

Energiband

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #fasta-tillståndets-fysik #modell

Kurs: F0005T **Förkunskaper:** Atomorbitaler, Paulis uteslutningsprincip

Sätter man ihop ett stort antal identiska atomer händer ingenting så länge avståndet är stort, men vid jämviktsavståndet växelverkar orbitalerna. Eftersom Pauliprincipen förbjuder identiska tillstånd måste de skarpa atomära nivåerna spridas ut till band av tätt liggande nivåer, och spektrumet går från linjespektrum till kontinuerligt. Valensbandet är det högsta helt fyllda bandet och ledningsbandet det närmast ovanför; deras kanter kallas VBM och CBM. Core-nivåerna ligger djupt och påverkas inte, vilket är varför röntgenspektrum fortfarande ger linjer.

Formeln, symbol för symbol

$$\text{tillstånd i bandet} = \underbrace{2}_{\text{spinn}} \cdot \underbrace{(2l + 1)}_{\text{orbitaler per nivå}} \cdot \underbrace{N}_{\text{antal atomer}}$$

Varje atom tar med sig sina $2(2l + 1)$ platser in i bandet. Platserna försvinner inte, de sprids bara ut över bandets bredd.

1. Från en atom till N atomer

Två identiska atomer långt ifrån varandra har exakt samma nivåer. När de närmar sig överlappar de yttre vågfunktionerna, och varje nivå delar upp sig i två: en där vågfunktionerna adderas och en där de subtraheras, som vid **kovalent bindning**. Med N atomer delar varje atomär nivå upp sig i N nivåer.

Varje nivå rymmer två elektroner med motsatt spinn enligt **Pauliprincipen**. En atomär nivå med rörelsemängdsmomentet l har $2l + 1$ orbitaler, och antalet tillstånd i bandet blir

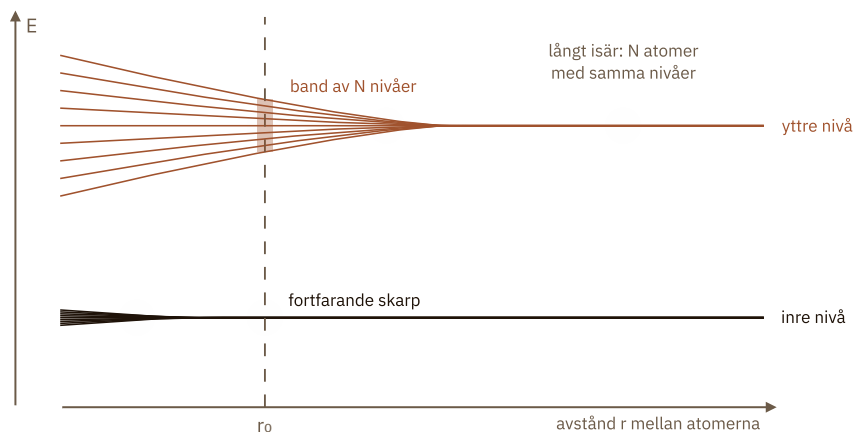
$$\text{nivåer i bandet} = (2l + 1)N$$

$$\text{tillstånd i bandet} = 2(2l + 1)N$$

Fysika: Fd3 (kvanttalerna m och s ger faktorerna $2l + 1$ och 2)

Ett s-band ($l = 0$) rymmer alltså $2N$ elektroner och ett p-band ($l = 1$) $6N$.

Bandets bredd bestäms av hur mycket grannatomernas vågfunktioner överlappar, alltså av avståndet mellan atomerna, och inte av hur många atomer kristallen innehåller. Typiskt är ett band några eV brett. Med $N \approx 10^{23}$ nivåer i ett band på några eV ligger nivåerna 10^{-23} eV från varandra, långt under $kT \approx 0,026$ eV. I praktiken betar sig bandet som ett kontinuum.



En atomär nivå för N atomer som funktion av avståndet mellan dem. Långt isär är nivån densamma för alla. När vågfunktionerna börjar överlappa delar den upp sig i N nivåer, som vid r_0 bildar ett band. De inre nivåerna överlappar inte och förblir skarpa.

2. Därför förblir de inre nivåerna skarpa

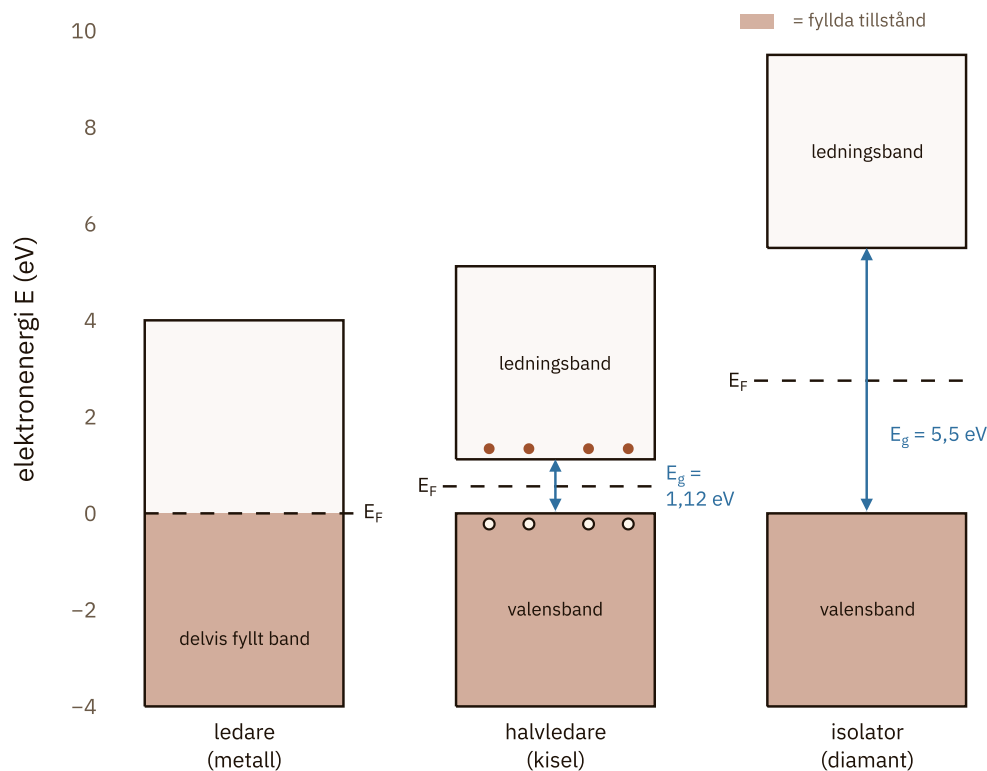
De inre elektronerna sitter nära sin kärna, och deras vågfunktioner når inte fram till grannatomen. Utan överlapp blir bandet extremt smalt och nivån är i praktiken densamma som i den fria atomen. Det är därför **röntgenstrålningens** karakteristiska linjer, som kommer från övergångar mellan inre skal, är lika skarpa i en fast metall som i en gas.

3. Fyllnaden avgör materialet

Ett elektriskt fält försöker ge elektronerna lite extra energi och rörelsemängd i fältets riktning. Det går bara om det finns lediga tillstånd strax ovanför de besatta. I ett **fullt** band är alla tillstånd tagna. För varje elektron som rör sig åt ena hållet finns en som rör sig åt det andra, och det blir ingen nettoström.

- **Delvis fyllt band:** lediga tillstånd direkt ovanför de besatta. Materialet är en **ledare**.
- **Fullt valensband, tomt ledningsband och ett bandgap emellan:** ingen ledning vid $T = 0$. Är gapet stort är materialet en **isolator**, är det litet en **halvledare**.

Var gränsen mellan besatt och ledigt går beskrivs av **ferminivån**.



Banden i en ledare, en halvledare och en isolator, med fyllda tillstånd skuggade. I ledaren ligger E_F inne i ett delvis fyllt band; i halvledaren och isolatorn ligger den i gapet, och det är gapets storlek (1,12 eV mot 5,5 eV) som skiljer dem åt.

4. Natrium och magnesium

Natrium har en valenselektron, $3s^1$. Med N atomer rymmer $3s$ -bandet $2N$ elektroner men får bara N . Bandet är halvfyllt och natrium är en metall. Dessutom överlappar $3s$ -bandet med $3p$ -bandet i kristallen. Tillsammans rymmer de $2N + 6N = 8N$ elektroner, och N elektroner fyller en åttondel av dem.

Magnesium har två valenselektroner, $3s^2$. Räknar vi bara $3s$ -bandet blir det exakt fullt, och då borde magnesium vara en isolator. Men $3s$ - och $3p$ -banden överlappar även här, så de $2N$ elektronerna fördelar sig i ett gemensamt band med $8N$ tillstånd, som då är en fjärdedel fullt. Överlappande band är orsaken till att även atomer med jämnt antal valenselektroner kan bilda metaller.

⚠ Vanliga fel

- **“Bandet är kontinuerligt.”** Det är N diskreta nivåer, bara så tätt liggande att skillnaden inte märks. Antalet tillstånd är ändligt och går att räkna, och det är det Pauliprincipen och fyllnadsgraden bygger på.
- **Spinnfaktorn 2 glöms.** Ett s -band med N nivåer rymmer $2N$ elektroner, inte N .

- **Bredden tros växa med N .** Fler atomer ger fler nivåer i *samma* band, som då blir tätare, inte bredare.
- **Jämnt antal elektroner betyder isolator.** Det gäller bara om banden inte överlappar. Magnesium, kalcium och zink är metaller.

5. Lösta exempel

≡ Exempel – Bandet i en mol magnesium

En kristall innehåller 1,00 mol magnesium, med två 3s-elektroner per atom.

- a) Hur många tillstånd rymmer 3s-bandet, och hur många elektroner finns det att fylla det med?
 b) Om bandet är 5,0 eV brett, ungefär hur tätt ligger nivåerna? Jämför med kT vid rumstemperatur. c) Varför leder magnesium ström trots svaret i a)?

Lösning

a) $N = N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ atomer. Ett s-band har $l = 0$:

$$\text{tillstånd} = 2(2 \cdot 0 + 1)N = 2N_A = \boxed{1,20 \cdot 10^{24}}$$

Fysika: Te Elektronerna är två per atom, alltså också $\boxed{1,20 \cdot 10^{24}}$. Bandet är exakt fullt.

b) Bandet innehåller N_A nivåer (två tillstånd var):

$$\Delta E \approx \frac{5,0 \text{ eV}}{6,022 \cdot 10^{23}} = \boxed{8,3 \cdot 10^{-24} \text{ eV}}$$

Det är ungefär $3 \cdot 10^{-22}$ gånger $kT = 0,026 \text{ eV}$, så bandet är i praktiken kontinuerligt.

c) I kristallen överlappar 3s-bandet med 3p-bandet, som rymmer $6N_A$ elektroner till. Det gemensamma bandet har $8N_A$ tillstånd och $2N_A$ elektroner. Det är bara en fjärdedel fyllt, så det finns gott om lediga tillstånd direkt ovanför de besatta, och magnesium är en ledare.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 42.4 Energy Bands