

# Тензор эффективной массы. Уравнение Шрёдингера

Лекция 6

2019

# 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:**

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

## Доказательство

- Продифференцируем по времени выражение для групповой скорости  $v_g = d\omega/dk$

$$\frac{d\vec{v}_g}{dt} = \frac{d}{\hbar dk} \frac{dE}{dt} \vec{e}_{v_g} = \frac{d}{\hbar dk} \frac{dE}{dk} \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \vec{F}$$

$$E = \hbar\omega \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$$

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  $\tau'$  - среднее время свободного пробега,  $m$  – масса электрона (Друде, Лоренц)

$$\tau' \sim \frac{1}{\sqrt{T}}$$

- Поэтому с точки зрения теории Друде-Лоренца  $\rho \sim \sqrt{T}$
- На самом деле  $\rho \sim T$

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

в состоянии с энергией  $E$

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

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

Количество свободных электронов с энергией в интервале  $(E, E+dE)$

- Объем в  $k$ -пространстве, приходящийся на одно состояние:

$$V_{k1} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

- Плотность состояний равна:

$$g(k) = \frac{4\pi k^2}{V_{k1}} \cdot 2 = \frac{k^2 V}{\pi^2} = \frac{p^2 V}{\pi^2 \hbar^2}$$

$$n(k) dk = \frac{k^2}{\pi^2} f(k) dk \quad (1) \quad \text{Здесь мы взяли } V=1 \text{ м}^3$$

## Переход к энергии

- Воспользуемся очевидными соотношениями (замена переменной):

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, dk = \frac{\sqrt{2m}}{2\hbar\sqrt{E}} dE$$

- После подстановки в (1) получим, что

$$n(E)dE = \frac{\sqrt{(2m)^3}}{\pi^2\hbar^3} \frac{\sqrt{E}dE}{\exp\left[\frac{(E - E_F)}{k_B T}\right]}$$

# Металлы

- В полупроводниках  $f(E) \ll 1$

$$n(E)dE = \frac{\sqrt{(2m)^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \exp\left[-(E - E_F)/k_B T\right] dE$$

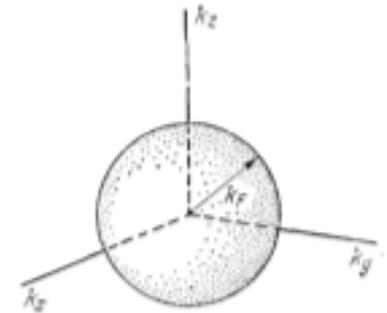
- Табличный интеграл:

- $$\int_0^{\infty} x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx = \sqrt{\pi}/2$$

Сфера Ферми при  $T = 0\text{K}$

$$E_F = \frac{p_{F0}^2}{2m} = \frac{k_F^2 \hbar^2}{2m}$$

$$2 \frac{V_{F0}}{V_{k1}} = N \rightarrow 2 \frac{\frac{4}{3} \pi k_{F0}^3}{8\pi^3/V} = N$$



$$k_{F0} = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$E_{F0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Энергия Ферми при  $T > 0\text{К}$

$$E_F = E_{F0} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_{F0}} \right)^2 \right]$$

# Полупроводники

- В полупроводниках  $f(E) \ll 1$

$$n(E)dE = \frac{\sqrt{(2m)^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \exp\left[-(E - E_F)/k_B T\right] dE$$

- Табличный интеграл:

- $$\int_0^{\infty} x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx = \sqrt{\pi}/2$$

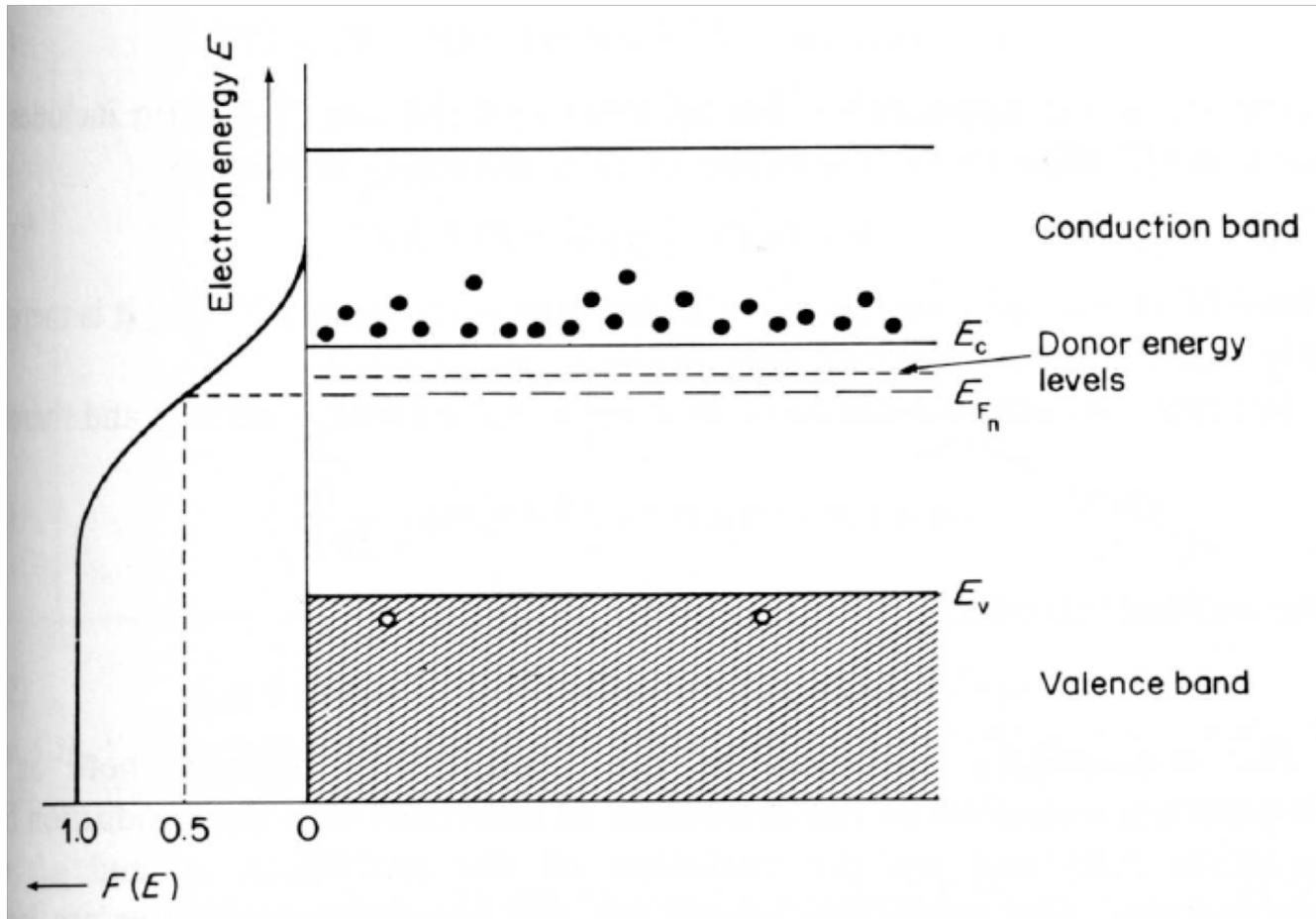
# Концентрация свободных электронов в полупроводнике *n*-типа

- Примем за начало отсчёта энергии уровень донорных атомов. Тогда концентрация электронов проводимости равна

$$n_e = \int_{E_c}^{\infty} n(E) dE = \frac{\sqrt{(2m_e)^3}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E} \exp\left[-(E - E_F)/k_B T\right] dE$$

$$n_e = \int_{E_c}^{\infty} n(E) dE = 2 \left( \frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left[ \frac{(E_F - E_d)}{k_B T} \right] \quad (a)$$

Где интегрирование проводится от дна зоны проводимости  $E_c$



С другой стороны, та же самая концентрация равна

$$n_e = n_0 [1 - f(0)] \approx n_0 \exp\left(-\frac{E_F}{k_B T}\right) \quad (b)$$

Здесь  $n_0$  – концентрация примесных атомов,  
 $E_c$  – энергия активации донорной примеси.

Перемножив уравнения (а) и (б), получим

$$n_e^2 = 2n_0 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{E_c}{k_B T}\right] \quad (c)$$

Извлекаем корень и получаем, что

$$n_e = \sqrt{2n_0} \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/4} \exp\left[-\frac{E_c}{2k_B T}\right] \quad (d)$$

# Положение уровня Ферми в примесном полупроводнике

- Теперь приравниваем (b) и (d) и логарифмируем:

$$\ln n_0 - \frac{E_F}{k_B T} = \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} \ln n_0 + \frac{3}{4} \ln \left( \frac{m k_B T}{2\pi\hbar^2} \right) - \frac{E_c}{2k_B T}$$

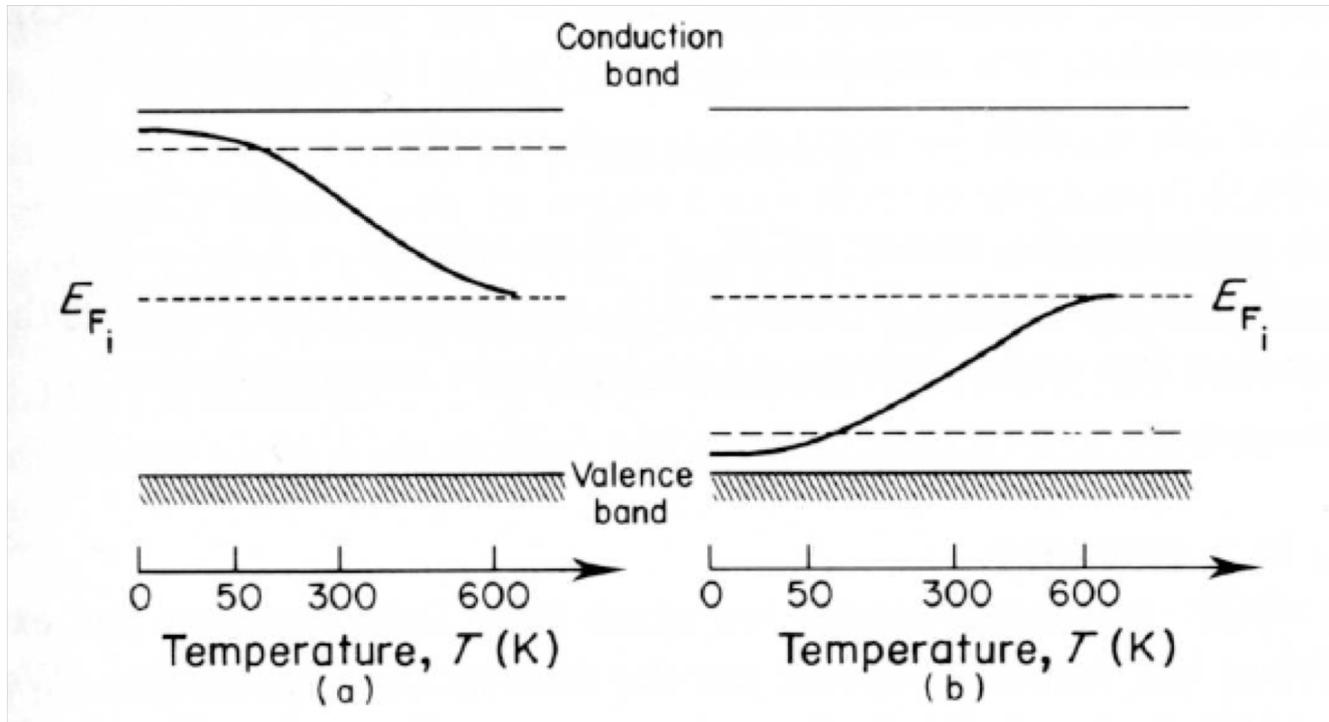
$$E_F = \frac{E_c}{2} - \frac{k_B T}{2} \ln \left[ \frac{2}{n_0} \left( \frac{m k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right]$$

## Положение уровня Ферми в примесном полупроводнике при $T \rightarrow 0$ К

- Рассмотрим предел

$$\lim_{T \rightarrow 0} E_F = \frac{E_a}{2} - \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ \frac{k_B T}{2} \ln \left[ \frac{2}{n_0} \left( \frac{m k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \right\} = \frac{E_a}{2}$$

- Отсюда видно, что при  $T \rightarrow 0$  уровень Ферми  $E_F \rightarrow E_c/2$ , т.е. находится посередине между дном зоны проводимости и уровнем доноров.



## Собственные полупроводники

- Для собственных полупроводников справедливы соотношения:  $E_c - E_F = E_g / 2$

$$n_e = \text{const} \cdot T^{3/2} \cdot \exp\left[-(E_c - E_F) / k_B T\right]$$

- Отсюда

$$n_e = n_i = \text{const} \cdot T^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

## Удельная электропроводность собственных полупроводников

- Удельная электропроводность собственных полупроводников может быть представлена в виде

$$\sigma_i = n_i e (\mu_e + \mu_h) = \text{const} \cdot T^{3/2} \cdot e (\mu_e + \mu_h) \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (1)$$

# Зависимость подвижности носителей заряда от температуры

- Подвижность носителей тока уменьшается с ростом температуры. Это обусловлено, главным образом, рассеянием на кристаллической решетке (с ростом температуры амплитуда колебаний растет). Приблизительно эта зависимость описывается соотношением

$$\mu = \text{const} \cdot T^{-3/2} \quad (2).$$

- На самом деле показатель степени при  $T$  чаще всего имеет значение между  $-2$  и  $-2.5$ .

# Механизмы рассеяния носителей заряда

Можно выделить несколько механизмов рассеяния носителей заряда:

1. На тепловых колебаниях атомов кристаллической решётки.
2. На ионизированных ионах примесей.
3. На нейтральных атомах примесей.
4. На дефектах кристаллической решётки: вакансиях, других точечных дефектах, дислокациях, границах кристаллитов и др.
5. На носителях заряда.

Если в рассеянии носителей участвуют два механизма 1) и 2),

то

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_T} + \frac{1}{\mu_c} = aT^{3/2} + bT^{-3/2},$$

где  $a$  и  $b$  – коэффициенты пропорциональности. Подставим (2)

в (1):

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left[-E_g / (2k_B T)\right] \quad (3)$$

Здесь коэффициент  $\sigma_0$  не зависит от температуры, поскольку

$$T^{-3/2} \cdot T^{3/2} = 1$$

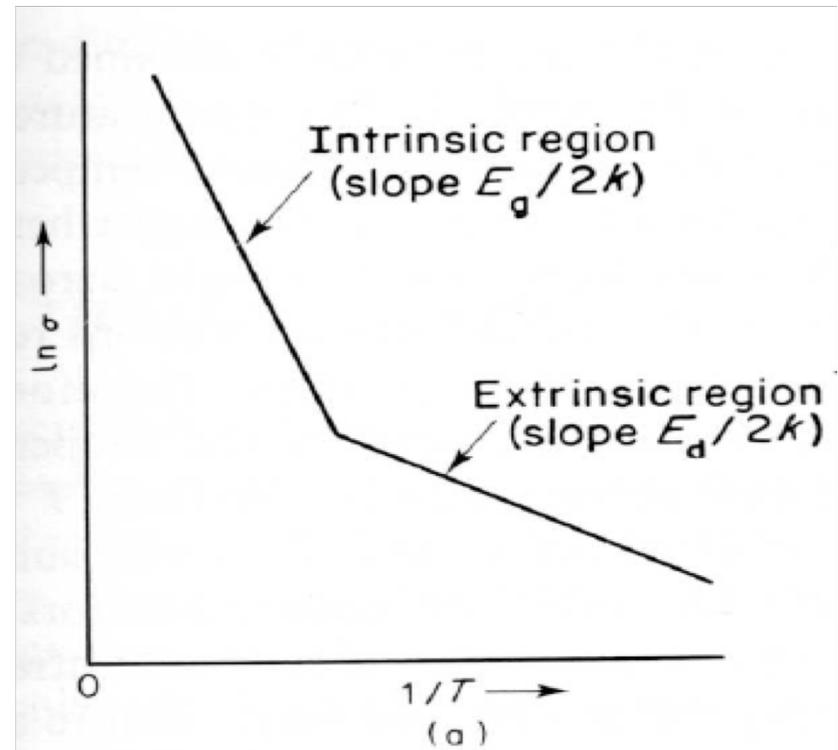
Логарифмируя обе части уравнения (3), получим

$$\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{E_g}{2k_B T} \quad (4)$$

Аналогичные соотношения можно получить и для примесных полупроводников:

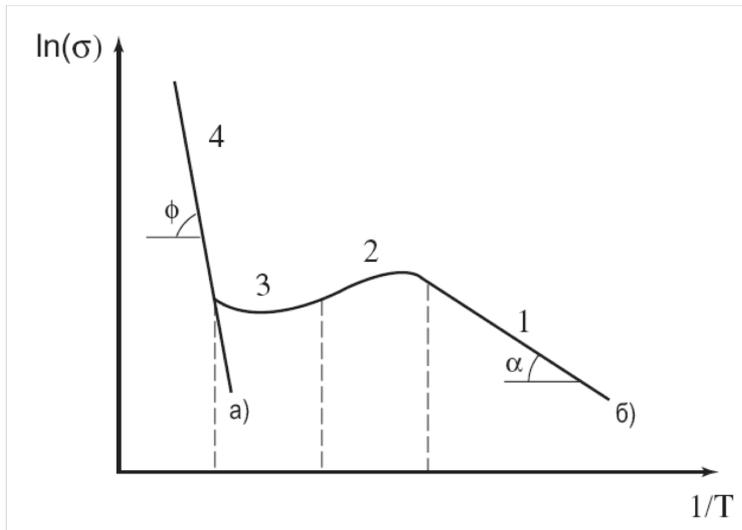
$$\ln \sigma_n = \ln \sigma_{n0} - \frac{E_d}{2k_B T} \quad (5)$$

$$\ln \sigma_a = \ln \sigma_{a0} - \frac{E_a}{2k_B T} \quad (6)$$



## Результат

- Электроны  
$$n_e = 2 \left( m_e^* kT / 2\pi\hbar^2 \right)^{3/2} \exp \left[ \left( E_F - E_g \right) / kT \right]$$
- Дырки  
$$n_h = 2 \left( m_h^* kT / 2\pi\hbar^2 \right)^{3/2} \exp \left[ -E_F / kT \right]$$



Участок кривой 1 обусловлен примесной проводимостью в соответствии с формулами (5) и (6). На участке 2 электропроводность сначала растёт незначительно с температурой, т. к. преобладает рассеяние на ионах примеси, при котором

$$\mu \sim T^{\frac{3}{2}}$$

затем с ростом температуры электропроводность уменьшается (переход от участка 2 к участку 3), т. к. преобладает рассеяние на тепловых колебаниях решетки, при котором на участке 3

$$\mu \sim T^{-\frac{3}{2}}$$

С дальнейшим повышением температуры на участке 3 начинается переход к собственной проводимости полупроводника. На участке 4 преобладает собственная проводимость. Участки 2 и 3 соответствуют «истощению» примеси:

$$n_d = N_d \quad n_a = N_a$$

Здесь  $N_d$  и  $N_a$  концентрации донорных и акцепторных примесных атомов соответственно.

# Принцип суперпозиции

- Пусть некоторая квантово-механическая система может находиться как в состоянии  $\psi_1$ , так и в состоянии  $\psi_2$ . Тогда существует состояние системы, описываемое функцией

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

- $c_1, c_2$  – произвольные комплексные числа.

# Ортонормированные собственные функции образуют базис

- Любую волновую функцию  $\Psi$  можно разложить по этому базису

$$\Psi = \sum_i a_i \psi_i; \quad a_i = \int_V \psi_i^* \Psi dV$$

# Физический смысл коэффициента $a_i$

- Квадраты модулей коэффициентов  $a_i$  дают вероятности того, что при измерениях, проводимых над системой, находящейся в состоянии  $\psi$ , будут получены соответствующие значения  $q$ . Поскольку сумма всех таких вероятностей должна быть равна единице, коэффициенты должны удовлетворять условию

$$\sum_i a_i^2 = 1$$