde, som absorberes. Samtidig kan båndgabet måles ved at undersøge fotoluminescens, dvs. lys udsendt fra krystallen. Til dette formål belyses halvlederen med meget energirig stråling, således at mange elektroner flyttes til ledningsbåndet. Disse elektroner mister hurtigt en del af deres energi i form af varme, men resten udsendes som lys, når elektronerne falder tilbage til valensbåndet. Den største bølgelængde, som udsendes, svarer præcis til båndgabet. I forsøget undersøger vi krystaller med både små og store båndgab, svarende til lys i den infrarøde, synlige og ultraviolette del af spektret. Der optages både absorptions- og emissionsspektre i form af intensitet som funktion af bølgelængde. Eleven får disse spektre med hjem til yderligere databehandling.

## Anvendelser:

Halvledere og lys indgår i virkelig mange vigtige teknologiske anvendelser. Hvis vi først kigger på halvlederens absorption af lys, er den vigtigste anvendelse selvfølgelig solceller. Men også fotodetektorer er helt essentielle komponenter i moderne kommunikation i fiberkabler, hvor lys omdannes til strøm, når signalet er nået frem til modtageren. Det kan måske undre, at man ikke bruger metaller i solceller, når de nu absorberer alt lys, men det hænger sammen med, at der kræves et båndgab for, at elektronerne ikke med det samme falder tilbage i de oprindelige pladser, hvorved energien mistes. Man kan vise, at det optimale er et båndgab svarende til såkaldt "nær-infrarødt" lys, med energi lige udenfor det synlige spektrum.

Lysudsendelse fra halvledere er den anden store teknologiske anvendelse. Vi kender alle LED'er, som fungerer ved, at et batteri eller anden spændingskilde trækker elektroner ud fra de fyldte pladser i krystallens ene ende, men der fyldes elektroner i de tomme pladser i den anden ende. Når elektronerne vandrer gennem krystallen fra den fyldte ende, møder de på et tidspunkt en tom plads i valensbåndet. Når de falder ned i den tomme plads, bliver den overskydende energi udsendt som lys, der dermed vil have en energi, som præcis er båndgabets. En halvlederlaser, som bruges i optisk kommunikation og DVD-afspillere, er i princippet en LED, hvor der er skruet højt op for den elektriske strøm. Man kan vise, at hvis man skruer så højt op, at der er flere elektroner i bunden af ledningsbåndet end i toppen af valensbåndet, vil det udsendte lys være laserlys. Dette kræver derfor, at der både trækkes mange elektroner ud fra valensbåndet samtidig med, at der fyldes mange i ledningsbåndet.

## Supplerende litteratur:

Stående elektronbølger: [Her](#)

Molekyler som ringe og tilhørende matrixproblemer: [Her](#)

Matrixregning: [Her](#) og andre sider under "linear algebra" på [mathworld.wolfram.com](http://mathworld.wolfram.com).

## Teoretisk øvelse: Elektroner som bølger

Kvantemekanik er kompliceret, men man kan lave en simpel model, som indeholder alt det væsentlige. Udgangspunktet er de Broglie's postulat om, at der til alle partikler er knyttet en bølgebevægelse beskrevet ved en bølgelængde  $\lambda$ , som hører sammen med impulsen  $p = mv$  via  $p = h / \lambda$ , hvor  $h$  er Planck's konstant og  $m$  er partiklens masse. Med mere moderne notation skriver vi  $p = \hbar k$ , hvor  $\hbar = h / 2\pi$  er Planck's reducerede konstant og  $k = 2\pi / \lambda$  kaldes bølgetallet. Vi ser derfor, at partiklens kinetiske energi bliver  $E = p^2 / 2m = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Selve bølgen er på formen  $\psi(x) = A \sin(2\pi x / \lambda) = A \sin(kx)$ , hvor man traditionelt bruger det græske bogstav  $\psi$  ("psi") i kvantemekanik og  $A$  er bølgens amplitude.

Hvis vi beskriver en fri partikel, er der ingen begrænsninger på bølgelængden og dermed energien. Men hvis partiklen holdes fast af ydre kræfter, er situationen en anden. Det er præcis, hvad der sker for elektroner i et atom, hvor atomkernen holder dem bundet. En simpel måde at tænke på atomer er at sige, at bølgen er "fanget" indenfor et lille område.

For vores en-dimensionelle bølge kan vi tænke os, at bølgen kun findes i et lille interval  $0 < x < L$  af længde  $L$ , således at vi kan skrive bølgen i et atom som

$$\psi_{\text{atom}}(x) = \begin{cases} A \sin(kx) & 0 < x < L \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases}$$

Dette svarer til en stående bølge, som kendes fra f. eks. en guitarstreng. Og præcis ligesom guitarstrengen vil der gælde, at bølgens udsving er nul i endepunkterne. Det betyder, at kun bestemte bølgelængder er tilladte. Sinus-bølgen opfylder automatisk denne betingelse i det ene endepunkt, nemlig  $\psi_{\text{atom}}(0) = 0$ .

**a)** Vis, at betingelsen  $\psi_{\text{atom}}(L) = 0$  medfører  $k = n\pi / L$ , hvor  $n = 1, 2, 3, \dots$  er et heltal. De tilladte bølgelængder er derfor  $\lambda = 2L / n$ .

De enkelte bølgeformer for vores "atom" er altså karakteriseret ved en "kvantiseret" energi  $E_{\text{atom}} = (\hbar\pi n / L)^2 / 2m$ , hvor laveste  $n$ , nemlig  $n = 1$ , svarer til laveste energi osv.

Nu er spørgsmålet, hvad der sker, når vi danner molekyler ved at sætte atomer sammen. Et molekyle er stabilt, hvis de atomerne sænker deres energi ved at sætte sig sammen. I bølgemodellen udtrykkes det ved, at elektroner vinder energi ved at "hoppe" fra atom til atom. Det betyder, at elektronens samlede bølge nu består af to dele: den oprindelige for det enkelte atom  $\psi_{\text{atom}}(x)$  og en ny amplitude  $A$ , som beskriver, hvilket atom, vi snakker om. Den oprindelige del  $\psi_{\text{atom}}(x)$  er den samme for alle atomer (det er underforstået, at vi måler  $x$  fra midten af de enkelte atomer). Vi ser først på molekyler dannet af to atomer. Her får vi en samlet bølge på formen  $\psi_{\text{samlet}}(x) = A_1\psi_{\text{atom}_1}(x) + A_2\psi_{\text{atom}_2}(x)$ , hvor de to  $A$ 'er hører til de to atomer. Lad os tage udgangspunkt i en elektron bundet til atom 1. Hvis det andet atom er langt væk har vi  $A_1 = 1$  og  $A_2 = 0$ , sådan at bølgen kun findes på det første atom. Hvis vi bringer det andet atom tættere på, kan elektronen vinde energi ved at hoppe mellem atomerne. Forholdet  $A_2 / A_1$  kaldes for "amplituden" for at hoppe mellem atomerne. For to atomer kan vi skrive  $E = E_{\text{atom}} - E_{\text{hop}}(A_2 / A_1)$ , hvor  $E_{\text{hop}}$  er en positiv energi, som siger, hvor meget man vinder ved at hoppe. Vi ser, at for atomer med stor afstand har vi  $E = E_{\text{atom}}$  som forventet, men dette ændres, hvis amplituden ( $A_2 / A_1$ ) ikke er nul. Lad os gange energiligningen igennem med  $A_1$ , så vi får  $EA_1 = E_{\text{atom}}A_1 - E_{\text{hop}}A_2$ . Sagen er nu, at vi vil få præcis samme formel, hvis vi tager udgangspunkt i atom 2, bortset fra, at vi skal bytte om på  $A_1$  og  $A_2$  i ligningen. Dette svarer altså til, at vi "sidder" på atom 2 og ser atom 1 komme tættere og tættere. Samlet har vi derfor to ligninger

$$EA_1 = E_{\text{atom}}A_1 - E_{\text{hop}}A_2 \quad \text{og} \quad EA_2 = E_{\text{atom}}A_2 - E_{\text{hop}}A_1.$$

Matematisk set udgør udtrykkene to koblede ligninger, som vi skal løse for at finde amplituderne  $A_1$  og  $A_2$ . Energien  $E$  er også ubekendt og udgør, hvad der kaldes en *egenværdi*. Vi kan først benytte en simpel løsningsmetode, som virker fint med to ligninger, men ikke er smart, når der er flere. Ved at indsætte  $A_2$  fra den sidste ligning og isolere  $A_1$

finder man nemt  $[(E - E_{\text{atom}})^2 - E_{\text{hop}}^2]A_1 = 0$ . Hvis denne ligning skal løses med  $A_1 \neq 0$ , må der gælde  $(E - E_{\text{atom}})^2 - E_{\text{hop}}^2 = 0$ . Denne andengrads-ligning for energien  $E$  har løsninger  $E = E_{\text{atom}} - E_{\text{hop}}$  og  $E = E_{\text{atom}} + E_{\text{hop}}$ . En smart måde at finde løsninger er *matrix*-metoden<sup>1</sup>, hvor vi skriver de to ligninger som én matrix-ligning

$$\begin{pmatrix} E - E_{\text{atom}} & E_{\text{hop}} \\ E_{\text{hop}} & E - E_{\text{atom}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = 0.$$

Det er klart, at der findes en såkaldt "triviel" løsning, nemlig  $A_1 = A_2 = 0$ . Den er uinteressant, da der så slet ikke findes en bølge. Betingelsen for en "ikke-triviel" løsning er, at matrixens *determinant* er nul.

**b)** Vis, at determinant-betingelsen er  $(E - E_{\text{atom}})^2 - E_{\text{hop}}^2 = 0$ .

Der er altså to løsninger: én, hvor elektronen vinder energi og én, hvor den får højere energi. Her kommer Pauli's princip på banen: Begge elektroner må godt være i tilstanden med lav energi, hvis de blot har modsatrettede spin. Altså vinder begge elektroner energi ved at danne molekylet, og molekylet er derfor stabilt. Modellen kan nemt udvides til flere atomer. Antag f. eks. at vi har fire atomer i en ring. Elektronen fra atom 1 kan hoppe til atom 2 og 4, elektronen fra atom 2 kan hoppe til atom 1 og 3, osv. På matrix-form bliver det til ligningen

$$\begin{pmatrix} E - E_{\text{atom}} & E_{\text{hop}} & 0 & E_{\text{hop}} \\ E_{\text{hop}} & E - E_{\text{atom}} & E_{\text{hop}} & 0 \\ 0 & E_{\text{hop}} & E - E_{\text{atom}} & E_{\text{hop}} \\ E_{\text{hop}} & 0 & E_{\text{hop}} & E - E_{\text{atom}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} = 0.$$

Determinanter for  $4 \times 4$  matricer er ikke så nemme, men med lidt arbejde finder man betingelsen  $(E - E_{\text{atom}})^4 - 4E_{\text{hop}}^2(E - E_{\text{atom}})^2 = 0$  for ikke-trivielle løsninger. Betingelsen kan selvfølgelig også findes ved at isolere og sætte ligninger sammen.

**c)** Vis, at de mulige energier er  $E_{\text{atom}} - 2E_{\text{hop}}$ ,  $E_{\text{atom}}$  (som findes to gange) og  $E_{\text{atom}} + 2E_{\text{hop}}$ . De fire elektroner vinder derfor samlet  $-4E_{\text{hop}}$ .

Vi kan nu generalisere til ringe med  $N$  atomer. Her kan det vises, at de mulige energier bliver  $E_{\text{atom}} - 2E_{\text{hop}} \cos(2\pi \frac{p-1}{N})$ , hvor heltallet  $p$  løber fra 1 til  $N$ . Man ser let, at det passer i de to tilfælde  $N = 2$  og  $N = 4$ . Desuden findes en amplitude givet ved  $A_q = \cos(2\pi qp / N)$ . Hvis afstanden mellem atomerne er  $a$ , befinder den  $q$ 'te "kerne" sig på positionen  $x_q = qa$ . Man ser heraf, at amplituden er en cosinus-bølge på formen  $A_q = \cos(2\pi x_q / \Lambda)$  med bølgelængde  $\Lambda = Na / p$ . Den samlede bølge er altså en "moduleret" sinus-bølge med en

---

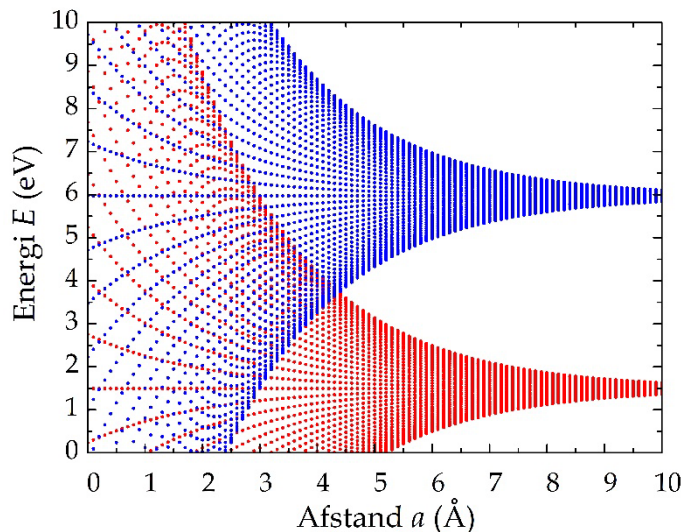
<sup>1</sup> Der findes mange sider, der forklarer matricer, egenverdier og determinanter. Se supplerende litteratur.

bølgelængde  $\lambda = 2L/n$  for de enkelte atomer og en anden karakteristisk bølgelængde  $\Lambda = Na/p$ , som beskriver hop mellem atomerne.

**d)** Vis det generelle resultat! Tip: Indfør  $\lambda = (E - E_{\text{atom}}) / E_{\text{hop}}$  og skriv ligningen for det  $q$ 'te atom på formen  $\lambda A_q + A_{q-1} + A_{q+1} = 0$ . Brug derefter trigonometriske relationer til at vise, at  $A_q = \cos(2\pi qp/N)$  er en løsning, som ydermere passer med ringens "ender", dvs.  $q = 1$  og  $q = N$ . Husk, at  $p$  er et heltal og at  $\cos(2\pi p) = 1$ .

Vi kan nu illustrere, hvordan energibånd opstår, når atomer i en krystal bringes tættere og tættere. Til dette formål kigger vi på atomer med to "skaller" svarende til, at vi sætter  $n = 1$  og  $n = 2$  i udtrykket  $E_{\text{atom}}(n\text{'te skal}) = (\hbar\pi n/L)^2 / 2m$ . For atomer kan vi antage  $L = 5 \text{ \AA}$ , hvilket giver  $E_{\text{atom}}(1. \text{ skal}) = 1.49 \text{ eV}$  og  $E_{\text{atom}}(2. \text{ skal}) = 5.97 \text{ eV}$ . "Hoppe-energien" afhænger som nævnt meget af afstanden mellem atomerne, og vi vil bruge  $E_{\text{hop}}(a) = 10 \text{ eV} \times \exp(-a/2\text{\AA})$  som funktion af afstanden  $a$ . Vi vælger en ring med  $N = 100$  atomer og beregner energier for  $1 < p \leq N$ .

**e)** Lav et plot af alle energierne magen til figuren nedenfor.



Vi ser, at elektronerne beholder deres oprindelige energier, når atomerne er langt fra hinanden. Men de to "energibånd" smelter sammen, hvis atomerne er så tætte, at  $a < 4.4 \text{ \AA}$  cirka. Her er nu en vigtig pointe: der er præcis  $N$  "blå" og  $N$  "røde" energier. Hvis vi tænker os, at hvert atom afgiver en elektron til krystallen (så der er  $N$  elektroner i alt), vil det svare til, at den laveste halvdel af de røde energier er besatte med to elektroner hver (igen Pauli's princip og modsatrettede spin). Dette beskriver altså et metal. Omvendt kan det tænkes, at hvert atom bidrager med to elektroner. I dette tilfælde vil alle de røde energier være besatte ved store afstande mellem atomerne, eftersom disse er de laveste. Dette svarer til en isolator eller en halvleder afhængig af båndgabets størrelse. Men for afstande mindre end  $4.4 \text{ \AA}$  overlapper de blå og røde løsninger, og dette svarer til et metal.