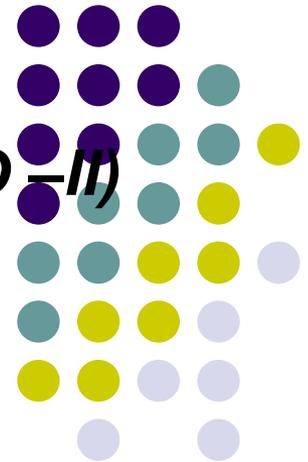


КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Лекция 23

(Для студентов элитного отделения ЭТО-II)

Зонная теория твёрдых тел





1. Понятие о зонной теории твердых тел. Основные положения
2. Образование энергетических зон
3. Особенности зонной схемы
4. Деление твердых тел на проводники, полупроводники и диэлектрики
5. Электропроводность металлов и полупроводников
6. Собственная и примесная проводимость полупроводников
7. Уровень Ферми в примесных полупроводниках

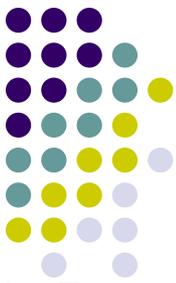
Понятие о зонной теории твердых тел.

Основные положения

Твердое тело – многоядерная и многоэлектронная система, в которой действуют электростатические (кулоновские) силы). Магнитное взаимодействие значительно слабее и вносит лишь небольшие поправки.

Допущения:

- 1) адиабатическое приближение – деление системы на легкие и тяжелые частицы. Тогда скорость движения ядер \ll скорости движения электронов. Ядра рассматриваются как неподвижные.
- 2) полагают, что рассматриваемый «выделенный» электрон находится в усредненном заданном внешнем поле сферически – симметричном поле, образованном всеми другими электронами и ядром. Такое поле называют «самосогласованным». Решение осуществляется методом Хартри-Фока.



Образование энергетических зон



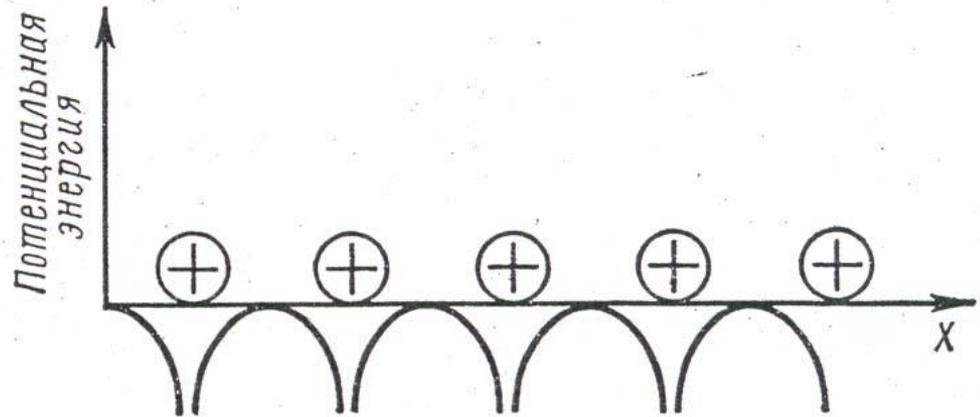
При образовании кристалла происходит сближение атомов; связь электронов с собственным ядром ослабляется: происходит обобществление электронов.

τ – время жизни электрона в определённом узле;

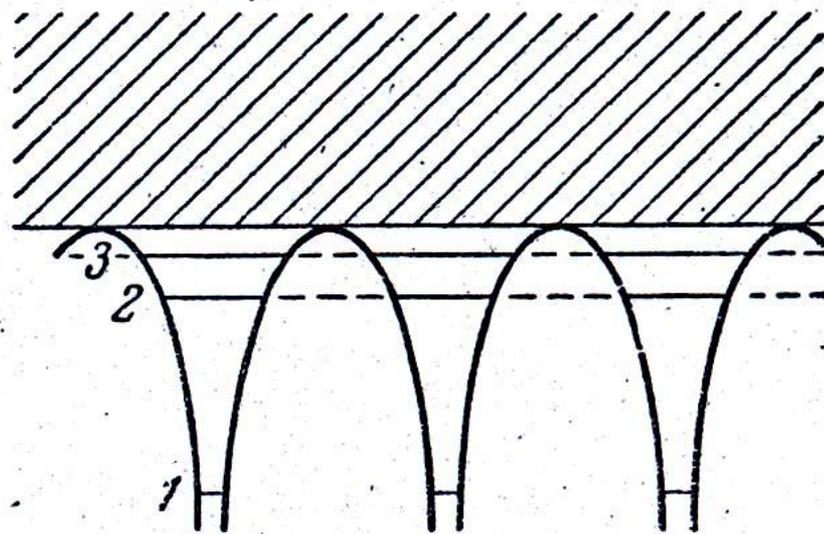
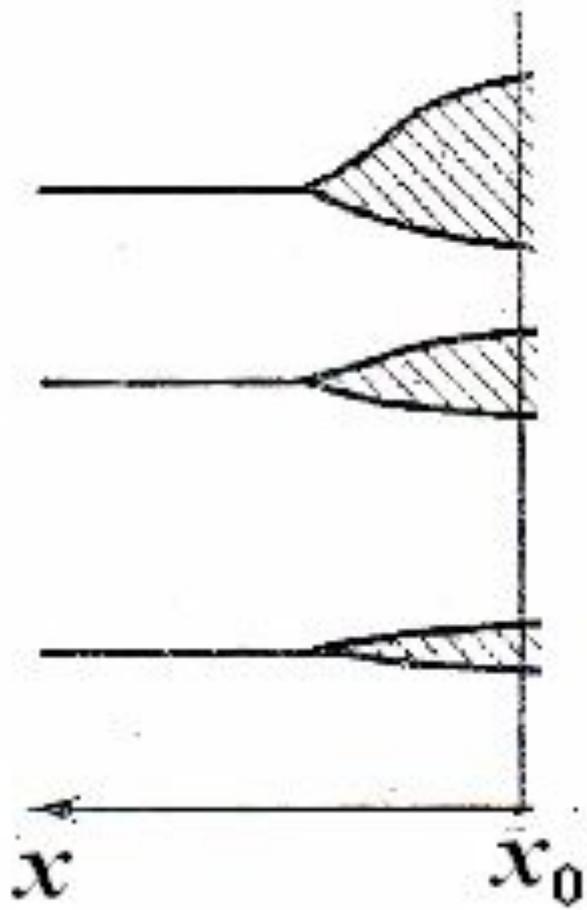
ΔE – ширина энергетического уровня.

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{10^{-15} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \approx 1 \text{ В}$$

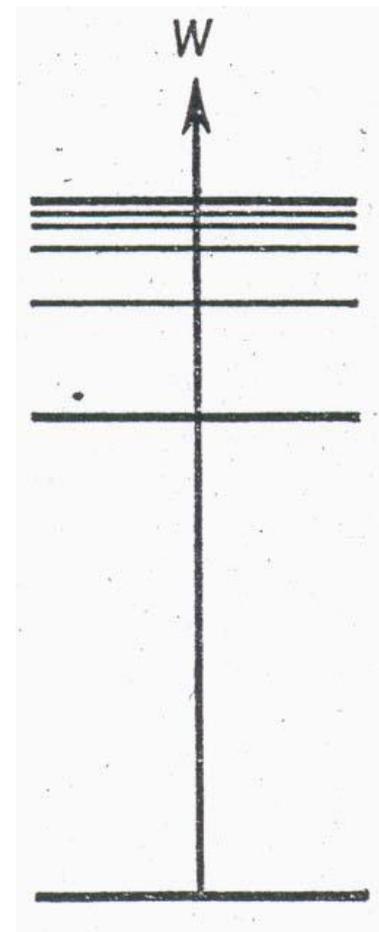
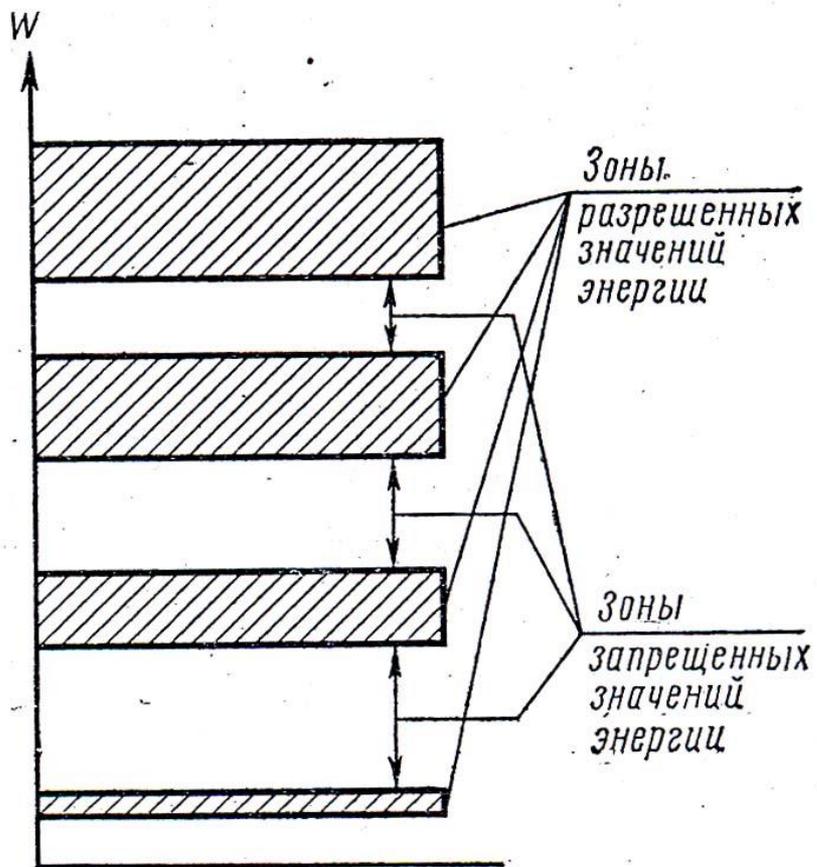
$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{10^{-8} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \approx 1 \text{ В}^{-7}$$

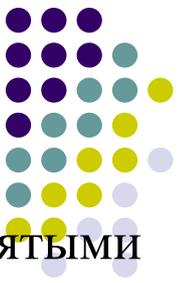


Расщепление уровня в зону



Зонная схема

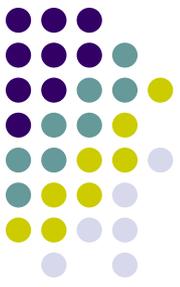




Особенности зонной схемы

1. Зоны энергетических уровней образуются как уровнями, занятыми электронами, так и свободными уровнями.
2. В изолированном атоме дискретные уровни энергии разделены областями недозволенных значений энергии. Разрешенные энергетические зоны разделены зонами запрещенных значений энергии (запрещенными зонами). Ширина запрещенных зон соизмерима с шириной разрешенных зон. С увеличением энергии ширина разрешенных зон увеличивается, а ширина запрещенных зон уменьшается.
3. В изолированном атоме дозволенные энергетические уровни могут быть заняты электронами или свободны. В кристалле может быть различное заполнение зон. В отдельных случаях они могут быть целиком свободны или целиком заняты.
4. В изолированном атоме электроны могут переходить с одного уровня на другой. В кристалле электроны могут переходить из одной разрешенной зоны в другую, а также совершать переходы внутри одной и той же зоны.
5. Особенно сильно расщепляются вышележащие энергетические уровни, и особенно, уровни с внешним валентным электроном. Эта зона называется валентной. Зона, лежащая над валентной называется свободной.

Деление твердых тел на проводники, полупроводники и диэлектрики

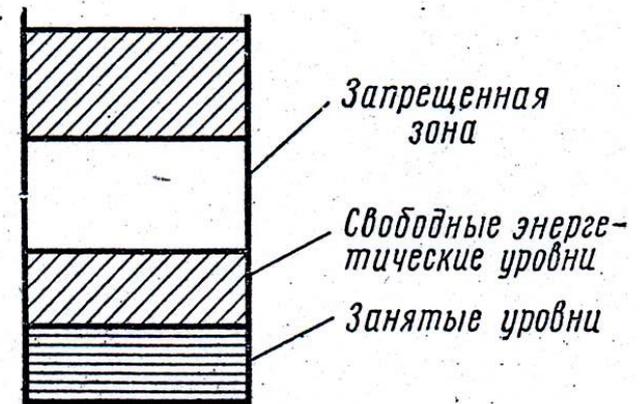


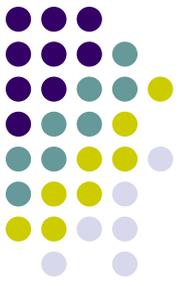
С позиций зонной теории различие в электрических свойствах твердых тел объясняется:

- а) шириной запрещенных зон;
- б) различным заполнением электронов разрешенных энергетических зон, а именно валентной зоны.

Необходимое условие проводимости — наличие свободных электронов в валентной зоне.

В зависимости от степени заполнения валентной зоны электронами и ширины запрещенной зоны кристаллы подразделяются на металлы, полупроводники и диэлектрики.





Электропроводность металлов

Согласно квантовой теории проводимость металлов

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

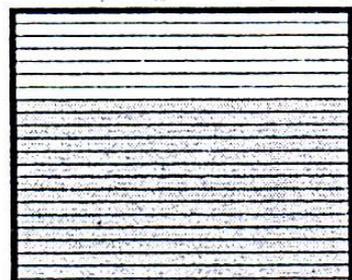
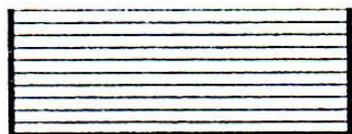
τ — время релаксации.

В проводимости участвуют не все электроны, а только те из них, которые имеют энергию вблизи уровня Ферми. Это — малая часть всех свободных электронов

Физическая причина электрического сопротивления — рассеяние электронных волн на примесях и дефектах решетки, а также на ее тепловых колебаниях.



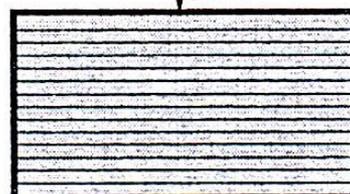
Зонная схема металлов, полупроводников и диэлектриков



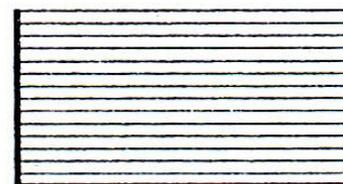
• *Металл*



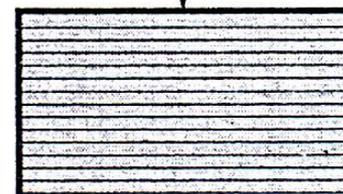
ΔE



Полупроводник



ΔE



Диэлектрик



Собственная проводимость полупроводников

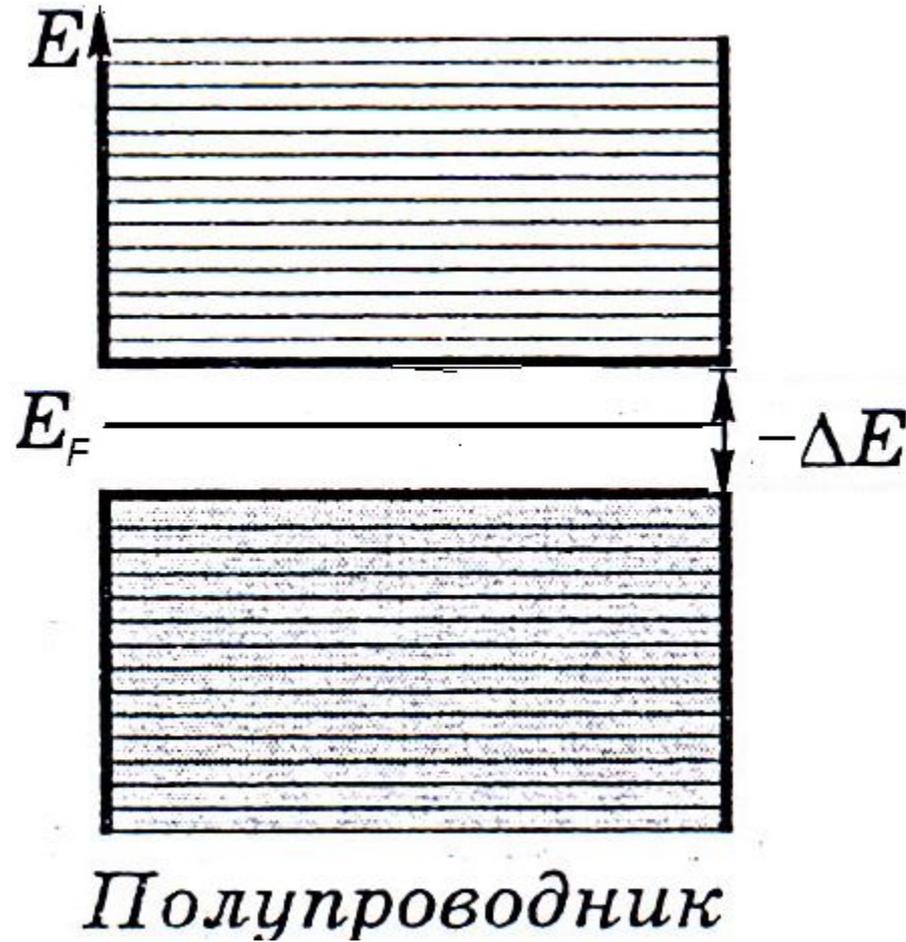
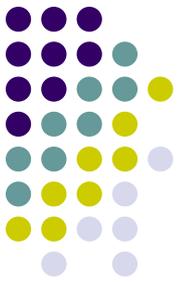
У полупроводников и диэлектриков валентная зона полностью заполнена электронами. При $T=0$ К они могут принять участие в проводимости, если им сообщить энергию, превышающую энергию запрещенной зоны и они перейдут в свободную зону. Свободная зона станет для них зоной проводимости.

Уровень Ферми, как показывает расчет, расположен в собственных полупроводниках и диэлектриках посередине запрещенной зоны и не связан с реальным электроном.

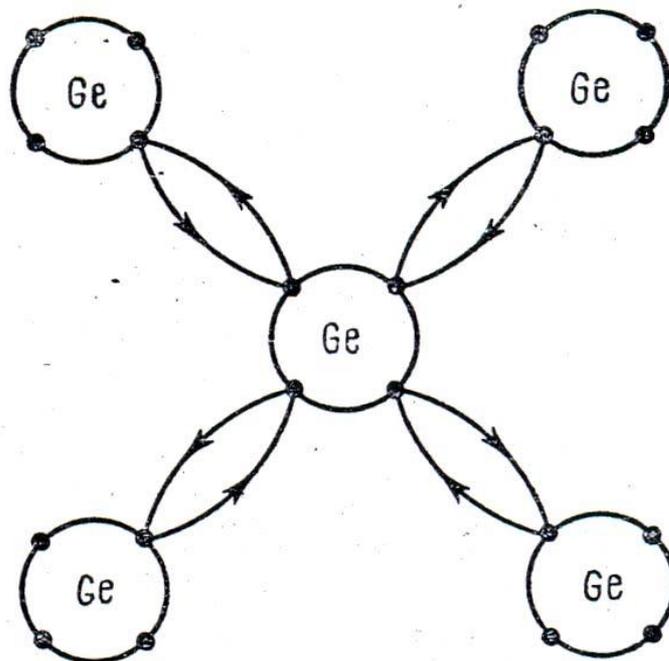
Собственная проводимость полупроводников зависит от температуры по закону $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$.

Наиболее важными собственными полупроводниками являются кремний (Si $Z=14$) и германий (Ge $Z=32$).

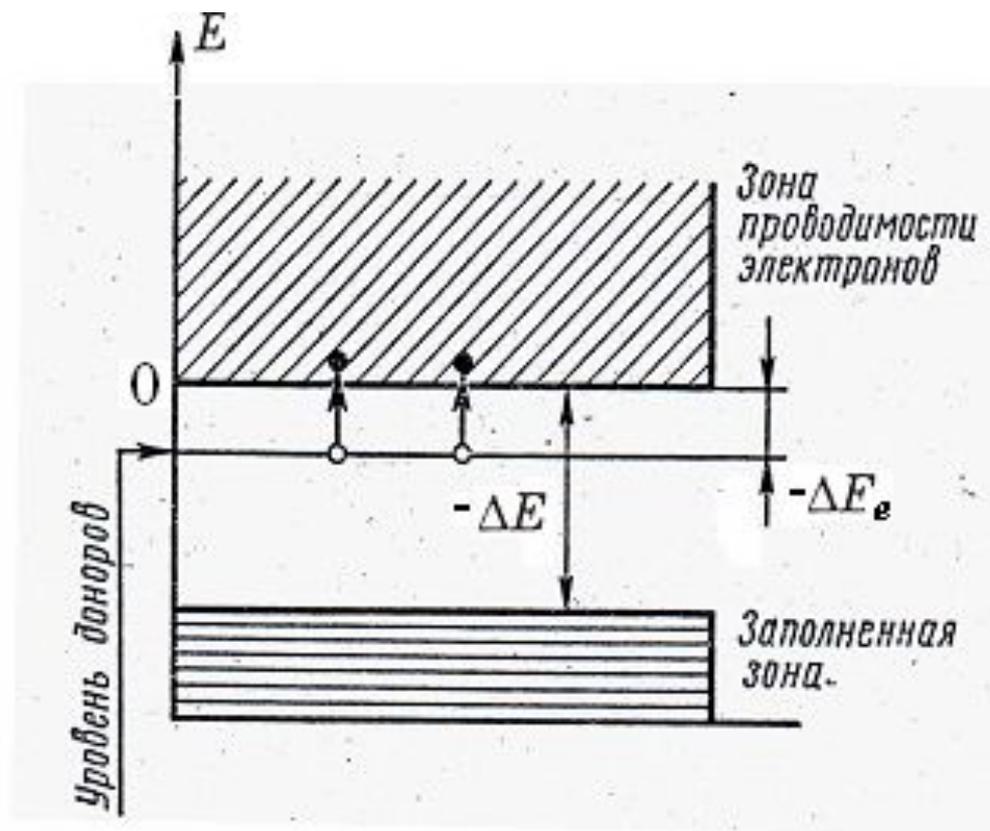
Уровень Ферми в собственном полупроводнике



Ковалентная связь в Ge

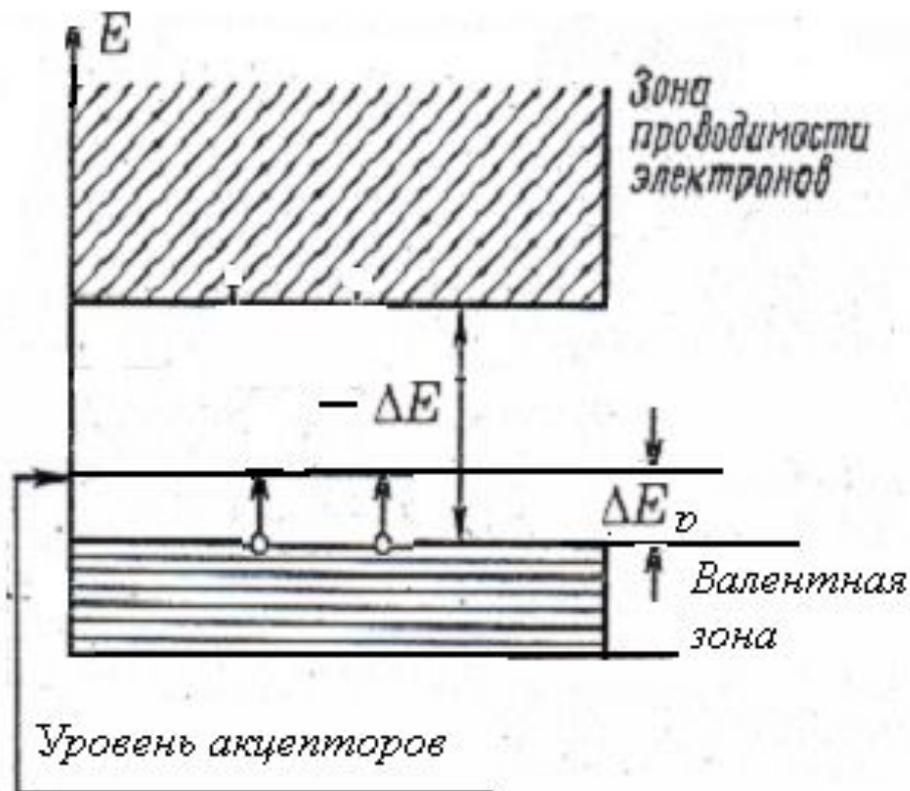


Донорные уровни





Акцепторные уровни



Возникает, когда в чистом полупроводнике некоторые атомы замещают другими атомами. Примесь может быть поставщиком электронов, так и образовывать центры прилипания.



- Если атом Si или Ge заменить атомами примеси, обладающими пятью валентными электронами (фосфор, мышьяк, сурьма). Четыре образуют связь с соседними атомами Si или Ge, а пятый оказывается лишним и не может образовать ковалентную связь - проводимость *n*-типа.

$$E_F = \frac{0 + (-E_e)}{2} = -\frac{E_e}{2}.$$

- Если примесь, например In, В содержит три валентных электрона, то одна двойная связь не укомплектована – дырочная проводимость – проводимость *p*-типа.

$$E_F = -E_g + \frac{E_v}{2}.$$