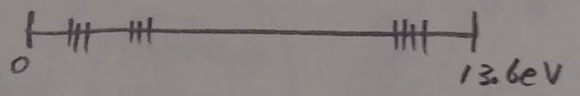
2.1.2 12-2

(에너지 밴드에 대한 정성적 고찰) : E - x 다이어그램

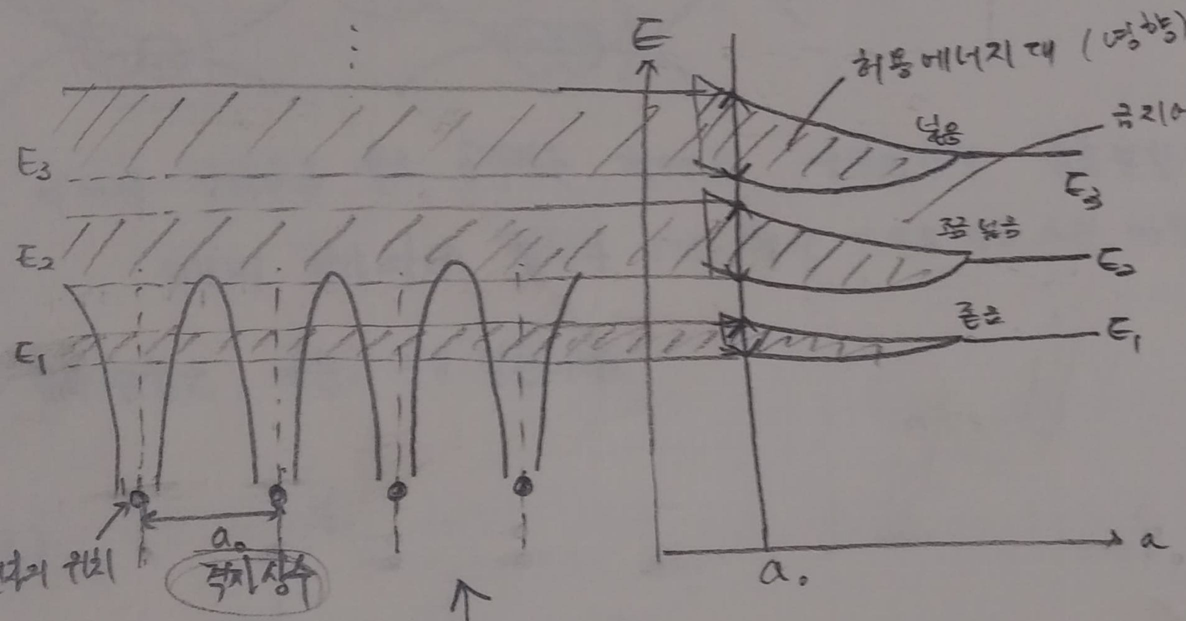
보어의 수소모델 (단원자) → 실제로는 많은 전자가 존재하는 원자결합에서는
고립원자 전자들간 에너지들이 작용

→ 파울리 배타율이 적용되어 해석이 불가능

→ 수많은 전자의 에너지가 중첩이 된 형태로 해석이 되어야 하며
이는 밴드모델로 정리된다
Kronig - penney 모델



◦ 좁은 대역 내에 무수히 많은 에너지 준위를 가지는 에너지 밴드가 존재



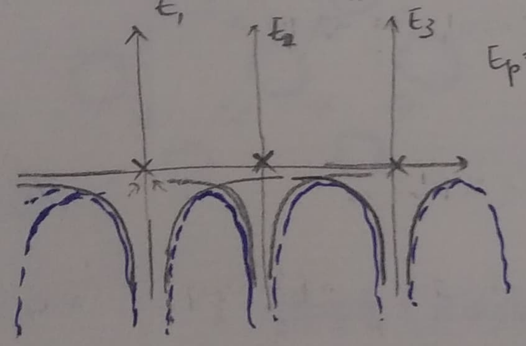
(고립 원자) N개.

$$E_p = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n}$$

$$E_k + E_p = -13.6\,(eV)\cdot\frac{1}{n^2}$$

n : 주양자수

$E_p = -k\cdot\frac{1}{r}$



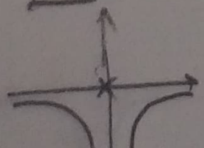
(고립) Si

$\underset{n=1}{1s^2}\ \underset{2}{2s^2 2p^6}\ \underset{3}{3s^2 3p^2}$

2 8 4

*

1개 $a_0 = \infty$



→ 주변에 있는 전자, 원자핵에 영향을 미치는 에너지 상태가 없다

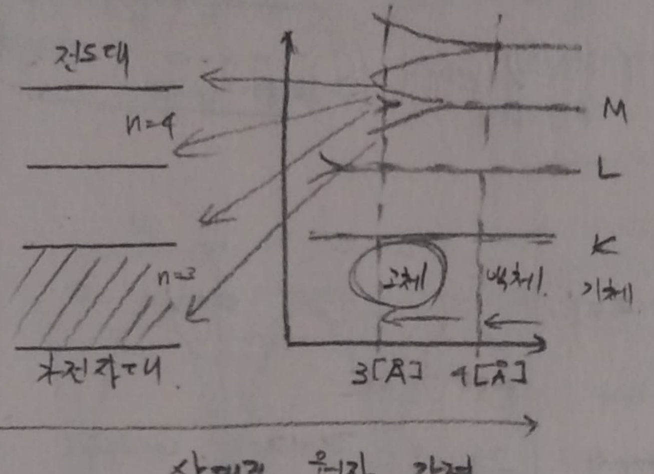
(에너지 띠)

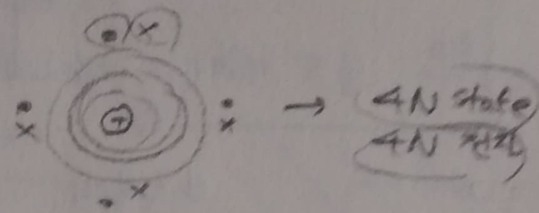
수소원자 예.

$$_{14}Si_1 = \underbrace{1s^2}_{E_1}^{n=1}\ \ \underbrace{2s^2 2p^6}_{E_2}^{n=2}\ \Big|\ \underbrace{3s^2 3p^2}_{E_2}^{n=3}$$

← 심전자 | 가전자 →

(유출 가능)





- n=4로 전자가 여기되면 전기 전도를 일으킨다

가전자띠 ⟶ 전도띠

- 전자들의 에너지 상태가 모여서 에너지 밴드를 형성한다. (띠)
- 심전자(에너지)띠의 전자는 여기되지 않는다
- 가전자(에너지)띠로부터 전도(에너지)띠로 전자가 여기될 수 있다

정리

전기전도에 기여하는 자유전자는 최외각 전자가 여기될 확률이 높기 때문에 특히 최외각 전자의 에너지 상태를 E-x 다이어그램으로 나타냄

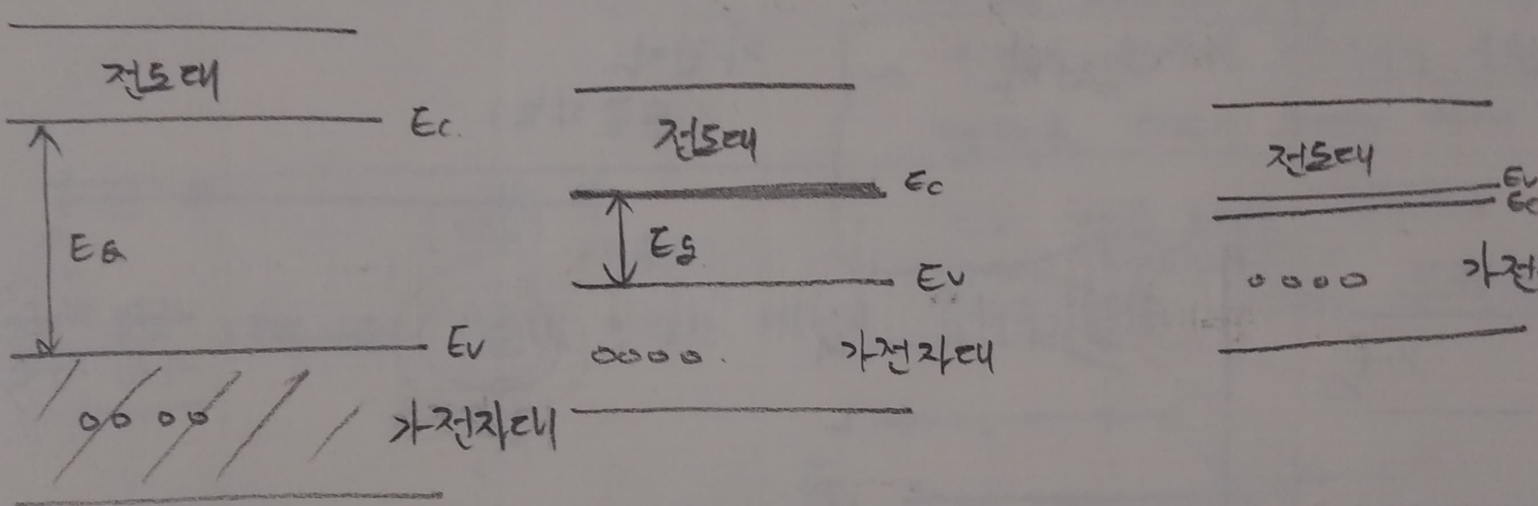
① 고립원자들을 서로 가까이 하게 되면 파동방정식의 경계조건과 포텐셜 에너지가 변하게 되고 최외각 전자들의 파동함수가 중첩되게 된다

② 파울리 배타율에 따라 에너지 준위가 갈라지고 쪼개진다.

③ 이때 나뉘어진 에너지 준위의 폭은 매우 작은 에너지 준위의 묶음이 10^{11}개 이상으로 존재하기 때문에 연속인 것으로 간주할 수 있으며 이를 에너지 띠 라고 한다.

(금속·반도체·절연체 에너지 밴드 구조.)

절연체 (부도체) | 반도체 | 금속(도체)



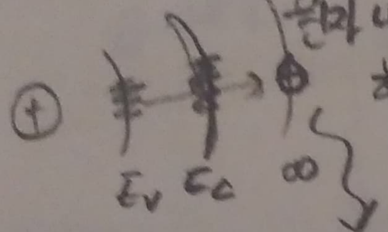
$E_g > 4eV$. | 반도체 1~2eV. | 0eV

에너지 띠의 발생: 전자공학에서 고체의 전기전도 여부를 매우 중요시하기 때문에 가전자대, 전도대, 그리고 이들이 얘기하는데 극복해야할 에너지 갭만을 그린다.

E_c: 전도대 끝단

E_v: 가전자대 끝단

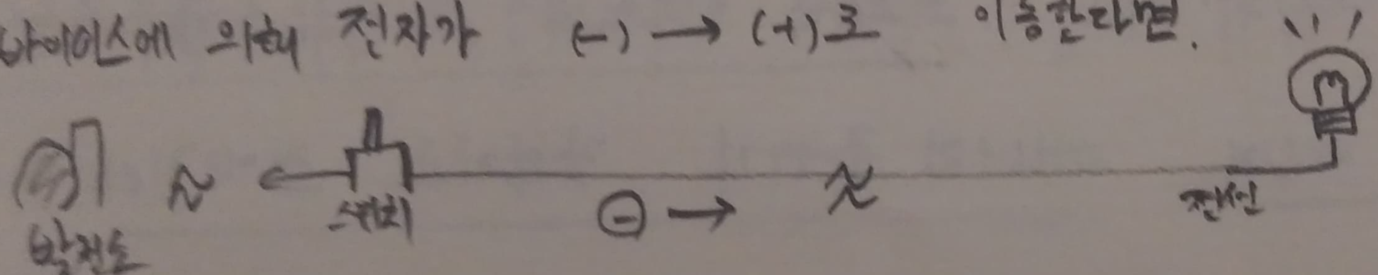
E-x 다이어그램의 설명 방식에는 오류가 존재한다



원자 내 전자는 궤도 내에 존재하고 최외각 전자들이 중첩되어 에너지 띠를 형성한다.

그리고 가전자 대로부터 전도대로 여기된 전자, 즉 자유전자는 전기전도에 기여하게 된다

바이어스에 의해 전자가 (-) → (+)로 이동한다면.



전자가 빛의 속도로 이동하여 불을 켜게 되는 것인가?

변위를 통해서만 전자의 이동을 설명하는 것은 타당하지 않다.

→ (전자파)는 빛의 속도로 이동하여 전달된다. (전파상수 k)

전자의 에너지는 전파상수 k를 통해서도 전달된다고 할 수 있다.

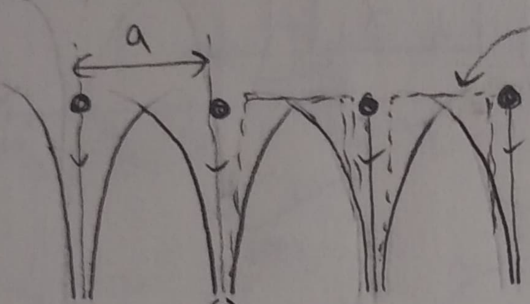
(파동성)

2.1.3 에너지 밴드에 대한 정량적 고찰: E-K 다이어그램.

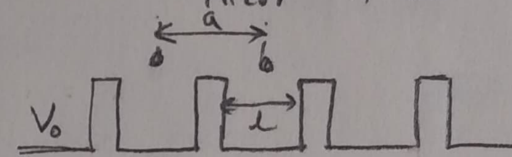
∘ E-x 다이어그램은 고체 내 전자의 변위를 공간적으로 나타내고 있지만 실제 전자는 이동하면서도 전기전도에 기여하고 천이 하며 운동량과 에너지를 가지며 파동성을 가지기 때문에 에너지-전파상수의 파동면에서도 동시에 생각해야 한다.

(kronig-penney potential.)

단일 원자가 완전 주기적인 격자 사이를 이동하는 것을 나타낸 것.



$$V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Big|_{r\to 0}$$



w = 0.
진폭 = ∞
면적 = 1

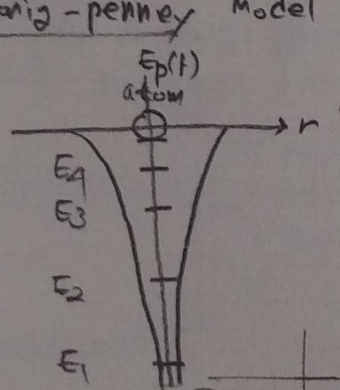
⇒ 임펄스 함수, 주기 함수 → Forier 변환 가능.

→ 격자상수가 a 이고 전위가 $-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ 이고 $r \to 0$ 이며 무한대 값을 가지는 주기 임펄스 함수로 나타낼 수 있다.

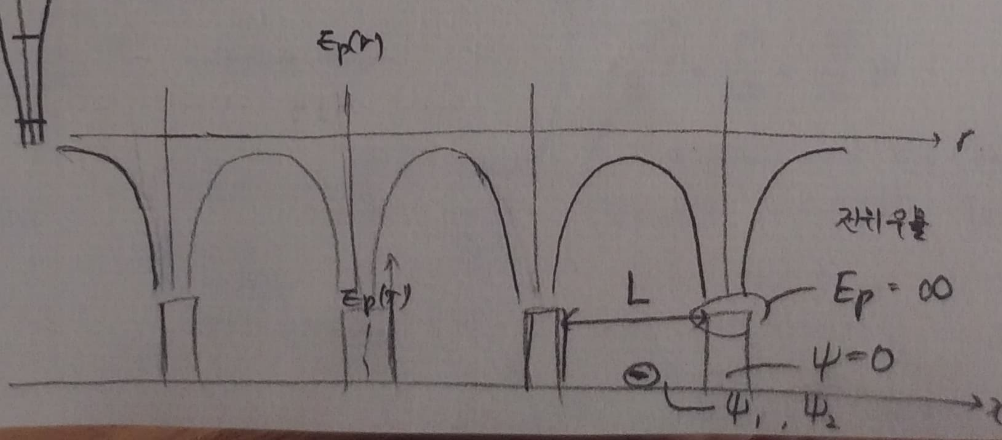
격자안에 있는 전자들이 중첩되어 있는 것을 통계적인 방법으로 나타내기 위해 주기적인 임펄스 함수로 나타내 푸리에 변환을 통해 가능하게 함.

(kronig-penney model for an electron in a periodic)

①



$$E_p(r) = -\frac{Zq^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Big|_{r\to r_n}$$

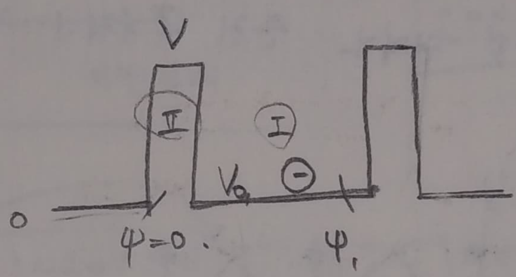


(Schrödinge wave Equation)

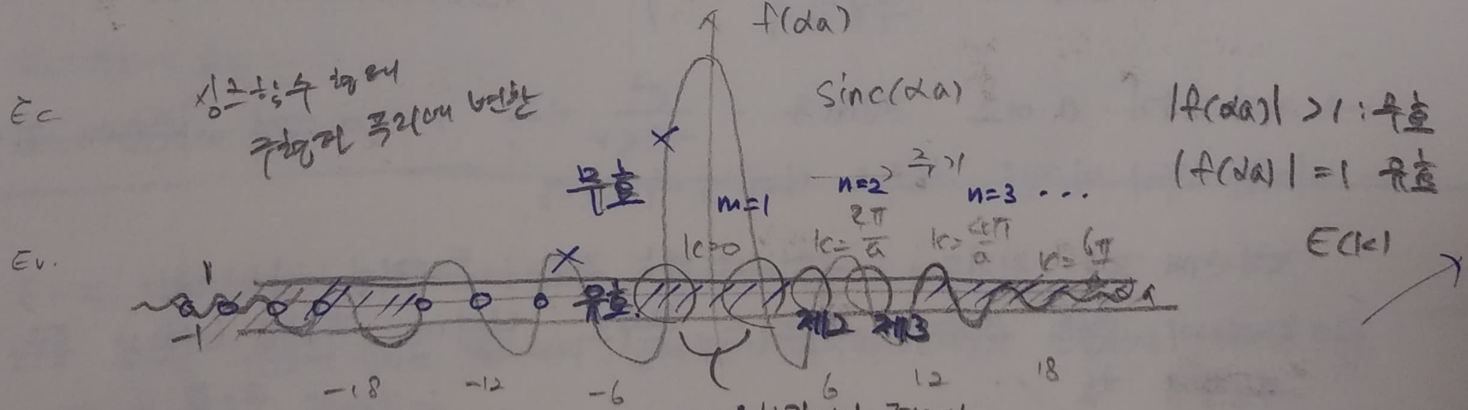
크로니히-페니 포텐셜에 의해 얻어지는 슈뢰딩거 파동방정식의 해

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m^*(E-E_p(x))}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \qquad E_p(x)=0 \qquad \text{region I}$$

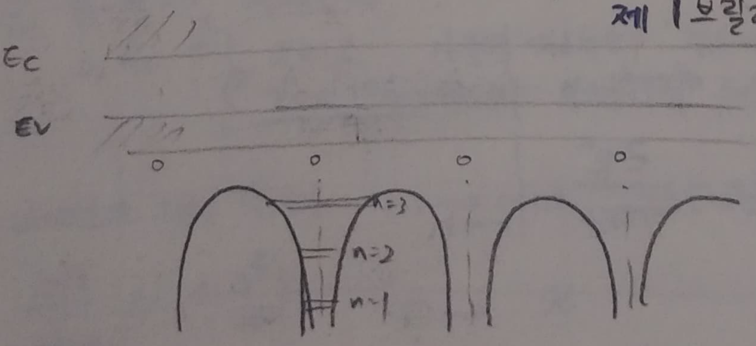
$$E_p(x+n(a+b)) = E_p(x), \quad V_0 \quad \text{region II}$$



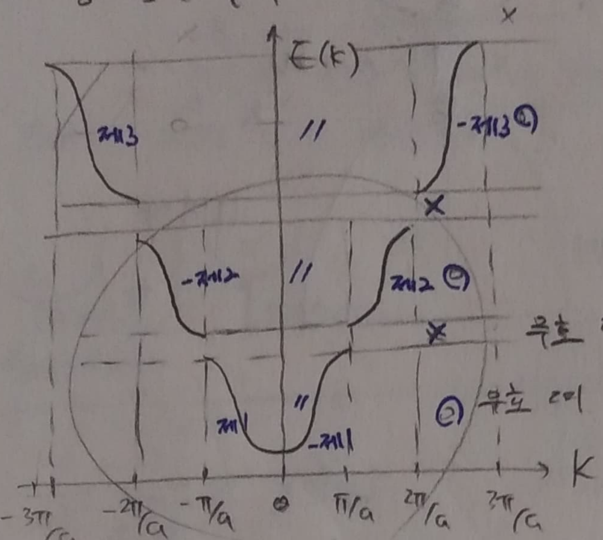
$$-1 \le P' \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka) \le +1$$



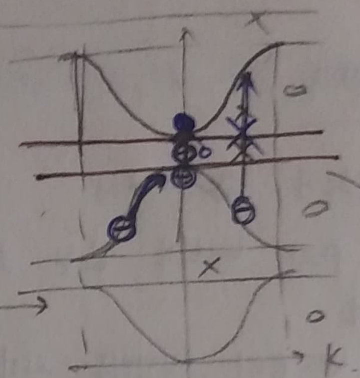
제 1 브릴리앙 경계 → 스펙트럼이 불연속이듯이 전자가 존재할 수 없는 구간이 정해져 있다



☆ 원자안에 전자가 존재할 수 있는 영역을
크로니히-페니 포텐셜 모델로 나타내고 슈뢰딩거 파동방정식으로
해를 나타내었더니 싱크 함수를 구할수 있었다
싱크 함수로부터 전자가 존재할 수 있는 영역을 알 수 있다



13-6.

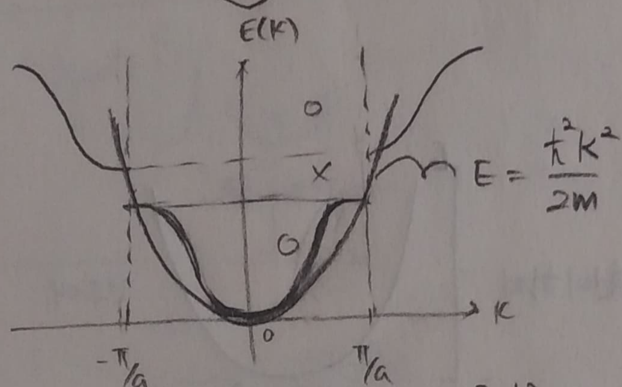


아인슈타인

광 → 보어 → 슈뢰딩거 파동방정식

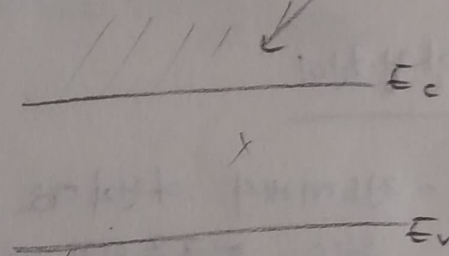
↑

크로니거 포텐셜



2-12.

자유 전자에 대한 E-k 관계



(운동량)

드 브로이 물질파에 의해

$\lambda = \frac{h}{p}$

$\boxed{p = \hbar \hat{k}}$ ($\hat{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$: 파수) 벡터

$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k.$

360° 안에 파수가 몇개 ?

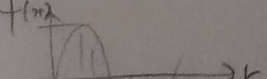
k : 전파상수 → 운동량에 관련 (운동량이 클 = 파수가 클

이를 증명.. →

$$\langle p_x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* p_{op} \psi \, dx}{\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx}_{=1}} = \hbar k_x.$$

슈뢰딩거 파동 방정식

$\psi(k) = U_k(x) e^{i\hat{k}_x \hat{x}}$



(자유전자 k와 에너지 E의 상관관계)

$p = \hbar k$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

$\boxed{E-x.}$ 거리 속도 시간

$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{P}{2m}$

운동 에너지 E-x 변위보단 k 함수로 표현하는게 바람직 E-k

→ 전자와 정공의 유효질량에 대한 ...

자유전자의 전자에너지와 전파상수 사이의 E-k 관계로부터 주기적인 퍼텐셜을 갖는 반도체 내에서의 E-k 관계를 유추 가능하다