Презентация на тему: электроны в кристаллах

ПОДГОТОВИЛ: СТУДЕНТ ГРУППЫ РТ-11

ДМИТРИЕВ ИЛЬЯ

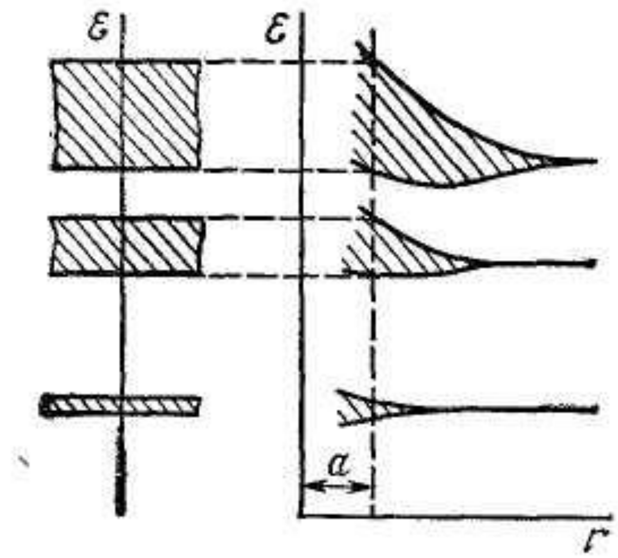
ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Одноэлектронное приближение **при котором вместо взаимодействия данного электрона с остальными электронами по отдельности рассматривается его движение в некотором результирующем (*самосогласованном*) поле усредненного пространственного заряда остальных электронов**

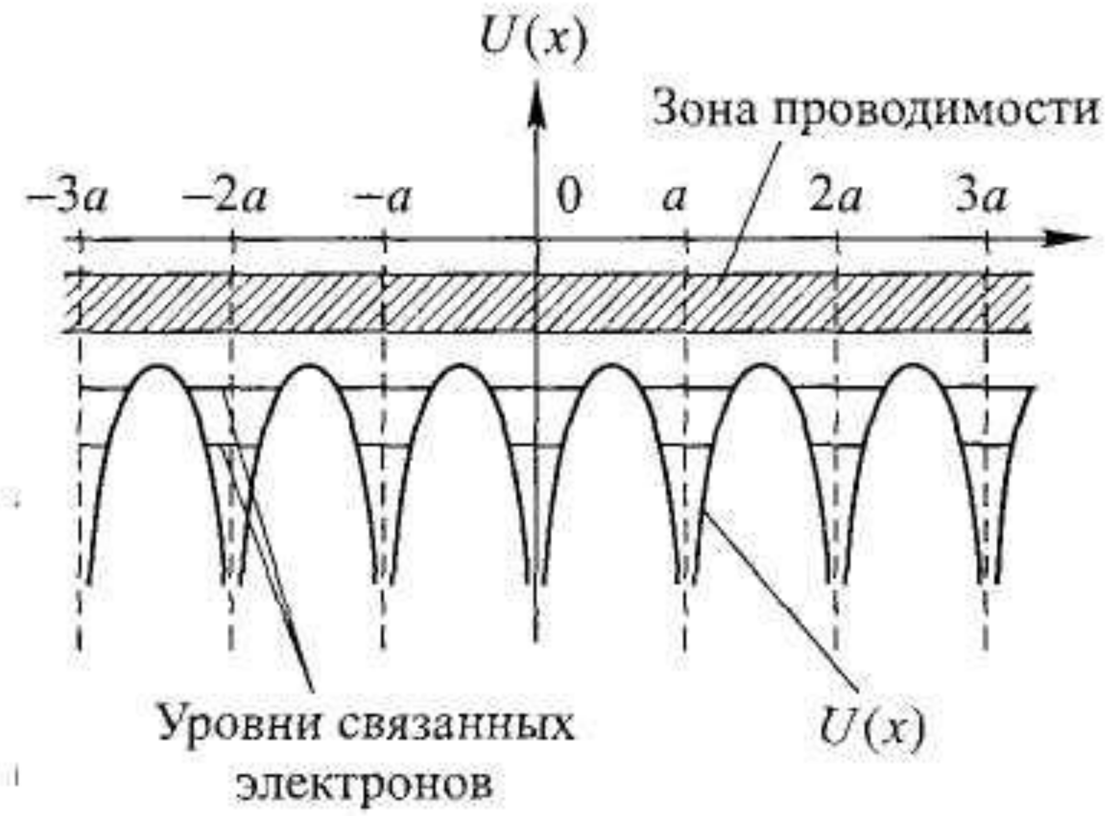
$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \left(W_p + W_e\right)\right]\Psi = 0$$

В *приближении сильной связи* предполагается, что во всем объеме кристалла существует сильно изменяющееся потенциальное поле

$$W_p(r) = W_a + \Delta W(r)$$



ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ



Разрешенной зоной называется интервал значений энергии, которой может обладать электрон в кристалле

Запрещенные зоны это энергетические промежутки, отделяющие разрешенные зоны друг от друга

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Свойство 1. Число квантовых состояний в разрешенной зоне равно кратности вырождения атомного уровня энергии, из которого возникла зона, умноженное на полное число атомов в кристалле

Свойство 2. Электроны являются фермионами и подчиняются принципу Паули, два и более тождественных фермиона (частицы с полуцелым спином) не могут одновременно находиться в одном и том же квантовом состоянии, поэтому число электронов в разрешенной зоне не может превзойти числа имеющихся в нем состояний, называемых вакансиями.

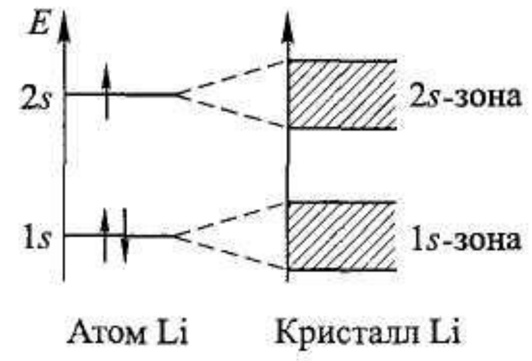
Свойство 3. Низко расположенные уровни образуют узкие зоны, а высоко расположенные – широкие.

Свойство 4. носителями заряда, создающими ток в кристалле могут быть только электроны из обобществленной, частично заполненной зоны. (проводимости)
https://www.youtube.com/watch?v=qD7eLEvMHVI

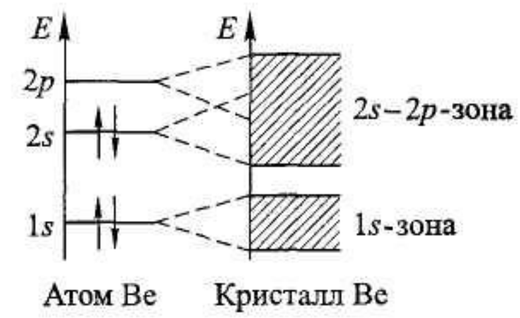
ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Зонная структура некоторых кристаллических проводников и изоляторов

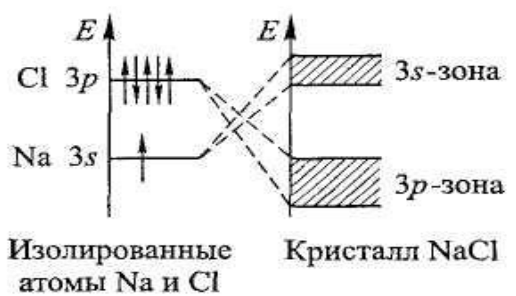
Пример 1. Кристаллы одновалентных химических элементов лития, натрия, калия, меди (проводники) 1s 2 2s 1



Пример 2. Кристаллы двухвалентных химических элементов бериллия, магния (проводники)
$1s^2 2s^2$

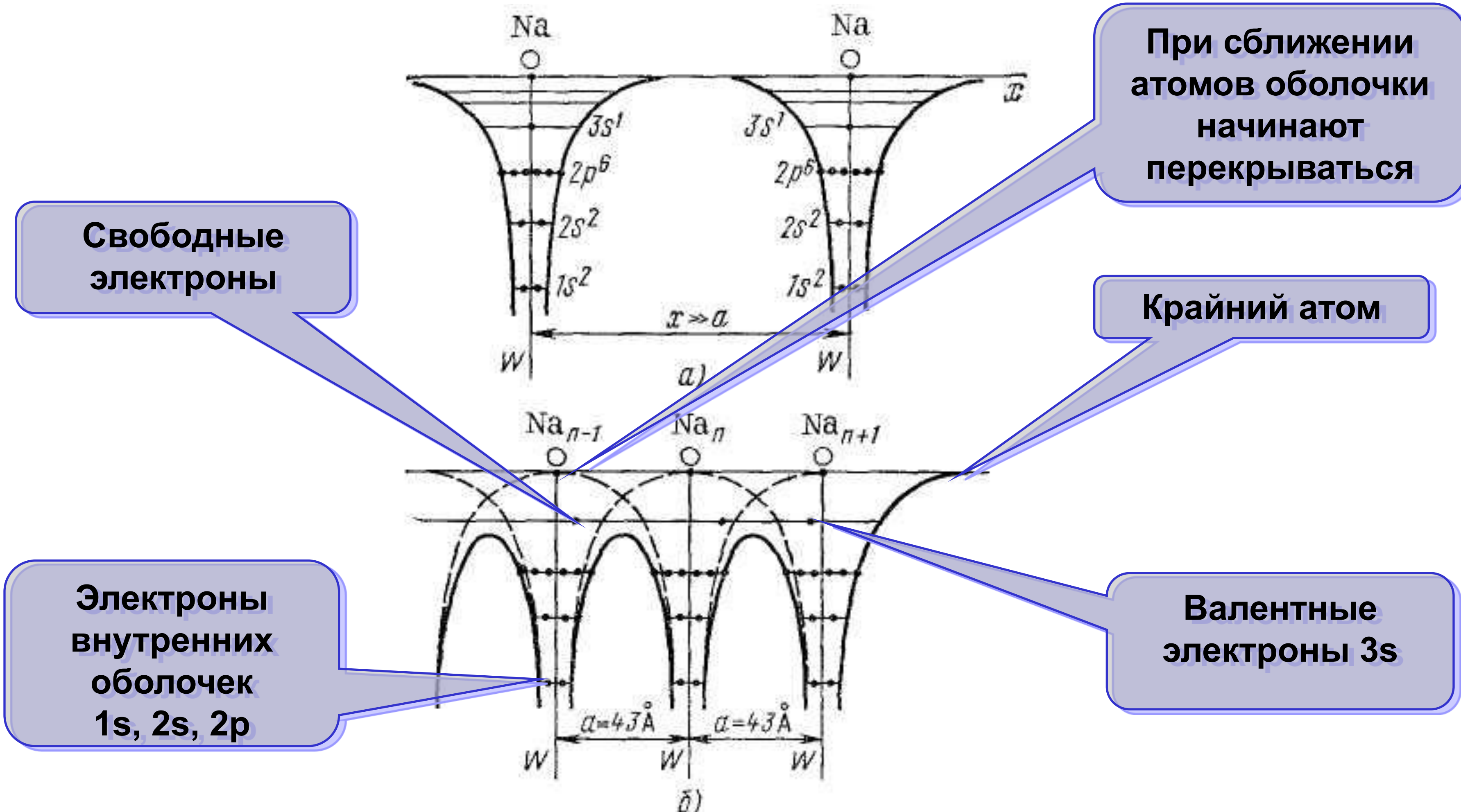


Пример 3. Кристалл поваренной соли (изолятор)
Натрий $1s^2 2s^1 2p^6 3s^1$
Хлор $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$



ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Для упрощения анализа применяют *адиабатное приближение* – атомы в узлах кристаллической решетки считаются неподвижными



ЗАПОЛНЕНИЕ ЭЛЕКТРОНАМИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА

вещества с неполным заполнением верхних разрешенных зон – а и б (***металлы***)

вещества с полным заполнением валентной зоны - в

Запрещенная зона относительно узкая - ***собственные полупроводники (0.5 -1.2 эВ)***

Запрещенная зона относительно широкая ***- диэлектрики (4-5 эВ)***

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

1. Решение уравнения Шредингера с учетом периодичности потенциального поля в кристалле имеет вид волн – *волны Блоха*, волновая функция частицы (обычно электрона), расположенной в периодическом потенциале.

2. В кристалле многие физические величины являются периодическими функциями Например квазиимпульс

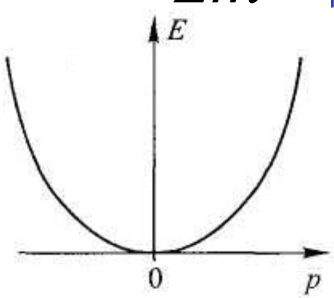
$$-\frac{\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$$

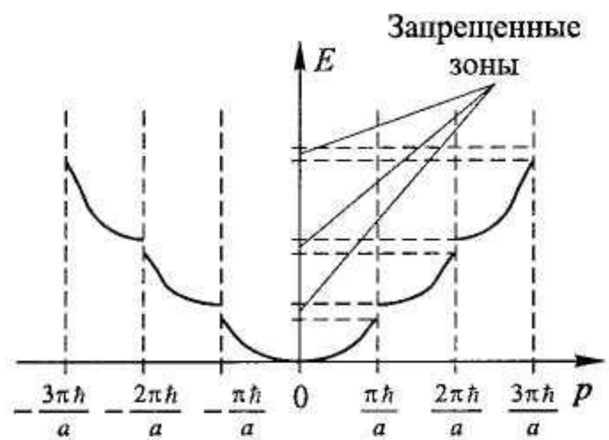
$$-\frac{\pi\hbar}{a} \le p \le \frac{\pi\hbar}{a}$$

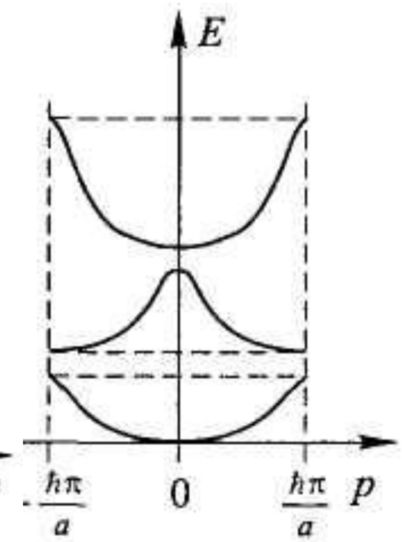
$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar m}{a}$$

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

3. Закон– зависимость ее энергии от импульса дисперсии частицы







ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Представим скорость электронов в кристалле, как групповую скорость распространения волн де-Бройля

$$v = v_{гр} = \frac{1}{\hbar}\frac{dW}{dk}$$

Волновой вектор

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

Энергия электрона, выраженная через частоту, соответствующую волне де-Бройля

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

На электрон во внешнем поле действует сила

$$F = eE$$

Работа по перемещению электрона приводит к изменению энергии электрона

$$dW = Fv_{гр}dt = \frac{F}{\hbar}\frac{dW}{dk}dt$$

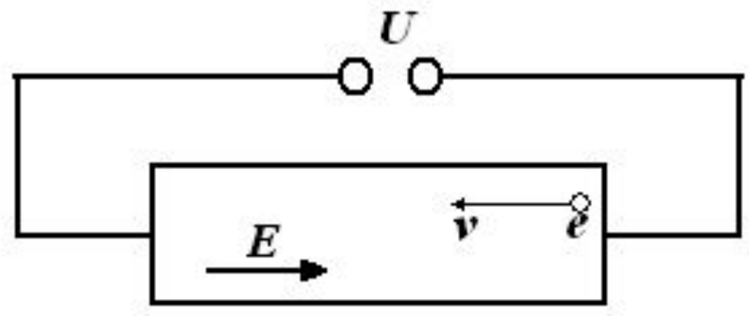
Сила, действующая на электрон

$$a = \frac{dv_{гр}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2W}{dk^2}\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2W}{dk^2}F = \frac{F}{m_{Эфф}}$$

$$F = \hbar\frac{dk}{dt}$$

$$m_{Эфф} = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2W}{dk^2}\right)^{-1}$$

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ



$$ma = eE \qquad a = \frac{eE}{m}$$

$$v_{cp} \approx a\tau = \frac{eE\tau}{m}$$

$$j = env_{cp} = \frac{e^2 n\tau}{m} E$$

Удельная проводимость

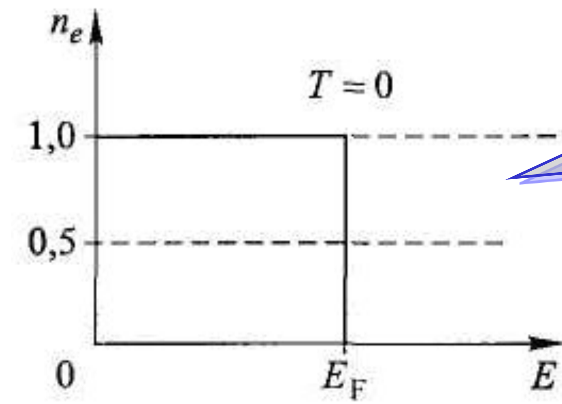
$$j = \sigma E \qquad \mu = \frac{v_{cp}}{E}$$

$$\sigma = \frac{e^2 n\tau}{m} \qquad \sigma = en\mu$$

ТЕПЛОЕМКОСТЬ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

$$n_e = \frac{1}{e^{\left(E-E_F\right)/kT} + 1}$$

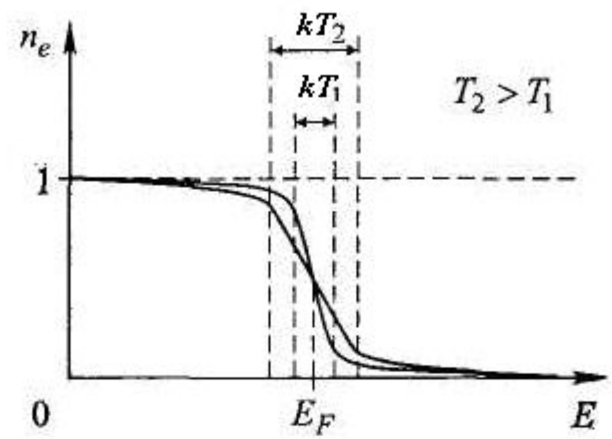
Распределение Ферми

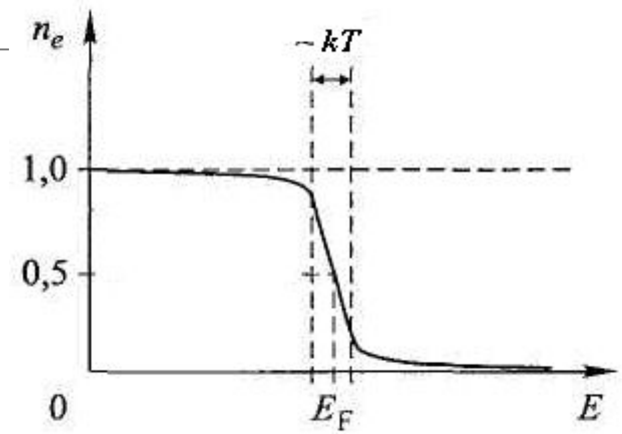


Полностью вырожденный электронный газ

$$kT \ll E_F$$

Условие вырождения электронного газа





$$E_F = \frac{\left(3\pi^2\hbar^3 n\right)^{2/3}}{2m}$$

ТЕПЛОЕМКОСТЬ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

$$C_{кр} = C_{реш} + {}_e$$

$$U_e = 3n\frac{3kT}{2E_F}\frac{kT}{2} = \frac{9nk^2T^2}{4E_F}$$

Суммарная тепловая энергия электрона

$$U_e = 3n\eta\frac{kT}{2}$$

$$C_e = \frac{dU_e}{dT} \qquad C_e = \frac{9}{2}nk\frac{kT}{E_F}$$

1. При больших температурах (больше температуры Дебая) выполняется закон Дюлонга-Пти

$$C_{реш} = 3nk \quad \square_e = \frac{9}{2}\frac{kT}{E_F} \qquad C_{кр} \approx C_{реш}$$

η - доля электронов, участвующих в тепловом движении

2. При малых температурах

$$\eta = \frac{3kT}{2E_F}$$

$$C_{реш} = nk\frac{2\pi^2}{5}\frac{k^4T^3}{\square^3 V_s^3} \quad \square_e = \frac{9}{2}\frac{kT}{E_F} \qquad C_{кр} \approx {}_e$$

ЗАПОЛНЕНИЕ ЭЛЕКТРОНАМИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ

Примесные полупроводники отличаются наличием в узлах решетки атомов посторонних примесей или других дефектов

Примесные уровни,
передающие электроны в зону проводимости называют ***донорными уровнями***,
а полупроводник - ***донором***

Примесные уровни,
на которые могут переходить электроны валентной зоны,
называют ***акцепторными уровнями***,
а полупроводник - ***акцептором***

СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Если число частиц **N** в системе много меньше числа возможных состояний **G**, то проблем с возможным заселением одного уровня несколькими частицами не существует – это ***невырожденное состояние***. Условие невырожденности состояния системы **N/G<<1**

Если число частиц **N** в системе сравнимо с числом возможных состояний **G**, то необходимы правила заселением каждого уровня несколькими частицам – это ***вырожденное состояние***. Условие вырожденности состояния системы **N/G ~ 1**

Концентрацию электронов в некотором диапазоне энергий можно определить с помощью распределения электронов по энергиям

$$dn_e = f(E)\omega_E(E)dE$$

Функция плотности энергетических состояний

Энергия электрона, отсчитанная от границы зоны

$$f(E) = \frac{4\pi}{h^3}\left(2m^*\right)^{3/2}\sqrt{E}$$

Видеоролики

Термоэлектронная эмиссия -

https://youtu.be/O2-KQhmO5DM

Опыт Штерна и Герлаха

https://youtu.be/2F-7uc0jTgo