

# PRESEK

List za mlade matematike, fizike, astronome in računalnikarje

ISSN 0351-6652

Letnik 27 (1999/2000)

Številka 1

Strani 10-15

Janez Strnad:

## VRZELI KOT NOSILCI NABOJA V KRISTALIH

Ključne besede: fizika, električni tok, električni naboj, Hallov pojav, polprevodniki, gibanje elektronov, enoelektronska stanja, Paulijeva prepoved, energijske špranje.

Elektronska verzija: <http://www.presek.si/27/1389-Strnad.pdf>

© 1999 Društvo matematikov, fizikov in astronomov Slovenije

© 2010 DMFA - založništvo

Vse pravice pridržane. Razmnoževanje ali reproduciranje celote ali posameznih delov brez poprejšnjega dovoljenja založnika ni dovoljeno.

## VRZELI KOT NOSILCI NABOJA V KRISTALIH

Presek je v predzadnji številki prejšnjega letnika opisal *Hallov pojav*. Baterija poganja električni tok po kovinskem traku, postavljenem v prečno magnetno polje. Voltmeter med robovoma traku – prečno na tok in prečno na magnetno polje – pokaže *Hallovo napetost*. Pri toku, usmerjenem k nam, in magnetnem polju v smeri navzgor je na primer pri bakru, srebru, zlatu, kaliju levi rob traku negativen in desni rob pozitiven. Izid pojasnimo takole: elektrone, ki se gibljejo od nas, v nasprotni smeri od dogovorjene smeri toka, vleče sila magnetnega polja proti levi, da se kopičijo na levem robu traku. Tam se pojavi presežek elektronov. Nastalo električno polje preprečuje nadaljnje prehajanje elektronov proti levi. *Hallov koeficient*  $K_H = bU_H/IB$  izračunamo z izmerjeno Hallovo napetostjo  $U_H$ , z debelino traku  $b$ , tokom  $I$  in gostoto magnetnega polja  $B$ . Hallov koeficient je v tem primeru negativen, kar pomeni, da je levi rob traku negativen, desni pa pozitiven. Absolutna vrednost Hallovega koeficienta določa gostoto nosilcev naboja  $N/V = 1/e_0|K_H|$ . Hallov pojav lahko izkoristimo tudi za merjenje gostote magnetnega polja. Lepo!

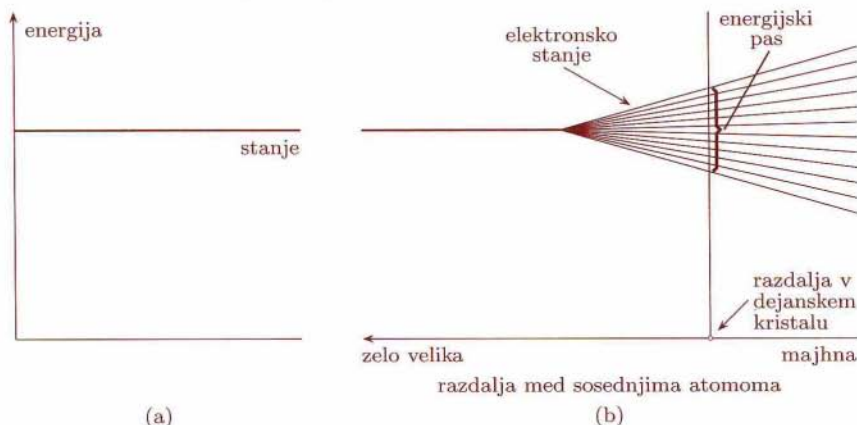
Pri nekaterih kovinah, na primer železu, cinku, volframu, bizmutu, pa je Hallov koeficient pozitiven, kar pomeni, da postane levi rob traku pozitiven in desni negativen. Ta izid je tako presenetljiv, da so ga imeli za paradoks. Pojasnili so ga šele pol stoletja po odkritju Hallovega pojava. Izid je presenetljiv, ker so v kovini gibljivi edino negativni nosilci naboja, to je prevodniški elektroni. Kako naj z *negativnimi* prevodniškimi elektroni pojasnimo *pozitivni* Hallov koeficient? V času, v katerem bi težko prebili brez računalnikov, računal, televizorjev in podobnih naprav, ki vsebujejo elemente iz polprevodnikov, je vredno vsaj poskusiti.

Začnimo s curkom prostih elektronov v katodni cevi televizijskega sprejemnika. Če se elektroni gibljejo od nas v navzgor usmerjenem magnetnem polju, se odklonijo proti levi in le proti levi. Proti desni bi se odklonili, če bi obrnili smer magnetnega polja ali smer gibanja. Toda Hallov koeficient za železo, cink, volfram in bizmut smo izmerili v enakih okoliščinah kot za baker, srebro, zlato, kalij. Prevodniških elektronov v kovini potemtakem ne moremo obravnavati, kot obravnavamo proste elektrone v vakuumu v katodni cevi. Upoštevati moramo, da se gibljejo po notranjosti kristala, v katerem nanje deluje množica atomov, razporejenih po prostoru v periodično ponavljajočem se vzorcu.

Poleg tega gibanja elektronov ne moremo opisati, kot opišemo gibanje žog in drugih teles, ki jih opazujemo s prostim očesom. Za gibanje elektronov velja zakon, ki se razlikuje od Newtonovega. Elektrone moramo obravnavati v okviru kvantne mehanike, ne v okviru klasične mehanike.

Gibanje elektronov v katodni cevi v okviru kvantne mehanike lahko obravnavamo približno kot gibanje žog. Če ne bi bilo tako, ne bi mogli predvideti, kje in kdaj elektroni zadenejo zaslon in ne bi mogli gledati televizije. Pri elektronih v kristalih je drugače. Kaj je mogoče o tem povedati s preprostimi besedami?

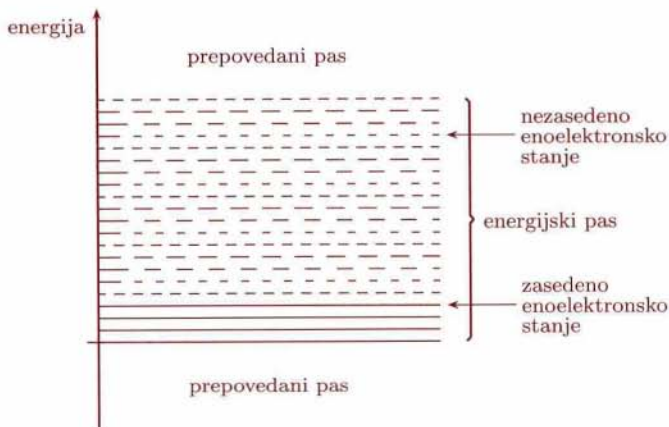
Elektron v osamljenem atomu se lahko giblje na določen način, ki mu ustreza določena energija. V kristalu veliko atomov, ki so urejeno razporejeni po prostoru, vpliva na gibanje elektrona. Mislimo na atome v kristalu, v katerem bi bila razdalja med sosednjima atomoma zelo velika, in se zanimamo samo za elektrone, ki so nanje najšibkeje vezani. Tedaj drugi atomi ne motijo gibanja elektrona in ne vplivajo na njegovo energijo. V takem kristalu ima elektron enako energijo kot v osamljenem atomu. Sosednji atomi bolj in bolj vplivajo na najšibkeje vezane elektrone, ko se razdalja med sosednjima atomoma bolj in bolj manjša. Zaradi tega se nekoliko spremeni energija elektronov. Iz energijskega stanja z določeno energijo elektrona v atomu nastane v kristalu širok *energijski pas* enoelektronskih stanj, ki se po energiji elektrona malo razlikujejo. Preobrazbo energijskih stanj od stanja z ostro določeno energijo pri enem atomu do širokega energijskega pasu v kristalu si lahko samo zamislimo in spremljamo z računom, ni pa mogoče pri poskusu po volji spreminjati razdalje med sosednjima atomoma v kristalu (slika 1).



Slika 1. Stanje elektrona z določeno energijo v osamljenem atomu (a). V kristalu, v katerem je razdalja med sosednjima atomoma zelo velika, sosednji atomi ne vplivajo na najšibkeje vezan elektron v atomu in so razmere take kot v osamljenem atomu (b, levo). Pri vse manjši razdalji pa sosednji atomi vse močnejše vplivajo na najšibkeje vezani elektron in energija elektrona se spremeni: bližnja enoelektronska stanja se razprejo v energijski pas (b, desno).

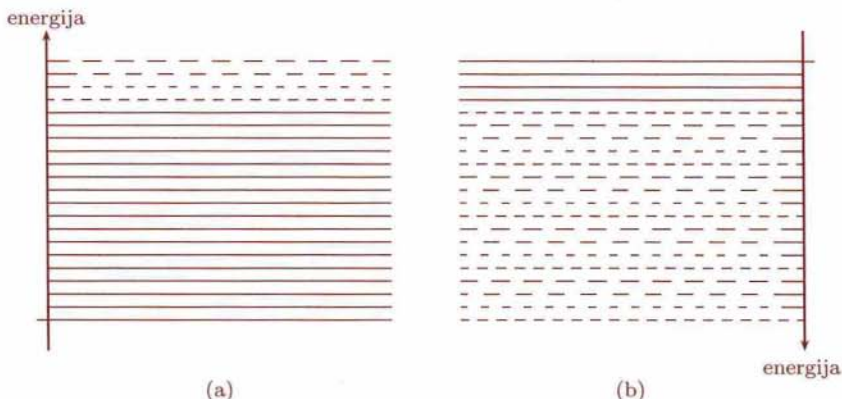
Enoelektronska stanja v pasu so zelo številna in se po energiji med seboj zelo malo razlikujejo. Zato si lahko mislimo, da se energija elektrona poljubno malo poveča ali pomanjša, ko elektron iz danega enoelektronskega stanja preide v malo višje ali malo nižje stanje. Glede energije je tako elektron v kristalu, če se omejimo na energijski pas, v podobnem položaju kot elektron v katodni cevi: ima lahko poljubno energijo. Vendar se v kristalu razmere razlikujejo od razmer v katodni cevi, ker v kristalu pride do izraza število enoelektronskih stanj. V enem enoelektronskem stanju je lahko kvečjemu *en elektron*. Enoelektronsko stanje je ali *nezasedeno* ali *zasedeno* z enim elektronom. To je znamenita *Paulijeva prepoved*, ki jo je leta 1925 odkril Wolfgang Pauli. Z obojim, s periodično urejenimi atomi, ki delujejo na prevodniške elektrone, da nastane energijski pas, in s Paulijevo prepovedjo je mogoče pojasniti pozitivni Hallov koeficient v kristalih nekaterih kovin.

Upoštevati je treba to, da pod pasom in nad njim, to je pri nižji in pri višji energiji, ni enoelektronskih stanj. Tam sta *prepovedana pasova*. Če je prevodniških elektronov v energijskem pasu veliko manj kot enoelektronskih stanj in je v pasu veliko nezasedenih enoelektronskih stanj, se elektroni vedejo kot prevodniški elektroni, to je približno kot prosti. To smo upoštevali, ko smo pojasnili Hallov koeficient v bakru in podobnih kovinah (slika 2).



Slika 2. Energijski pas z enoelektronskimi stanji v kovini, v kateri je v energijskem pasu veliko manj elektronov kot enoelektronskih stanj. Prevodniški elektroni zasedejo enoelektronska stanja z najnižjo energijo, a tako, da je v vsakem enoelektronskem stanju kvečjemu en elektron. V tem primeru je Hallov koeficient negativen.

Drugače je, če je elektronov samo malo manj kot enoelektronskih stanj in je v sicer zasedenem pasu samo malo nezasedenih elektronskih stanj. Nezasedeno stanje v takem okolju ustreza *primanjkljaju elektrona*. Gibanje primanjkljaja elektrona v skoraj popolnoma zasedenem energijskem pasu opišemo kot gibanje *vrzeli* v skoraj nezasedenem pasu (slika 3).

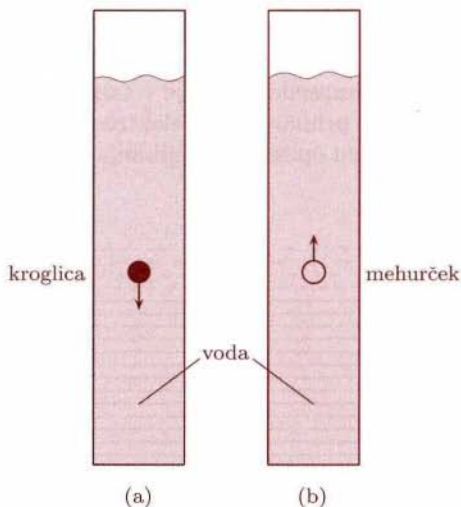


Slika 3. Energijski pas z enoelektronskimi stanji v kovini, v kateri je v energijskem pasu samo malo manj prevodniških elektronov kot enoelektronskih stanj (a). Gibanje nosilcev naboja, ki ustrezajo primanjkljaju prevodniških elektronov v nezasedenih enoelektronskih stanjih, opišemo z vrzeli v nezasedenem energijskem pasu (b). Vrzeli so namišljeni nosilci naboja s pozitivnim nabojem  $e_0$ , njihova energija je pozitivna v drugo smer kot energija prevodniških elektronov. V tem primeru je Hallov koeficient pozitiven.

Vrzel je namišljen delec, ki ima nasproten naboj kot elektron, torej pozitivni osnovni naboj. Pojavi se v računih in si je mehanično ne moremo dobro nazorno predstavljati (slika 4). Rezultat, ki ga dobimo za vrzel v prečnem magnetnem polju, pa je tak kot za elektron, če upoštevamo nasprotni znak naboja. Ker imajo vrzeli nasprotni naboj, se gibljejo v nasprotni smeri kot prevodniški elektroni. Rezultat za magnetno silo se ne spremeni, če spremenimo znak naboja in smer hitrosti. Vrzeli se torej kopičijo na levem robu traku in je ta rob pozitiven proti desnemu robu.

V kovinah z negativnim Hallovim koeficientom je v energijskem pasu prevodniških elektronov veliko nezasedenih enoelektronskih stanj. Kovine s pozitivnim Hallovim koeficientom se od njih razlikujejo po tem, da imajo v tem energijskem pasu le malo nezasedenih enoelektronskih stanj. Tako kolikor mogoče preprosto pojasnimo ozadje pozitivnega Hallovega koeficienta nekaterih kovin.

Slika 4. Mehanična prisposoba za gibanje prevodniških elektronov in vrzeli. V vodi se gibljejo kovinske kroglice navzdol (a), zračni mehurčki pa navzgor (b). Če bi se cevi gibali pospešeno proti desni, bi se kroglice odklonile proti levi, mehurčki pa proti desni. Mehurčke sicer lahko opišemo kot nekakšen primanjkljaj kroglice, a so slabo nadomestilo za vrzeli, ki so računsko pomagalo. S prisposobo ne moremo naravnost pojasniti pozitivnega Hallovega koeficienta, ker se bi morali mehurčki odkloniti v isto smer kot kroglice. Vrzeli so zares dokaj zahteven pojem.



Kako pa je s polprevodniki, ki so tako pomembni? Pri polprevodniku je eden od energijskih pasov do vrha zaseden z elektroni, naslednji pa popolnoma nezaseden. Tako je pri zelo nizki temperaturi, pri kateri je polprevodnik izolator. Pri višji temperaturi elektroni z vrha zasedenega energijskega pasu na račun energije, ki jo dobijo od nihajočih atomov, preidejo preko *energijske špranje* v višji energijski pas in v njem igrajo vlogo prevodniških elektronov. V nižjem, polno zasedenem energijskem pasu, pri tem nastanejo primanjkljaji elektronov, ki jih opišemo kot vrzeli v nezasedenem energijskem pasu. V polprevodniku pri navadni temperaturi prenašajo naboj oboji: prevodniški elektroni in vrzeli. V *polprevodniku brez primesi* je obojih enako. Pri merjenju s takim polprevodnikom potentakem ne dobimo Hallove napetosti, ker bi se prevodniški elektroni in vrzeli nakopičili na levem robu traku in bi učinek enih izravnal učinek drugih.

Na vrzeli je prvi pomislil Werner Heisenberg leta 1926, ko je obravnaval atome elementov, ki so bili v periodni preglednici mesto ali dve pred žlahtnim plinom. Atom takega elementa je bilo mogoče obdelati kot atom žlahtnega plina s primanjkljajem enega ali dveh elektronov. Felix Bloch je leta 1928 opisal elektrone v periodičnem kristalu v okviru kvantne mehanike. Ugotovil je, da se elektron v periodičnem kristalu giblje nemoteno. Za električni upor je krivo termično nihanje atomov in nečistoče ali druge

nepravilnosti v kristalu. Heisenberg je v Leipzigu svetoval mlajšemu sodelavcu Rudolfu Peierlsu, naj razišče, ali je mogoče z Blochovim prijemom pojasniti pozitivni Hallov koeficient. Peierls je to storil v zelo kratkem članku leta 1929. Nato je v letih 1930 in 1932, ko je delal pri Pauliju v Zürichu, podrobno raziskal prevajanje elektrike in toplote v kovinah ter dopolnil Blochove rezultate iz leta 1928 pa tudi svoje iz leta 1929.

*Janez Strnad*