

Теорема Блоха

Лекция 4.

Лектор Чернышев А.П.

Форм-фактор атома

- Величина атомного структурного фактора (форм-фактора атома) зависит от пространственного распределения электронов атома, от длины волны и угла рассеяния излучения. Выше уже было дано определение форм-фактора атома в виде

$$f_{\mu}(\vec{G}) = \int_{V_{a,\mu}} d\vec{\xi} \rho_{\mu}(\vec{\xi}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{\xi}}$$

- где интегрирование проводится по объему атома, а количество электронов в единице объема в точке, положение которой определяется вектором $\vec{\xi}$.

Пусть угол между $\vec{\xi}$ и $\vec{G}$ равен φ , тогда $\vec{G} \cdot \vec{\xi} = G \cdot \xi \cdot \cos \varphi$.

$$f_{\mu} = 2\pi \int_0^{R_a} d\xi \cdot \xi^2 \rho(\xi) \int_{-1}^{+1} d(\cos \varphi) e^{-iG\xi \cos \varphi} = 2\pi \int_0^{R_a} d\xi \rho(\xi) \xi^2 \frac{e^{iG\xi} - e^{-iG\xi}}{iG\xi}$$

После очевидных преобразований имеем:

$$f_{\mu} = 4\pi \int_0^{R_a} d\xi \rho(\xi) \xi^2 \frac{\sin(G\xi)}{G\xi}$$

Рассмотрим предельный случай, когда заряд сконцентрирован в начале координат, т.е. подынтегральное выражение отлично от нуля только в бесконечно малой окрестности начала координат. Тогда $G\xi \rightarrow 0$

и имеем предельный случай $\lim_{G\xi \rightarrow 0} \frac{\sin G\xi}{G\xi} = 1$

Отсюда следует, что для всех G вместо соотношения справедливо равенство

$$f_{\mu} = 4\pi \int_0^{R_a} d\xi \rho(\xi) \xi^2 = Z$$

Поэтому можно сказать, что форм-фактор атома — это отношение амплитуды излучения, рассеянного реальным распределением электронов в атоме к амплитуде излучения, рассеянного одним электроном, расположенным в начале координат.

Волновая функция (пси-функция)

- В квантовой механике состояние микрочастицы описывается волновой функцией Ψ .
- Квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности P обнаружить частицу в данной точке пространства:

$$\frac{dP}{dV} = \left| \Psi(\vec{r}, t) \right|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$$

- Условие нормировки показывает, что вероятность обнаружить частицу во всем пространстве равна единице:

$$\int_V \Psi^* \Psi dV = 1$$

Физический смысл волновой функции

- Вероятность dP обнаружить частицу в окрестности точки с координатами x, y, z в объеме dV равна

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi dV$$

Уравнение Шредингера

- Рассмотрим для простоты одномерный случай. Согласно де Бройлю свободной частице можно сопоставить волну

$$\Psi(x, t) = a \exp[-i(\omega t - kx)]$$

- или

$$\Psi = a \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right]$$

Продифференцируем Ψ один раз по t и дважды по x

- Получим

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2 \Psi.$$

- Теперь выразим E и p^2

$$E = \frac{1}{\Psi} i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad p^2 = -\frac{1}{\Psi} \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (1)$$

Временное уравнение Шрёдингера для свободной частицы

- В нерелятивистской механике

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

- Поэтому из (1) получаем

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Временное уравнение Шредингера при наличии взаимодействия

- Из механики известно, что

$$\frac{p^2}{2m} = E - U$$

- Теперь легко из (1) получить, что

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi \quad (2)$$

Операторное представление уравнения Шредингера

- Оператор Лапласа – **лапласиан**:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

- Оператор Гамильтона - **гамильтониан**

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U$$

Стационарное уравнение Шрёдингера

- Если функция U не зависит от времени, то она имеет смысл потенциальной энергии, и решение уравнения (2) принимает вид:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp \left[-i \left(\frac{E}{\hbar} t \right) \right] \quad (3)$$

- После подстановки (3) в (2) получим стационарное уравнение Шредингера

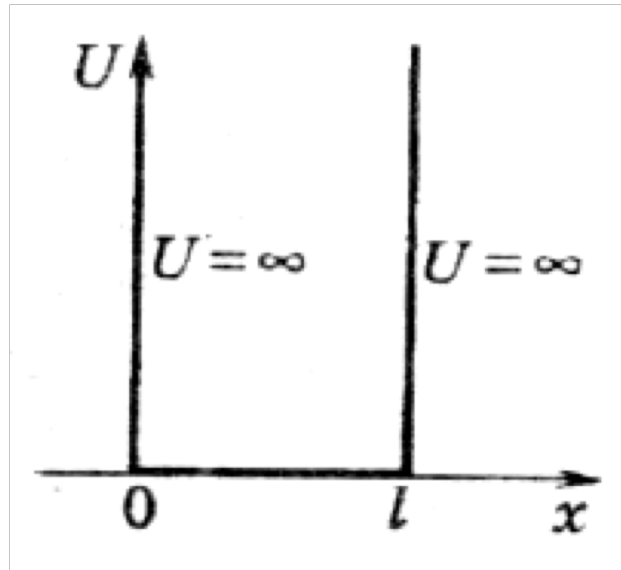
$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0 \quad (4)$$

Стандартные условия

- В соответствии с физическим смыслом пси-функции она должна быть однозначной, непрерывной и конечной (за исключением, может быть, особых точек).
- Кроме того, она должна иметь непрерывную и конечную производную.

Бесконечно глубокая одномерная потенциальная яма

- Потенциальная энергия имеет вид



- $U(0) = U(l) = \infty$, $U = 0$ на отрезке $0 < x < l$.

За пределы потенциальной ямы частица проникнуть не может, поэтому $\psi(0) = \psi(l) = 0$

- Поэтому в потенциальной яме уравнение имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$$

- Введем обозначение

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (5)$$

- В этих обозначениях уравнение Шредингера имеет вид

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad (6)$$

Решение уравнения (5) имеет вид

- a, α — константы.

$$\psi(x) = a \sin(kx + \alpha)$$

- Из первого граничного условия имеем

$$\psi(0) = a \sin \alpha = 0$$

- Поэтому $\alpha = 0$.

Из второго граничного условия следует, что решение должно удовлетворять условию

$$\psi(l) = a \sin(kl) = 0$$

- Из этого соотношения получаем

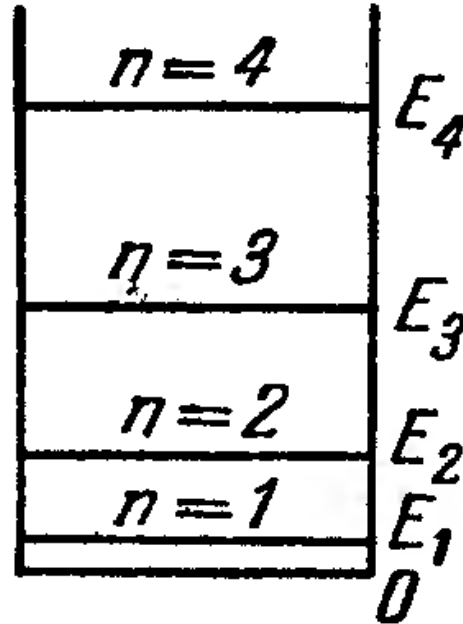
$$kl = \pm \pi n \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

- Значение $n = 0$ отбрасывается, т.к. в этом случае $\psi = 0$ во всем пространстве.

Подставив последнее соотношение в (5), получим

для энергии частицы выражение

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$



Классический предел ($n \sim \infty$)

- Найдем разность двух соседних уровней энергии ΔE_n :

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n.$$

- Относительное изменение расстояния между соседними уровнями энергии равно

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2}{n}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta E_n}{E_n} = 0$$

Принцип Паули

- Никакие два электрона в квантовой системе не могут иметь все одинаковые квантовые числа. (Хотя бы одно квантовое число должно отличаться).

Квантовые числа электрона в одномерном случае

1. Главное квантовое число – n . Характеризует энергию электрона.
2. Магнитное квантовое число – m_s . Характеризует проекцию спина S_z на выделенное направление.

$$S_z = \hbar m_s, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

n	1 1 2 2 3 3 4 4 5 5 6 6 7 7 8 8 9 9
m_s	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
Наличие электрона	1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Вырожденный электронный газ

1. $T \ll T_F$ или $kT \ll \varepsilon_F$ – вырожденный электронный газ;
2. $T \gg T_F$ или $kT \gg \varepsilon_F$ – невырожденный электронный газ.

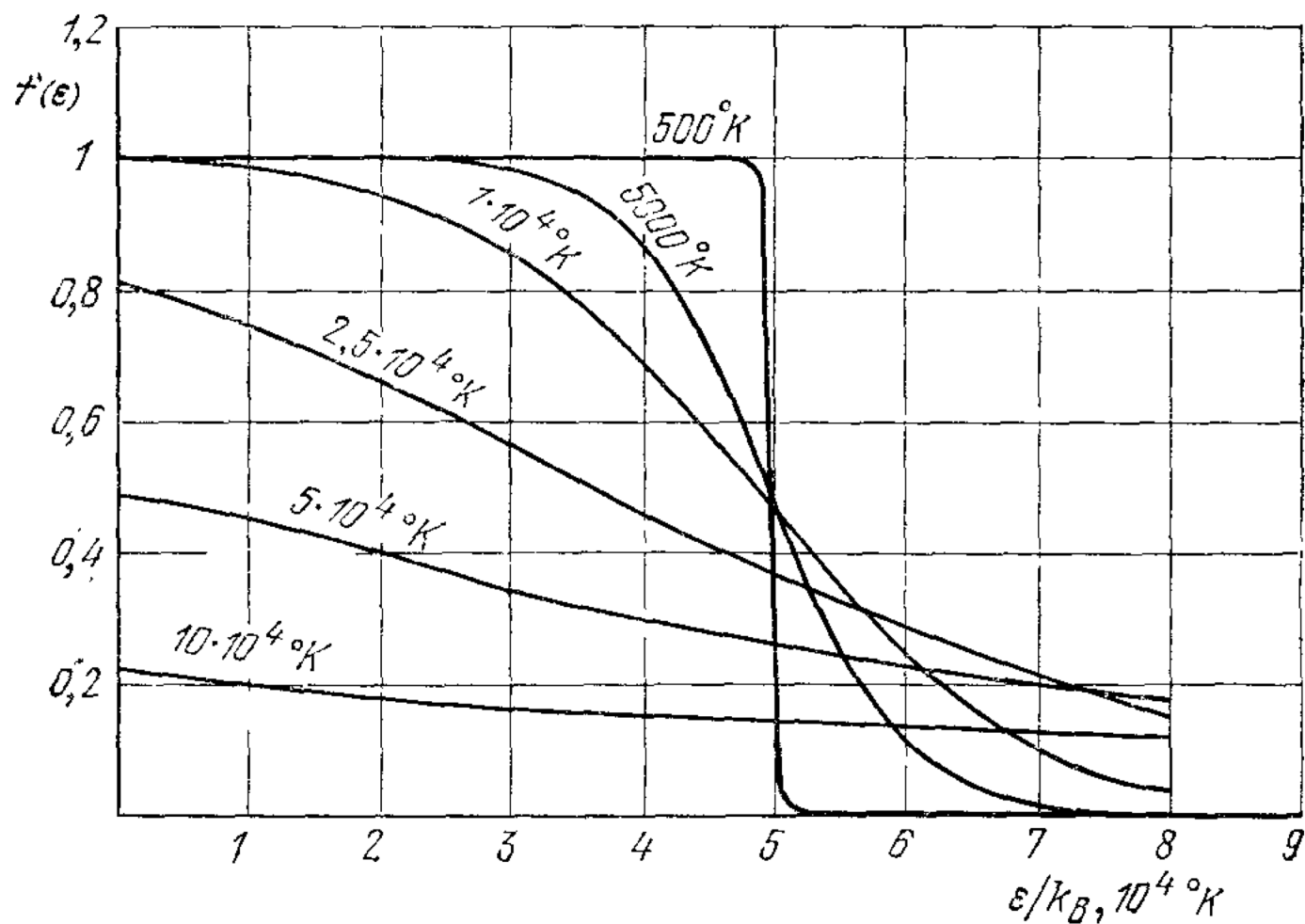


Рис. 7.4. Функция распределения Ферми — Дирака при различных температурах для случая $T_F \equiv \epsilon_F/k_B = 50\,000 \text{ }^\circ\text{K}$. Графики относятся к случаю трехмерного электронного газа. Полное число частиц постоянно и не зависит от температуры. (В. Feldman.)

Квантовая теория свободных электронов в металле. Электронный газ

- Пусть электроны движутся совершенно свободно в пределах образца металла. Тогда $U = 0$, а уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \varepsilon\psi. \quad (1)$$

- Решение уравнения (1) для свободной частицы очевидно:

$$\psi_k = C \exp(i\vec{k}\vec{r}). \quad (2)$$

Периодические граничные условия

- Добавим периодические граничные условия:

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z);$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z);$$

$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z).$$

- После подстановки сюда (2) получим, что

$$k_i = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots$$

$$i = x, y, z$$

Подставляем (2) в (1).

- Имеем, что $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$
- Импульс в квантовой механике определяется как

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla$$

- Отсюда $\hat{p}\psi_k = -i\hbar\nabla\psi_k = \hbar k\psi_k$

- Скорость: $v = \frac{\hbar k}{m}$

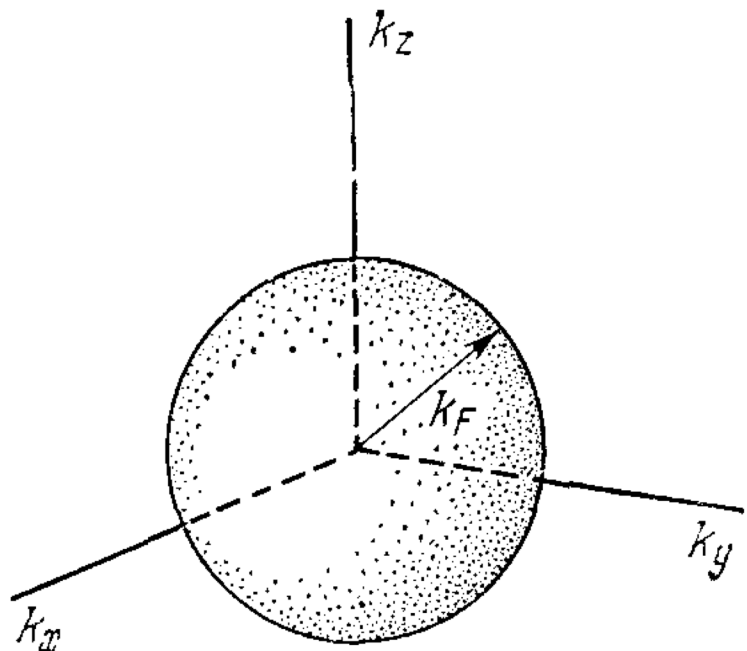
Поверхность Ферми

- Изоэнергетическая поверхность в $\mathbf{k}$ – пространстве ($\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$)
- В случае свободных электронов поверхность описывается уравнением:

$$\frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \varepsilon_F, \quad (2)$$

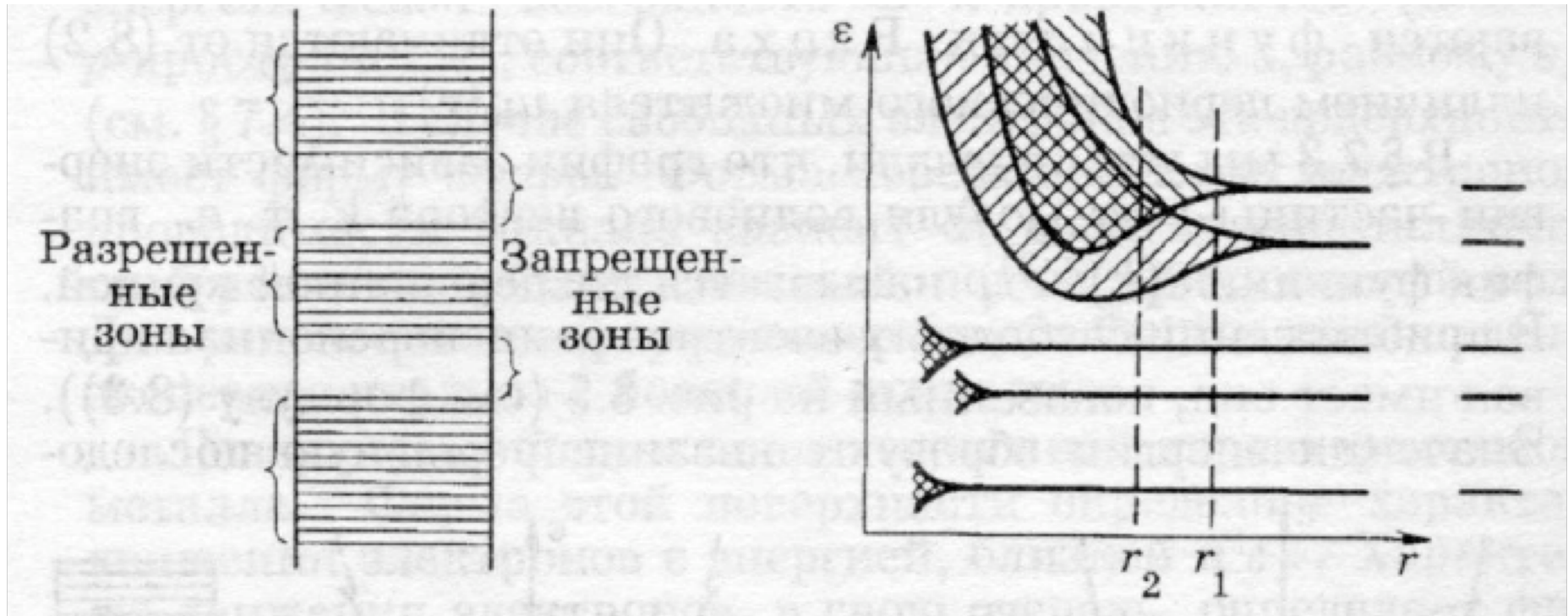
- и имеет форму сферы

Поверхность Ферми в $\mathbf{k}$ -пространстве



Энергетические зоны в кристаллах

- Вместо одного одинакового для всех N атомов уровня возникают N очень близких, но не совпадающих уровней: образуется энергетическая полоса или **зона**.

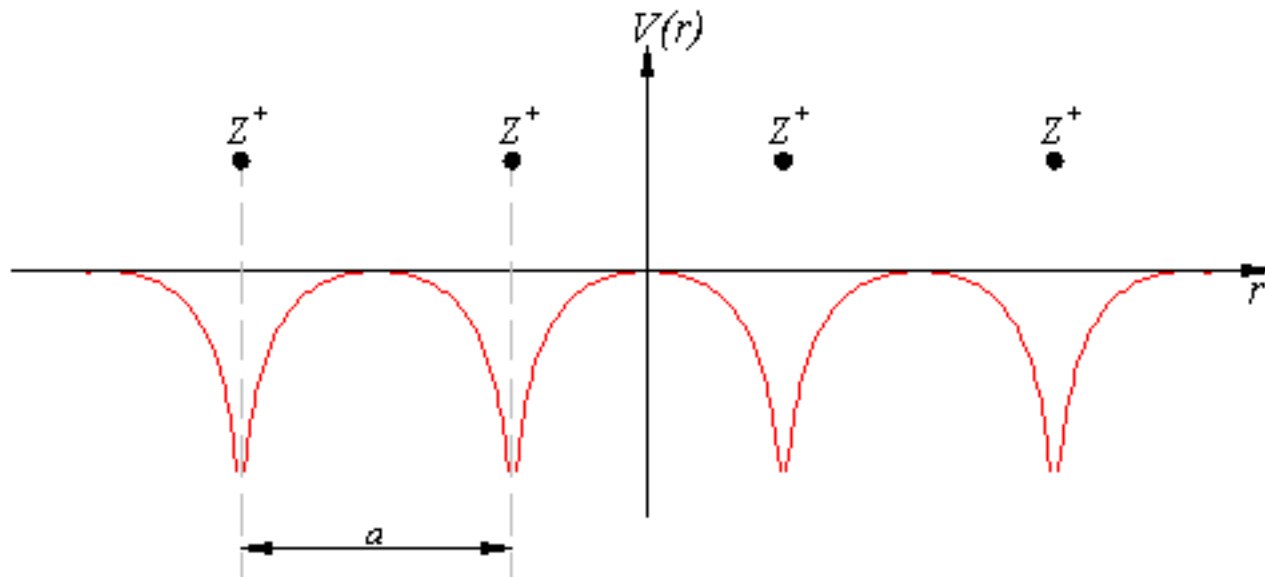


Периодичность кристаллической структуры — это идеализация

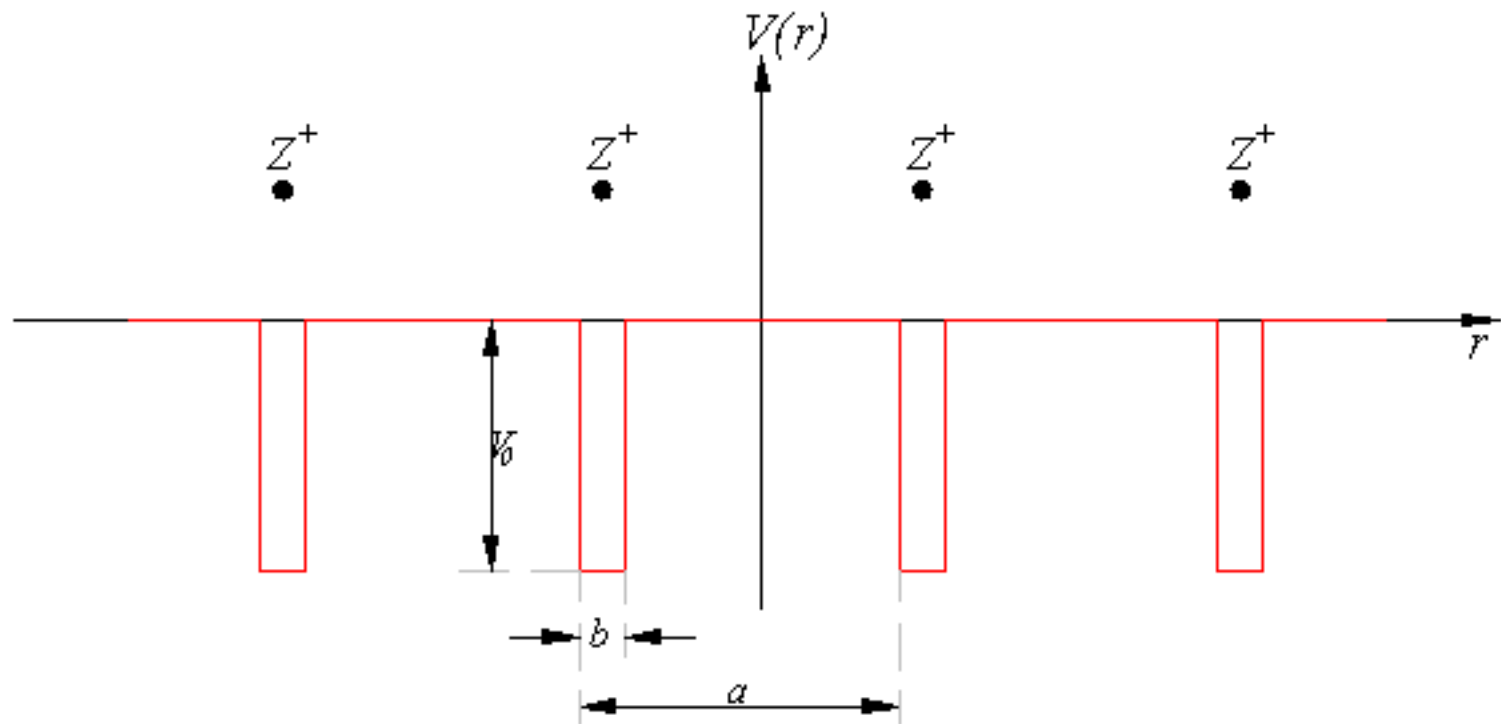
- Поскольку характерный период потенциала U ($\sim 10^{-8}$ см) совпадает по порядку величины с типичной длиной волны де Бройля электрона в модели свободных электронов Зоммерфельда, для учета влияния периодичности на движение электронов следует пользоваться квантовой механикой.
- С самого начала следует подчеркнуть, что полная периодичность — это идеализация. Реальные твердые тела никогда не бывают абсолютно чистыми, а по соседству с примесным атомом свойства твердого тела оказываются иными, чем в остальном кристалле.
- Наконец, ионы в действительности не неподвижны, а все время совершают тепловые колебания вокруг своих положений равновесия.
- Ещё есть и другие дефекты кристаллической структуры.

- Задача об электронах в твердом теле в принципе представляет собой многоэлектронную задачу, поскольку полный гамильтониан твердых тел содержит не только одноэлектронные потенциалы, описывающие взаимодействие электронов с массивными атомными ядрами, но и парные потенциалы, описывающие взаимодействие между электронами. В приближении независимых электронов это взаимодействие учитывается с помощью эффективного одноэлектронного потенциала $U(\mathbf{r})$.

Одномерная цепочка ионов



Модель Кронига-Пенни



Уравнение Шрёдингера для независимых электронов

- Уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi.$$

- Здесь U – одноэлектронный эффективный периодический потенциал:

$$U(x+a, y, z) = U(x, y, z),$$

$$U(x, y+b, z) = U(x, y, z),$$

$$U(x, y, z+c) = U(x, y, z).$$

Теорема Блоха (формулировка)

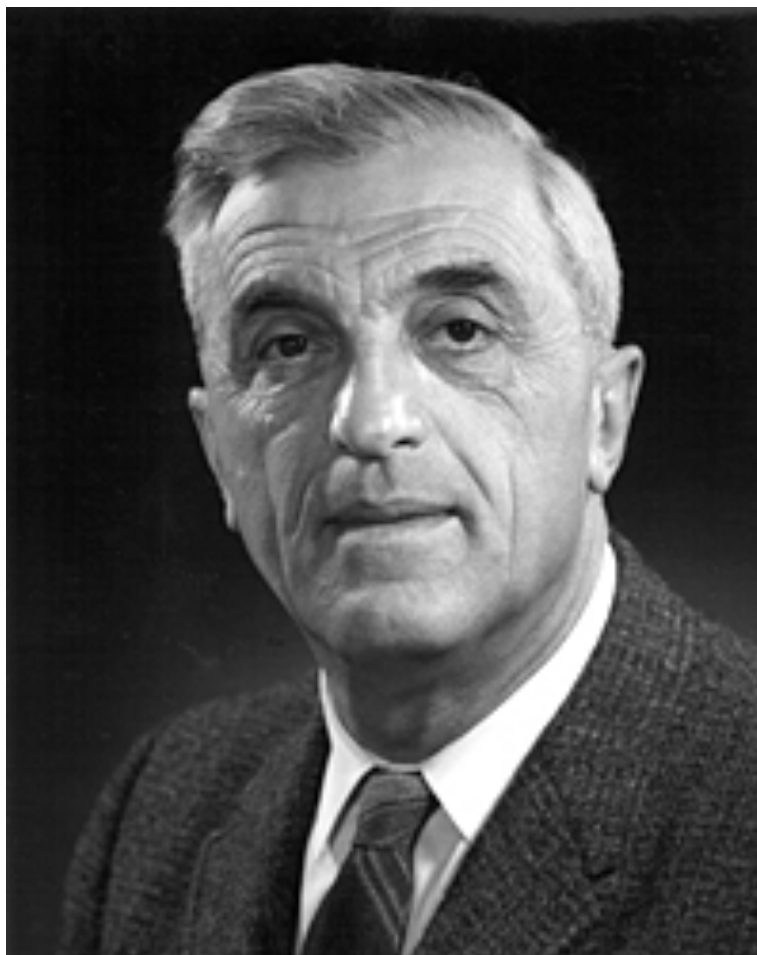
- Собственные состояния ψ одноэлектронного гамильтониана $\hat{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / (2m) + U(\mathbf{r})$, где $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$ при всех $\mathbf{R}$ из решетки Браве, могут быть выбраны так, чтобы их волновые функции имели форму плоской волны, умноженной на функцию с периодичностью решетки Браве, т. е.

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}).$$

- Функция $u_{n\mathbf{k}}$ имеет периодичность потенциала, n – номер зоны

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Феликс Блох (нем. Felix Bloch; 23 октября 1905, Цюрих — 10 сентября 1983, Цюрих)



Теорема Блоха (продолжение)

Элементарное следствие: $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

Иногда теорему Блоха формулируют иначе:
собственные состояния ψ оператора $\hat{H}$ можно выбрать таким образом, чтобы с каждым из них был связан некоторый волновой вектор $\mathbf{k}$ и для любого $\mathbf{R}$ в решетке Браве выполнялось равенство

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r})$$

Доказательство теоремы Блоха

- Определим для каждого вектора $\mathbf{R}$ решетки Браве оператор трансляции $\hat{T}_{\mathbf{R}}$, под действием которого аргумент любой функции $f(\mathbf{r})$ сдвигается на $\mathbf{R}$:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

- В силу периодичности гамильтониана имеем

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} \hat{H} \psi = \hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \hat{H}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \hat{H} \hat{T}_{\mathbf{R}} \psi$$

- Поскольку это уравнение выполняется тождественно для любой функции ψ , справедливо следующее операторное тождество:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} \hat{H} = \hat{H} \hat{T}_{\mathbf{R}} \quad (1)$$

Продолжение доказательства теоремы Блоха

- Далее, результат двух последовательных трансляций не зависит от порядка их применения, поскольку для любой функции $\psi(\mathbf{r})$ имеем

$$\hat{T}_{\mathbf{R}}\hat{T}_{\mathbf{R}'}\psi(\mathbf{r}) = \hat{T}_{\mathbf{R}'}\hat{T}_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R} + \mathbf{R}')$$

- Поэтому $\hat{T}_{\mathbf{R}}\hat{T}_{\mathbf{R}'} = \hat{T}_{\mathbf{R}'}\hat{T}_{\mathbf{R}} = \hat{T}_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}$ (2)

- Соотношения (1) и (2) показывают, что гамильтониан $\hat{H}$ и операторы $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ для всех векторов $\mathbf{R}$ решетки Браве образуют набор коммутирующих операторов. Из фундаментальной теоремы квантовой механики следует, что тогда собственные состояния гамильтониана $\hat{H}$ можно выбрать таким образом, чтобы они одновременно являлись собственными состояниями всех операторов $\hat{T}_{\mathbf{R}}$:

$$\hat{H}\psi = E\psi; \quad \hat{T}_{\mathbf{R}}\psi = C(\mathbf{R})\psi$$

Завершение доказательства теоремы Блоха

- Собственные значения $C(\mathbf{R})$ операторов трансляции связаны между собой в силу условия (2) следующим образом: $\hat{T}_{\mathbf{R}'}\hat{T}_{\mathbf{R}}\psi = C(\mathbf{R})\hat{T}_{\mathbf{R}'}\psi = C(\mathbf{R})C(\mathbf{R}')\psi$

и

$$C(\mathbf{R} + \mathbf{R}') = C(\mathbf{R})C(\mathbf{R}') \quad (3)$$

- Пусть теперь $\mathbf{a}_j$ три основных вектора решетки Браве. Мы можем всегда записать $C(\mathbf{a}_j)$ в виде

$$C(\mathbf{a}_j) = e^{2\pi i x_j}$$

- Последовательное применение соотношений (3) показывает, что для произвольного вектора $\mathbf{R}$ решетки Браве, задаваемого выражением $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ справедливо равенство $C(\mathbf{R}) = C(\mathbf{a}_1)^{n_1} C(\mathbf{a}_2)^{n_2} C(\mathbf{a}_3)^{n_3}$

- Но это равенство в точности эквивалентно равенству
- $C(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$ где

$$\mathbf{k} = x_1 \mathbf{b}_1 + x_2 \mathbf{b}_2 + x_3 \mathbf{b}_3 \quad \mathbf{b}_k \cdot \mathbf{a}_l = 2\pi \delta_{kl} \quad (4)$$

- Итак, мы показали, что собственные состояния ψ гамильтониана $\hat{H}$ можно выбрать таким образом, чтобы для каждого вектора $\mathbf{R}$ решетки Браве выполнялось равенство

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} \psi = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = C(\mathbf{R}) \psi = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi(\mathbf{r})$$

- Но это как раз и есть теорема Блоха.

Граничное условие Борна-Кармана

- Налагая на волновые функции соответствующее граничное условие, можно показать, что волновой вектор $\mathbf{k}$ должен быть действительным, и получить условие, которому должны удовлетворять разрешенные значения $\mathbf{k}$.
- Запишем периодическое граничное условие Б-К в виде

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3$$

- Здесь $\mathbf{a}_i$ – тройка основных векторов, а все N_i – целые числа порядка $N^{1/3}$, где $N = N_1 N_2 N_3$ – полное число элементарных ячеек в кристалле.

- Применяя к граничному условию Б-К теорему Блоха, находим

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_j \mathbf{a}_j) = e^{iN_j \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_j} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad j = 1, 2, 3$$

- и, таким образом,
$$e^{iN_j \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_j} = 1 \quad j = 1, 2, 3$$

- Если $\mathbf{k}$ имеет вид (4), то из этого равенства следует, что

$$e^{2\pi i N_j x_j} = 1 \quad j = 1, 2, 3$$

- Отсюда следует, что $x_j = \frac{m_j}{N_j}$, где m_j – целое число
- Поэтому разрешенный блоховский волновой вектор должен иметь следующий общий вид

$$\mathbf{k} = \frac{m_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \mathbf{b}_3, \quad m_j - \text{целые числа} \quad (5)$$

Объем $\Delta\mathbf{k}$ в $\mathbf{k}$ -пространстве, приходящийся на одно разрешенное значение $\mathbf{k}$

- Из формулы (5) следует, что объем $\Delta\mathbf{k}$ в $\mathbf{k}$ -пространстве, приходящийся на одно разрешенное значение $\mathbf{k}$, равен объему маленького параллелепипеда с ребрами $\mathbf{b}_i/N_i$:

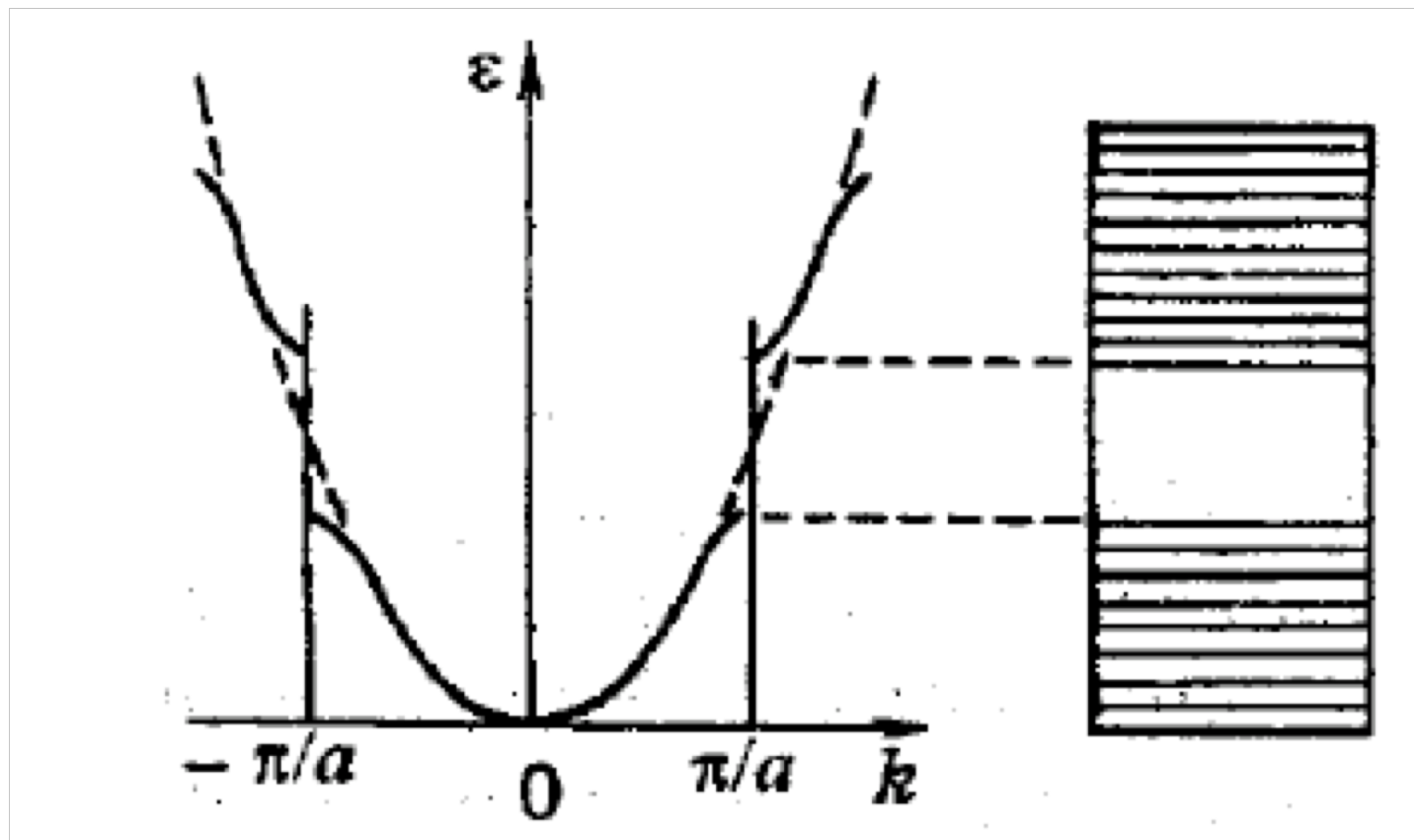
$$\Delta\mathbf{k} = \frac{\mathbf{b}_1}{N_1} \cdot \left(\frac{\mathbf{b}_2}{N_2} \times \frac{\mathbf{b}_3}{N_3} \right) = \frac{1}{N} \mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3), \quad (6)$$

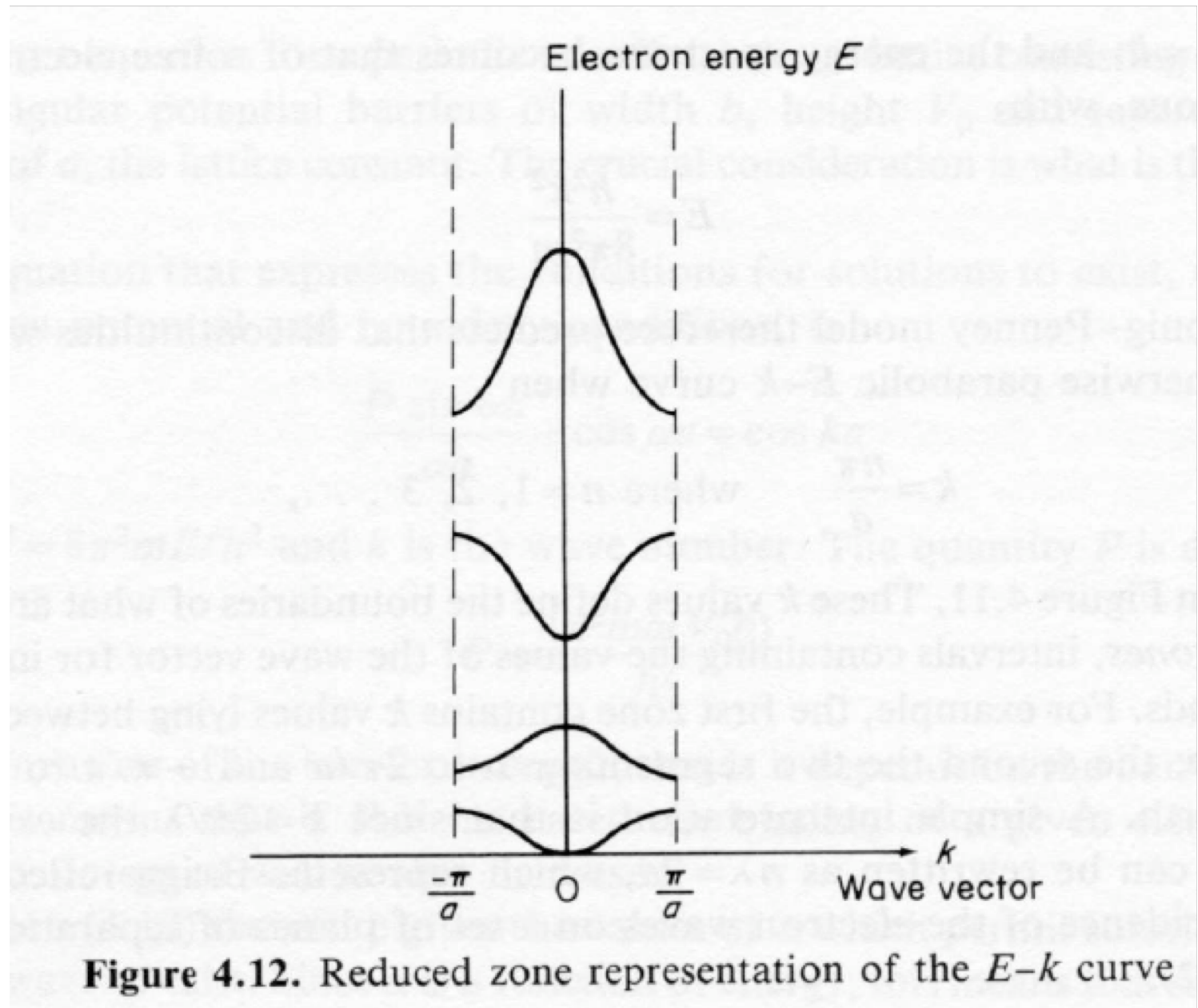
- Поскольку $\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)$ есть объем элементарной ячейки обратной решетки, формула (6) означает, что **число разрешенных волновых векторов, содержащихся в одной элементарной ячейке обратной решетки, равно числу ячеек в кристалле.**

- Объем элементарной ячейки обратной решетки равен $(2\pi)^3 / v$, где $v = V/N$ — объем элементарной ячейки прямой решетки. Следовательно, формулу (6) можно записать в другой форме:

$$\Delta \mathbf{k} = \frac{(2\pi)^3}{V}.$$

Область k -пространства, внутри которой энергия электрона в кристалле изменяется квазинепрерывно, называется **зоной Бриллюэна**.





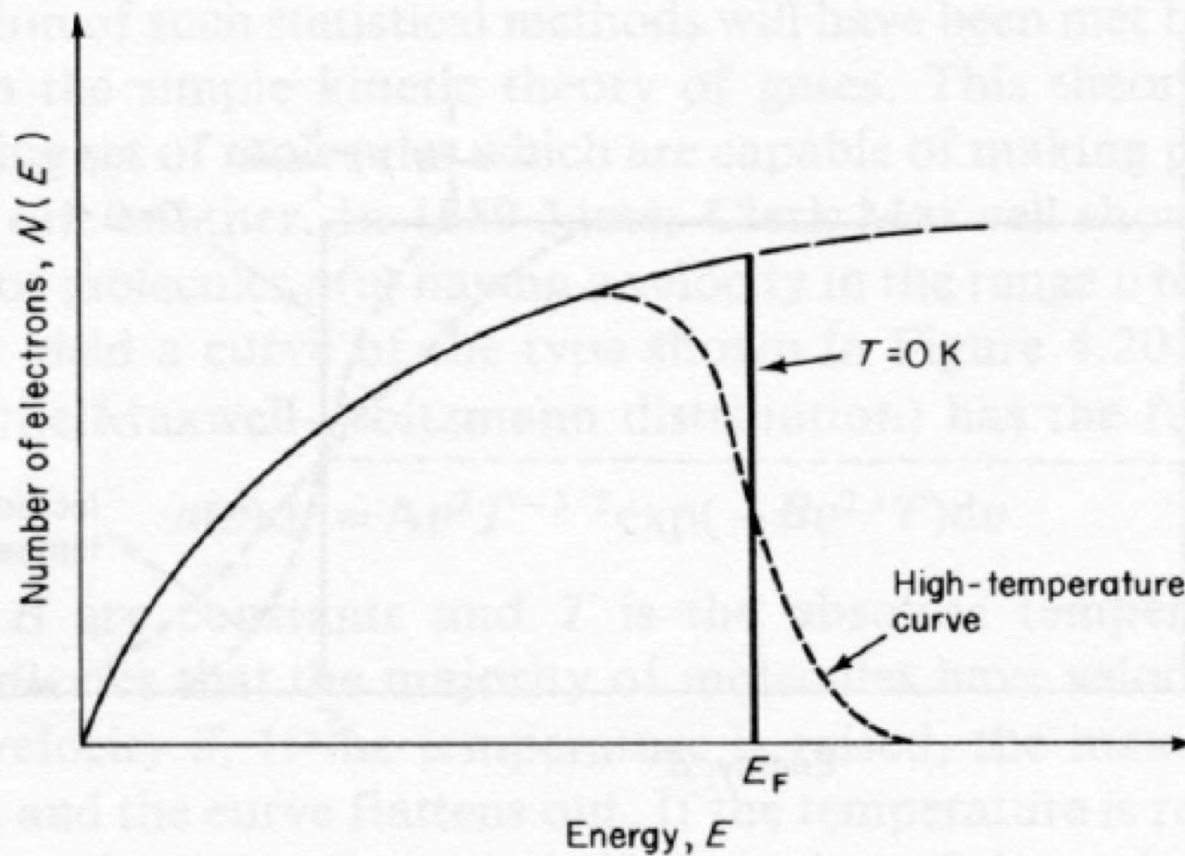


Figure 4.22. The theoretical distribution of the electrons in an energy band

Квантовая теория электропроводности

- **Удельное электрическое сопротивление** металлов:

$$\rho = \rho_{\text{пр}} + \rho_{\text{реш}}$$

Протекание тока через металл - наложение медленного дрейфа в электрическом поле на быстрое (квантовое) движение

- **Дрейфовая скорость:**
$$\mathbf{v}_{\text{др}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{v}_i$$

Эффективная масса носителей тока

- Анализ движения электрона в периодическом поле кристалла под действием электрической силы F дает для ускорения электрона выражение:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2} \mathbf{F};$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\mathbf{F}}{m}.$$

- Здесь $E(\mathbf{k})$ – полная энергия электрона, $\mathbf{k}$ – его волновой вектор.

Сравнение этих двух формул дает выражение для эффективной массы носителей тока

- **Эффективная масса носителей тока:**

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(d^2 E / dk^2 \right)}.$$

Взаимодействие с кристаллической решеткой дает силу «трения» $F_{\text{тр}} = -r\mathbf{v}_{\text{др}}$

- Уравнение движения имеет вид:

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_{\text{др}}}{dt} = -e\mathbf{E} - r\mathbf{v}_{\text{др}} \quad (1)$$

- m^* – эффективная масса электрона. При отсутствии внешнего электрического поля уравнение (1) имеет вид

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_{\text{др}}}{dt} = -r\mathbf{v}_{\text{др}} \quad (2)$$

Решение уравнения (2) имеет вид:

$$\mathbf{v}_{\text{др}}(t) = \mathbf{v}_{\text{др}}(0) \exp\left(-\frac{r}{m^*} t\right). \quad (3)$$

- $\mathbf{v}_{\text{др}}(0)$ – значение дрейфовой скорости в момент выключения поля. Из (3) следует, что время релаксации равно

$$\tau = \frac{m^*}{r}$$

Теперь силу трения можно записать в виде $\mathbf{F}_{\text{тр}} = -(m^*/\tau)\mathbf{v}_{\text{др}}$

- В установившемся режиме ($d\mathbf{v}/dt=0$) уравнение (1) можно записать в виде

$$-e\mathbf{E} - \frac{m^*}{\tau} \mathbf{v}_{\text{др}} = 0,$$

$$\mathbf{v}_{\text{др}} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m^*}.$$

Установившаяся плотность тока $\mathbf{j}$ равна произведению $\mathbf{v}_{\text{др}}$, $-e$ и n :

$$\mathbf{j} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m^*}(-e)n = \frac{ne^2\tau}{m^*}\mathbf{E}$$

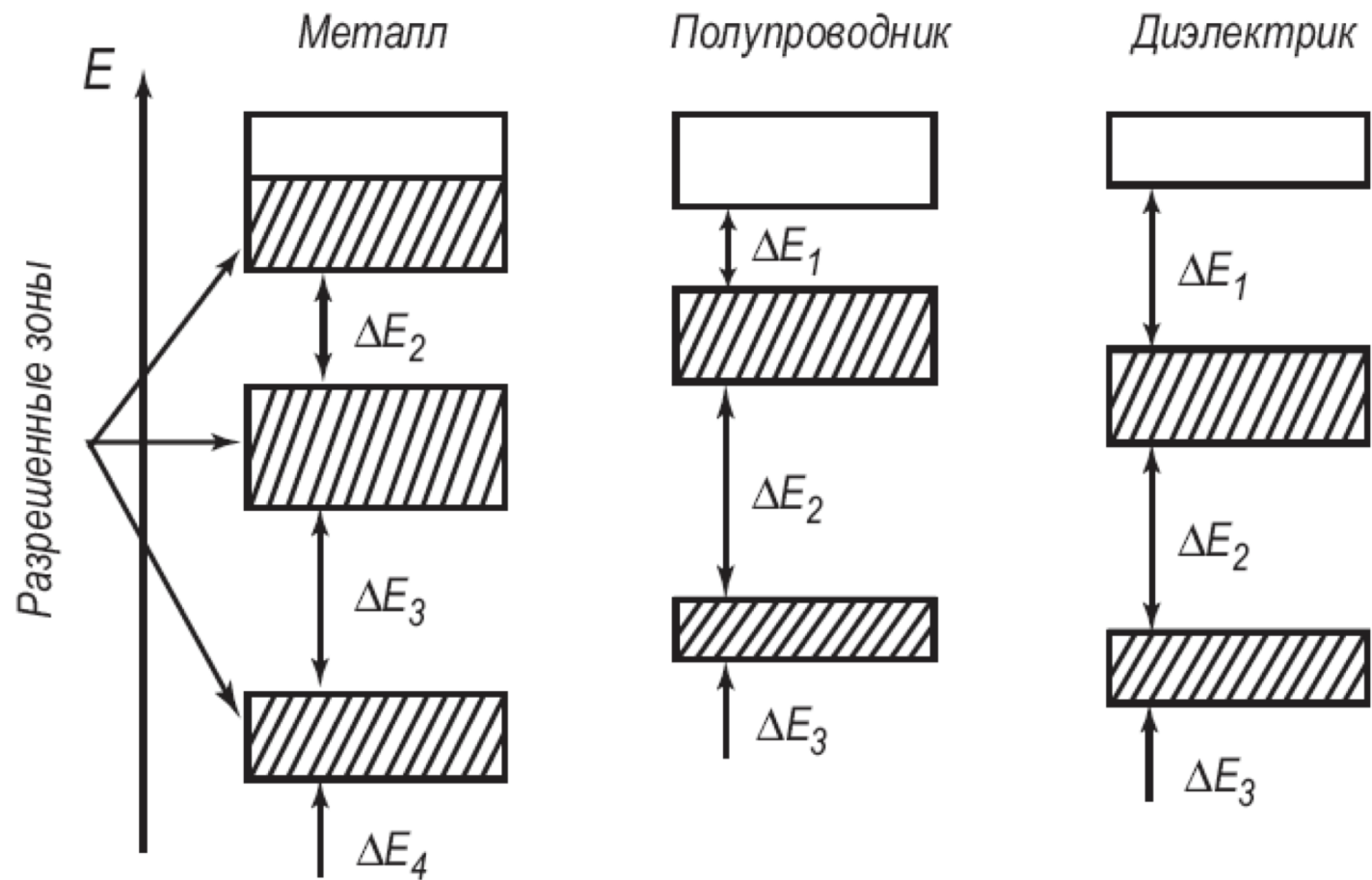
- С другой стороны, из уравнения $\mathbf{j}=\sigma\mathbf{E}$ следует, что удельная электропроводность равна

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

Сравним с классической формулой

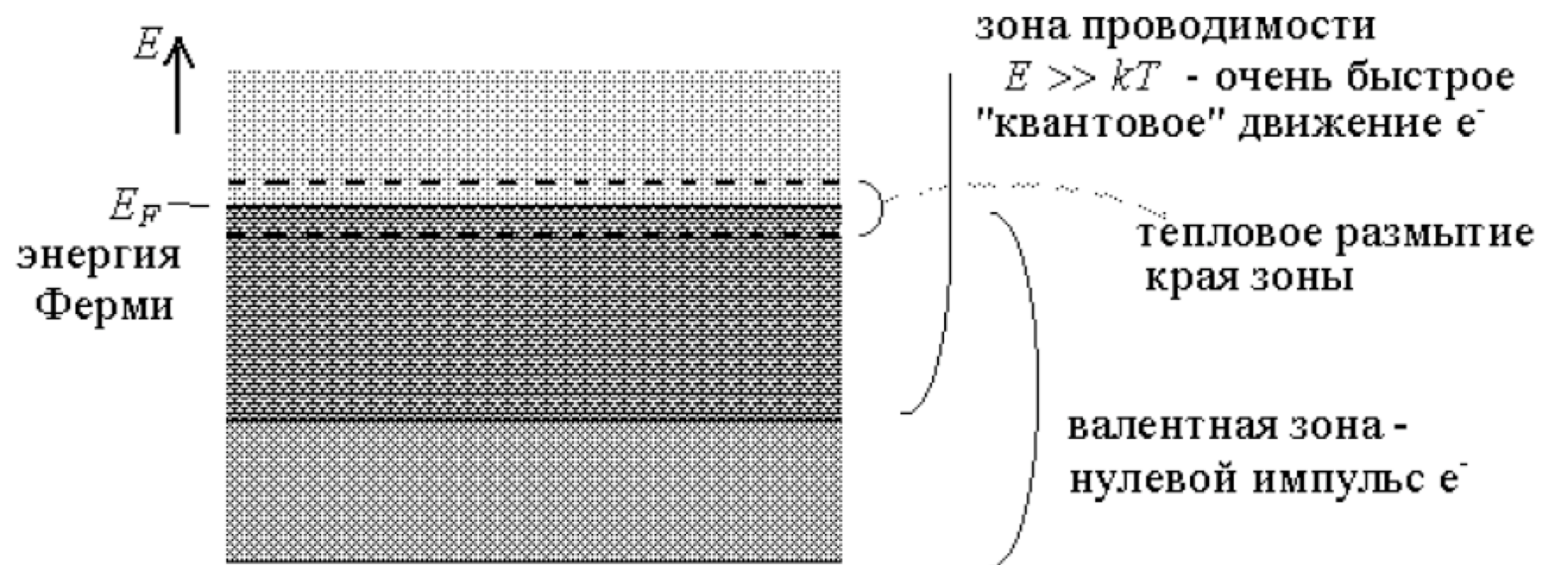
$$\sigma = \frac{ne^2\tau'}{2m}$$

- Здесь τ' - среднее время свободного пробега, m – масса электрона (Друде, Лоренц)
- $\tau' \sim 1/\sqrt{T}$



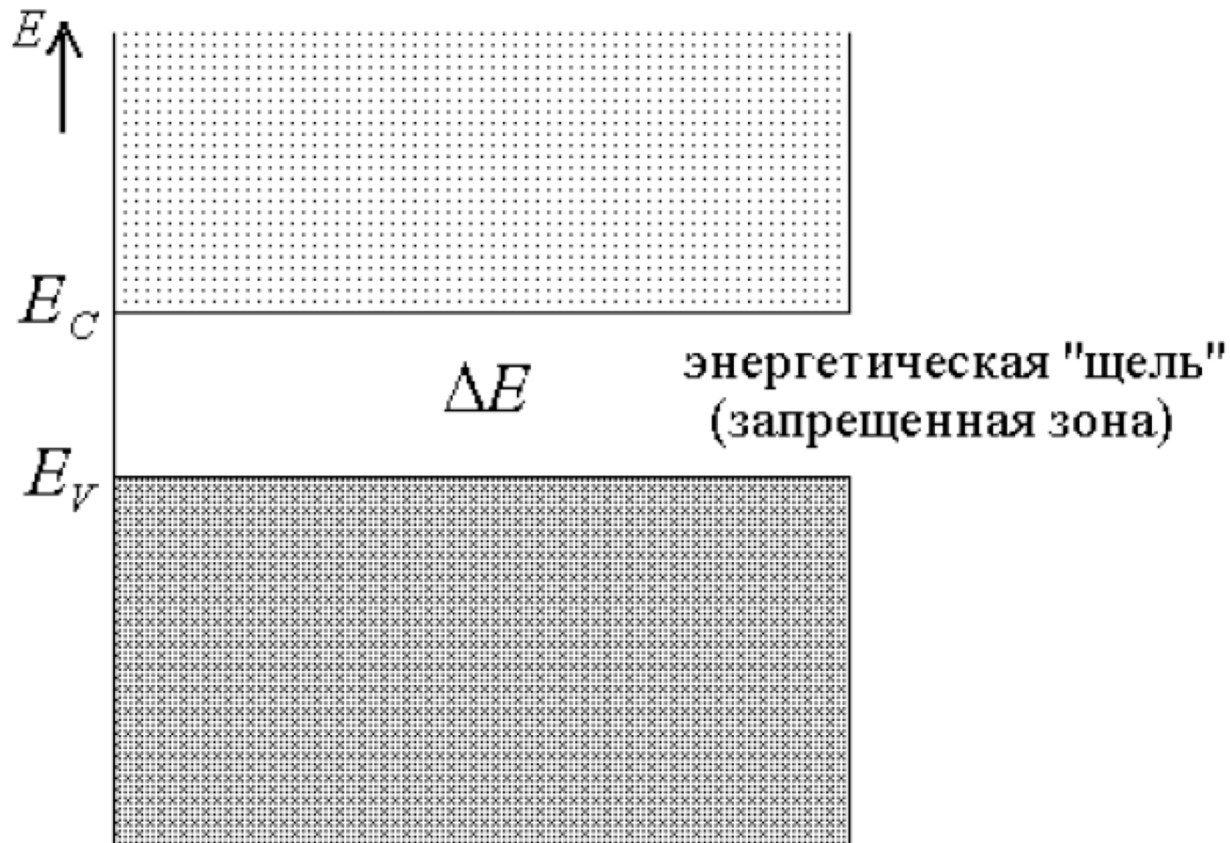
Структура энергетических зон твердого тела

Проводники



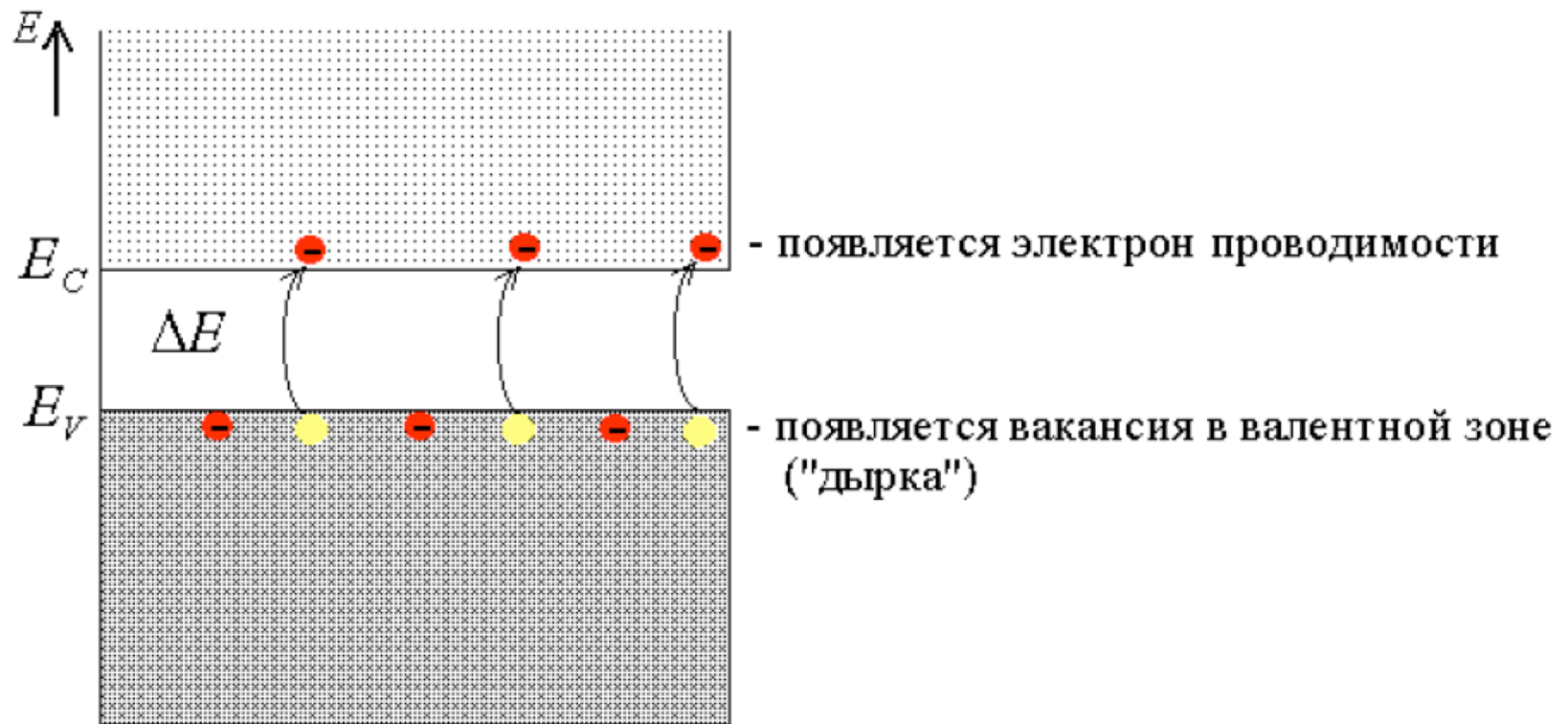
Протекание тока через металл - наложение медленного дрейфа в электрическом поле на быстрое (квантовое) движение

Диэлектрики и полупроводники



Различие диэлектриков и полупроводников - в ширине щели

Для диэлектриков $\Delta E \gg kT$; для полупроводников $\Delta E \sim kT$



Свойства дырок и электронов в полупроводнике

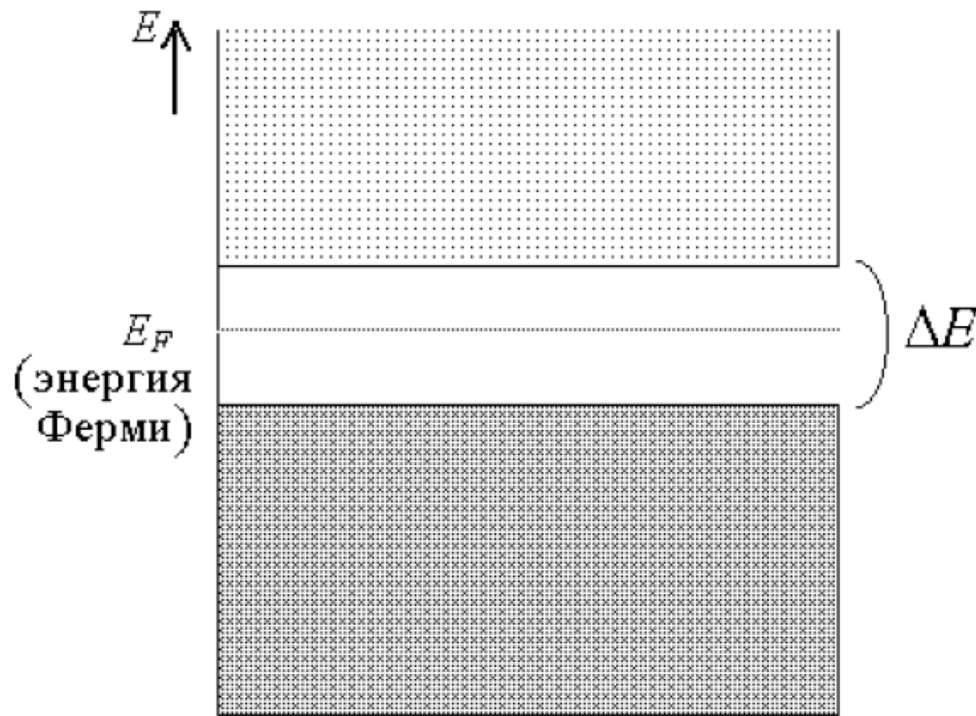
- Дырки могут иметь определенную массу, энергию, импульс и набор квантовых чисел, характеризующих их состояние. Следовательно, дырки являются квазичастицами-переносчиками положительного заряда. Конечно, движение дырок обусловлено последовательным переносом связанных электронов в обратном направлении.
- Дырка-квазичастица взаимодействует с электроном проводимости, образуя аналог атома водорода – экситон. В экситоне, как и в атоме водорода, излучаются фотоны при переходе с одного энергетического уровня на другой.
- С другой стороны, электрон проводимости ведет себя как квазичастица, поскольку его эффективная масса и связь энергии с импульсом отличаются от массы и связи энергии с импульсом свободного электрона.

$$f = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} - \text{вероятность обнаружить электрон}$$

в состоянии с энергией E

- Для нормальных – не вырожденных и чистых бездефектных полупроводников – вероятность перескока много меньше единицы, поэтому

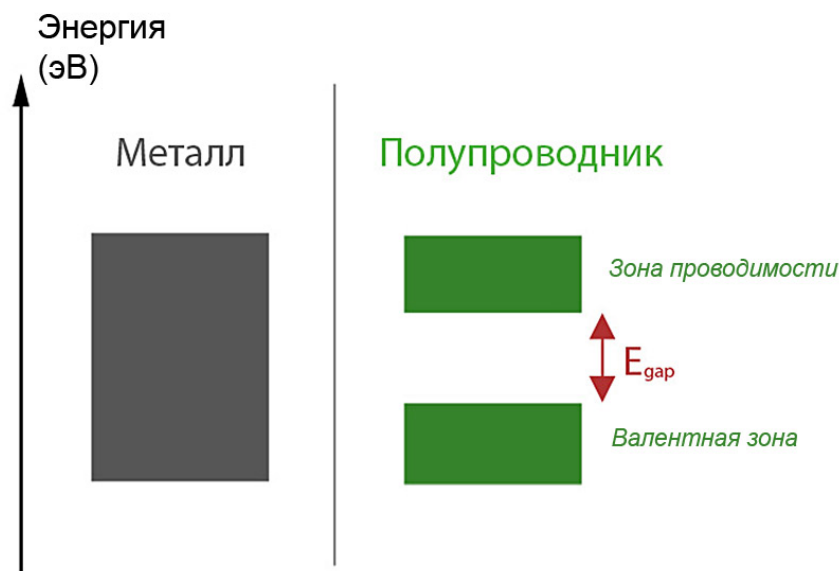
$$f \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right)$$



Уровень Ферми в таких полупроводниках в середине запрещенной зоны $\Rightarrow f_{\Delta E} \approx e^{\frac{\Delta E}{2kT}}$ - практически статистика Максвелла-Больцмана (для вырожденных полупроводников - Ферми-Дирака)

В **полупроводниках** запрещённой зоной называют область энергий, отделяющую полностью заполненную электронами **валентную зону** (при $T=0$ К) от незаполненной **зоны проводимости**. В этом случае **шириной запрещённой зоны** (см. рисунок) называется разность энергий между дном (нижним уровнем) зоны проводимости и потолком (верхним уровнем) валентной зоны.

Характерные значения ширины запрещённой зоны в полупроводниках составляют 0,1—4 эВ. Кристаллы с шириной запрещённой зоны более 4 эВ (в некоторых источниках даже свыше 2 эВ^[1]) обычно относят к **диэлектрикам**.

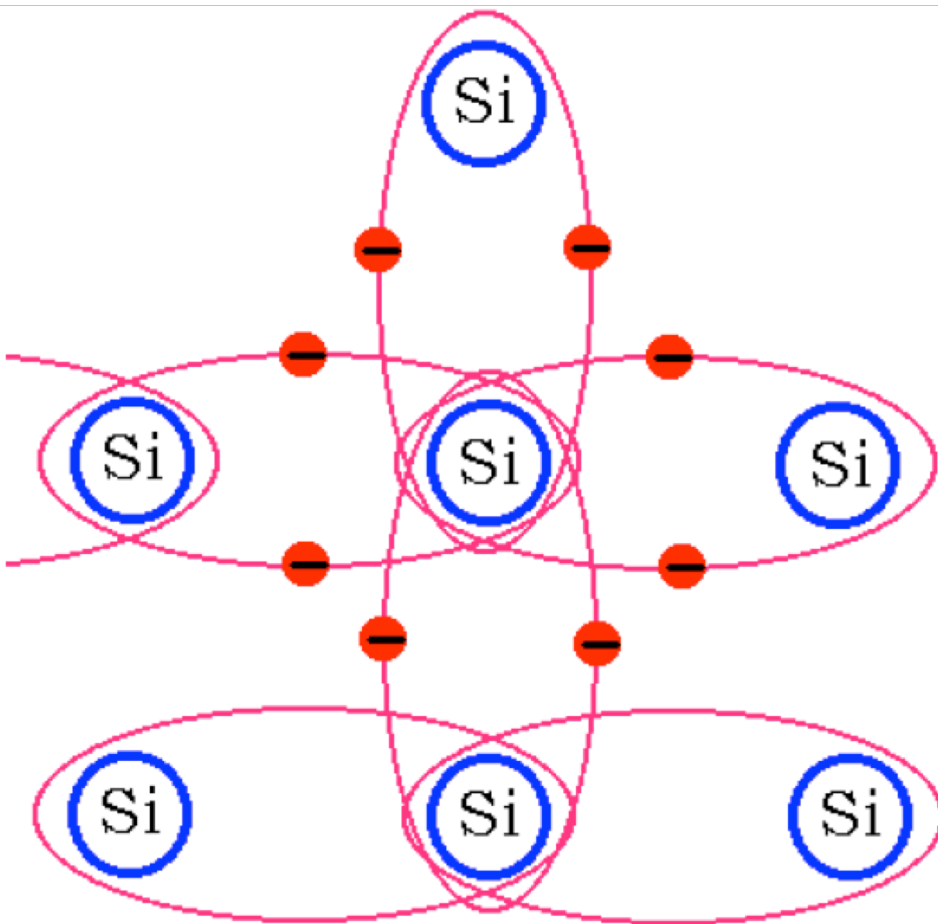


¹Сивухин Д. В. Общий курс физики 3 том / ФИЗМАТЛИТ. — Москва: Изд-во МФТИ, 1989. — С. 427. — 656 с.

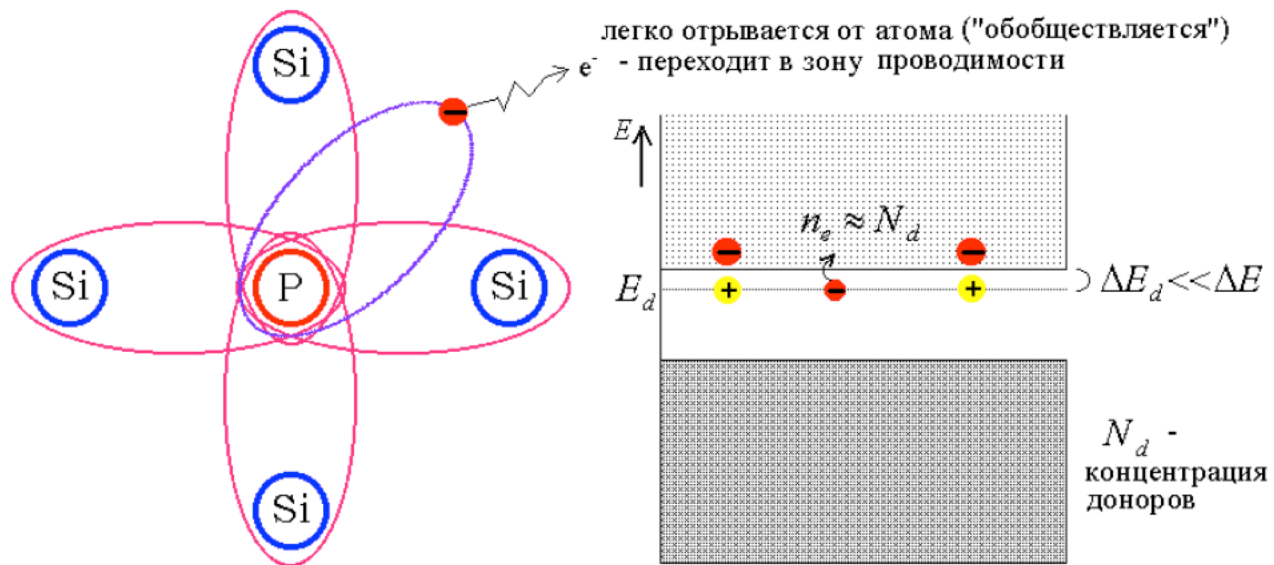
Ширина запрещённой зоны различных материалов

Материал	Форма	Энергия в эВ	
		0 К	300 К
Элемент			
C (мод. Алмаз)	непрямая	5,4	5,46-6,4
Si	непрямая	1,17	1,11
Ge	непрямая	0,75	0,67
Se	прямая		1,74
A ^{IV} B ^{IV}			
SiC 3C	непрямая		2,36
SiC 4H	непрямая		3,28
SiC 6H	непрямая		3,03
A ^{III} B ^V			
InP	прямая	1,42	1,27
InAs	прямая	0,43	0,355
InSb	прямая	0,23	0,17
InN	прямая		0,7
In _x Ga _{1-x} N	прямая		0,7-3,37
GaN	прямая		3,37
GaP 3C	непрямая		2,26
GaSb	прямая	0,81	0,69
GaAs	прямая	1,42	1,42
Al _x Ga _{1-x} As	x<0,4 прямая, x>0,4 непрямая		1,42-2,16
AlAs	непрямая		2,16
AlSb	непрямая	1,65	1,58

Примесные полупроводники



P, As, Sb - т.н. **донорные примеси**



⇒ вместо атома примеси остается **положительный неподвижный ион** и отрицательный носитель (электрон)

полупроводник **n-типа** (с **электронной проводимостью**)

Т.н. **донорные уровни** :

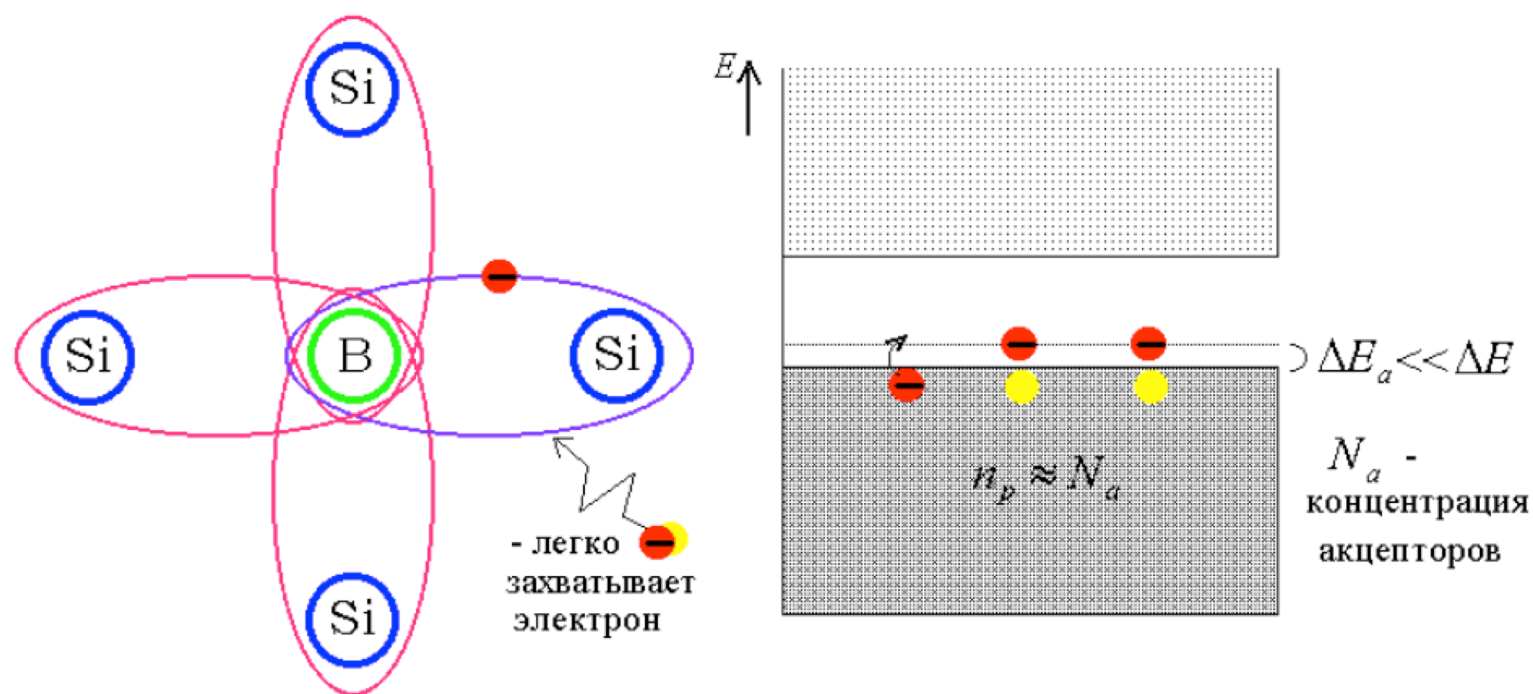
$$\text{P в Si} - \Delta E_d = 0.044 \text{ eV}$$

$$\text{P в Ge} - \Delta E_d = 0.012 \text{ eV}$$

Т.к. $kT \sim 0.025 \text{ eV}$, такие примеси полностью ионизованы

при введении элементов III группы (B, Al, In, Ga - т.н.

акцепторные примеси)



⇒ вместо атома примеси остается отрицательный неподвижный ион и положительный носитель (дырка)

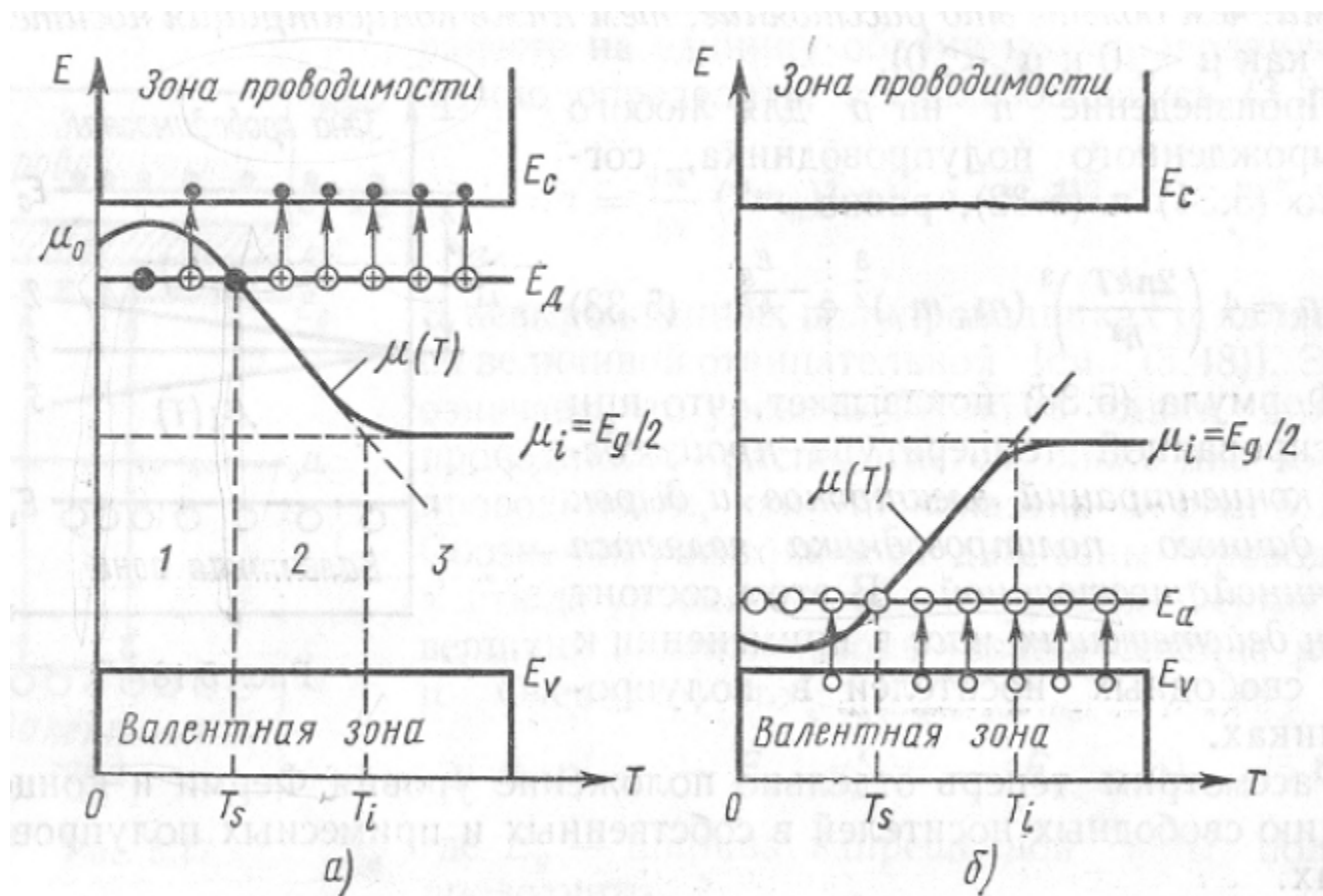
Т.н. акцепторные уровни :

$$\text{В в Si} - \Delta E_a = 0.046 \text{ eV}$$

$$\text{В в Ge} - \Delta E_a = 0.01 \text{ eV}$$

- при ионизации атомов акцепторной примеси генерируются дырки в валентной зоне (но не электроны проводимости) - образуются полупроводник **р-типа** (с **дырочной проводимостью**)

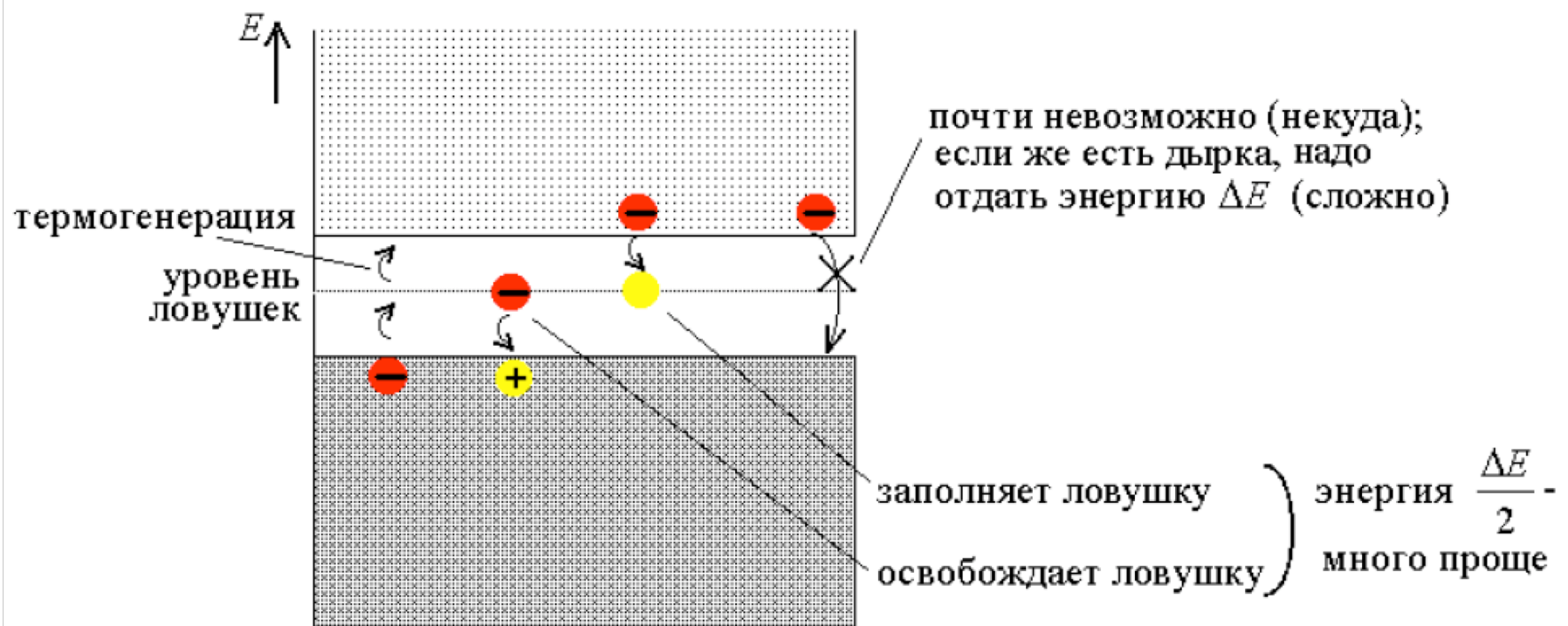
Зависимость положения уровня Ферми от температуры



Выполнение соотношения $n_p \cdot n_e = n_i^2$ обеспечивают процессы рекомбинации -

в основном - через рекомбинацию на ловушках (прямая "аннигиляция" дырки и электрона через образование экситона маловероятна)

Ловушки - слабоионизованные примеси, дефекты решетки (дислокации, т.д.), кластеры (группы атомов примеси)

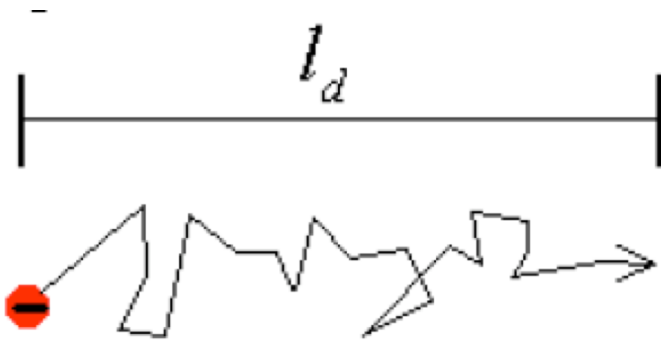


Концентрация ловушек так же влияет на **время жизни** носителей - характерное время существования носителя в полупроводнике до захвата или рекомбинации

τ_e - для электронов

τ_p - для дырок

Диффузионная длина l_d - расстояние, на которое носитель "отдиффундирует" за время жизни



$$l_e = (D_e \tau_e)^{1/2} \text{ - для электронов и } l_p = (D_p \tau_p)^{1/2} \text{ для дырок}$$

где D_e и D_p - коэффициенты диффузии электронов и дырок

Подвижность носителей тока: $\mathbf{v} = \mu \mathbf{E}$

С коэффициентами диффузии связана **подвижность носителей** (соотношение Эйнштейна) : $\mu = \frac{q_e D}{kT}$, т.е.

$$\mu_e = \frac{q_e D_e}{kT} \text{ - для электронов и } \mu_p = \frac{q_e D_p}{kT} \text{ - для дырок}$$

Ранее для металлов удельная проводимость $\sigma = nq\mu$

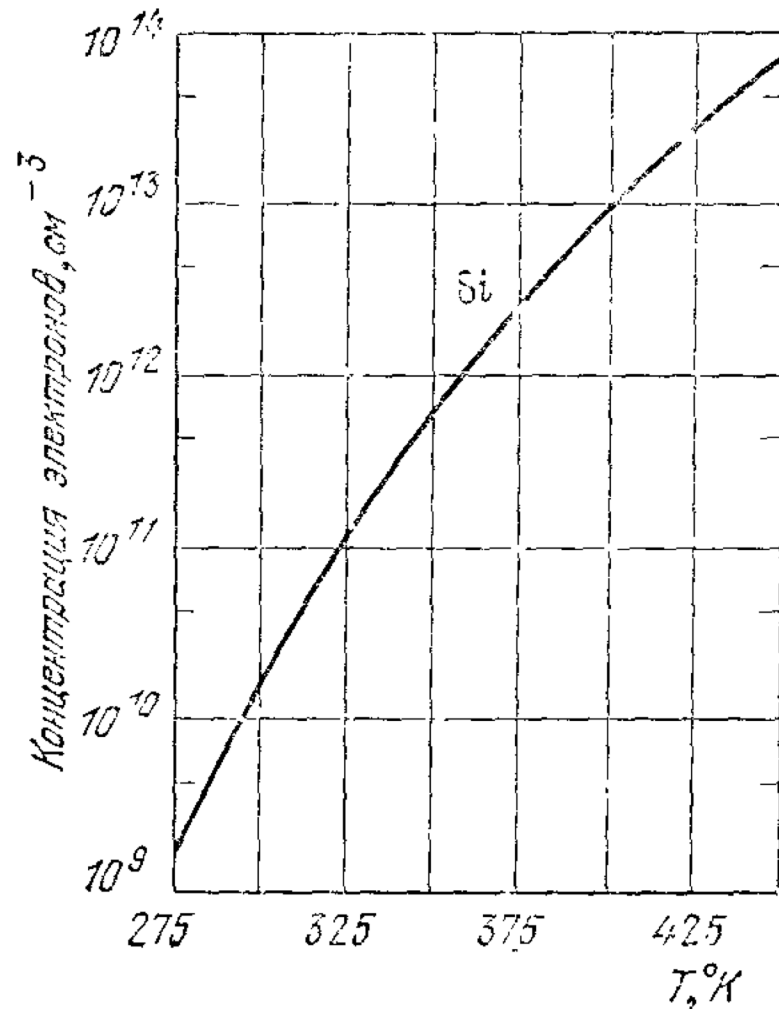
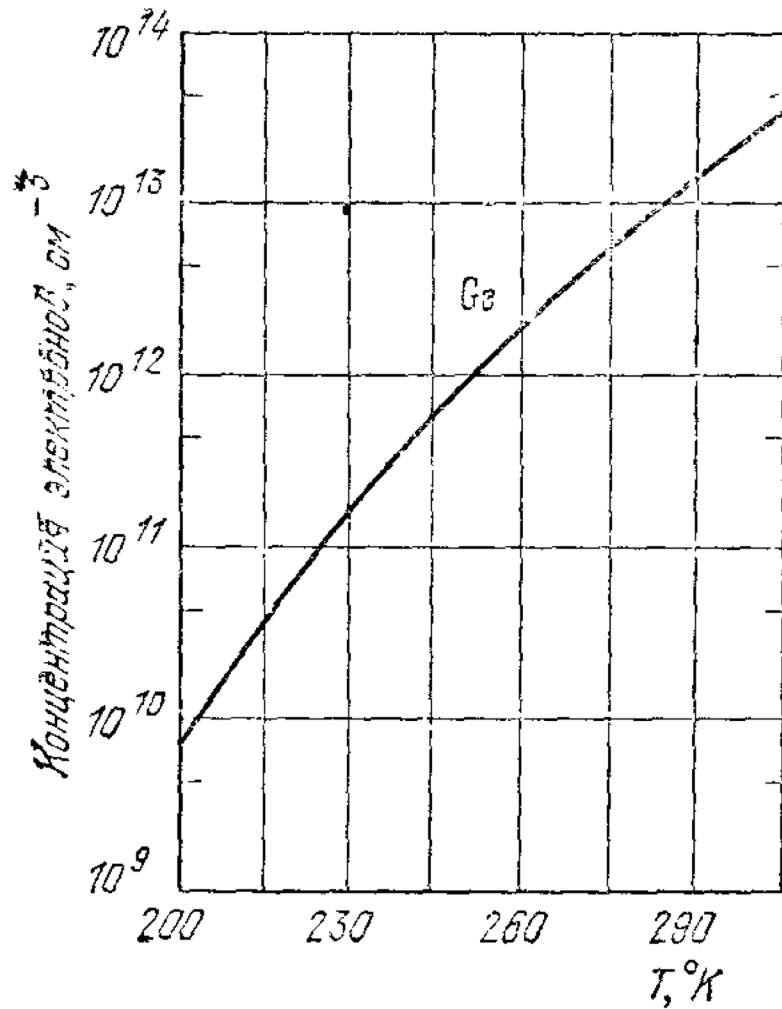
Для полупроводников - две составляющие $\sigma = n_e q_e \mu_e + n_p q_e \mu_p$

$$\text{Для Si} \quad \mu_e = 1200 \frac{\text{cm} / \text{sec}}{\text{V} / \text{cm}} \quad \mu_p = 500 \frac{\text{cm} / \text{sec}}{\text{V} / \text{cm}}$$

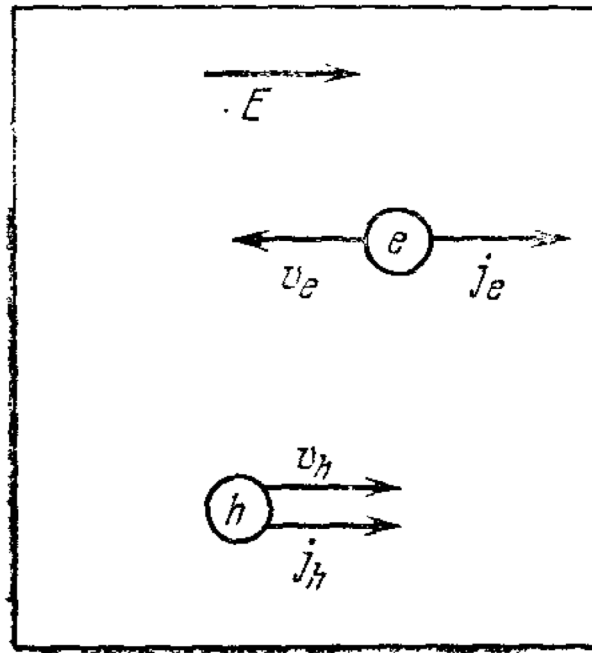
$$\text{Для Ge} \quad \mu_e = 3600 \frac{\text{cm} / \text{sec}}{\text{V} / \text{cm}} \quad \mu_p = 1700 \frac{\text{cm} / \text{sec}}{\text{V} / \text{cm}}$$

Значение подвижности : определяет скорость перемещения носителей в электрическом поле $\Rightarrow$ влияет на быстродействие приборов - на СВЧ применяют GaAs (повышенная подвижность)

Электропроводность собственных п/п



Движение электронов и дырок в электрическом поле



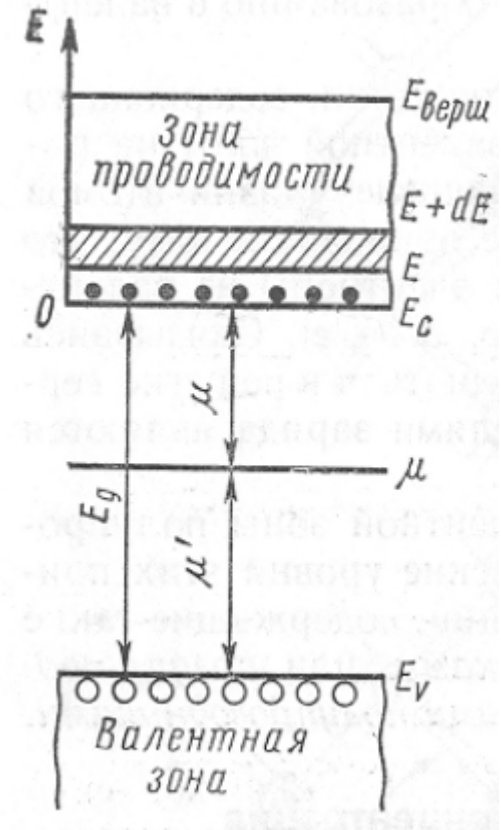
Концентрация носителей тока

- Концентрация электронов в зоне проводимости

$$n_e = N_c e^{\frac{E_F - E_c}{kT}}.$$

- Концентрация дырок в валентной зоне

$$n_p = N_v e^{\frac{E_v - E_F}{kT}}.$$



Температурная зависимость электропроводности п/п

- Концентрация носителей тока в собственном п/п:

$$n_p = n_e = n_i;$$

$$n_i = \sqrt{n_p \cdot n_e} = \sqrt{N_v \cdot N_c} \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right) = C \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right).$$

Концентрация носителей тока

- Где C – слабо зависит от температуры (по сравнению с $\exp$)
- Эффективная плотность состояний в зоне проводимости

$$N_c = 2 \left(2\pi m_n^* kT \right)^{3/2} / \hbar^3.$$

- Эффективная плотность состояний в валентной зоне

$$N_v = 2 \left(2\pi m_p^* kT \right)^{3/2} / \hbar^3.$$

Зависимость концентрации носителей тока от температуры

$$\ln(n_i) = \text{const} - \frac{\Delta E}{2k} \cdot \frac{1}{T}.$$

$$\ln(n) = \text{const} - \frac{\Delta E_d}{2kT}.$$

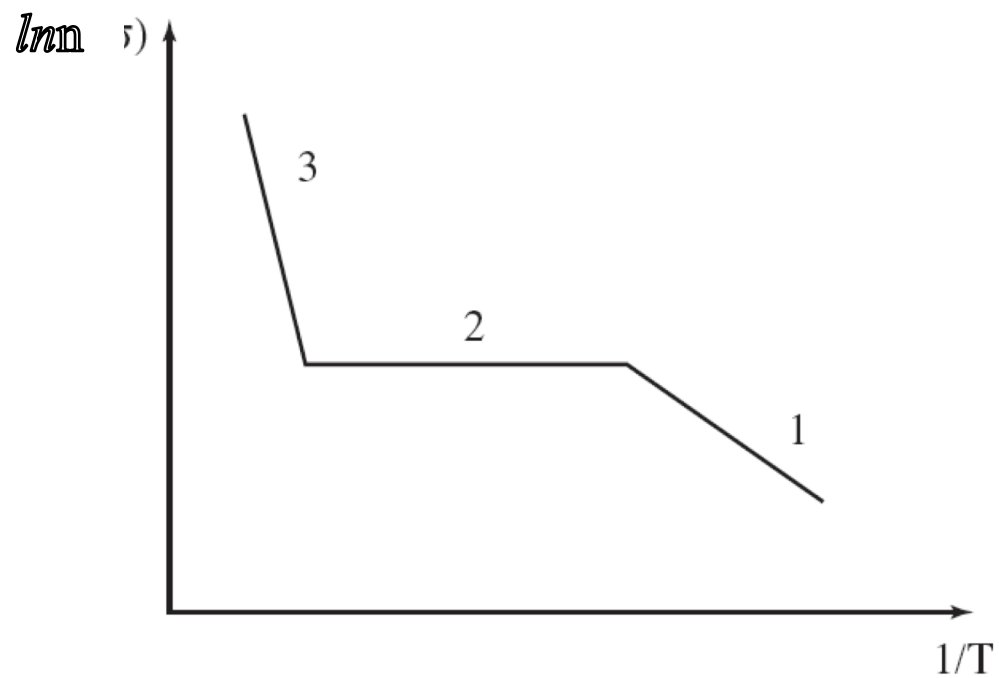


Рис. 5. Зависимость концентрации носителей заряда в примесных полупроводниках от обратной температуры

Область истощения примеси

- Область температур, при которой происходит полная ионизация примеси, носит название области истощения примеси и на рисунке 5 отмечена цифрой 2.