

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

А.П. ЧЕРНЫШЕВ

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ
ПОЛУПРОВОДНИКОВ
И НАНОФИЗИКУ
СПЕЦИАЛЬНЫЙ КУРС ФИЗИКИ
КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

Утверждено Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного пособия

НОВОСИБИРСК
2021

УДК 539.2(075.8)
Ч-497

Рецензенты:

В.Я. Костюченко, д-р физ.-мат. наук, профессор

Д.И. Остертак, канд. техн. наук, доцент

Чернышев А.П.

Ч-497 Введение в физику полупроводников и нанофизику. Специальный курс физики. Конспект лекций : учебное пособие / А. П. Чернышев. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2021. – 82 с.

ISBN 978-5-7782-4417-7

Полупроводниковые материалы широко используются в современной элементной базе микроэлектроники. В учебном пособии подробно рассмотрена теория квантовых состояний электронов и дырок в собственных и примесных полупроводниках, описаны особенности квантовых состояний носителей заряда в квантовых ямах, нанопроволоках, квантовых точках и полупроводниковых гетероструктурах. Эти наноструктуры получили в настоящее время широкое применение как элементы микро- и нанoeлектроники и как ключевые элементы в генераторах всех видов электромагнитного излучения. Учебное пособие по физике полупроводников и нанофизике призвано помочь в изучении специального курса физики как на аудиторных занятиях, так и самостоятельно. Данное пособие является дополнением к краткому конспекту лекций по специальному курсу физики «Введение в физику твердого тела и нанофизику», изданному в 2019 г.

Учебное пособие предназначено для студентов II курса МТФ дневной формы обучения по направлениям 15.03.02 «Технологические машины и оборудование» и 15.03.05 «Конструкторско-технологическое обеспечение машиностроительных производств».

Работа подготовлена на кафедре общей физики

УДК 539.2(075.8)

ISBN 978-5-7782-4417-7

© Чернышев А.П., 2021

© Новосибирский государственный
технический университет, 2021

1. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ АТОМА ВОДОРОДА

1.1. БОРОВСКАЯ ТЕОРИЯ АТОМА ВОДОРОДА

Нильс Бор, исходя из соображений классической физики о круговом движении электрона вокруг неподвижного ядра по стационарной орбите под действием кулоновской силы притяжения, разработал первую квантовую теорию атома водорода. Для этого ему потребовалось принять без доказательства два предположения, которые затем получили название постулатов Бора.

1. Атомная система может находиться только в особых стационарных, или квантовых, состояниях, каждому из которых соответствует определенная энергия E_n . В стационарных состояниях атом не излучает. Не все орбиты, возможные с точки зрения классической механики, доступны для электронов, а только те, для которых справедливо соотношение

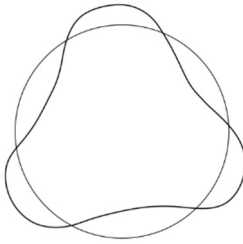
$$mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.1)$$

Здесь m – масса электрона; v – скорость электрона; r – радиус орбиты электрона; $\hbar$ – постоянная Планка; n – целое положительное число. Соотношение (1.1) можно получить, потребовав, чтобы целое число дебройлевских длин волн приходилось на каждую орбиту (рис. 1.1).

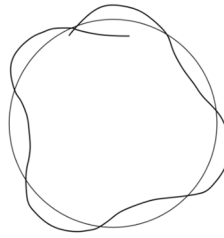
2. Переход электрона с одной орбиты на другую возможен за счет поглощения или излучения кванта энергии. Когда электрон переходит с орбиты с энергией E_1 на орбиту с меньшей энергией E_2 , энергия кванта определяется соотношением

$$E_1 - E_2 = \hbar\omega, \quad (1.2)$$

где ω – частота излучения атома.



a



б

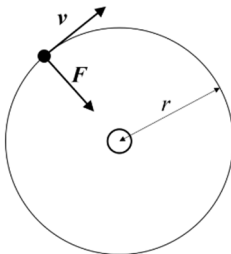
Рис. 1.1. На орбите электрона укладывается целое число волн де Бройля (*a*); на орбите электрона не укладывается целое число волн де Бройля (*б*)

Эти два пункта обычно и называют постулатами Бора.

Теперь получим спектр энергии электрона в атоме водорода. Закон Кулона дает для силы взаимодействия электрона с ядром атома водорода (протоном) выражение

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}, \quad (1.3)$$

где e – элементарный заряд ($1,602176634 \cdot 10^{-19}$ Кл); ϵ_0 – электрическая постоянная ($8,8541878128(13) \cdot 10^{-12}$ Ф · м⁻¹). Сила, описываемая формулой (1.3), показана на рис. 1.2.



● Электрон

○ Протон

Рис. 1.2. Планетарная модель атома водорода: электрон вращается вокруг ядра атома по круговой орбите

Из второго закона Ньютона следует, что $\vec{F} = m\vec{a}_c$. Здесь $a_c = v^2/r$ – центростремительное ускорение. Отсюда имеем, что

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} . \quad (1.4)$$

Из формулы (1.4) следует, что кинетическая энергия электрона равна

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} . \quad (1.5)$$

Потенциальная энергия кулоновского взаимодействия электрона с ядром

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} . \quad (1.6)$$

Полная механическая энергия равна сумме кинетической и потенциальной энергии согласно формулам (1.5) и (1.6):

$$E = E_k + E_p = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} . \quad (1.7)$$

Из соотношения (1.1) и уравнения (1.4) следует, что

$$r = \frac{4\pi n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{me^2} . \quad (1.8)$$

После подстановки значения (1.8) в формулу (1.7) для полной энергии получаем выражение

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2} . \quad (1.9)$$

Поскольку $n = 1, 2, 3, \dots \infty$, то полная энергия атома водорода принимает только дискретные значения. В таких случаях говорят, что полная энергия имеет дискретный спектр значений. Индекс n называется «главное квантовое число».

1.2. ПОСТОЯННАЯ РИДБЕРГА

Из второго постулата Бора и соотношения (1.9) следует, что

$$\hbar\omega = E_2 - E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = \hbar R_\infty \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (1.10)$$

где постоянная $R_\infty = \frac{me^4}{2\hbar^3(4\pi\epsilon_0)^2}$ называется постоянной Ридберга для ядра атома водорода бесконечной массы, $n_2 > n_1$.

В формуле (1.10) принято, что ядро атома водорода покоится в системе отсчета, связанной с центром масс атома водорода. На самом деле ядро атома водорода (протон) имеет конечную массу и вместе с электроном они вращаются вокруг общего центра масс. Чтобы учесть это вращение, массу электрона m в (1.10) надо заменить приведенной массой μ :

$$\mu = \frac{mm_p}{m + m_p} = \frac{m}{1 + \frac{m}{m_p}}, \quad (1.11)$$

где m_p — масса протона.

Отсюда получаем экспериментально наблюдаемое значение постоянной Ридберга:

$$R_H = \frac{\mu e^4}{2\hbar^3(4\pi\epsilon_0)^2}. \quad (1.12)$$

Это соотношение также можно записать в виде

$$R_H = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m}{m_p}}. \quad (1.13)$$

Для атомов, имеющих ядро массы m_a , приведенная масса равна $\mu = mm_a/(m + m_a)$. Для многоэлектронных атомов она близка к массе

электрона, поскольку $m_a \gg m$. Из выражения (1.13) следует, что для многоэлектронных атомов и тяжелых водородоподобных атомов и ионов выполняется соотношение $R_H \approx R_\infty$ и справедлива формула (1.10).

Водородоподобными, т. е. имеющими (как и атом водорода) по одному электрону, являются ионы He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} , B^{4+} и т. д. Водородоподобными атомами являются атомы с одним валентным электроном, не входящим в состав заполненных электронных оболочек. К ним относятся атомы Li, Na, K, Rb и Cs. Для легких водородоподобных атомов и ионов постоянная Ридберга, представленная выражением (1.12), перестает быть постоянной, поскольку в соответствии с формулой (1.13) зависит от массы ядра.

Таким образом, дискретный (линейчатый) спектр атома водорода может быть описан с помощью соотношений (1.10–1.12). Замена R_∞ на R_H в формуле (1.10) приводит к двум эквивалентным выражениям: первому выражению для дискретного набора циклических частот, соответствующих линиям излучения (поглощения) в спектре излучения (поглощения) атома водорода:

$$\omega = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad n_2 > n_1, \quad (1.14)$$

и второму аналогичному выражению для обратной длины волны излучения (поглощения) атома водорода:

$$\frac{1}{\lambda} = R'_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad n_2 > n_1. \quad (1.15)$$

Исторически сложилось так, что эти две формулы (и другие подобные им) называются формулой Бальмера.

Поскольку справедливо тождество

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda},$$

где c – скорость света в вакууме, а λ – длина волны, вторая постоянная Ридберга определяется соотношением

$$R'_H = \frac{\mu e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2 c}, \quad (1.16)$$

где $h = 2\pi\hbar$.

Из выражений (1.12) и (1.16) следует, что

$$R_H = 2\pi c R'_H.$$

Для ядра бесконечной массы постоянная Ридберга имеет вид

$$R'_\infty = \frac{me^4}{8h^3 \varepsilon_0^2 c} = 1,0973731568160(21) \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}. \quad (1.17)$$

Табличное значение $R'_H \approx 1,09677583407 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$.

1.3. СПЕКТРЫ АТОМА ВОДОРОДА

Спектральные линии серии Лаймана находятся в ультрафиолетовом диапазоне и соответствуют $n_1 = 1$. Серия Лаймана описывается выражением

$$\omega = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 = 2, 3, 4, \dots \infty). \quad (1.18)$$

Серия Лаймана наблюдается при переходах электронов с возбужденных энергетических уровней ($n_2 = 2, 3, 4, \dots \infty$) на первый ($n_1 = 1$) в спектре излучения и с первого уровня на все остальные – в спектре поглощения.

Первые четыре спектральные линии серии Бальмера находятся в видимой области спектра электромагнитного излучения, остальные – в ультрафиолетовом диапазоне. Соответствующие серии Бальмера циклические частоты определяются формулой

$$\omega = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 = 3, 4, 5, \dots \infty). \quad (1.19)$$

Здесь в спектре излучения (яркие полосы) переходы электронов осуществляются с возбужденных уровней энергии ($n_2 = 3, 4, 5, \dots \infty$) на

второй уровень ($n_1 = 2$). В спектре поглощения (темные полосы) происходит поглощение энергии и переход электронов со второго уровня энергии на более высокие уровни.

Серия Пашена соответствует уравнению

$$\omega = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 = 4, 5, 6, \dots \infty). \quad (1.20)$$

Все линии серии Пашена находятся в инфракрасном диапазоне излучения.

Все линии серий Брэкета и Пфунда расположены в далеком инфракрасном диапазоне электромагнитного излучения. Серии Брэкета соответствует уравнение

$$\omega = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 = 5, 6, 7, \dots \infty); \quad (1.21)$$

уравнение для серии Пфунда:

$$\omega = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 = 6, 7, 8, \dots \infty). \quad (1.22)$$

Все перечисленные выше спектральные серии и спектры водородоподобных ионов описываются обобщенной формулой Бальмера:

$$\omega = R_H Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad n_2 > n_1, \quad (1.23)$$

где Z – порядковый номер элемента в периодической системе Д.И. Менделеева.

В спектроскопии частоты спектральных линий принято представлять в виде разности положительных чисел, называемых термами $T(n)$. В соответствии с уравнением (1.23) для атома водорода имеем

$$T(n) = \frac{R_H}{n^2}. \quad (1.24)$$

1.4. ПРАВИЛО КВАНТОВАНИЯ БОРА–ЗОММЕРФЕЛЬДА

Согласно теории Бора–Зоммерфельда при периодическом движении частицы в потенциальном поле должно выполняться следующее правило квантования:

$$\oint p dq = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (1.25)$$

где p – обобщенный импульс; q – обобщенная координата; n – целое число.

Получим выражение (1.25) для квантового осциллятора. Обозначим координату осциллятора как q , а импульс – как p . Энергия квантового гармонического осциллятора [1]:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (1.26)$$

где ω – частота осциллятора.

Полная энергия осциллятора равна сумме кинетической и потенциальной энергии:

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (1.27)$$

Введем координатную плоскость, на которой в качестве координат выступают q и p . Такую плоскость принято называть фазовой плоскостью, а кривую зависимости $p = p(q)$ – фазовой траекторией. Из выражения (1.27) следует, что

$$\frac{p^2}{2m\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} + \frac{q^2}{2\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)/(m\omega)} = 1, \quad (1.28)$$

т. е. фазовая траектория представляет собой эллипс с полуосями $a = \sqrt{2m\hbar\omega(n + 1/2)}$ и $b = \sqrt{2\hbar(n + 1/2)/(m\omega)}$. Площадь эллипса равна

$$S = \pi ab = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (1.29)$$

С другой стороны, площадь можно получить, взяв интеграл по контуру:

$$S = \oint pdq . \quad (1.30)$$

Приравняв выражения (1.29) и (1.30), получаем формулу (1.25). В квазиклассическом приближении $n \gg 1$, поэтому соотношение (1.25) можно переписать в виде

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n . \quad (1.31)$$

Получим с помощью формулы (1.31) первый постулат Бора. Электрон в атоме водорода движется в центрально-симметричном поле протона (см. рис. 1.2). При движении в таком поле сопряженными координатой и импульсом являются азимутальный угол φ и момент импульса $M_\varphi = mr^2\dot{\varphi}$ соответственно. В замкнутой системе момент импульса сохраняется, поэтому его можно вынести за знак интеграла:

$$\oint M_\varphi d\varphi = M_\varphi \oint d\varphi = 2\pi M_\varphi = 2\pi mvr . \quad (1.32)$$

Здесь было использовано соотношение $v = r\dot{\varphi}$. Приравнивая правые части равенств (1.31) и (1.32), получаем искомое соотношение (1.1).

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

С помощью правила квантования Бора–Зоммерфельда (формула (1.31)) найти разрешенные значения энергии E_n частицы массы m , которая движется:

а) в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками;

б) по окружности радиуса r ;

в) в одномерном потенциальном поле $U(x) = \kappa x^2/2$, где κ – положительная постоянная.

1.5. АТОМ ВОДОРОДА И УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

Потенциальная энергия электрона, находящегося на расстоянии r от ядра атома водорода (т. е. протона), определяется соотношением (1.6). Следовательно, уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0 . \quad (1.33)$$

Это уравнение имеет решения, удовлетворяющие стандартным условиям в следующих случаях:

- 1) при любых положительных значениях E ;
- 2) при дискретных отрицательных значениях энергии:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2} \quad (n=1, 2, 3, \dots). \quad (1.34)$$

Следует отметить, что боровская теория атома водорода и решение уравнения (1.33) дают одинаковые значения дискретного спектра энергии электрона (сравните формулы (1.9) и (1.34)). Поскольку электрон в атоме водорода движется в центрально-симметричном потенциальном поле, то решение уравнения (1.33) удобно искать в сферических координатах (рис. 1.3). Декартовы координаты выражаются через сферические по следующим формулам:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi; \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi; \\ z &= r \cos \vartheta, \end{aligned} \quad (1.35)$$

где r – радиальное расстояние (расстояние от точки до начала координат); ϑ – зенитный угол; φ – азимутальный угол.

Оператор кинетической энергии в сферических координатах можно записать как

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2, \quad (1.36)$$

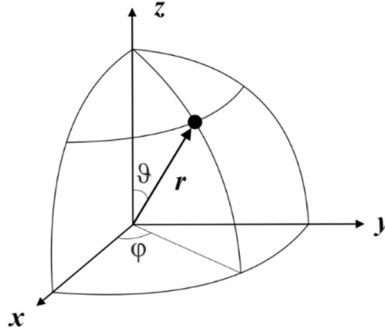


Рис. 1.3. Система сферических координат

где ∇^2 – оператор Лапласа. В сферических координатах он имеет вид

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (1.37)$$

Оператор Лапласа (лапласиан) можно представить в виде суммы его радиальной части ∇_r^2 и угловой части $\nabla_{\vartheta\varphi}^2$:

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}; \quad (1.38)$$

$$\nabla_{\vartheta\varphi}^2 = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}; \quad (1.39)$$

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta\varphi}^2. \quad (1.40)$$

Таким образом, уравнение (1.33) в сферических координатах имеет вид

$$\nabla_r^2 \psi + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta\varphi}^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0. \quad (1.41)$$

1.6. ОРБИТАЛЬНЫЙ МОМЕНТ ИМПУЛЬСА (УГЛОВОЙ МОМЕНТ) ЭЛЕКТРОНА

1.6.1. МАГНИТНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО

Из первого постулата Бора (1.1) непосредственно следует, что угловой момент электрона квантуется, т. е. принимает дискретные значения. Докажем, что проекция углового момента L_z на произвольное направление z также квантуется. Оператор $\hat{L}_z$ имеет простой вид:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (1.42)$$

Найдем его собственные значения и собственные функции. Для этого решим уравнение

$$\hat{L}_z \psi = L_z \psi. \quad (1.43)$$

После подстановки соотношения (1.42) в уравнение (1.43) получим

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi. \quad (1.44)$$

Ищем решение уравнения (1.44) в виде

$$\psi = C \exp(i\alpha\varphi). \quad (1.45)$$

Подстановка этого соотношения в формулу (1.44) дает $\hbar\alpha = L_z \rightarrow \alpha = L_z/\hbar$. Таким образом, решение (1.45) принимает следующий вид:

$$\psi = C \exp\left(\frac{iL_z}{\hbar} \varphi\right). \quad (1.46)$$

Для того чтобы волновая функция была однозначной, поворот на 2π не должен изменять волновую функцию. Поэтому должно выполняться соотношение

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi). \quad (1.47)$$

После подстановки выражения (1.46) в формулу (1.47) получаем уравнение

$$\exp\left(i\frac{L_z}{\hbar}(\varphi + 2\pi)\right) = \exp\left(i\frac{L_z}{\hbar}\varphi\right). \quad (1.48)$$

Несложные преобразования уравнения (1.48) приводят к уравнению

$$\exp\left(i\frac{L_z}{\hbar}2\pi\right) = 1. \quad (1.49)$$

Решение последнего уравнения приводит к соотношению

$$L_z = m\hbar, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l), \quad (1.50)$$

где $\hbar l$ – максимальное значение проекции углового момента электрона на ось z ; m – магнитное квантовое число. Запишем в явном виде собственные функции оператора $\hat{L}_z$:

$$\Phi(\varphi) = C \exp(im\varphi), \quad (1.51)$$

где C – нормировочная постоянная.

1.6.2. КВАНТОВАНИЕ КВАДРАТА МОМЕНТА ИМПУЛЬСА

Для нахождения квадрата момента импульса L^2 нужно решить уравнение на собственные значения и собственные функции оператора квадрата момента импульса $\hat{L}^2$:

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi. \quad (1.52)$$

Оператор квадрата момента импульса (квадрата углового момента) пропорционален угловой части лапласиана:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\vartheta\varphi}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right). \quad (1.53)$$

Решение задачи на собственные значения и собственные функции оператора квадрата углового момента (квадрата момента импульса, формула (1.52)) приводит к следующему результату:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (1.54)$$

где собственные значения определяются соотношением

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l \leq n-1. \quad (1.55)$$

В уравнении (1.54) $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ – это сферические функции, которые являются собственными функциями оператора $\hat{L}^2$:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Theta_{l|m|}(\vartheta) e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (1.56)$$

Число n называют радиальным квантовым числом или главным квантовым числом, число l – азимутальным или орбитальным квантовым числом, число m называют магнитным квантовым числом. Для обозначения состояний с различными значениями углового момента частицы $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ существует общепринятая символика, состояния обозначаются буквами латинского алфавита со следующим соответствием:

$$\begin{array}{ccccccccccc} l & = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & \dots \\ & & s & p & d & f & g & h & i & \dots \end{array} \quad (1.57)$$

Т а б л и ц а 1.1

Функции $\Theta_{l|m|}(\vartheta)$ для s -, p - и d -состояний электрона

Состояние	l, m	$\Theta_{l m }(\vartheta)$
s	0, 0	1
p	$\begin{cases} 1, 0 \\ 1, 1 \end{cases}$	$\begin{matrix} \cos \vartheta \\ \sin \vartheta \end{matrix}$
d	$\begin{matrix} 2, 0 \\ 2, 1 \\ 2, 2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 - 3 \cos^2 \vartheta \\ \sin \vartheta \cos \vartheta \\ \sin^2 \vartheta \end{matrix}$

Некоторые состояния электрона в атоме водорода приведены в табл. 1.1 [2].

Таким образом, состояние электрона в атоме водорода можно описать с помощью формулы nl : например, состояния $1s$, $2s$ или $2p$ и др.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Преобразовать гамильтониан частицы в центрально-симметричном поле $U(r)$ к виду

$$\hat{H} = \hat{K}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r).$$

Какой вид имеет оператор $\hat{K}_r$?

1.7. СПИН И СПИНОВОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО

Классический момент импульса частицы описывается выражениями:

$$\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}], \quad \vec{p} = m\vec{v}, \quad (1.58)$$

где m — масса частицы, которая стремится к нулю при $\vec{r}$, стремящемуся к нулю:

$$\lim_{\vec{r} \rightarrow 0} \vec{L} = 0. \quad (1.59)$$

В квантовой механике момент импульса не зависит от размеров микрочастицы и остается конечным (если не равен нулю по определению). В нерелятивистской квантовой механике постулируется, что частицы могут иметь внутреннюю степень свободы, не связанную с пространственным движением и называемую спином. Оператор спина:

$$\hat{S} = \hbar \hat{s}. \quad (1.60)$$

Его свойства аналогичны квантовым свойствам момента импульса. Для электрона собственное значение оператора $\hat{s}$ равно $s = 1/2$. Собственные значения оператора проекции спина электрона на произвольную выделенную ось z ($\hat{s}_z$) равны $m_s = -1/2$ и $+1/2$.

Проекция магнитного момента электрона на заданное направление:

$$p_{mz} = -\frac{e}{m} m_s = -\frac{e\hbar}{m} \left(\pm \frac{1}{2} \right) = \mp \frac{e\hbar}{2m} . \quad (1.61)$$

Элементарный магнитный момент определяется выражением

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 0,927 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}} \quad (1.62)$$

и называется магнетоном Бора в честь выдающегося датского физика Нильса Бора.

1.8. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

Всего четыре квантовых числа определяют состояние электрона в атоме: n – главное квантовое число, l – азимутальное квантовое число, m – магнитное квантовое число, s – спиновое квантовое число. В сферических координатах (см. рис. 1.3) решение уравнения Шрёдингера для атома водорода имеет вид

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) . \quad (1.63)$$

Условие нормировки

$$\int_V \psi_{nlm}^* \psi_{nlm} dV = \int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr \int_0^{4\pi} Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) d\Omega = 1 \quad (1.64)$$

состоит из двух частей:

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr = 1 ; \quad (1.65)$$

$$\int_0^{4\pi} Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) d\Omega = 1 . \quad (1.66)$$

Вероятность нахождения электрона в элементе объема dV равна

$$dP_{r\vartheta\varphi} = R_{nl}^2(r) r^2 dr Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) d\Omega . \quad (1.67)$$

Здесь элемент объема в сферических координатах имеет вид

$$dV = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi = r^2 dr d\Omega. \quad (1.68)$$

Телесный угол равен

$$d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (1.69)$$

В табл. 1.2 показаны функции $R_{nl}(\rho)$, $\rho = r / r_1$ для нескольких состояний электрона в атоме водорода [2].

Т а б л и ц а 1.2

Радиальные волновые функции для водородоподобных систем

Состояние	n	l	$R_{nl}(\rho), \quad \rho = r / r_1$
1s	1	0	$e^{-\rho}$
2s	2	0	$(2 - \rho)e^{-\rho/2}$
2p	2	1	$\rho e^{-\rho/2}$
3s	3	0	$(21 - 81\rho + 2\rho^2)e^{-\rho/3}$
3p	3	1	$\rho(6 - \rho)e^{-\rho/3}$
3d	3	2	$\rho^2 e^{-\rho/3}$

Здесь r_1 – первый боровский радиус. Его можно получить из выражения (1.8), подставив в него $n = 1$:

$$r_1 = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_0}{me^2} = 0,0526 \text{ нм}. \quad (1.70)$$

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Частица находится в центрально-симметричном потенциальном поле в состоянии $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Каков физический смысл функции $|Y_{lm}|^2$? Воспользовавшись табл. 1.1, вычислить нормировочные коэффициенты функций: $Y_{1,0}$ и $Y_{2,1}$.

1.9. ПОЛНЫЙ УГЛОВОЙ МОМЕНТ

Полный угловой момент атома водорода $\vec{J}$ складывается из орбитального момента $\vec{L}$ и спина электрона $\vec{S}$:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} . \quad (1.71)$$

Полный угловой момент квантуется, и ему соответствует квантовое число j . Его проекция на произвольно выбранную ось z равна

$$J_z = \hbar j , \quad (1.72)$$

а его модуль определяется выражением

$$|\vec{J}| = \hbar \sqrt{j(j+1)} . \quad (1.73)$$

Спектральные термы водорода обычно обозначают как nl_j . В атоме водорода два значения j : $j = l - s$ и $j = l + s$.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Выписать спектральные обозначения термов электрона в атоме водорода для $n = 3$.

2. ПРИНЦИП ПАУЛИ И МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

2.1. ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ОДИНАКОВЫХ ЧАСТИЦ

Одинаковые частицы в квантовой механике неразличимы (тождественны). Поэтому гамильтониан системы одинаковых частиц

$$\hat{H} = \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (2.1)$$

не зависит от перестановки наборов переменных $\mathbf{r}_i$ и $\mathbf{r}_j$, описывающих i -ю и j -ю частицы. Оператор перестановок i -й и j -й частиц $\hat{\rho}_{ij}$ действует следующим образом:

$$\hat{\rho}_{ij}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (2.2)$$

Действуя дважды одним и тем же оператором перестановок на волновую функцию, мы получаем исходное состояние, поэтому

$$\hat{\rho}_{ij}\hat{\rho}_{ij} = 1. \quad (2.3)$$

2.2. БОЗОНЫ И ФЕРМИОНЫ

Подействуем оператором перестановок на волновую функцию. При перестановке одинаковых частиц волновая функция не изменяется и может приобрести только численный множитель ε :

$$\hat{\rho}_{ij}\psi = \varepsilon\psi. \quad (2.4)$$

Подействуем на то же состояние оператором перестановок еще раз:

$$\hat{\rho}_{ij}^2 \Psi = \hat{\rho}_{ij} \hat{\rho}_{ij} \Psi = \hat{\rho}_{ij} \varepsilon \Psi = \varepsilon^2 \Psi = \Psi . \quad (2.5)$$

Из уравнения (2.5) следует, что у оператора перестановок есть два собственных значения: $\varepsilon = \pm 1$. Одинаковые частицы, перестановка которых дает $\varepsilon = 1$, называются бозонами. В этом случае волновая функция не меняет знак при перестановках любых двух частиц, т. е. она полностью симметрична по отношению к их перестановкам. Такие системы называют бозевскими или бозе-системами.

Одинаковые частицы, перестановка которых дает $\varepsilon = -1$, называются фермионами. Волновая функция меняет знак при перестановках любых двух частиц, т. е. она полностью антисимметрична по отношению к их перестановкам. Такие системы называют фермиевскими или ферми-системами.

В квантовой механике доказывается, что спин определяет вид частиц (бозоны или фермионы). Частицы с целым спином являются бозонами: $S = 0, \hbar, 2\hbar, 3\hbar, \dots$ ($s = 0, 1, 2, 3, \dots$ – спиновое квантовое число). Частицы с полуцелым спином являются фермионами:

$$S = \frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \frac{5}{2}\hbar, \frac{7}{2}\hbar, \dots \left(s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \dots \right). \quad (2.6)$$

2.3. ПРИНЦИП ПАУЛИ

Рассмотрим систему фермионов. Для такой системы справедливы соотношения:

$$\hat{\rho}_{ij} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = -\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N); \quad (2.7)$$

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) = -\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (2.8)$$

Если все квантовые числа у двух тождественных фермионов совпадают, т. е. $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$, то последнее соотношение показывает, что одна и та же волновая функция одновременно и положительная, и отрицательная. Отсюда немедленно следует, что

$$\Psi|_{\mathbf{r}_i=\mathbf{r}_j} = 0. \quad (2.9)$$

Формула (2.9) показывает, что волновая функция ферми-системы обращается в ноль при совпадении переменных любых двух частиц. Это свойство формулируется в виде принципа Паули (1925 г.): *в одном и том же атоме (или какой-либо другой квантовой системе) не может быть двух электронов (либо других частиц с полуцелым спином), обладающих одинаковой совокупностью квантовых чисел.*

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Используя табл. 1.2, найти для $2p$ - и $3d$ -электронов атома водорода:

а) наиболее вероятное расстояние от ядра;

б) среднеквадратичное отклонение $\left\langle (r - \langle r \rangle)^2 \right\rangle$.

2.4. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

Разобьем все электроны, входящие в состав многоэлектронного атома, на оболочки и подоболочки. Примем, что электроны, имеющие одинаковое главное квантовое число, образуют оболочку. Электроны, входящие в одну и ту же оболочку и имеющие одинаковое значение азимутального квантового числа, образуют подоболочку. Подоболочки называются в соответствии с правилом (1.57): например, s -подоболочка, p -подоболочка и т. д. Оболочки обозначаются латинскими буквами.

$$\begin{array}{ccccccccc} n & = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots & \\ & & K & L & M & N & O & \dots & \end{array} \quad (2.10)$$

Количество электронов в оболочке

Электроны являются фермионами. Поэтому электронная оболочка атома – это ферми-система. Это значит, что в соответствии с принципом Паули все электроны атома отличаются друг от друга хотя бы одним квантовым числом. Перечислим квантовые числа, определяющие состояние электрона в атоме: n , l , m и s_m . Спиновое квантовое число электрона $s = 1/2$. Проекция спина электрона на произвольно выделенную ось z (S_z) принимают значения

$$S_z = \hbar s_m = \begin{cases} +\frac{1}{2}\hbar, & s_m = +\frac{1}{2}; \\ -\frac{1}{2}\hbar, & s_m = -\frac{1}{2}. \end{cases} \quad (2.11)$$

Таким образом, спиновое магнитное квантовое число электрона s_m принимает два значения: $-1/2$ и $+1/2$. Магнитное квантовое число m в каждой подоболочке с орбитальным квантовым числом l может принимать следующие значения:

$$-l \quad -l+1 \quad -l+2 \quad \dots \quad -2 \quad -1 \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad \dots \quad l-2 \quad l-1 \quad l, \quad (2.12)$$

т. е. всего $2l+1$ значение. Введем обозначение m_l для магнитного квантового числа подоболочки l и воспользуемся арифметической прогрессией для подсчета максимального количества электронов в оболочке с главным квантовым числом n :

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l; \\ N_e = \sum_l m_l = \sum_{l=0}^{l=n-1} (2l+1) = \frac{1+(2n-1)}{2} n = n^2. \quad (2.13)$$

С учетом двух проекций спина электрона окончательно выводим формулу

$$N_e = 2n^2.$$

2.5. МЕХАНИЧЕСКИЙ МОМЕНТ МНОГОЭЛЕКТРОННОГО АТОМА

Полный орбитальный момент многоэлектронного атома будем обозначать как $\vec{L}$, а полный спиновый момент – как $\vec{S}$. Соответствующие им квантовые числа обозначим как L и S . Суммарный механический момент $\vec{J}$ (соответствующее квантовое число – J) может складываться двумя способами. Если орбитальные моменты электронов $\vec{l}$ взаимодействуют между собой сильнее, чем со спиновыми моментами $\vec{s}$, то такая связь называется связью Рассела – Саундерса, или LS -связью. Это наиболее распространенная связь.

При LS -связи отдельно складываются орбитальные и спиновые моменты электронов:

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \quad \text{и} \quad \vec{S} = \sum_i \vec{s}_i, \quad (2.14)$$

где i – порядковый номер электрона.

Если же $\vec{l}$ и $\vec{s}$, принадлежащие каждому электрону, взаимодействуют между собой сильнее, чем с аналогичными механическими моментами других электронов, то такая связь называется jj -связью. Такая связь характерна для тяжелых атомов. В этом случае для каждого электрона сначала рассчитывается величина $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$ и затем производится суммирование

$$\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i. \quad (2.15)$$

Атомные уровни энергии (спектральные термы атомов) имеют обозначение $^{2S+1}\{L\}_J$. $2S+1$ называется мультиплетностью. L соответствует ряду (1.57), записанному прописными буквами. При LS -связи полный момент атома принимает значения, соответствующие следующим значениям квантового числа J :

$$|L - S|, |L - S| + 1, |L - S| + 2, \dots, L + S - 2, L + S - 1, L + S. \quad (2.16)$$

Эмпирические правила Хунда позволяют определить спектральный терм с минимальным значением энергии: наименьшей энергией обладает терм с максимальным значением спина S при данной электронной конфигурации и максимально возможным при этом значении спина значением L . Для основного терма $J = |L - S|$, если подболочка заполнена менее чем наполовину, и $J = L + S$ в остальных случаях.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Используя правила Хунда, найти основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной подболочки которого:

а) nd^2 ; б) nd^3 .

Ответ: а) 3F_2 ; б) $^4F_{3/2}$.

3. МЕТАЛЛЫ И ПОЛУПРОВОДНИКИ

Основными видами химических связей являются ионная, ковалентная, металлическая, водородная и ван-дер-ваальсова связь. Кратко охарактеризуем металлическую и ковалентную связь.

Металлическая связь возникает за счет обобществления валентных электронов. Обобществленные электроны подобно газу перемещаются по всему кристаллу. В узлах кристаллической решетки металлов находятся положительно заряженные ионы, взаимное кулоновское отталкивание которых и компенсирует этот «электронный газ».

Природа ковалентной химической связи может быть объяснена только с помощью квантовой механики [4]. Здесь мы ограничимся качественным «механистическим» рассмотрением этого вида связи на примере кристалла германия. Свойство атомов соединяться друг с другом, образуя молекулы или кристаллы, описывается с помощью понятия о валентности. Каждому атому приписывается определенная валентность, и при соединении атомов их валентности должны насыщаться, т. е. каждой валентности одного атома должна соответствовать валентность другого атома. Валентная связь обладает направленностью и может обладать полярностью. Полярная валентная связь образуется в случае, если ковалентную связь составляют атомы разных элементов периодической системы Д.И. Менделеева. При сильном различии у атомов сродства к электрону образуется гетерополярная связь, при которой все валентные электроны одних атомов переходят к другим атомам. Кристаллы германия, кремния и других полупроводников образуются за счет образования ковалентной связи. Четыре валентных электрона каждого атома германия связаны с такими же электронами соседних атомов неполярными ковалентными связями. Схематично это показано на рис. 3.1, где каждые две параллельные линии обозначают одну ковалентную связь.

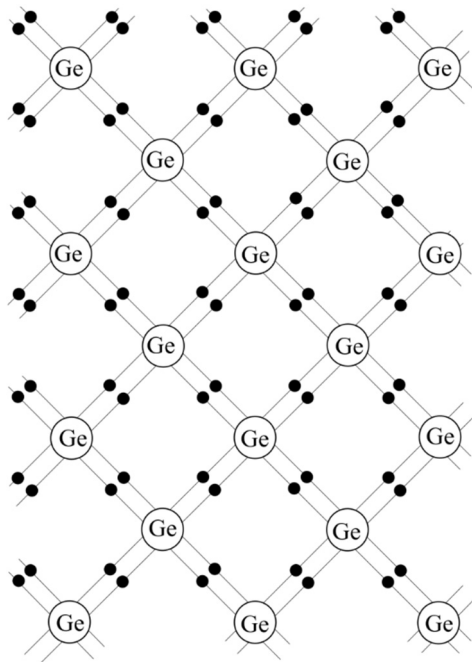


Рис. 3.1. Схема кристалла германия. Каждый атом образует четыре связи с соседними атомами и на каждую связь приходится два электрона

Ковалентные связи германия достаточно прочны и при низких температурах все электроны привязаны к атомам германия. Аналогичное строение имеет и кристалл кремния.

3.1. СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ

По величине электрической проводимости все материалы делят на три класса: диэлектрики, полупроводники и проводники. Четкой границы между классами нет. Если две горы находятся рядом, то нельзя определить, где заканчивается одна гора и начинается другая. Зато легко определить, где находятся их вершины. Диэлектрики (изоляторы) – это вещества с малой удельной электрической проводимостью (удельной электропроводностью, измеряемой в сименсах на метр,

См/м): $\sigma < 10^{-5}$ См/м. Полупроводники имеют удельную электропроводность в интервале $10^{-5} \dots 10^3$ См/м. Для проводников $\sigma > 10^3$ См/м.

Металлы – это группа химических элементов, обладающих в виде простых веществ характерными металлическими свойствами: высокой тепло- и электропроводностью, положительным температурным коэффициентом сопротивления, высокой пластичностью, ковкостью и металлическим блеском. Прежде чем обсуждать теоретические модели металлического состояния, приведем некоторые физические свойства металлов [3].

1. В изотермических условиях в металлах выполняется закон Ома для однородного участка цепи:

$$I = \frac{U}{R}. \quad (3.1)$$

В дифференциальной форме этот закон имеет вид

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad (3.2)$$

где скалярная удельная электропроводность σ связывает плотность тока $\vec{j}$ (в амперах на метр квадратный, А/м²) с напряженностью электрического поля $\vec{E}$ (в вольтах на метр, В/м).

2. Металлы – очень хорошие проводники электрического тока. Большинство металлов при комнатной температуре имеет удельную электропроводность в интервале $10^6 \dots 10^8$ См/м. Наибольшее значение σ имеют Cu и Ag.

3. Металлы обладают также высокой электронной теплопроводностью κ_e . Видеман и Франц в 1853 г. обнаружили совпадение отношения κ_e / σ для разных металлов при данной температуре. Это явление называется законом Видемана–Франца. При обычных температурах κ_e , как правило, от температуры почти не зависит, в то время как σ обнаруживает температурную зависимость вида T^{-1} . В 1881 г. Лоренц заметил, что отношение $\kappa_e / \sigma T$ не зависит от температуры и имеет одинаковую величину для многих металлов, поэтому величина

$$L = \frac{\kappa_e}{\sigma T} \quad (3.3)$$

называется числом Лоренца.

4. Если металл охлажден ниже некоторой характерной температуры (которая связана с характеристической температурой Дебая Θ_D [1]), то наблюдается рост κ_e и еще большее возрастание σ . Для меди и некоторых других одновалентных металлов на самом крутом участке кривой электропроводность пропорциональна T^{-5} .

5. При достаточно низкой температуре электропроводность σ перестает зависеть от температуры. Значение σ при этом определяется примесями и дефектами решетки. Удельное электрическое сопротивление (величина, обратная электропроводности и измеряемая в омах, умноженных на метр, Ом · м) часто подчиняется правилу Маттисена, согласно которому вклад, вносимый примесями и дефектами, одинаков для всех температур:

$$\frac{1}{\sigma(T)} = \frac{1}{\sigma_{\text{деф}}} + \frac{1}{\sigma_{\text{чист}}(T)}. \quad (3.4)$$

Вклад $\sigma_{\text{деф}}$ можно наблюдать только при очень низких температурах, когда $\sigma_{\text{чист}} \gg \sigma_{\text{деф}}$.

6. Магнитные эффекты в ферромагнитных металлах и сплавах также дают вклад в электрическое удельное сопротивление.

7. Примерно половина металлических элементов при достаточно низких температурах становится сверхпроводниками.

8. Газ свободных электронов обладает очень малой удельной теплоемкостью [1], которая пропорциональна абсолютной температуре, а также очень малой магнитной восприимчивостью, которая не зависит от температуры.

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, атомы или ионы в действительности не неподвижны, а все время совершают тепловые колебания вокруг своих положений равновесия. Есть и другие дефекты кристаллической структуры.

3.2. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛЕ. ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ

Пусть электроны движутся совершенно свободно в пределах образца металла. Тогда $U = 0$ (нет взаимодействия), а уравнение Шрёдингера [1] имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \varepsilon\psi, \quad (3.5)$$

где m – масса электрона; ε – энергия электрона; ∇^2 – оператор Лапласа.

Решение уравнения (3.5) очевидно:

$$\psi = C \exp(i\vec{k}\vec{r}), \quad (3.6)$$

где C – константа; i – мнимая единица ($i = \sqrt{-1}$); $\vec{r}$ – радиус-вектор.

3.3. ПЕРИОДИЧНОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И МОДЕЛЬ НЕЗАВИСИМЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Поскольку характерный период потенциала U ($\sim 10^{-8}$ см) совпадает по порядку величины с типичной длиной волны де Бройля электрона, для учета влияния периодичности на движение электронов следует пользоваться квантовой механикой. 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 $U(\vec{r})$.

Уравнение Шрёдингера для независимых электронов имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi, \quad (3.7)$$

где U – одноэлектронный эффективный периодический потенциал:

$$\begin{aligned} U(x+a, y, z) &= U(x, y, z); \quad U(x, y+b, z) = U(x, y, z); \\ U(x, y, z+c) &= U(x, y, z). \end{aligned} \quad (3.8)$$

3.3.1. ТЕОРЕМА БЛОХА (ФОРМУЛИРОВКА)

Собственные функции ψ одноэлектронного гамильтониана

$$\hat{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / (2m) + U(\vec{r}), \quad (3.9)$$

где $U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$ для всех векторов решетки Браве $\vec{R}$ [1], могут быть выбраны так, чтобы их волновые функции имели форму плоской волны, умноженной на функцию с периодичностью решетки Браве:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r}). \quad (3.10)$$

Функция $u_{n\vec{k}}$ имеет периодичность потенциала, n – номер зоны Бриллюэна:

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (3.11)$$

Элементарное следствие:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (3.12)$$

Иногда теорему Блоха формулируют иначе: собственные функции ψ оператора $\hat{H}$ можно выбрать таким образом, чтобы с каждым из них был связан некоторый волновой вектор $\vec{k}$ и для любого вектора $\vec{R}$ решетки Браве выполнялось равенство (3.12).

Налагая на волновые функции *граничное условие Борна–Кармана*, можно показать, что волновой вектор $\vec{k}$ должен быть действительным, и получить условие, которому должны удовлетворять разрешенные значения $\vec{k}$.

Периодическое граничное условие Борна–Кармана имеет вид

$$\psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi(\vec{r}), \quad (3.13)$$

где $\vec{a}_i$ – тройка основных векторов решетки Браве [1], $i = 1, 2, 3$; все N_i – целые числа порядка $N^{1/3}$, где $N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ – полное число элементарных ячеек в кристалле.

Применяя к граничному условию Борна–Кармана теорему Блоха, находим

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) = e^{iN_j \vec{k} \vec{a}_j} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (3.14)$$

где $j = 1, 2, 3$. Таким образом,

$$e^{iN_j \vec{k} \vec{a}_j} = 1. \quad (3.15)$$

В [1] было показано, что любой вектор $\vec{k}$ можно представить в виде

$$\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3. \quad (3.16)$$

Из этого равенства следует, что

$$e^{2\pi i N_j k_j} = 1. \quad (3.17)$$

Соотношение (3.17) выполняется, если $k_j = \frac{m_j}{N_j}$, $m_j \in \mathbb{N}$. Поэтому

разрешенный блоховский волновой вектор должен иметь следующий общий вид:

$$\vec{k} = \frac{m_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \vec{b}_3, \quad m_j \in \mathbb{N}. \quad (3.18)$$

3.3.2. ОБЪЕМ $\vec{k}$ -ПРОСТРАНСТВА, ПРИХОДЯЩИЙСЯ НА ОДНО РАЗРЕШЕННОЕ ЗНАЧЕНИЕ $\vec{k}$

Из формулы (3.18) следует, что объем Δk в $\vec{k}$ -пространстве, приходящийся на одно разрешенное значение $\vec{k}$, равен объему маленького параллелепипеда с ребрами b_i/N_i :

$$\Delta k = \frac{\vec{b}_1}{N_1} \left(\frac{\vec{b}_2}{N_2} \frac{\vec{b}_3}{N_3} \right) = \frac{1}{N} \vec{b}_1 (\vec{b}_2 \vec{b}_3). \quad (3.19)$$

Поскольку $\vec{b}_1(\vec{b}_2\vec{b}_3)$ есть объем элементарной ячейки обратной решетки, формула (3.19) означает, что **число разрешенных волновых векторов, содержащихся в одной элементарной ячейке обратной решетки, равно числу ячеек в кристалле**. Объем элементарной ячейки обратной решетки равен $(2\pi)^3/V_1$ [1], где $V_1 = V/N$ – объем элементарной ячейки прямой решетки. Следовательно, формулу (3.19) можно записать в другой форме:

$$\Delta k = \frac{(2\pi)^3}{V}. \quad (3.20)$$

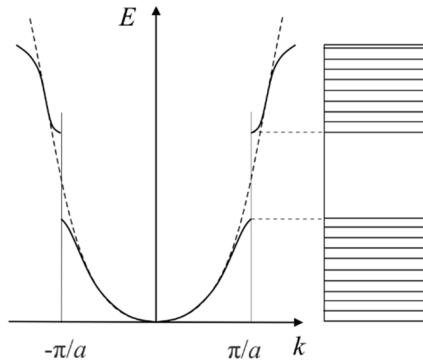


Рис. 3.2. Квазинепрерывное изменение энергии электронов и дырок. Энергетические зоны в кристаллах

В первой части курса мы рассматривали область $\vec{k}$ -пространства, которая называется зоной Бриллюэна. Можно показать при помощи квантовой физики (например, решая уравнение (3.7)), что внутри этой зоны энергия электрона в кристалле изменяется квазинепрерывно. Оказывается, что ширина энергетической зоны (рис. 3.2) много больше расстояния между уровнями энергии внутри этой зоны. Поэтому можно считать, что энергия электронов или дырок в пределах одной энергетической зоны изменяется почти непрерывно, т. е. квазинепрерывно. Это позволяет перейти от дискретных уровней энергии ε_i в распределении Ферми–Дирака [1] к непрерывному изменению энергии E .

При рассмотрении уровней энергии электронов и дырок химический потенциал называется энергией Ферми E_F , а соответствующий энергии Ферми уровень энергии – уровнем Ферми [1].

3.4. ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ

Поверхность Ферми – это изоэнергетическая поверхность (поверхность постоянной энергии) в $\vec{k}$ -пространстве $k_F = k(E_F)$ (рис. 3.3). В случае свободных электронов такая поверхность описывается уравнением

$$\frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = E_F \quad (3.21)$$

и имеет форму сферы. Здесь учтено, что импульс электрона определяется соотношением

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} . \quad (3.22)$$

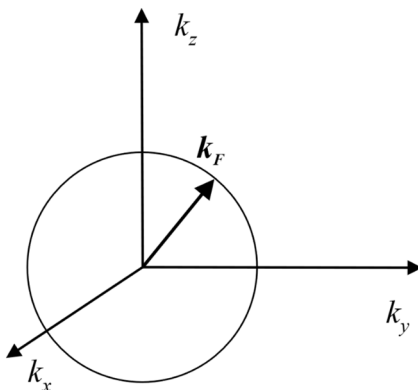


Рис. 3.3. Поверхность Ферми в $\vec{k}$ -пространстве

По определению температура Ферми равна

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} . \quad (3.23)$$

Если $T \ll T_F$ (или соответственно $k_B T \ll E_F$), то электронный газ называется вырожденным. Если же $T \gg T_F$ (т. е. $k_B T \gg E_F$), то электронный газ называется невырожденным.

3.5. КОЛИЧЕСТВО ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ИНТЕРВАЛЕ ОТ E ДО $E + dE$

Рассчитаем количество уровней энергии, приходящееся на интервал от E до $E + dE$. Для этого воспользуемся формулами (3.20) и (3.22). Объем бесконечно тонкого шарового слоя $\vec{k}$ -пространства равен

$$dV_{\vec{k}} = 4\pi k^2 dk, \quad (3.24)$$

где k – длина радиуса-вектора $\vec{k}$ -пространства.

Пусть $g_E(k)$ – это количество квантовых состояний в кристалле объемом V , приходящееся на единичный интервал длины радиуса-вектора $\vec{k}$. Тогда количество уровней энергии, приходящееся на этот шаровой слой, равно

$$g_E(k) dk = \frac{dV_{\vec{k}}}{\Delta k} = \frac{V k^2 dk}{2\pi^2}. \quad (3.25)$$

Выполним замену переменной $k \rightarrow E$. Введем очевидное соотношение

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (3.26)$$

Отсюда следует, что

$$p = \sqrt{2mE}. \quad (3.27)$$

Подстановка формул (3.22), (3.26) и (3.27) в выражение (3.25) дает искомую формулу для количества энергетических уровней в интервале от E до $E + dE$:

$$G_E(E) dE = \frac{V \sqrt{2m^3 E}}{2\pi^2 \hbar^3} dE. \quad (3.28)$$

Согласно принципу Паули, на каждом уровне могут находиться два электрона (один со спином «вверх», другой со спином «вниз»). Поэтому максимальное количество электронов, которое может иметь энергию в этом энергетическом интервале, определяется удвоенным выражением (3.28):

$$G(E)dE = \frac{V\sqrt{2m^3E}}{\pi^2\hbar^3}dE. \quad (3.29)$$

Разумеется, что и количество квантовых состояний, которое может иметь каждый электрон в интервале от E до $E + dE$, также определяется соотношением (3.29). $G(E)$ – это количество квантовых состояний в кристалле объемом V , приходящееся на единичный интервал энергии.

Теперь рассчитаем число различных квантовых состояний электрона $N(E)$ в диапазоне энергий от 0 до E . Для этого надо проинтегрировать в данном интервале соотношение (3.29):

$$N(E) = \int_0^E G(E) dE = \frac{V\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^E \sqrt{E} dE = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (3.30)$$

Функция $N(E)$ качественно представлена на рис. 3.4.

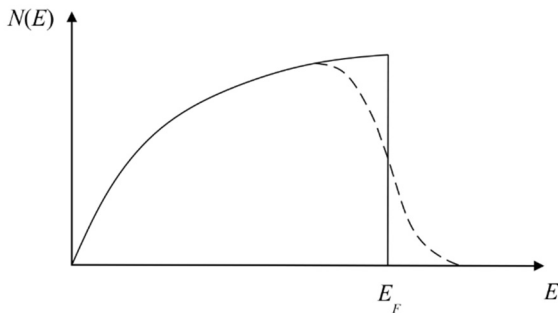


Рис. 3.4. Зависимость $N(E)$ от энергии и температуры

На рис. 3.4 сплошная прямая линия показывает зависимость при $T = 0$, пунктирная – при $T > 0$.

3.6. ПОНЯТИЕ ОБ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЕ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

Протекание тока через металл – это наложение медленного дрейфа в электрическом поле на быстрое (квантовое) движение. Поэтому скорость i -го электрона $\vec{v}_i$ можно представить в виде суммы двух скоростей: дрейфовой скорости $\vec{v}_i$, которая является скоростью упорядоченного движения i -го электрона под действием внешнего поля, и скорости быстрого хаотического движения этого электрона w_i ($|\vec{w}_i| \gg |\vec{u}_i|$). Таким образом, $\vec{v}_i = \vec{v}_i + \vec{w}_i$. Скорость электронного облака как целого называется дрейфовой скоростью электронного облака и равна

$$\vec{v} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{w}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i, \quad (3.31)$$

где N – количество электронов и учтено, что вследствие хаотичности движения электронов $\sum_{i=1}^N w_i = 0$.

Проанализируем движения электрона в периодическом поле кристалла. В этом разделе символом $\vec{E}$ обозначена напряженность электрического поля, поэтому обозначим энергию электрона символом E . Подставим в соотношение неопределенности $\Delta p_x \Delta x \sim \hbar$ выражение (3.22). В результате получаем соотношение неопределенности для волнового вектора и координаты:

$$\Delta k_x \Delta x \sim 1. \quad (3.32)$$

Разумеется, аналогичные соотношения можно записать и для координат y и z . Из соотношения неопределенности следует, что если волновой вектор $\vec{k}$ имеет точное значение ($\Delta k_x, \Delta k_y, \Delta k_z \rightarrow 0$), то координаты электрона в кристалле вообще не могут быть определены, поскольку

$$\Delta x \sim 1 / \Delta k_x, \quad (3.33)$$

а следовательно, $\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow \infty$). Для описания движения электрона в кристалле необходимо знать его скорость и ускорение. Чтобы имело смысл говорить об этих величинах, электрон должен быть достаточно

локализован в пространстве, т. е. необходимо, чтобы выполнялось условие $\Delta k_x, \Delta k_y, \Delta k_z > 0$ и Δx в соотношении (3.33) было меньше межатомного расстояния в кристалле.

Для простоты рассмотрим одномерную задачу движения свободной частицы (электрона) вдоль оси x . Пусть электрон локализован в области пространства Δx , тогда его волновой вектор лежит в интервале $k_0 - \Delta k \leq k \leq k_0 + \Delta k$. Здесь принято, что $\Delta k \sim 1/\Delta x$. В соответствии с принципом суперпозиции волновая функция электрона может быть представлена как наложение состояний вида

$$\psi(x, t) = \exp(k_x x - \omega t) \quad (3.34)$$

со значениями k_x , заключенными в интервале $k_0 - \Delta k \leq k \leq k_0 + \Delta k$:

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k_x) \exp(k_x x - \omega t) dk_x, \quad (3.35)$$

Выражение (3.35) описывает *волновой пакет* (группу волн). Циклическая частота является функцией k_x : $\omega = \omega(k_x)$. Разложим эту функцию в ряд Тейлора в окрестности точки k_0 :

$$\omega(k_x) = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk_x} \right|_{k_0} (k_x - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk_x^2} \right|_{k_0} (k_x - k_0)^2 + \dots \quad (3.36)$$

Ограничимся двумя первыми членами разложения (3.36) и примем, что коэффициент A в соотношении (3.35) слабо зависит от k_x и поэтому справедливо приближение $A(k_x) \approx A(k_0) = \text{const}$. Вынесем $A(k_0)$ за знак интеграла и подставим первые два члена разложения (3.36) в интеграл (3.35):

$$\psi(x, t) = A_0 \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} \exp \left[i \left(x - \left. \frac{d\omega}{dk_x} \right|_{k_0} t \right) \xi \right] d\xi, \quad (3.37)$$

где приняты следующие обозначения: $A_0 = A(k_0)$, $\omega_0 = \omega(k_0)$ и $\xi = k_x - k_0$. Взяв интеграл (3.37), получим

$$\psi(x, t) = 2A_0 \frac{\sin \left[\left(x - \frac{d\omega}{dk_x} \Big|_{k_0} t \right) \Delta k \right]}{x - \frac{d\omega}{dk_x} \Big|_{k_0} t} \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)]. \quad (3.38)$$

Вследствие малости Δk волновая функция представляет собой квазимонохроматическую волну $B(x, t) \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)]$ с медленно меняющейся амплитудой:

$$B(x, t) = 2A_0 \frac{\sin \left[\left(x - \frac{d\omega}{dk_x} \Big|_{k_0} t \right) \Delta k \right]}{x - \frac{d\omega}{dk_x} \Big|_{k_0} t}. \quad (3.39)$$

Максимум амплитуды находится в той точке, где знаменатель выражения (3.39) обращается в ноль, т. е. имеет координату

$$x = \frac{d\omega}{dk_x} \Big|_{k_0} t. \quad (3.40)$$

Примем за центр волнового пакета точку, в которой наблюдается максимум амплитуды $B(x, t)$. Тогда в соответствии с выражением (3.40) групповая скорость волнового пакета (скорость центра волнового пакета) равна

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk_x} \Big|_{k_0}. \quad (3.41)$$

Разумеется, что соотношение справедливо и для любого произвольного направления распространения волнового пакета, поэтому формулу (3.41) перепишем в более общем виде:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk}. \quad (3.42)$$

Энергия свободной частицы в нерелятивистской квантовой механике равна $E = p^2 / (2m)$. Подставляя сюда очевидные выражения $E = \hbar\omega$ и $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, получаем

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (3.43)$$

Теперь подставим равенство (3.43) в формулу (3.42). В результате $v_{\text{гр}}$ выразится как

$$v_{\text{гр}} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v. \quad (3.44)$$

Соотношение (3.44) показывает, что групповая скорость волнового пакета $v_{\text{гр}}$ совпадает со скоростью частицы v . Это еще одно проявление квантово-волнового дуализма.

Подействуем теперь на электрон внешним электрическим полем напряженностью $\vec{E}$. Сила, действующая со стороны электрического поля на электрон, равна $\vec{F}$. Работа dA , совершаемая этой силой за время dt , определяется выражением

$$dA = F v_{\text{гр}} dt = F \frac{dE}{\hbar dk} dt. \quad (3.45)$$

Здесь было использовано очевидное соотношение

$$v_{\text{гр}} = \frac{dE}{\hbar dk}. \quad (3.46)$$

Работа силы $\vec{F}$ идет на увеличение энергии электрона, поэтому $dA = dE$. После подстановки dE вместо dA в равенство (3.45) и несложных преобразований получаем

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar}. \quad (3.47)$$

Теперь выведем соотношение для ускорения электрона в кристалле. Для этого продифференцируем по времени групповую скорость (3.46):

$$\frac{d\vec{v}_{\text{гр}}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}. \quad (3.48)$$

Подстановка равенства (3.47) в соотношение (3.48) дает выражение для ускорения электрона:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \vec{F}. \quad (3.49)$$

Запишем рядом формулу второго закона Ньютона:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\vec{F}}{m}. \quad (3.50)$$

Сравнение формул (3.49) и (3.50) дает выражение для эффективной массы носителей заряда:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{(d^2 E / dk^2)}. \quad (3.51)$$

Взаимодействие с кристаллической решеткой дает силу «трения»

$$\vec{F}_{\text{тр}} = -r\vec{v}, \quad (3.52)$$

а электрическое поле действует на электрон с силой

$$\vec{F} = -e\vec{E}. \quad (3.53)$$

Уравнение движения принимает вид (второй закон Ньютона):

$$m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E} - r\vec{v}, \quad (3.54)$$

где m^* – эффективная масса электрона; $\vec{E}$ – напряженность электрического поля.

При отсутствии внешнего электрического поля ($\vec{E} = 0$) уравнение (3.54) имеет вид

$$m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = -r\vec{v}. \quad (3.55)$$

Решение уравнения (3.55) определяется соотношением

$$\vec{v}(t) = \vec{v}(0) \exp\left(-\frac{r}{m^*} t\right) = \vec{v}(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad (3.56)$$

где $\vec{v}(0)$ – значение дрейфовой скорости в момент выключения поля; τ – время релаксации.

Из (3.56) следует, что время релаксации равно

$$\tau = \frac{m^*}{r}. \quad (3.57)$$

Теперь представим формулу силы трения в виде $\vec{F}_{\text{тр}} = -(m^* / \tau)\vec{v}$. В установившемся режиме ($d\vec{v} / dt = 0$) уравнение (3.54) можно записать следующим образом:

$$-e\vec{E} - \frac{m^*}{\tau}\vec{v} = 0. \quad (3.58)$$

Отсюда получим

$$\vec{v} = -\frac{e\vec{E}\tau}{m^*}. \quad (3.59)$$

Установившаяся плотность тока $\vec{j}$ равна произведению $\vec{v}$, $-e$ и n :

$$\vec{j} = qn\vec{v}, \quad (3.60)$$

где q – заряд электрона; n – концентрация электронов. Учитывая, что в данном случае $q = -e$, получаем

$$\vec{j} = -\frac{e\vec{E}\tau}{m^*}(-e)n = \frac{ne^2\tau}{m^*}\vec{E}. \quad (3.61)$$

Таким образом, 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. В общем случае эффективная масса является тензором:

$$m_{ij}^* = \frac{\hbar^2}{(dE^2 / dk_i dk_j)} . \quad (3.62)$$

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Сравнить выражение (3.62) с классической формулой

$$\sigma = \frac{ne^2\tau'}{2m} . \quad (3.63)$$

Здесь τ' – среднее время свободного пробега; m – масса электрона, $\tau' \sim 1/\sqrt{T}$ (см. теорию Друде–Лоренца).

4. ПОЛУПРОВОДНИКИ

4.1. СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН ТВЕРДОГО ТЕЛА

Упрощенная структура энергетических зон твердого тела представлена на рис. 4.1. Разрешенные энергетические зоны обозначены прямоугольниками. Заполненные электронами энергетические зоны выделены серым цветом.

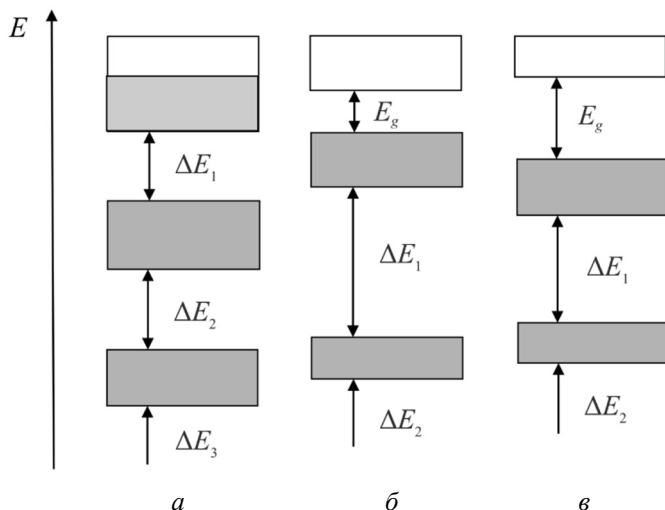


Рис. 4.1. Упрощенная структура энергетических зон
твердого тела:

a – металл; *б* – полупроводник; *в* – диэлектрик (изолятор)

Для металлов характерно то, что зона проводимости (верхняя зона на рис. 4.1, *а*) образуется путем наложения валентной зоны на следующую свободную зону, как это показано на рисунке, или за счет частичного заполнения валентной зоны. В обоих случаях зона проводимости не заполнена целиком даже при температуре 0 К. В полупроводниках свободная зона отделена от валентной зоны энергетическим барьером E_g , который равен ширине запрещенной зоны (рис. 4.1, *б*).

При температуре $T=0$ К валентная зона заполнена валентными электронами полностью – поэтому она и называется *валентной зоной*, а в свободной зоне нет носителей заряда. Это происходит потому, что при этой температуре у электронов недостаточно энергии, чтобы преодолеть энергетический барьер, которым является ширина запрещенной зоны E_g . С повышением температуры у электронов появляется дополнительная энергия $E \sim k_B T$, за счет которой они могут переходить в свободную зону. Этот переход и обуславливает наличие проводимости у беспримесных (собственных) полупроводников, поэтому рассматриваемая свободная зона называется *зоной проводимости*. Вероятность наличия электрона в зоне проводимости растет с увеличением температуры. Для того чтобы эта вероятность заметно отличалась от нуля уже при умеренных температурах, ширина запрещенной зоны E_g должна быть небольшой. Обычно принимают, что $E_g < 3$ эВ. Разумеется, это значение приблизительное. Диэлектрики (изоляторы) имеют настолько широкую запрещенную зону, что электроны не могут перейти в свободную зону (рис. 4.1, *в*), поэтому их проводимость чрезвычайно мала. Остальные зоны заполнены целиком электронами и не вносят вклад в проводимость твердых тел. Ниже мы будем рассматривать только те зоны, которые влияют на электрическую проводимость проводников и полупроводников. Для большинства материалов E_g незначительно уменьшается с температурой. Так, при 0 К ширина запрещенной зоны в кремнии и германии составляет 1,17 и 0,75 эВ соответственно. При 300 К эти величины равны 1,11 и 0,67 эВ соответственно.

4.2. СОБСТВЕННЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ

Различие диэлектриков и полупроводников заключается в ширине энергетической щели. Верхняя зона на рис. 4.2 недостижима для электронов валентной зоны диэлектрика из-за большой величины энергетической щели (ширины запрещенной зоны) E_g . Поэтому в диэлектриках ее называют свободной зоной, а не зоной проводимости. Самый нижний уровень энергии зоны проводимости E_c называют дном зоны проводимости, а самый высокий уровень энергии валентной зоны E_v — потолком валентной зоны (рис. 4.2). Энергия электронов E квазинепрерывна как в зоне проводимости, так и в валентной зоне и имеет разрыв в виде запрещенной зоны. В запрещенной зоне находится уровень Ферми, который мы пока не рассматриваем.

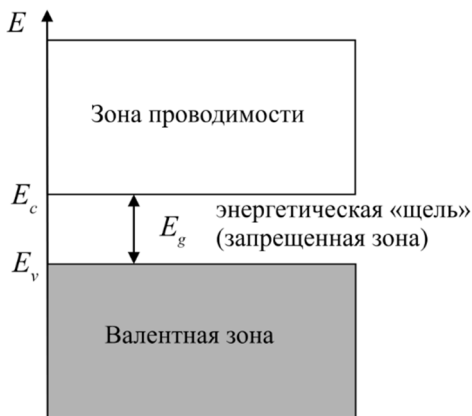
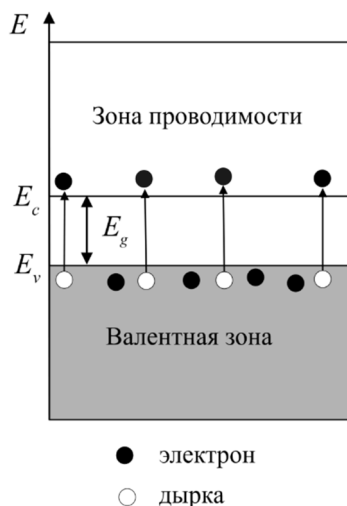


Рис. 4.2. Структура зон собственного полупроводника при $T = 0$ К

При температурах, отличных от 0 К, часть электронов из валентной зоны переходит в зону проводимости. На их месте в валентной зоне образуются так называемые дырки, т. е. места, не занятые электронами (рис. 4.3). Соседние валентные электроны могут переходить на свободное место (дырку). То место, из которого ушел электрон, теперь становится новым положением дырки в кристалле полупроводника. Таким способом дырка может свободно перемещаться

по всему полупроводнику. Дырки имеют определенную эффективную массу, энергию, импульс и набор квантовых чисел, характеризующих их состояние. Следовательно, дырки являются квазичастицами – переносчиками положительного заряда. Квазичастица-дырка является фермионом, как и электрон. Конечно, движение дырок обусловлено последовательным переносом связанных электронов в обратном направлении. Дырка как положительно заряженная квазичастица взаимодействует с отрицательно заряженным электроном проводимости, образуя аналог атома водорода – экситон. В экситоне, как и в атоме водорода, излучаются или поглощаются фотоны при переходе с одного энергетического уровня на другой.

Рис. 4.3. Структура зон собственного полупроводника при $T > 0$ К. Стрелками показаны переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости



Вероятность обнаружить электрон в состоянии с энергией E определяется распределением Ферми–Дирака:

$$f_e = \frac{1}{\exp\left[\frac{E - E_F}{k_B T}\right] + 1}. \quad (4.1)$$

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

в знаменателе выражения (4.1) можно пренебречь единицей, после чего получаем соотношение

$$f_c = \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right), \quad (4.2)$$

которое соответствует распределению Максвелла – Больцмана. Следует отметить, что для вырожденных полупроводников справедливо соотношение (4.1).

4.3. ПРИМЕСНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ

Примеси в полупроводниках создают дополнительные уровни энергии, которые могут находиться как в запрещенной, так и в разрешенной зоне. Для того чтобы получить необходимые свойства полупроводника, добавляют донорные или акцепторные примеси. К донорным примесям относятся, например, P, As и Sb. Они пятивалентны, поэтому в кристалле Ge или Si четыре электрона участвуют в образовании валентных связей, а пятый электрон легко отрывается от атома и переходит в зону проводимости. Уровни энергии, создаваемые такими примесями, называются донорными уровнями (E_d на рис. 4.4). Они находятся немного ниже зоны проводимости. Ширина энергетического зазора между дном зоны проводимости и донорным уровнем называется энергией связи электрона донорной примеси или энергией активации донорной примеси. Энергия связи электронов донорных примесей P в Si составляет примерно $E_{св} = E_c - E_d = 0,044$ эВ; P в Ge – примерно $E_{св} = E_c - E_d = 0,012$ эВ. Поскольку при 300 К тепловая энергия $k_B T \sim 0,025$ эВ, то такие примеси полностью ионизированы (вместо атома примеси остается положительно заряженный ион), и концентрация электронов в зоне проводимости практически совпадает с концентрацией примеси в полупроводнике. Такой полупроводник называется полупроводником *n*-типа (полупроводником с электронной проводимостью).

Элементы III группы периодической системы Д. И. Менделеева (B, Al, In, Ga) являются акцепторными примесями. Они трехвалентны и, чтобы образовать четвертую ковалентную связь с атомом Ge или Si, они заимствуют один электрон соответственно у атома Ge

или Si. В результате в валентной зоне примесного полупроводника образуется дырка.

Ширина энергетической щели между валентной зоной и акцепторным примесным уровнем называется энергией связи электронов акцепторной примеси или энергией активации акцепторной примеси (рис. 4.5).

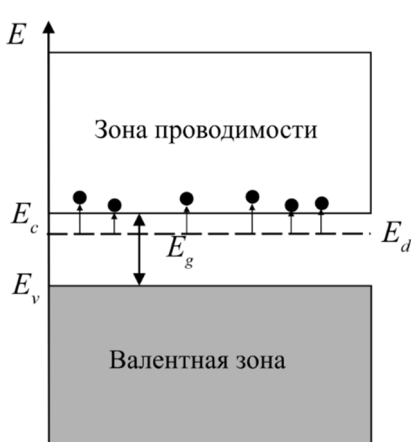


Рис. 4.4. Схема энергетических зон полупроводника n -типа

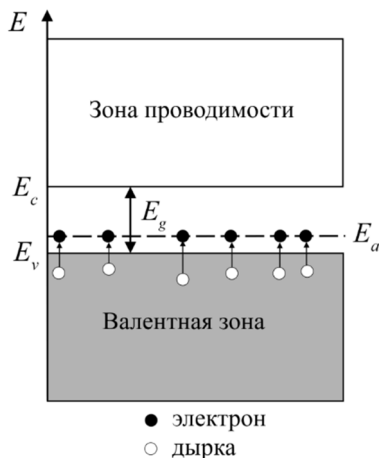


Рис. 4.5. Схема энергетических зон полупроводника p -типа

Энергия связи электронов акцепторных примесей В в Si составляет примерно $E_{\text{св}} = E_a - E_v = 0,046$ эВ; В в Ge – примерно $E_{\text{св}} = E_a - E_v = 0,01$ эВ. Поскольку при 300 К тепловая энергия $k_B T \sim 0,025$ эВ, то такие примеси полностью ионизированы (вместо атома примеси остается отрицательно заряженный ион), и концентрация дырок в валентной зоне практически равна концентрации акцепторной примеси в полупроводнике. Такой полупроводник называется полупроводником p -типа (полупроводником с дырочной проводимостью).

4.4. ДОНОРНЫЕ И АКЦЕПТОРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Германий и кремний имеют кристаллическую решетку алмаза. Каждый атом образует связи с четырьмя соседними атомами. Когда донором в германии или кремнии является атом фосфора, энергия связи электрона на доноре мала, а орбита связанного электрона велика по сравнению с межатомным расстоянием (рис. 4.6).

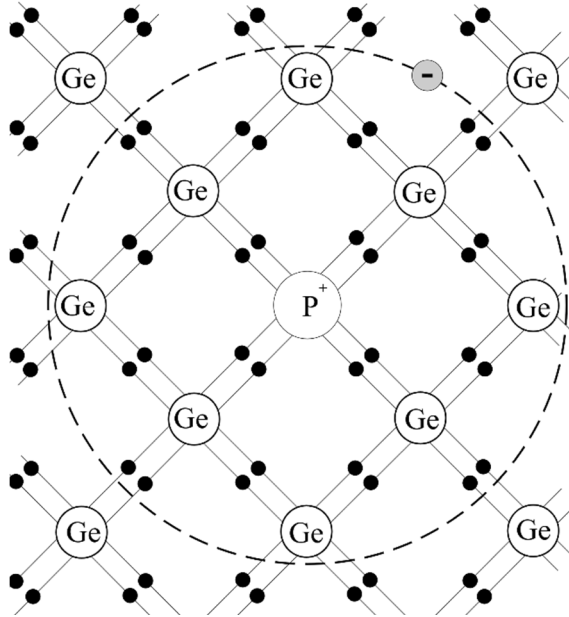


Рис. 4.6. Условное двумерное изображение части кристалла германия. Атом фосфора имеет один избыточный электрон, не участвующий в образовании ковалентной связи с германием. Донорный электрон движется по орбите с радиусом большим, чем межатомное расстояние

Электрон, связанный на доноре, занимает объем в реальном пространстве, который мал по сравнению с размером кристалла. В соответствии с соотношением неопределенности (3.32) эта степень локализации в реальном пространстве определяет область $\vec{k}$ -пространства,

для которой волновая функция электрона отлична от нуля. Поэтому связанное состояние электрона занимает конечную область $\vec{k}$ -пространства.

Поскольку орбита связанного состояния электрона велика по сравнению с межатомным расстоянием, то величина кулоновского притяжения между примесным центром и связанным электроном ослаблена макроскопической диэлектрической проницаемостью полупроводника ϵ . Исходя из этой упрощенной модели связанного состояния электрона примеси, Бете постулировал, что волновая функция донорного состояния может быть водородоподобной, видоизмененной только диэлектрической проницаемостью и заменой массы электрона на его эффективную массу (см. раздел 3.4). Очевидным преимуществом данной модели является то, что в рамках этой модели не требуется знание природы химической связи. Уравнение Шрёдингера для такого водородоподобного центра может быть записано в виде, подобном уравнению (1.33):

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \right) \psi = 0, \quad (4.3)$$

где m_e^* – эффективная масса электрона.

Квантовая механика и полуклассическая модель Бора (см. раздел 1.1) дают одни и те же значения для энергии связи основного состояния и «боровского радиуса» ($n=1$) для этого способа описания связанного состояния электрона примеси в кристалле полупроводника:

$$E_{\text{св}}(n) = \frac{e^2}{8\pi\epsilon\epsilon_0 r_n} = \frac{m_e^* e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon\epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2}; \quad (4.4)$$

$$r_n = \frac{4\pi n^2 \hbar^2 \epsilon\epsilon_0}{m_e^* e^2}. \quad (4.5)$$

Имеется также водородоподобная последовательность возбужденных (но не ионизованных) состояний, т. е. квантовое число n может принимать значения $n = 1, 2, \dots, \infty$.

На рис. 4.7 в условной форме изображен простейший вид акцепторной примеси замещения в германии. Атом бора занимает один из узлов кристаллической решетки германия. Атом бора имеет три валентных электрона, а атом германия – четыре. Чтобы образовать четвертую связь, атом бора захватил один электрон у соседних атомов. В результате образовалась квазичастица-дырка. Дырка движется по орбите с радиусом бóльшим, чем межатомное расстояние. Она движется по кристаллу, находясь под действием экранированного кулоновского притяжения центрального отрицательного заряда.

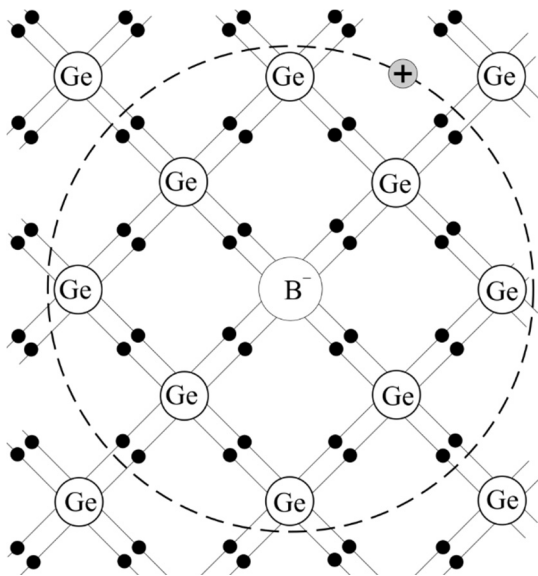


Рис. 4.7. Условное двумерное изображение части кристалла германия

Дырка может стать полностью нелокализованной, если сообщить ей энергию E_a . Нейтральное состояние акцепторной примеси мы представляем с помощью незанятого электронного состояния с энергией, лежащей на E_a выше потолка валентной зоны. Такое условное представление изображено на рис. 4.5. Энергия связи E_a и радиус r_a водородоподобного акцептора определяются теми же формулами (4.4) и (4.5), если заменить в них m_e^* на эффективную массу дырки m_h^* .

Разумеется, боровская модель связанного состояния электрона примеси является слишком упрощенной для примесных центров в большинстве полупроводников. Характер зонной структуры часто приводит к пространственному перераспределению связанного заряда и делает энергию связи более сложной, чем отражено в формулах (4.4) и (4.5). Водородоподобные состояния, вытекающие из уравнения (4.3), возможны, если эффективная масса является скаляром, не зависящим от энергии. Если же эффективная масса является тензором (3.62), то требуется решить уравнение Шрёдингера гораздо большей сложности. Как показывает опыт, почти все примесные атомы в полупроводниках имеют энергии связи основного состояния, превышающие значение, вычисленное с помощью метода эффективной массы. Добавка к энергии связи, определяемая конкретным видом примеси, называется химическим сдвигом. Причиной химического сдвига является отклонение от кулоновского вида (см. формулу (4.6)) потенциальной энергии электрона или дырки на малых расстояниях от иона примесного атома.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Имеется водородоподобный донор. Пусть на всех расстояниях от примесного центра r потенциальная энергия электрона, вращающегося вокруг этого центра, имеет вид

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r}. \quad (4.6)$$

1. Показать, что основное состояние (состояние с моментом импульса, равным $\hbar$) в модели Бора имеет в этом случае радиус, определяемый формулой (4.5).

2. Полупроводник теллурид кадмия имеет зону проводимости с одним минимумом в центре этой зоны. В окрестности этого минимума эффективная масса электрона равна $m_c^* = 0,11m_e$. Диэлектрическая проницаемость теллурида кадмия $\epsilon = 10,6$. Получить энергию связи донорной примеси $E_{\text{св}} = E_c - E_d$ и первый боровский радиус вращения примесного электрона r_1 .

Ответ: $E_{\text{св}} = 0,0133$ эВ; $r_1 = 51$ Å.

5. КВАНТОВЫЙ КОНФАЙНМЕНТ

Квантовый конфайнмент (от англ. *confinement* – удержание) – это удержание носителей заряда (дырок и электронов) внутри нанобъектов. Нанобъекты могут быть одномерные, двумерные и трехмерные. В настоящее время разработаны технологии, позволяющие получать нанобъекты различной формы и размера и тем самым управлять желаемыми квантово-механическими эффектами и точно контролировать транспортные свойства носителей заряда. Квантовый конфайнмент можно теоретически описать по крайней мере двумя способами: атомистическим и методом введения эффективной массы. В атомистическом методе микроскопическая структура кристаллической решетки учитывается явным включением в гамильтониан потенциала электрон-ионного взаимодействия. Вместо этого во втором методе взаимодействие электрона или дырки с ионами кристаллической решетки учитывается путем введения эффективной массы так, как это было сделано в разделе 3. Ниже будет использоваться метод введения эффективной массы.

5.1. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА ПРИ НАЛИЧИИ НАНОСТРУКТУР

Для определения волновых функций в наноструктурах надо задать потенциал удержания $U_c(\vec{r})$. В принципе, он должен как можно лучше описывать реальный потенциал, т. е. тот, которым на самом деле обладает данная наноструктура в приближении эффективной массы. Чтобы упростить задачу, примем в первом приближении, что наноструктура обладает потенциалом жестких стен:

$$U_c(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \text{внутри;} \\ +\infty, & \text{снаружи.} \end{cases} \quad (5.1)$$

Этот выбор соответствует нулевой вероятности нахождения частицы на границах наноструктуры. Возможны и другие варианты, например предположение о конечном потенциальном барьере на границе наноструктуры. В последнем случае есть вероятность проникновения носителей заряда через потенциальный барьер как за счет туннельного эффекта [1, раздел 5.6], так и за счет теплового движения. В первом случае энергия носителей заряда недостаточна для преодоления потенциального барьера. Во втором случае она хотя бы у части носителей заряда больше, чем высота потенциального барьера.

Определим граничное условие для электронной или дырочной волновой функции $\Psi(\vec{r})$, совместимое с выбранным потенциалом удержания (5.1). В этом случае граничное условие имеет вид

$$\Psi(\vec{r})\big|_{\vec{r}=\Gamma} = 0, \quad (5.2)$$

где Γ – координаты границы наноструктуры.

При этих граничных условиях необходимо решить уравнение Шрёдингера:

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - U_c(\vec{r})) \Psi(\vec{r}) = 0. \quad (5.3)$$

Наноструктуры часто классифицируют по их размерности. Далее описанный выше метод расчета применяется для определения электронной зонной структуры квантовых ям (2D), квантовых проволок (1D) и квантовых точек (0D) в приближении эффективной массы.

5.2. КВАНТОВЫЕ ЯМЫ

Квантовые ямы получают путем встраивания слоя материалов с более низкой запрещенной зоной (материал *A* на рис. 5.1) между двумя слоями материала с более высокой запрещенной зоной (материал *B*).

Рассогласование запрещенных зон служит потенциальной ямой для носителей заряда, т. е. образует потенциал удержания. В этом случае квантовый конфайнмент осуществляется в одном направлении, что приводит к двумерным наноструктурам.

Полезным параметром здесь является соотношение смещения зон в контактирующих полупроводниках, т. е. соотношение энергий зон

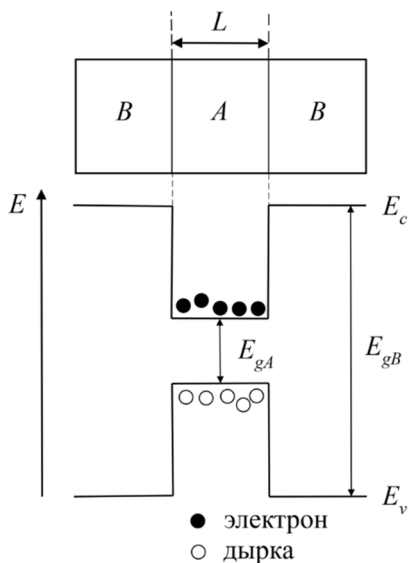
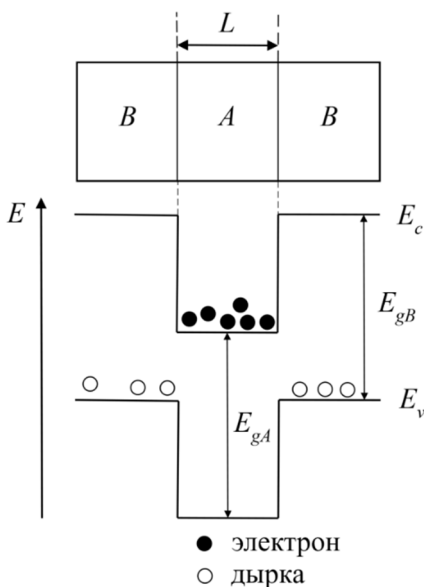


Рис. 5.1. Схематичное представление гетероструктуры первого типа. Полупроводник A контактирует с двух сторон с полупроводником B ; E_c – дно зоны проводимости; E_v – потолок валентной зоны; E_{gA} и E_{gB} – ширина запрещенной зоны в полупроводниках A и B соответственно

Рис. 5.2. Схематичное представление гетероструктуры второго типа. Полупроводник A контактирует с двух сторон с полупроводником B ; E_c – дно зоны проводимости; E_v – потолок валентной зоны; E_{gA} и E_{gB} – ширина запрещенной зоны в полупроводниках A и B соответственно



проводимости и энергий валентных зон. Могут возникнуть две ситуации: либо край зоны проводимости (валентной зоны) в одном материале ниже (выше) соответствующего края в другом (например, как на рис. 5.1), либо оба края зоны проводимости и валентной зоны в одном материале ниже соответствующих краев зоны в другом материале (рис. 5.2).

Первые называются гетероструктурами первого типа, где электроны и дырки могут одновременно находиться в одном материале, а вторые – гетероструктурами второго типа, где электроны и дырки пространственно разделены и находятся в разных материалах. Гетероструктуры первого типа включают соединения III-V, такие как GaAs/GaAlAs, GaSb/GaAlSb, InGaAs/InAlAs. Гетероструктурами второго типа являются InAs/AlGaSb, InAs/GaSb.

5.3. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА ДЛЯ НЕКОТОРЫХ НАНОСТРУКТУР

Рассмотрим решение уравнения Шрёдингера для бесконечной плоской плиты (квантовой ямы) толщиной L вдоль z -направления (рис. 5.3).

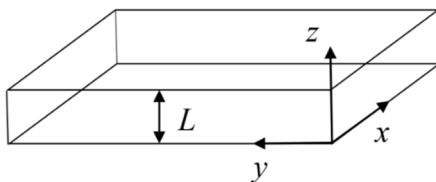


Рис. 5.3. Модель квантовой ямы в виде плиты. Предполагается, что вдоль осей x и y плита простирается до бесконечности

Применение описанной выше методики приводит к следующим собственным функциям и собственным значениям:

$$\Psi_n(x, y, z) = A \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} z\right) e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (5.4)$$

где A – константа нормировки; n – целые положительные числа.

В направлении оси z здесь имеется потенциал с бесконечно высокими стенками. Решение этой задачи уже рассматривалось в [1, формула (5.32)], и оно входит в виде содержащего синус сомножителя в выражение (5.4). Энергия имеет дискретную и непрерывную составляющую (рис. 5.4):

$$E_n(k_x, k_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} n^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2). \quad (5.5)$$

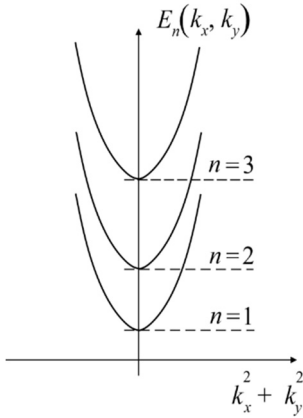


Рис. 5.4. Структура уровней энергии в квантовой яме

На рис. 5.4 параболические уровни энергии обусловлены свободным движением электронов вдоль осей x и y . Квантовый конфайнмент в направлении оси z приводит к появлению набора квантовых чисел n .

Таким образом, носители заряда движутся в направлениях x и y плиты как свободные частицы с эффективными массами. Удержание вдоль направления z порождает дискретную уровневую структуру (сравните с формулой (5.25) из [1]), соответствующую дискретным собственным значениям энергии. При расчетах было принято, что эффективная масса изотропна (т. е. не зависит от направления).

Квантовые проволоки – это одномерные наноструктуры, в которых квантовое удержание активно в двух разных направлениях, а третье остается свободным. Квантовые эффекты удержания зависят от формы проволоки и ее сечения, которое может быть квадратным, прямоугольным, круглым или другой формы. Применение описанного выше метода расчета к длинному круглому цилиндру, имеющему ось вдоль z -направления, дает следующие собственные функции и собственные значения энергии:

$$\Psi_n(\rho, z) = A \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_z z + m\phi)} J_m \left(\frac{\chi_{mp}}{R} \rho \right); \quad (5.6)$$

$$E_{mp}(k_z) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_z^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\chi_{mp}^2}{R^2}, \quad (5.7)$$

где A – нормировочная константа; R – радиус нанопроволоки; ρ – радиальная координата в плоскости X – Y ; J_m – m -я цилиндрическая функция Бесселя, χ_{mp} – ее p -й ноль.

Полученный энергетический спектр качественно подобен спектру квантовой ямы.

Квантовое удержание во всех направлениях приводит к образованию 0D-наноструктур, или квантовых точек. Простейшая ситуация возникает, когда квантовую точку можно смоделировать как сферическую с радиусом R . В этом случае волновая функция может быть выражена через произведение радиальной функции, т. е. сферической функции Бесселя $j_n(w)$ (здесь буквой w обозначен произвольный аргумент сферической функции Бесселя), на угловую функцию $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, которая задается сферическими гармониками и уже рассматривалась в разделе 1.6.2. Другими словами, решение уравнения Шрёдингера приводит к следующему выражению:

$$\Psi_{nlm} = A j_n \left(\frac{\chi_{nl} r}{R} \right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (5.8)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$; $l = 0, 1, 2, \dots$; $m = -l, \dots, 0, \dots, l$ – главные, орбитальные угловые и азимутальные квантовые числа углового момента.

Соответствующий энергетический спектр имеет вид

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \chi_{nl}^2}{2m^* R^2}, \quad (5.9)$$

где χ_{nl} – l -й ноль сферической функции Бесселя порядка n ; E_{nl} – энергия, обусловленная конфайнментом: она возникает из-за ограничения волновой функции внутри квантовой точки. Чем меньше размер точки, тем больше энергия удержания в соответствии с законом масштабирования R^2 .

Дискретный спектр энергии электронов таких наноструктур очень похож на спектр атомов и молекул. По этой причине квантовые точки также называют искусственными атомами.

Сегодня в лабораториях могут быть сконструированы квантовые точки различной формы, поэтому расчет энергии конфайнмента может быть непростой задачей в наноструктурах даже сравнительно несложной конфигурации. Например, в случае квантовых точек эллипсоидальной формы энергия конфайнмента оказывается больше, чем у соответствующей сферической точки с равным объемом. Кроме того, обнаруживается, что волновая функция локализована вдоль особых направлений.

6. ЗАСЕЛЕННОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В первой части пособия было показано, что для фермионов (к которым и относятся электроны) характерно распределение Ферми–Дирака. Поэтому вероятность обнаружить электрон в состоянии с энергией E задается формулой (4.1). В нормальных (не вырожденных и чистых бездефектных полупроводниках) в зоне проводимости $f_e \ll 1$, поэтому единицей в знаменателе выражения (4.1) можно пренебречь и пользоваться распределением Максвелла–Больцмана f_c (см. формулу (4.2)). В валентной зоне, наоборот, вероятность обнаружить электрон близка к единице ($f_e \approx 1$), поэтому

$$\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \ll 1, \quad (6.1)$$

и надо пользоваться распределением f_e при рассмотрении концентрации электронов в валентной зоне нормальных полупроводников.

Вероятность обнаружить дырку в валентной зоне нормального полупроводника определяется соотношением

$$f_h = 1 - f_e = \frac{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1} \approx \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right). \quad (6.2)$$

При выводе формулы (6.2) было учтено соотношение (6.1).

6.1. КОНЦЕНТРАЦИЯ СВОБОДНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДОВ В СОБСТВЕННОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Примем за начало отсчета энергий потолок валентной зоны. Поскольку отсчет энергии производится от потолка валентной зоны, то $E_c = E_g$, где E_g – ширина запрещенной зоны. В этом случае формула для импульса электрона в зоне проводимости определяется соотношением

$$p = \sqrt{2m_e^*(E - E_c)}, \quad (6.3)$$

где E_c – уровень энергии, соответствующий дну зоны проводимости (рис. 6.1); m_e^* – эффективная масса электрона, находящегося вблизи дна зоны проводимости (сравните формулы (3.27) и (6.3)).

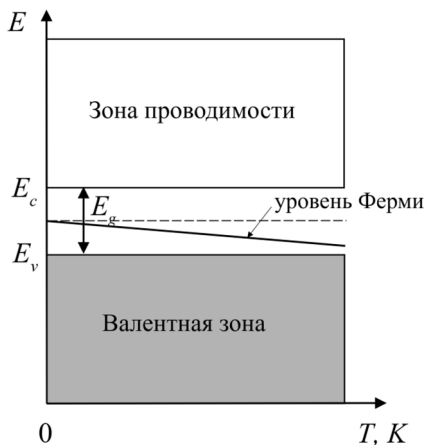


Рис. 6.1. Зависимость положения уровня Ферми в собственных полупроводниках от температуры

Проведя выкладки, аналогичные выкладкам при выводе формулы (3.29), получаем

$$G(E - E_c)dE = \frac{V \sqrt{2m_e^{*3}(E - E_c)}}{\pi^2 \hbar^3} dE. \quad (6.4)$$

Для концентрации свободных электронов имеем

$$n_e = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{+\infty} f_c G(E - E_c) dE = \frac{\sqrt{2m_e^{*3}}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_c}^{+\infty} e^{\frac{E_F - E}{k_B T}} \sqrt{E - E_c} dE. \quad (6.5)$$

Чтобы привести интеграл в правой части выражения (6.5) к табличному виду

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad (6.6)$$

сделаем в (6.5) замену переменной $x = (E - E_c)/(k_B T)$:

$$n_e = \frac{\sqrt{2m_e^{*3}} k_B^3 T^3}{\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}} dx = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}}. \quad (6.7)$$

В валентной зоне $E < 0$. Поэтому импульс дырки (см. формулу (3.27)) определяется соотношением

$$p = \sqrt{2m_h^*(-E)}, \quad (6.8)$$

а формула (3.29) для дырок имеет вид

$$G(-E)dE = \frac{V \sqrt{2m_h^{*3}(-E)}}{\pi^2 \hbar^3} dE. \quad (6.9)$$

Вероятность обнаружить дырку в состоянии с энергией E определяется согласно выражению (6.2); соответственно концентрация дырок определяется соотношением

$$n_h = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^0 f_h G(-E) dE = \frac{\sqrt{2m_h^{*3}}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^0 \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \sqrt{-E} dE. \quad (6.10)$$

Чтобы привести интеграл в правой части соотношения (6.10) к виду (6.6), сделаем замену переменной $x = -E/(k_B T)$:

$$n_h = \frac{\sqrt{2m_h^* k_B^3 T^3}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}} dx = 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{E_F}{k_B T} \right]. \quad (6.11)$$

В формулах (6.7) и (6.11) остается по-прежнему неизвестной энергия Ферми E_F . В соответствии с законом сохранения электрического заряда алгебраическая сумма зарядов электрически замкнутой системы сохраняется, поэтому справедливо условие электронейтральности для собственного полупроводника: количество дырок в валентной зоне n_h равно количеству электронов в зоне проводимости n_e . Это приводит к тому, что суммарный заряд кристалла полупроводника равен нулю. Отсюда следует, что

$$n_e^2 = n_h^2 = n_e n_h = 4 \left(m_e^* m_h^* \right)^{3/2} \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{6/2} \exp \left[-\frac{E_c}{k_B T} \right]. \quad (6.12)$$

Извлекая квадратный корень из обеих частей уравнения (6.12) и учитывая, что $E_c = E_g$, получаем

$$n_e = n_h = 2 \left(\frac{\sqrt{m_e^* m_h^*} \cdot k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{E_g}{2k_B T} \right]. \quad (6.13)$$

6.2. ПОЛОЖЕНИЕ УРОВНЯ ФЕРМИ В СОБСТВЕННОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Из условия электронейтральности следует, что количество отрицательно заряженных свободных электронов должно равняться количеству положительно заряженных дырок для того, чтобы суммарный заряд равнялся нулю, т. е. $n_e = n_h$. Отсюда следует соотношение

$$\ln n_e = \ln n_h. \quad (6.14)$$

Подставляя в левую и правую части равенства (6.14) соотношения (6.7) и (6.11) соответственно, после очевидных преобразований получаем

$$E_F = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_h^*}{m_e^*}. \quad (6.15)$$

Поскольку обычно $m_e^* > m_h^*$, то второе слагаемое в соотношении (6.15) отрицательное, поэтому с увеличением температуры уровень Ферми обычно приближается к потолку валентной зоны (см. рис. 6.1). При абсолютном нуле температуры или при выполнении равенства $m_e = m_h$ уровень Ферми находится в середине запрещенной зоны. Если $m_e < m_h$, то с повышением температуры уровень Ферми смещается ко дну зоны проводимости.

6.3. КОНЦЕНТРАЦИЯ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ n -ТИПА

Примем за начало отсчета энергии уровень донорных атомов (см. рис. 4.4). По аналогии с предыдущим разделом запишем, что концентрация электронов проводимости равна

$$n_e = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{\infty} f_e G(E - E_c) dE = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{(E_F - E_c)}{k_B T} \right], \quad (6.16)$$

где интегрирование проводится от дна зоны проводимости E_c .

С другой стороны, та же самая концентрация в соответствии с условием электронейтральности равна

$$n_e = n_0 [1 - f_e(0)] \approx n_0 \exp \left(-\frac{E_F}{k_B T} \right), \quad (6.17)$$

где n_0 – концентрация примесных атомов.

Поскольку энергия отсчитывается от донорного уровня энергии, то E_c равно энергии связи электрона донорной примеси: $E_{cb} = E_c$ (см. рис. 4.4). Перемножив уравнения (6.16) и (6.17), получим

$$n_e^2 = 2n_0 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{E_c}{k_B T} \right]. \quad (6.18)$$

Извлекая корень и учитывая, что в данном случае $E_{cb} = E_c$, получаем

$$n_e = \sqrt{2n_0} \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/4} \exp \left[-\frac{E_{cb}}{2k_B T} \right]. \quad (6.19)$$

6.4. ПОЛОЖЕНИЕ УРОВНЯ ФЕРМИ В ПРИМЕСНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ n -ТИПА

Точно так же, как было сделано в разделе 6.2, приравняем (6.16) и (6.17) и прологарифмируем обе части получившегося уравнения:

$$\ln n_0 - \frac{E_F}{k_B T} = \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} \ln n_0 + \frac{3}{4} \ln \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right) - \frac{E_{cb}}{2k_B T}. \quad (6.20)$$

После элементарных преобразований получаем выражение для уровня Ферми:

$$E_F = \frac{E_{cb}}{2} - \frac{k_B T}{2} \ln \left[\frac{2}{n_0} \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right]. \quad (6.21)$$

Теперь определим положение уровня Ферми в примесном полупроводнике n -типа при $T \rightarrow 0$ К:

$$\lim_{T \rightarrow 0} E_F = \frac{E_{cb}}{2} - \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ \frac{k_B T}{2} \ln \left[\frac{2}{n_0} \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \right\} = \frac{E_{cb}}{2}. \quad (6.22)$$

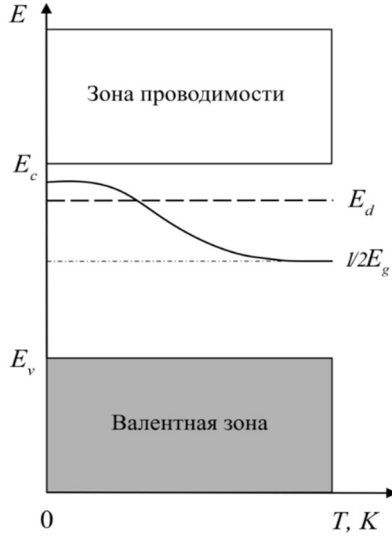


Рис. 6.2. Зависимость положения уровня Ферми в примесных полупроводниках n -типа от температуры

Отсюда видно, что при $T \rightarrow 0$ уровень Ферми $E_F \rightarrow E_{св}/2$, т. е. находится в середине между дном зоны проводимости и донорным уровнем энергии (рис. 6.2).

6.5. КОНЦЕНТРАЦИЯ ДЫРОК В ПОЛУПРОВОДНИКЕ p -ТИПА

Примем за начало отсчета потолок валентной зоны (см. рис. 4.5). При таком выборе начала отсчета энергии $E_v = 0$. Для расчета воспользуемся формулами (6.8) и (6.9). Тогда концентрация дырок в валентной зоне определяется соотношением (6.11). В то же время концентрация дырок может быть выражена через концентрацию акцепторных примесей:

$$n_h = n_0 f_e(E_a) = \frac{n_0}{\exp\left[\frac{E_a - E_F}{k_B T}\right] + 1} \approx n_0 \exp\left(\frac{E_F - E_a}{k_B T}\right). \quad (6.23)$$

Перемножая формулы (6.11) и (6.23) и учитывая, что в данном случае $E_{\text{св}} = E_a$, получаем

$$n_h^2 = 2n_0 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{E_{\text{св}}}{k_B T} \right). \quad (6.24)$$

Извлекая квадратный корень из обеих частей уравнения (6.24), имеем концентрацию дырок в валентной зоне в виде

$$n_h = \sqrt{2n_0} \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/4} \exp \left(-\frac{E_{\text{св}}}{2k_B T} \right). \quad (6.25)$$

6.6. ПОЛОЖЕНИЕ УРОВНЯ ФЕРМИ В ПРИМЕСНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ p -ТИПА

Как и в предыдущих разделах, чтобы найти положение уровня Ферми, надо приравнять правые части соотношений (6.11) и (6.23). После логарифмирования обеих частей получившегося уравнения получим

$$\ln \left[2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] - \frac{E_F}{k_B T} = \ln n_0 + \frac{E_F - E_a}{k_B T}. \quad (6.26)$$

Очевидные преобразования приводят к следующему результату:

$$E_F = \frac{E_{\text{св}}}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left[\frac{2}{n_0} \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right]. \quad (6.27)$$

Здесь учтено, что $E_{\text{св}} = E_a$.

Определим положение уровня Ферми в примесном полупроводнике p -типа при $T \rightarrow 0$ К:

$$\lim_{T \rightarrow 0} E_F = \frac{E_{\text{св}}}{2} + \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ \frac{k_B T}{2} \ln \left[\frac{2}{n_0} \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \right\} = \frac{E_{\text{св}}}{2}. \quad (6.28)$$

Отсюда видно, что при $T \rightarrow 0$ уровень Ферми $E_F \rightarrow E_{\text{св}}/2$, т. е. находится в середине между потолком валентной зоны и акцепторным примесным уровнем энергии (рис. 6.3).

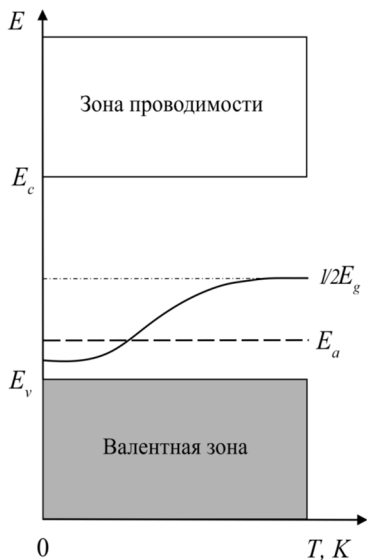


Рис. 6.3. Зависимость положения уровня Ферми в примесных полупроводниках p -типа от температуры

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

1. Проведя подробно все выкладки, получить соотношения (6.16) и (6.17).
2. Обосновать соотношение (6.23).

6.7. ЗАВИСИМОСТЬ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОЛОЖЕНИЯ УРОВНЯ ФЕРМИ И КОНЦЕНТРАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Легко видеть, что представленные на рис. 6.2 и 6.3 зависимости положения уровня Ферми от температуры намного сложнее, чем можно было бы ожидать, исходя из соотношений (6.21) и (6.27).

Это обусловлено тем, что энергия связи «избыточных» электронов и дырок примесных атомов мала до такой степени, что уже при температуре выше 300 К почти все примесные атомы ионизированы. Это явление называется истощением примесных уровней. Выделим три области температур: область низких температур, область истощения примесей и область высоких температур. В области низких температур выполняется соотношение

$$k_B T \ll E_g, \quad (6.29)$$

поэтому тепловой энергии недостаточно для того, чтобы перебросить электроны из валентной зоны в зону проводимости. Если в этой области температур тепловой энергии все же достаточно для переброски части электронов с донорных уровней в зону проводимости или части дырок с акцепторных уровней в валентную зону, то преобладает примесная проводимость (см. рис. 4.4 и 4.5). В этой области расчет концентрации носителей заряда и положения уровня Ферми следует проводить в рамках теории, представленной в разделах 6.4–6.6.

С повышением температуры увеличивается количество ионизированных примесных атомов. Наконец, при некоторой температуре T_s почти все примесные атомы оказываются ионизированы, т. е. наступает истощение примесей. Температура истощения примесей тем выше, чем выше энергия активации примесей и выше концентрация примесных атомов. При дальнейшем повышении температуры концентрация свободных носителей заряда будет почти постоянной, пока выполняется соотношение (6.29). Затем вклад собственной проводимости будет расти за счет перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости. Температуру, при которой собственная проводимость начнет преобладать над примесной, обозначим T_i . При постепенном переходе от примесной проводимости к собственной проводимости уровень Ферми смещается к положению, соответствующему собственной проводимости – середине запрещенной зоны (рис. 6.2 и 6.3). Следует отметить, что, например, при выполнении условия

$$T_s \approx T_i \quad (6.30)$$

область истощения примеси может быть «скрыта» большим вкладом собственной проводимости.

7. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

В этом разделе мы ознакомимся с кинетическим уравнением Больцмана. Для этого воспользуемся шестимерным μ -пространством, только вместо импульса $\vec{p}$ возьмем скорость $\vec{v}$. По определению для функции распределения справедливо соотношение

$$f(\vec{r}, \vec{v}) d\vec{r} d\vec{v} = \text{числу частиц в объеме } d\vec{r} d\vec{v}. \quad (7.1)$$

Скорость изменения этой функции со временем df/dt определяется перемещением частиц и их столкновениями:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{перем}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}}. \quad (7.2)$$

Пусть число частиц сохраняется. В противном случае надо в правую часть уравнения (7.2) добавить члены, учитывающие изменение количества частиц (например, учесть рекомбинацию электронов и дырок в полупроводнике). Если следовать в фазовом пространстве вдоль линии тока и не учитывать столкновения, то получаем

$$f(t + dt, \vec{r} + d\vec{r}, \vec{v} + d\vec{v}) = f(t, \vec{r}, \vec{v}). \quad (7.3)$$

Если функция распределения изменяется с течением времени из-за столкновений, то с учетом столкновений получаем

$$f(t + dt, \vec{r} + d\vec{r}, \vec{v} + d\vec{v}) - f(t, \vec{r}, \vec{v}) = dt \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}}. \quad (7.4)$$

Здесь правая часть определяет влияние столкновений. Таким образом,

$$dt \frac{\partial f}{\partial t} + d\vec{r} \text{grad}_{\vec{r}} f + d\vec{v} \text{grad}_{\vec{v}} f = dt \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}}. \quad (7.5)$$

7.1. УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА В ОБЩЕМ ВИДЕ

Обозначая ускорение $d\vec{v}/dt$ через $\vec{\alpha}$, запишем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \operatorname{grad}_{\vec{r}} f + \vec{\alpha} \operatorname{grad}_{\vec{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}}. \quad (7.6)$$

Ускорение можно выразить через внешнюю силу, действующую на частицу.

Рассмотрим уравнение переноса Больцмана в приближении времени релаксации. По определению $\partial f_0 / \partial t = 0$, поэтому

$$\frac{\partial (f - f_0)}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (7.7)$$

где f_0 – функция распределения в тепловом равновесии. Решение этого уравнения имеет вид

$$(f - f_0)_t = (f - f_0)_{t=0} \exp(-t/\tau). \quad (7.8)$$

Подставляя (7.8) в правую часть уравнения (7.6), получаем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \operatorname{grad}_{\vec{r}} f + \vec{\alpha} \operatorname{grad}_{\vec{v}} f = -\frac{f - f_0}{\tau}. \quad (7.9)$$

В стационарном состоянии $\partial f / \partial t = 0$. Таким образом, член, ответственный за столкновения в приближении времени релаксации, имеет вид

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (7.10)$$

где f_0 – функция распределения в тепловом равновесии; τ – время релаксации.

Для многих задач можно приближенно ввести время релаксации $\tau(\vec{r}, \vec{v})$.

Равновесное состояние электронного газа в отсутствие электрического поля описывается равновесными функциями распределения, например функцией распределения Ферми–Дирака.

7.2. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Пусть в образце в направлении x приложено электрическое поле напряженностью $\vec{E}$ и имеется температурный градиент $\partial\theta/\partial x$. Здесь $\theta = k_B T$.

Ограничимся стационарным случаем $\partial f / \partial t = 0$. Тогда для частицы с зарядом q и массой m имеем

$$\frac{qE}{m} \frac{\partial f}{\partial u} + u \frac{\partial f}{\partial x} = - \frac{f - f_0}{\tau}. \quad (7.11)$$

Здесь ускорение равно $\alpha = \frac{qE}{m}$.

Уравнение (7.11) можно переписать в виде

$$f = f_0 - \tau \left(\frac{qE}{m} \frac{\partial f}{\partial u} + u \frac{\partial f}{\partial x} \right). \quad (7.12)$$

Здесь $v_x = u$. В первом приближении в правой части выражения (7.12) f можно заменить на f_0 :

$$f = f_0 - \tau \left(\frac{qE}{m} \frac{\partial f_0}{\partial u} + u \frac{\partial f_0}{\partial x} \right). \quad (7.13)$$

Функция f_0 зависит от энергии частицы E , химического потенциала μ и температуры θ . Энергия частицы в направлении x зависит от ее скорости u : $E = mu^2 / 2$. Выпишем частные производные:

$$\frac{\partial f_0}{\partial x} = \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial x} + \frac{\partial f_0}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x}; \quad (7.14)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial u} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial u} = mu \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (7.15)$$

Обычно электропроводность определяется при дополнительных условиях отсутствия градиентов температуры и концентрации:

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \text{ и } \frac{\partial n}{\partial x} = 0, \quad (7.16)$$

где n – концентрация носителей заряда.

Тогда $\partial f_0 / \partial x = 0$, и уравнение (7.13) сводится к соотношению

$$f = f_0 - \tau q E u \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (7.17)$$

7.3. ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

Плотность электрического тока для частиц с зарядом q определяется соотношением

$$j_q = \int q u f d\vec{v} = -\tau q^2 E \int u^2 \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) d\vec{v}. \quad (7.18)$$

Здесь учтено, что поскольку f_0 – четная функция скорости, то $\int u f_0 d\vec{v} = 0$. В случае распределения Максвелла

$$f_0 = n \left(\frac{m}{2\pi\theta} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{mv^2}{2\theta} \right) \quad (7.19)$$

имеем, что

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{1}{\theta} f_0. \quad (7.20)$$

Подстановка выражения (7.20) в формулу (7.18) дает

$$j_q = \frac{\tau q^2 E}{\theta} \int u^2 f_0 d\vec{v}. \quad (7.21)$$

Средняя кинетическая энергия движения в x -направлении равна

$$\frac{1}{2} m \int u^2 f_0 d\vec{v} = \frac{1}{2} n \theta, \quad (7.22)$$

поэтому

$$j_q = \frac{nq^2 \tau}{m} E. \quad (7.23)$$

По определению удельная электрическая проводимость равна

$$\sigma = j_q / E, \quad (7.24)$$

отсюда для удельной электрической проводимости получаем

$$\sigma = \frac{nq^2 \tau}{m}. \quad (7.25)$$

7.4. ДРЕЙФОВАЯ СКОРОСТЬ И ПОДВИЖНОСТЬ

С другой стороны, легко получить выражение

$$j_q = q n v_d. \quad (7.26)$$

Здесь v_d – средняя дрейфовая скорость носителей заряда.

Из формул (7.23) и (7.26) следует, что

$$\bar{v}_d = \frac{q \vec{E} \tau}{m}. \quad (7.27)$$

Отношение v_d к E называют подвижностью носителей:

$$b = \frac{v_d}{E} = \frac{|q| \tau}{m}, \quad (7.28)$$

где b – подвижность носителей заряда, $\text{м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.

При таком определении подвижности получаем, что для электронов и для дырок $b > 0$. В проводимость полупроводников вносят вклад как электроны, так и дырки:

$$\sigma = n_e |q_e| b_e + n_h q_h b_h, \quad (7.29)$$

где b_e и b_h – подвижность электронов и дырок соответственно; $q_e = -e$ и $q_h = e$ – заряд электрона и дырки соответственно; e – элементарный заряд.

В анизотропной среде подвижность зависит от направления движения носителей заряда. В этом случае связь компонентов вектора напряженности электрического поля E_j с компонентами вектора дрейфовой скорости v_{di} имеет тензорный характер и выражается следующими соотношениями:

$$v_{dx} = b_{xx} E_x + b_{xy} E_y + b_{xz} E_z,$$

$$v_{dy} = b_{yx} E_x + b_{yy} E_y + b_{yz} E_z,$$

$$v_{dz} = b_{zx} E_x + b_{zy} E_y + b_{zz} E_z,$$

где b_{ij} – тензор подвижности носителей заряда ($i, j = x, y, z$).

Значение подвижности для электроники заключается, например, в том, что она определяет скорость перемещения носителей заряда в электрическом поле. В свою очередь, скорость перемещения носителей заряда влияет на быстродействие приборов, поэтому на СВЧ-приборах применяют полупроводники с повышенной подвижностью носителей заряда.

7.5. ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ И ДЛИНА СВОБОДНОГО ПРОБЕГА

Выключим электрическое поле. Исходя из уравнения (7.11), получим уравнение перехода электронного газа в равновесное состояние – процесс его релаксации:

$$\frac{dv_d(t)}{dt} = -\frac{v_d(t)}{\tau}. \quad (7.30)$$

Интегрируя уравнение (7.30), находим

$$v_d(t) = v_0 e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (7.31)$$

Из этого уравнения следует, что за время τ дрейфовая скорость уменьшается в $e \approx 2,7$ раза. Это время называется временем релаксации. Для чистых металлов $\tau \approx 10^{-14}$ с.

Средний отрезок пути λ , который проходит электрон между двумя последовательными рассеяниями, называется *длиной свободного пробега*. За время релаксации τ электрон успевает претерпеть в среднем v рассеяний, поэтому вводят *среднюю транспортную длину свободного пробега* L :

$$L = \lambda v = v\tau. \quad (7.32)$$

Отсюда следует, что

$$\tau = \frac{\lambda v}{v}. \quad (7.33)$$

Таким образом, изучив настоящее пособие, мы приступили к изучению очень интересного и перспективного в плане практических приложений раздела физики твердого тела – физики полупроводников. В качестве инструментов для описания физических свойств полупроводников использовались методы квантовой механики и статистической физики. Было показано, что при переходе от макроскопического описания к описанию наноструктур наблюдаются новые физические явления, которые в физике твердого тела называются размерными эффектами. В следующей части конспекта лекций будут рассмотрены явления переноса в полупроводниковых материалах и влияние на них внешних электрических и магнитных полей.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Чернышев А. П.* Введение в физику твердого тела и нанофизику. Специальный курс физики. Конспект лекций : учеб. пособие / А. П. Чернышев. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2019. – 88 с.
2. *Иродов И. Е.* Задачи по квантовой физике / И. Е. Иродов. – 3-е изд. – Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 215 с.
3. *Блейкмор Дж.* Физика твердого тела : пер. с англ. / Дж. Блейкмор. – Москва : Мир, 1988. – 608 с.
4. *Ландау Л. Д.* Теоретическая физика : учеб. пособие для вузов. В 10 т. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Наука, 1989. – 768 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Квантовая теория атома водорода.....	3
1.1. Боровская теория атома водорода	3
1.2. Постоянная Ридберга.....	6
1.3. Спектры атома водорода	8
1.4. Правило квантования Бора–Зоммерфельда	10
Задача для самопроверки	11
1.5. Атом водорода и уравнение Шрёдингера.....	12
1.6. Орбитальный момент импульса (угловой момент) электрона.....	14
1.6.1. Магнитное квантовое число.....	14
1.6.2. Квантование квадрата момента импульса	15
Задача для самопроверки	17
1.7. Спин и спиновое квантовое число.....	17
1.8. Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода.....	18
Задача для самопроверки	19
1.9. Полный угловой момент	20
Задача для самопроверки	20
2. Принцип Паули и многоэлектронные атомы.....	21
2.1. Тождественность одинаковых частиц.....	21
2.2. Бозоны и фермионы.....	21
2.3. Принцип Паули	22
Задача для самопроверки	23
2.4. Многоэлектронные атомы.....	23
2.5. Механический момент многоэлектронного атома.....	24
Задача для самопроверки	25

3. Металлы и полупроводники	26
3.1. Свойства металлов.....	27
3.2. Квантовая теория свободных электронов в металле. Электронный газ	30
3.3. Периодичность кристаллической структуры и модель независимых электронов	30
3.3.1. Теорема Блоха (формулировка).....	31
3.3.2. Объем $\vec{k}$ -пространства, приходящийся на одно разрешенное значение $\vec{k}$	32
3.4. Поверхность Ферми.....	34
3.5. Количество электронных состояний в интервале от E до $E + DE$	35
3.6. Понятие об эффективной массе носителей заряда.....	37
Задача для самопроверки	43
4. Полупроводники	44
4.1. Структура энергетических зон твердого тела	44
4.2. Собственные полупроводники.....	46
4.3. Примесные полупроводники	48
4.4. Донорные и акцепторные состояния.....	50
Задача для самопроверки	53
5. Квантовый конфайнмент	54
5.1. Уравнение Шрёдингера при наличии наноструктур	54
5.2. Квантовые ямы.....	55
5.3. Решение уравнения Шрёдингера для некоторых наноструктур.....	57
6. Заселенность энергетических уровней в полупроводниках	61
6.1. Концентрация свободных носителей зарядов в собственном полупроводнике	62
6.2. Положение уровня Ферми в собственном полупроводнике	64
6.3. Концентрация свободных электронов в полупроводнике n -типа.....	65
6.4. Положение уровня Ферми в примесном полупроводнике n -типа	66
6.5. Концентрация дырок в полупроводнике p -типа.....	67
6.6. Положение уровня Ферми в примесном полупроводнике p -типа	68

Задача для самопроверки	69
6.7. Зависимость от температуры положения уровня Ферми и концентрации носителей заряда в примесных полупроводниках	69
7. Кинетическое уравнение Больцмана	71
7.. Уравнение Больцмана в общем виде.....	72
7.2. Электропроводность электронного газа	73
7.3. Плотность электрического тока.....	74
7.4. Дрейфовая скорость и подвижность	75
7.5. Время релаксации и длина свободного пробега.....	76
Библиографический список	78

Чернышев Альфред Петрович

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И НАНОФИЗИКУ

СПЕЦИАЛЬНЫЙ КУРС ФИЗИКИ

КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

Учебное пособие

Редактор *Е.Е. Татарникова*
Выпускающий редактор *И.П. Брованова*
Корректор *И.Е. Семенова*
Дизайн обложки *А.В. Ладыжская*
Компьютерная верстка *Л.А. Веселовская*

Налоговая льгота – Общероссийский классификатор продукции
Издание соответствует коду 95 3000 ОК 005-93 (ОКП)

Подписано в печать 12.05.2021. Формат 60 × 84 1/16. Бумага офсетная. Тираж 50 экз.
Уч.-изд. л. 4,88. Печ. л. 5,25. Изд. № 11. Заказ № 535. Цена договорная

Отпечатано в типографии
Новосибирского государственного технического университета
630073, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20