

Зонная теория твердых тел

Современная квантовая теория твердого тела основывается на ряде упрощений. Такой теорией является теория твердого тела. Название связано с характерной группировкой энергетических уровней электронов в кристаллах в зоны уровней.

В основе зонной теории лежат следующие предположения:

1) При изучении движения валентных электронов положительные ионы кристаллической решетки, ввиду их большой массы, рассматриваются как неподвижные источники поля, действующего на электроны.

2) Расположение положительных ионов в пространстве считается строго периодическим: они размещаются в узлах идеальной кристаллической решетки данного кристалла.

3) Взаимодействие электронов друг с другом заменяется некоторым эффективным силовым полем.

Задача сводится к рассмотрению движения электрона в периодическом силовом поле кристалла.

Потенциальная энергия электрона $U(r)$ периодически изменяется.

§2. Простейшая модель кристаллического тела

Это модель одномерная Кронига - Пенни, периодическое электрическое поле положительных ионов кристалла аппроксимируется потенциалом типа «зубчатой стенки».

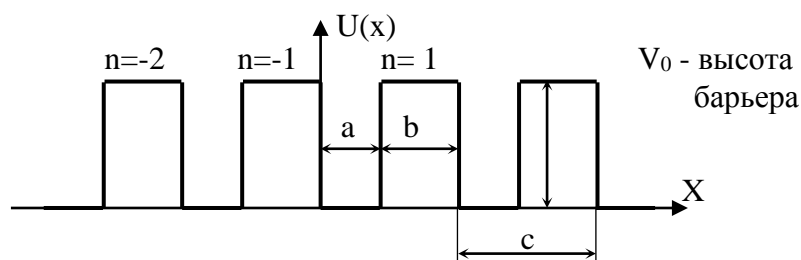


Рис.2

На рисунке изображено чередование потенциальных ям и барьеров.

Решение уравнения Шредингера для потенциальной ямы:

$$\Psi_n = A_n \sin kx_n + B_n \cos kx_n \quad (1)$$

Решение для потенциального барьера:

$$\Psi_k = A'_n \operatorname{sh}x(x_n - c) + B'_n \operatorname{ch}x(x_n - C) \quad (2)$$

где $\cos ix = \operatorname{ch} = \frac{e^x - e^{-ix}}{2}$; $\operatorname{sh}x = \sin ix = \frac{e^x - e^{-ix}}{2i}$

$$k = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}, \quad x = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

X_n – координата отсчитывается от начала $n^{\text{го}}$ участка. Записывают для каждой ямы и барьера, потом «сшивают» решения и получают основное уравнение для определения энергетических уровней в периодическом поле кристалла.

$$\cos k'a = \frac{P}{ka} \sin ka + \cos ka \quad (3)$$

где $P = \frac{x^2 ba}{2} = \text{const}$ – площадь зубца.

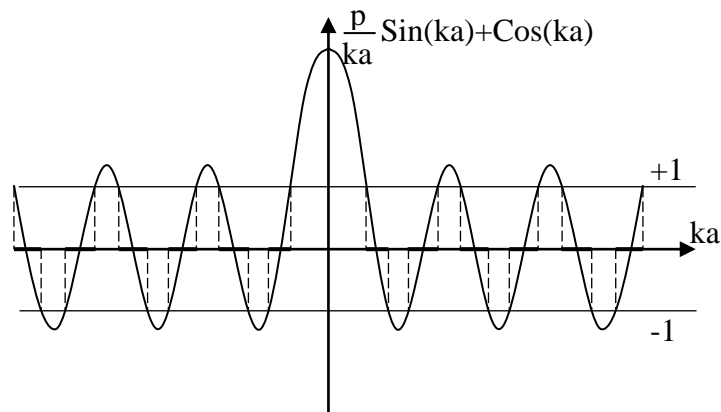


Рис.3

Графическое изображение решения уравнения Шредингера по Кронигу – Пенни.

$\cos k'a$ может меняться в пределах от -1 до $+1$.

Провели параллельные прямые оси абсцисс и находим точки пересечения этих прямых с графиком, опускаем перпендикуляры и находим корни уравнения (3). Эти участки обозначены жирными линиями. Таким

образом допустимые значения $E(k)$ имеют дискретный характер (зонный). Если ось (Ka) перевернуть в вертикальное положение, то получим картину расположения энергетических зон, разрешенных и запрещенных.

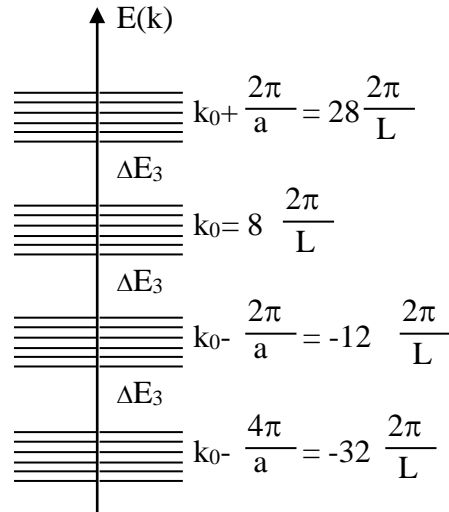


Рис.4

На рис.4 энергетический спектр электронов в кристалле имеет зонную структуру.

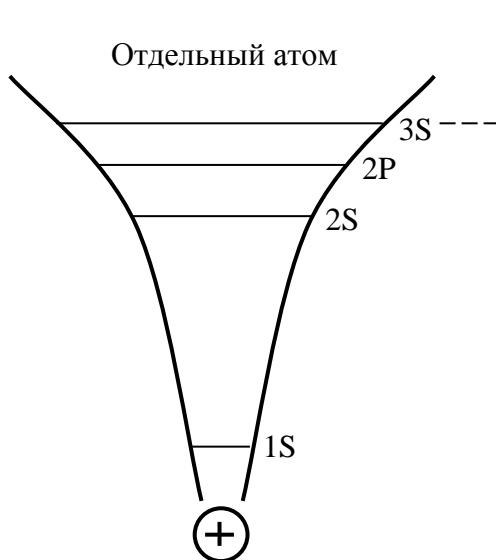
L – длина кольца цепочки.

Значения волновых векторов $K = \frac{2\pi}{L} n$. a - постоянная решетки.

Зону, произошедшую от валентных уровней атомов, образующих кристалл, называют валентной зоной.

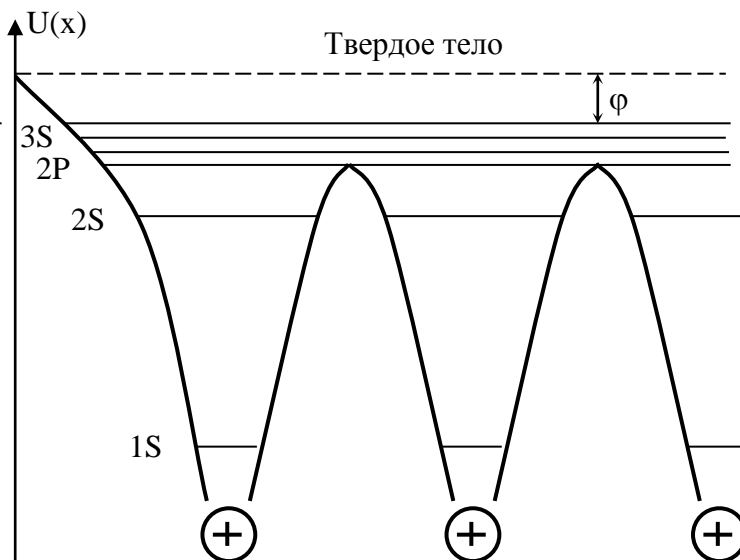
Зоны, произошедшие от внутренних уровней, всегда полностью заполнены электронами.

Частично заполненной или незаполненной может быть внешний валентный уровень (зона проводимости).



Потенциальная энергия электрона в изолированном атоме.

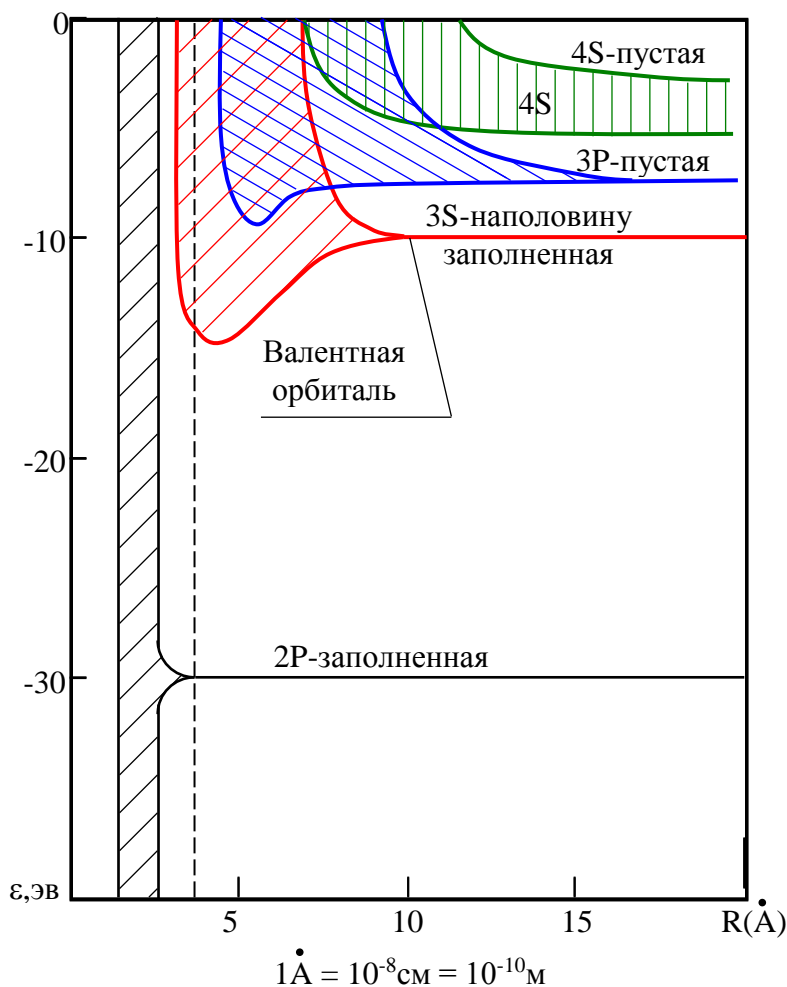
Рис.5



Потенциальная энергия электрона в кристалле

Рис.6

Наиболее слабо связаны 3S-электроны. При образовании твердого тела из отдельных атомов происходит перекрытие волновых функций этих электронов.



Зонная структура твердого натрия.

Рис.7

Пространственная протяженность электронных волновых функций зависит от квантовых чисел. Для больших квантовых чисел электронные волновые функции простираются на большие расстояния от ядра, для этих уровней взаимное влияние атомов будет проявляться при больших расстояниях между атомами. Что хорошо видно на рис.7, на

примере уровней атомов натрия. На уровнях 1S, 2S, 2P практически не сказывается влияние соседних атомов, тогда как для уровней 3S, 3P и более высоких уровней это влияние существенно и эти уровни превращаются в энергетические зоны. Для 3S – электронов имеется энергетический минимум, обеспечивающий устойчивую твердотельную конфигурацию атомов натрия при средней межатомной расстоянии $R \sim 3A$. В атоме натрия на энергии 3S – электрона сказывается влияние соседних атомов, означает также заметное перекрытие волновых функций этих электронов. Поэтому уже нельзя говорить о том, что конкретный 3S – электрон связан с каким-то конкретным атомом. Когда присутствие других атомов изменяет потенциальную яму отдельного атома (рис.5, рис.6), результирующий кулоновский потенциал уже не будет удерживать 3S – электроны около конкретных атомов, так что они могут находиться в твердом теле где угодно в результате перекрытия волновых функций 3S – электронов. Но 3S – электроны не могут свободно покидать твердое тело, так как их волновые функции не «выходят» за пределы вещества. Энергия связи электронов в твердом теле равна работе выхода ϕ .

Твердое тело из четырех атомов будет иметь всего четыре уровня, распределенные по некоторому энергетическому интервалу.

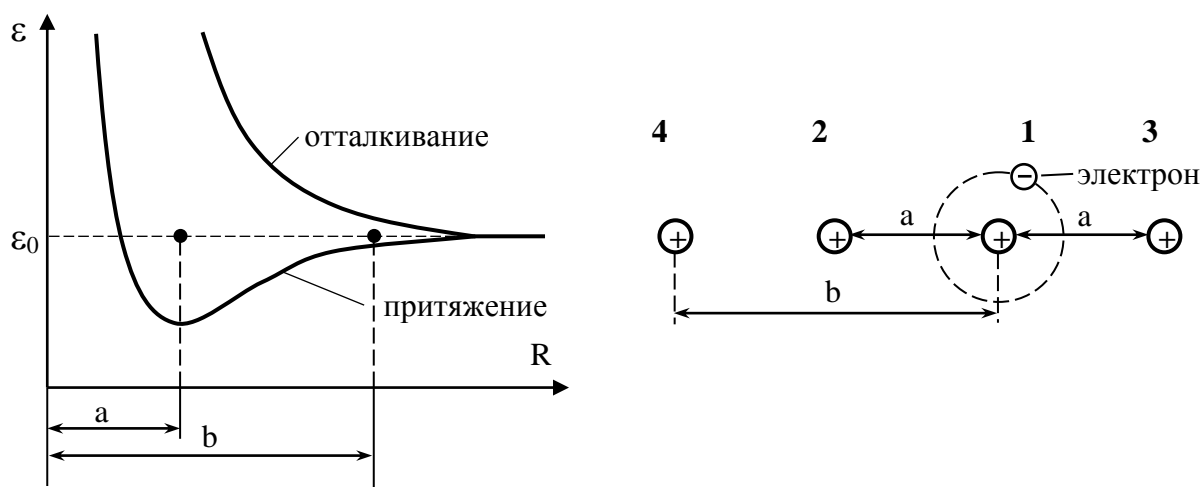


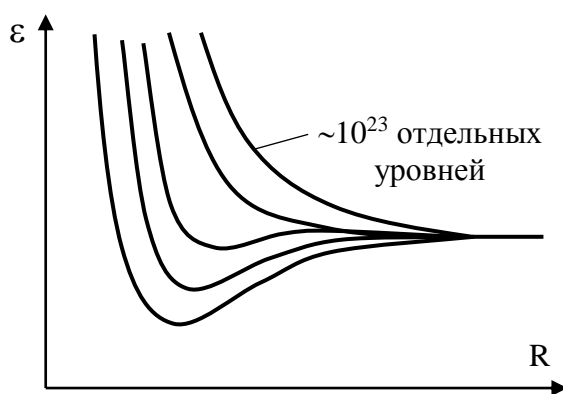
Рис.8

Например: в основном состоянии атома водорода электрон может находиться в одном из двух состояний – со спином вверх или вниз. В системе

четырёх протонов имеется восемь возможных состояний. Но если добавить еще три электрона, чтобы получить четыре атома водорода, то занятыми окажутся четыре состояния и на каждый электрон будет приходиться по два состояния. Эффект сближения атомов проявляется в изменении энергии отдельных состояний

$$\varepsilon_t = \varepsilon_0 + \Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4$$

где ε_0 - энергия изолированного атома, $\Delta_2, \Delta_3, \Delta_4$ - изменения энергии, связанные с влиянием соответствующих протонов 2, 3, 4. R – расстояние между атомами.



Эффект сближения атомов проявляется в увеличении общего числа уровней. В реальном теле содержится порядка 10^{23} отдельных уровней, которые непрерывно распределяются внутри некоторого интервала, образуя зону разрешенных значений энергии (рис.9). Такая же ситуация в основном имеет место для валентных электронов любого атома. Рис.9

В твердом натрии зона 3S – электронов является внешней, наполовину заполненной. Верхняя граница заполненных уровней приходится на середину зоны. Электрон может перейти на более высокий свободный уровень в этой зоне за счет теплового или электрического возбуждения. Следовательно, твердый натрий обладает хорошей электропроводностью и теплопроводностью. На рис.10 зонная структура проводников (натрия). Верхняя зона – частично заполненная зона. Нижние зоны - заполненные электронами.



Если число энергетических уровней в зоне больше числа электронов в ней, то электроны легко возбуждаются,



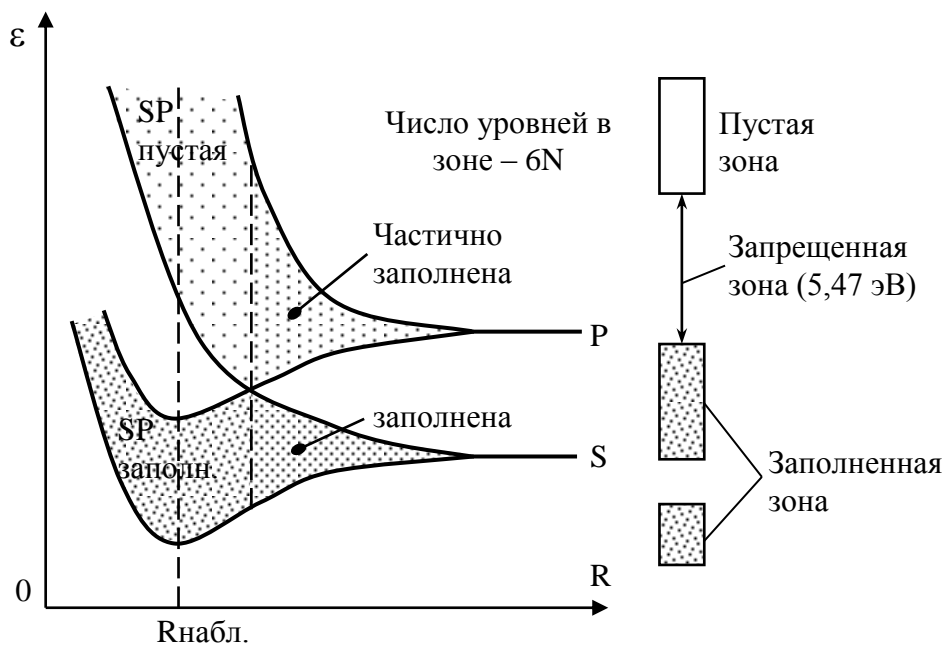
обеспечивая тем самым проводимость, если же все уровни в



зоне заполнены, то проводимость невозможна или затруднена.

Например: в кремнии, германии, углероде (алмаз) на Р – оболочке имеются два электрона и возникает смешанная конфигурация S и Р – орбиталей (орбиталь – волновая функция, описывающая данное квантовое состояние), которая делает особенно благоприятной конфигурацию из четырех атомов, изображенную на рис.11 (энергия кулоновского отталкивания электронов минимальна).

Рис.10



Зонная структура алмаза.

Рис.11

Волновые функции S и P – электронов образуют одну совершенно пустую гибридную SP – зону и одну заполненную гибридную SP – зону. Заполненная и пустая зоны разделены довольно значительным энергетическим интервалом или зоной запрещенных значений энергии. Для изоляторов типичное значение ширины запрещенной зоны ~ 5 эВ и больше. Ширина запрещенной зоны для полупроводников (германия 0,67 эВ, кремния 1,12 эВ) находится в пределах $0,1 \div 3$ эВ.

Полупроводники и изоляторы отличаются друг от друга только шириной запрещенной зоны.

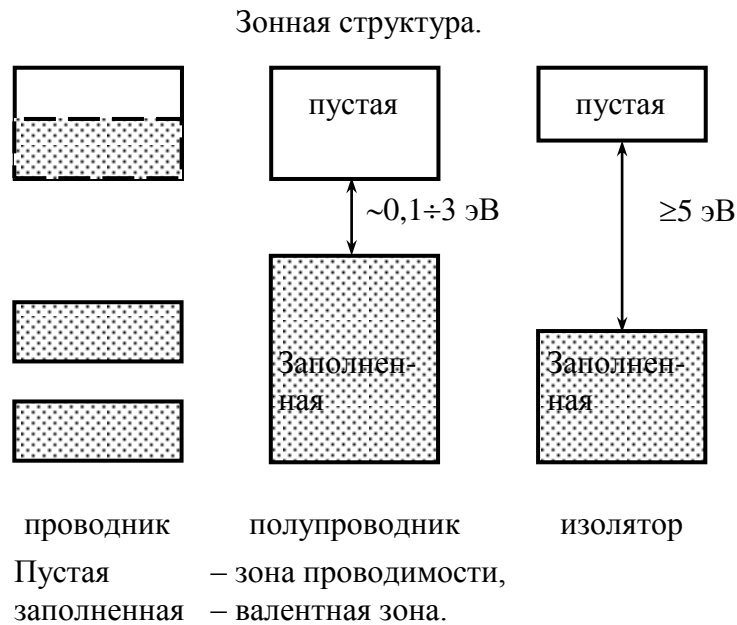


Рис.12

§ Теорема Блоха

Теорема Блоха утверждает, что собственные функции волнового уравнения с периодическим потенциалом имеют вид произведения функции плоской волны

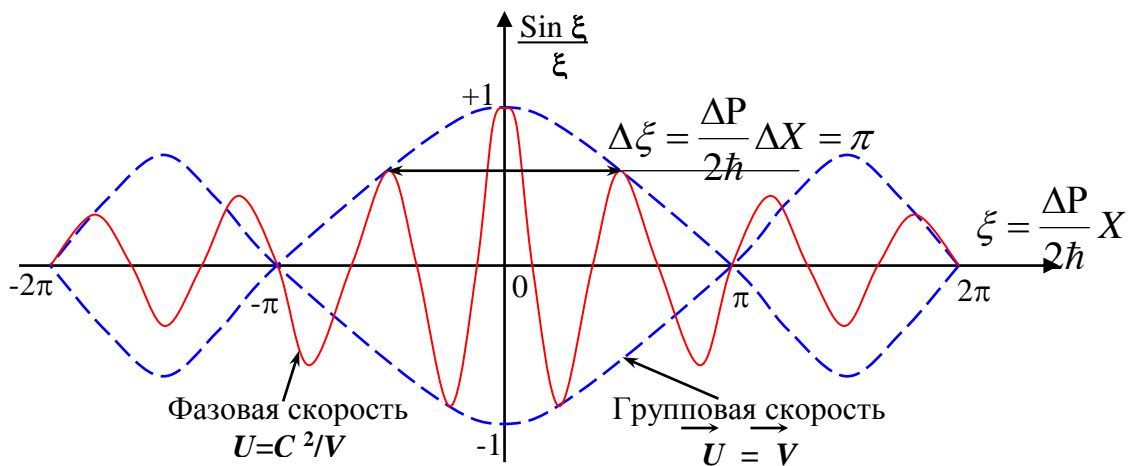
$$\exp(i\vec{k}\vec{r})$$

на функцию $U_k(\vec{r})$, которая является периодической функцией в кристаллической решетке:

$$\Psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} U_k(\vec{r})$$

Индекс \vec{k} в $U_k(\vec{r})$ указывает, что эта функция зависит от волнового вектора \vec{k} .

Волновую функцию $\Psi_k(\vec{r})$ называют функцией Блоха. Решения уравнения Шредингера такого вида состоят из бегущих волн, из таких решений можно составить волновой пакет, который будет представлять



электрон, свободно распространяющийся в периодическом потенциальном поле, созданном ионными остовами.

Рис.13

Форма волнового пакета при $t=0$ для дебройлевских волн $\left(\Delta k = \frac{\Delta P}{\hbar} \right)$.

Амплитуда $\frac{\sin \xi}{\xi}$ указана штриховой линией, волна – сплошной. Движение

монохроматической плоской волны вдоль оси X можно описать функцией

$$\varphi = Ae^{-i(\omega t - kx)} \quad (1)$$

Скорость распространения волны может быть найдена как скорость перемещения постоянной фазы.

$$\omega t - kx = const \quad (2)$$

Если время изменится на величину Δt , то для того, чтобы соблюдалось условие (2), координата должна измениться на величину Δx , которая может быть найдена из равенства

$$\omega(t + \Delta t) - k(x + \Delta x) = \omega t - kx$$

$$\text{т.е. } \omega \Delta t - k \Delta x = 0 \quad (3)$$

Отсюда скорость распространения постоянной фазы, получившей название фазовой скорости:

$$U = \frac{\Delta X}{\Delta t} = \frac{\omega}{K} \quad (4)$$

Фазовая скорость фотонов ($m_0 = 0$) равна скорости света

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{c\sqrt{P^2 + m_0^2 c^2}}{\hbar} \quad (5)$$

$$k = \frac{P}{\hbar}, \quad U = \frac{\omega}{k} = c \quad (6)$$

Фазовая скорость электрона, движущегося со скоростью V , можно написать

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{mc^2}{\hbar} \quad k = \frac{mV}{\hbar} \quad (7)$$

$$U = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{V} > c, \quad (7) \quad (V < c)$$

т.е. она становится больше скорости света, поскольку $V < c$. Это говорит о том, что фазовая скорость не может соответствовать движению частицы или же переносу какой-либо энергии.

Реальный процесс не может быть чисто монохроматическим ($k = \text{const}$). Он всегда обладает определенной шириной, т.е. состоит из набора волн, обладающих близкими волновыми числами, а вместе с тем и частотами.

С помощью набора волн можно построить волновой пакет, амплитуда которого отлична от нуля лишь в небольшой области пространства, которую связывают с местоположением частицы. Максимум амплитуды волнового пакета распространяется со скоростью, которая получила название групповой скорости.

Амплитуда B волнового пакета

$$B = A \frac{\sin \xi}{\xi}$$

где A – амплитуда постоянная каждой из этих волн.

$$\xi = \frac{\Delta k}{2}(x - \omega'_0 t)$$

B распространяется со скоростью

$$U = \omega'_0 = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0}$$

Для фотонов ($m_0 = 0$)

$$\bar{U} = U = c$$

Для дебройлевских волн

$$\bar{U} = \frac{c^2 P}{E} = v$$

т.е. групповая скорость совпадает со скоростью движения частицы.

В точках $\xi = \pm\pi, \pm 2\pi$ и т.д. $B_{(0)}^2 = 0$

Квадрат амплитуды обращается в нуль.

Область локализации волнового пакета

$$\Delta k \cdot \Delta x \geq 2\pi, ,$$

где Δx - ширина волнового пакета.

$$\Delta t = \frac{(\Delta x)^2}{2\pi \frac{d^2\omega}{dk^2}}$$

где Δt - время расплывания волнового пакета.

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar, \quad \Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar, \quad \Delta t = \frac{(\Delta x)^2}{2\pi \frac{d^2\omega}{dk_2}}$$

Соотношения неопределенностей Гейзенберга. Чем меньше ΔP , тем шире Δx . Для монохроматической волны

$$\Delta p \rightarrow 0, \quad \Delta x \rightarrow \infty, ,$$

где амплитуда во всем пространстве имеет одно и то же значение, т.е. наложение частицы (одномерный случай) во всем пространстве равновероятно. Это обобщается и на трехмерный случай.

Для нерелятивистского случая ($m = m_0$) время расплывания волнового пакета

$$\Delta t \approx \frac{m_0}{\hbar} (\Delta x)^2$$

если $m = 1\text{г}$, $\Delta x \approx 0,1\text{см}$, то $\Delta t \approx 10^{25}\text{с}$

время расплывания чрезвычайно велико. В случае электрона $m_0 \sim 10^{-27}\text{г}$
 $\Delta x \approx 10^{-8}\text{см}$ (размеры атома),

$$\Delta t = 10^{-17}\text{с}$$

т.е. для описания электрона в атоме мы должны использовать волновое уравнение, т.к. волновой пакет расплывается практически мгновенно.

Волновое уравнение фотона содержит вторую производную по времени, т.к. фотон всегда релятивистская частица.

Движение электрона в кристалле

Закон движения, сравнивая с

$$\vec{F} = \frac{\hbar^2}{dk^2} \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} \quad \text{где} \quad \frac{\hbar^2}{d^2E} = m^*$$

где m^* - эффективная масса, она учитывает совместное действие потенциального поля и внешней силы на электрон в кристалле.

$m_e^* > 0$ - в зоне проводимости,

$m_e^* < 0$ в валентной зоне

$m_p^* > 0$ - в валентной зоне, но в зоне германия и кремния имеются тяжелые и легкие дырки. Эффективные массы всегда выражаются в долях истинной массы $m_0 = 9 \cdot 10^{-28}\text{г}$

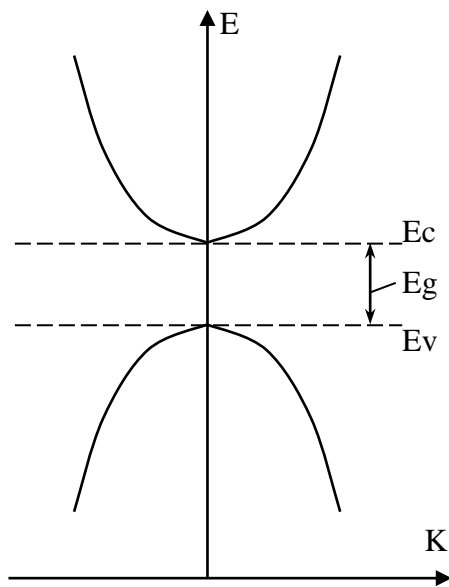
$$\frac{m_n^*}{m_0} \quad \text{и} \quad \frac{m_p^*}{m_0}$$

Эффективная масса – тензорная величина, в различных направлениях она различна, что является следствием анизотропных свойств кристаллов.

$$E(k) = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_{\text{перп}}^*} + \frac{k_z^2}{m_{\text{парал}}^*} \right)$$

E_k – уравнение эллипсоида вращения и описывается двумя значениями масс $m_{\text{парал}}^*$ и $m_{\text{перп}}^*$

Энергетический спектр электронов и дырок в координатах E и K



$E(K)$ – функция квазиимпульса. Энергия электрона в идеальной решетке есть периодическая функция квазиимпульса.

$$\text{Импульс электрона } \vec{P} = \hbar \vec{k}$$

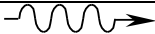

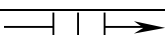
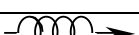
Дырки – квазичастицы с меньшей энергией располагаются у потолка валентной зоны и увеличивают свою энергию, перемещаясь по шкале энергии вглубь валентной зоны. Для дырок и электронов отсчет энергий в противоположных

направлениях.

Электроны и дырки, обладающие волновым вектором \vec{K} , могут сталкиваться с другими частицами или полями, как если бы они имели импульс

$$\hbar \vec{k} = \vec{P}$$

$\hbar \vec{k}$ – называется квазиимпульсом.

Обозначение	Название	Поле
	Электрон	-
	Фотон	Электромагнитная волна
	Фонон	Упругая волна
	Плазмон	Коллективная электронная волна
	Магنون	Волна перемагничивания
---	Полярон	Электрон + упругая деформация
---	Экситон	Волна поляризации

На фононах рассеиваются рентгеновские лучи, нейтроны.

Импульсу \vec{P} в квантовой механике отвечает оператор \hat{P} .

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

$$\hat{P}\Psi_k(\vec{r}) = -i\hbar\nabla\Psi_k(\vec{r}) = \hbar\vec{k}\Psi_k(\vec{r})$$

т.е. плоская волна Ψ_k является собственной функцией оператора импульса \hat{P} , причем собственными значениями оператора импульса служат $\hbar\vec{k}$

Энергия Ферми определяется как энергия электронов на высшем заполненном уровне

$$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_F \pi}{L} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N\pi}{2L} \right)^2$$

где n_F – квантовое число наивысшего занятого энергетического уровня.

$$2n_F = N$$

где N – число электронов в объеме

$$\Lambda = \Gamma_3$$

Энергия - квадратичная функция квантового числа n_F .

Волновые функции, удовлетворяющие уравнения Шредингера, для свободной частицы в периодическом поле представляют собой бегущие плоские волны:

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

при условии, что компоненты волнового вектора \vec{K} принимают значения

$$k_x = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \pm \dots$$

аналогичные наборы для K_y и K_z . Любая компонента вектора имеет вид

$$k = \frac{2\pi n}{L}, \text{ где}$$

n – целое положительное или отрицательное число. Компоненты \vec{K} являются квантовыми числами наряду с квантовыми числами

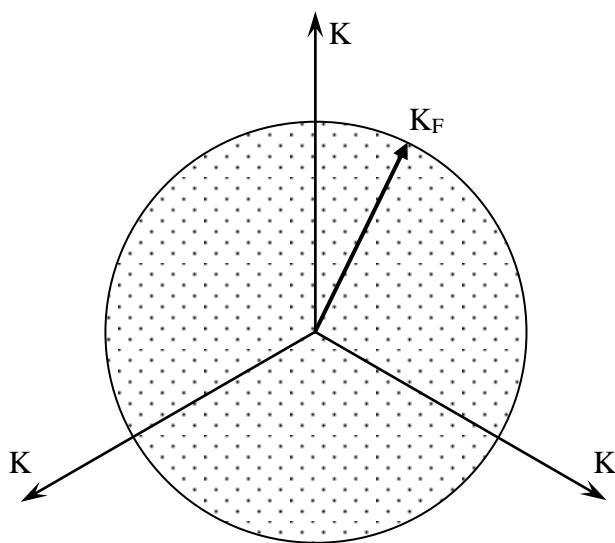
$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

задающим направление спина.

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

т.е. собственные значения энергии ε_K состояний с волновым вектором \vec{K}

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$



В основном состоянии (1S) системы из N свободных электронов занятые состояния можно описывать точками внутри сферы в K – пространстве. Энергия, соответствующая поверхности этой сферы, является энергией Ферми. Волновые векторы, «упирающиеся» в поверхность этой сферы, имеют длины, равные K_F , а сама поверхность называется поверхностью Ферми (в данном состоянии она является сферой). K_F - радиус этой сферы

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

где ε_F – энергия электрона с волновым вектором \vec{k}_F , оканчивающимся на поверхности сферы.

$$\varepsilon_F^{(k)} = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$$

Каждой тройке квантовых чисел K_x, K_y, K_z отвечает элемент объема в K – пространстве величиной $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$. поэтому в сфере объемом $\frac{4}{3}\pi k_F^3$ число точек, описывающих разрешенные состояния, равно числу ячеек объемом $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$, и поэтому число разрешенных состояний равно

$$2 \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 = N$$

где множитель 2 в левой части учитывает два допустимых значения спинового квантового числа

$$(m_s = \pm \frac{1}{2})$$

для каждого разрешенного значения \vec{k}

Полное число состояний равно числу электронов N .

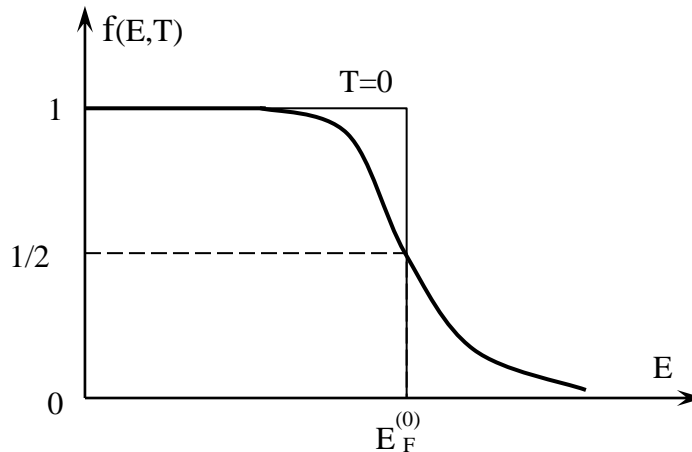
$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$$

Радиус сферы Ферми K_F зависит лишь от концентрации частиц $\frac{N}{V}$ и не зависит от массы m

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

$$V_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

Энергию Ферми можно определять как энергию таких квантовых состояний, вероятность заполнения которых частицей равна 1/2.



$$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

если $E = E_F$, то $f(E, T) = \frac{1}{2}$

$$E_F = E_F^{(0)} \left[\left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F^{(0)}} \right)^2 \right) \right] \quad \text{значение ее можно рассчитать при}$$

$T=0$ по формуле $E_F^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_0)^{2/3}$

Но абсолютный нуль температуры понимается как предел

$$T \rightarrow 0,$$

имея в виду, что абсолютный нуль не достижим и плюс принцип Паули.

Обычно рассматриваются системы не только при $T = 0$, но и при любой температуре, если граничная энергий $\varepsilon_0 = E_F \gg kT$, это условие

вырождения, функция распределения таких частиц близка к «ступеньке»

$$T_0 = \frac{\varepsilon_F}{k}$$

Для таких систем, где можно пренебречь зависимостью E_F от температуры и считать $E_F = E_F^{(0)}$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_0)^{2/3}$$

Существуют таблицы параметров поверхности Ферми для ряда металлов, вычисленных для модели свободных электронов для комнатной температуры ($T = 300^{\circ}\text{K}$).

Концентрация электронов $\frac{N}{V}$ определяется произведением валентности металла на число электронов в 1 см^3 .

$$[k_F] = \text{см}^{-1} \quad [V_F] = \frac{\text{см}}{\text{с}} \quad [V] = \text{см}^3$$

то получим:

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} = \left(29,609 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = 1,157 k_F$$

$$\varepsilon_F = \frac{1}{2} m v_F^2 \quad \text{или, если } |\varepsilon_F| = \varepsilon \text{ в,}$$

$$\varepsilon_F(\varepsilon \text{ в}) = 0,284 \cdot 10^{-15} v_F^2$$

$$T_F(^{\circ}\text{K}) = 1,16 \cdot 10^4 \cdot \varepsilon_F(\varepsilon \text{ в})$$

Например: Li

Валентность – 1,

$$\frac{N}{V} = 4,70 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$$

* r_0 – радиус сферы, содержащей один электрон.

L_H – боровский радиус $0,53 \cdot 10^{-8}$ см.

$$* r_S = \frac{r_0}{\alpha_H} \approx 3,25 \text{ безразмерный параметр}$$

Волновой вектор $k_F = 1,11 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$;

Скорость Ферми $v_F = 1,29 \cdot 10^8 \text{ см/с}$;

Энергия Ферми $\varepsilon_F = 4,72 \text{ эв}$.

Температура Ферми $T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_F} = 5,48 \times 10^4 ({}^0K)$

T_F не имеет никакого отношения к температуре электронного газа.

Определим $dn(\varepsilon)$ – число состояний на единичный энергетический интервал, части называемый плотностью состояний при $\varepsilon \leq \varepsilon_F$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}; \quad \varepsilon_F^{3/2} = \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^{3/2} \frac{3\pi^2 N}{V}$$

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

Плотность состояний равна:

$$dn(\varepsilon_F) = \frac{dN}{d\varepsilon_F} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon_F^{1/2} d\varepsilon_F$$

Вариант 5 № 2. Число электронов с кинетической энергией от $E_F/2$ до E_F определяется соотношением

$$n_1 = \int_{E_F/2}^{E_F} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{1/2} dE_F = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{E_F^{3/2} - 2^{3/2} E_{F/2}^{3/2}}{3} =$$
$$= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{3/2} \left(1 - \frac{1}{2^{3/2}} \right)$$

По аналогии:

$$n_2 = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{1/2} dE_F = \left(\frac{1}{3\hbar} \right)^{3/2} E_F^{3/2} \frac{1}{2^{3/2}}$$

$$\frac{n_1}{n_2} = 2^{3/2} - 1 = 2,83 - 1 = 1,83$$

Этот же результат можно получить из

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

в более простой форме:

$$\ln N = \frac{3}{2} \ln \varepsilon_F + Const$$

$$\frac{dN}{N} = \frac{3}{2} \frac{d\varepsilon_F}{\varepsilon_F} \Rightarrow \frac{dN}{d\varepsilon_F} = \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon_F} = \frac{3N}{2\varepsilon_F}$$

$$dn(\varepsilon_F) = \frac{3N}{2\varepsilon_F} d\varepsilon_F = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon_F^{1/2} d\varepsilon_F$$

С точностью порядка единицы число состояний на единичный энергетический интервал вблизи энергии Ферми равно отношению числа электронов проводимости к энергии Ферми.

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

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{P_{\max}^2}{2m} \Rightarrow P_{\max} = \hbar \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

Выводы

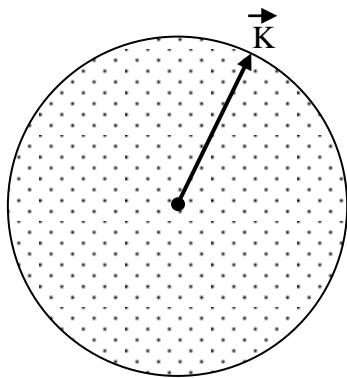
1. Эффективные массы: германий $\frac{m_{\text{парал}}^*}{m_0} = 1,58$; $\frac{m_{\text{перп}}^*}{m_0} = 0,082$;

$$\frac{m_{P_1}^*}{m_0} = 0,04; \quad \frac{m_{P_2}^*}{m_0} = 0,34; \quad \frac{m_{P_3}^*}{m_0} = 0,071$$

кремний $\frac{m_{\text{парал}}^*}{m_0} = 0,98;$ $\frac{m_{\text{перп}}^*}{m_0} = 0,19;$ $\frac{m_{P_1}^*}{m_0} = 0,16;$ $\frac{m_{P_2}^*}{m_0} = 0,52$

$$\frac{m_{P_3}^*}{m_0} = 0,24;$$

т.е. в валентной зоне германия и кремния имеются тяжелые и легкие дырки. Валентные зоны состоят из трех подзон.



2. Поверхность Ферми есть поверхность постоянной энергии ε_F в \vec{K} пространстве. Поверхность Ферми при абсолютном нуле $\varepsilon_F^{(0)}$ отделяет заполненные электронами состояния от незаполненных состояний. Сфера Ферми. Все состояния с $K < K_F$ являются занятыми.

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

3. Разнообразие свойств твердых тел и есть свидетельство разнообразия квазичастиц.

4. До последнего времени считалось, что электроны похожи друг на друга. Когда хотят подчеркнуть отличие электронов железа от электронов меди, то говорят, что они обладают различными поверхностями Ферми.

На всемирной выставке в Брюсселе здание отдает дань веку физики. Представляет правильную систему связанных между собой сфер, внутри которых выставочные помещения. Каждая из которых (сфера) представляет ион железа, потерявший один электрон. Это поверхность уровня Ферми.

У каждого металла только своя ему присущая форма поверхности Ферми, она ограничивает область импульсного пространства, занятого

электронами проводимости при абсолютном нуле. Это визитные карточки различных металлов.

5. Свойства металлов определяются электронами на поверхности Ферми или вблизи нее.

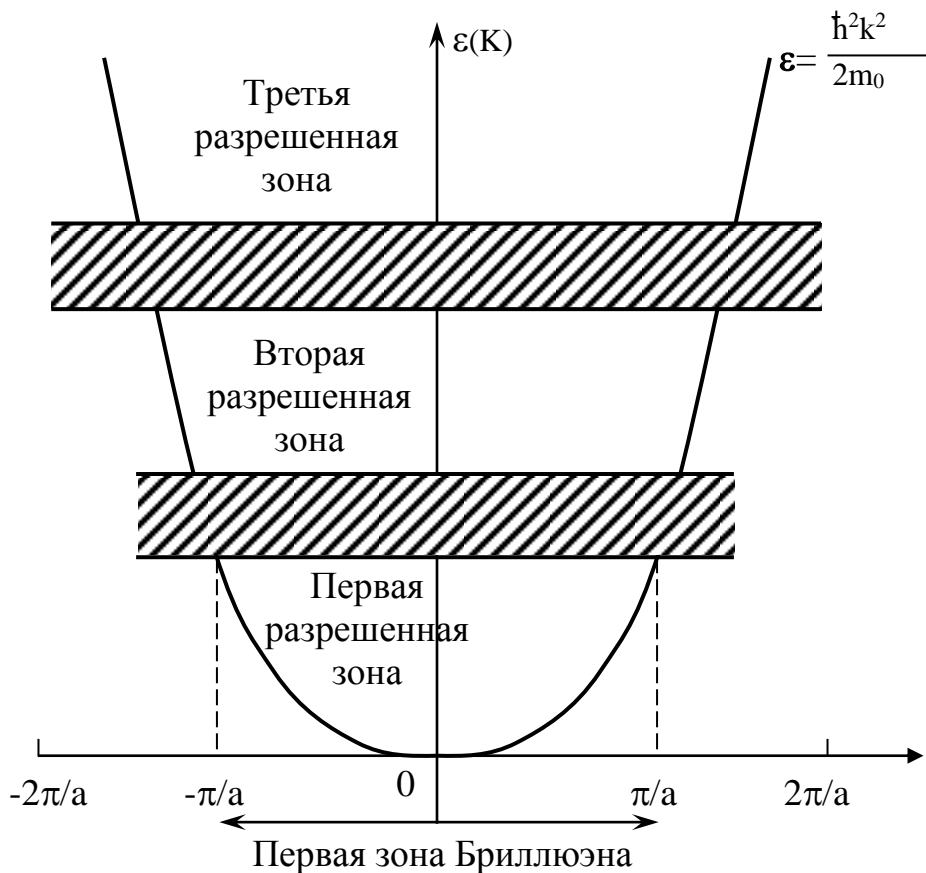
6. Движение волнового пакета, связанного с волновым вектором \vec{K} описывается уравнением

$$\vec{F} = \hbar \frac{d\vec{K}}{dt}$$

Групповая скорость

$$V_g = \hbar^{-1} \nabla \varepsilon(\vec{K})$$

§ Энергетический спектр энергии для свободных электронов в периодическом поле



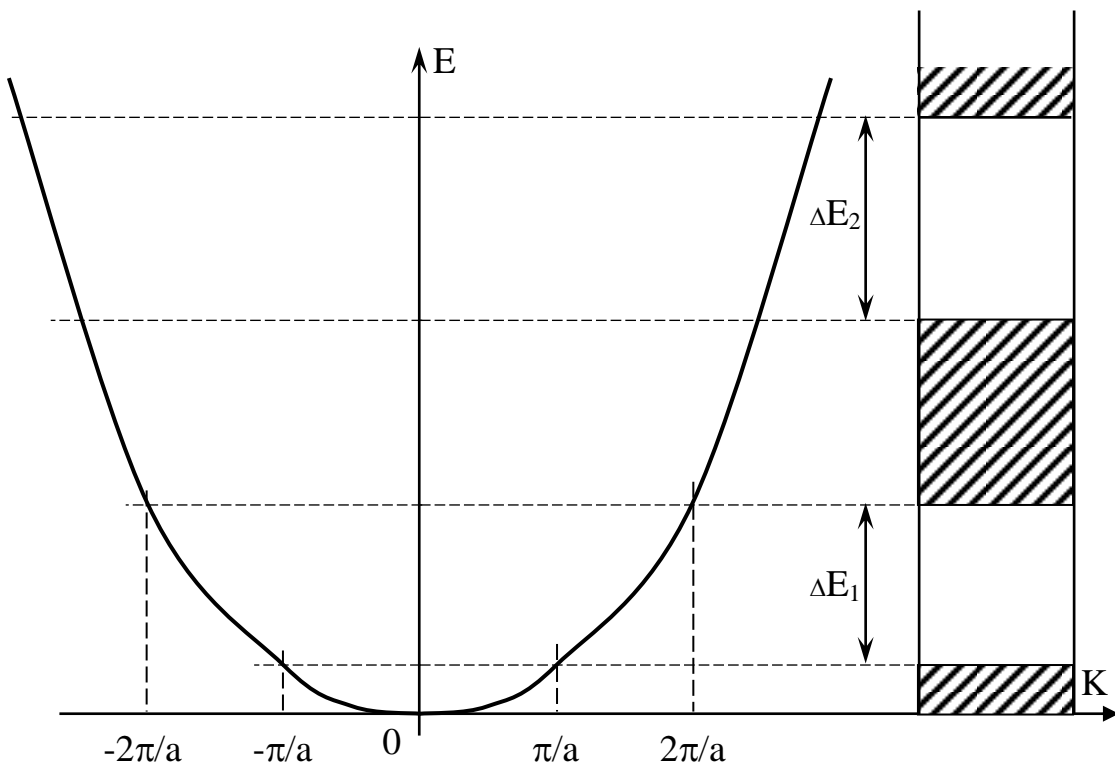
На рисунке заштрихованные области запрещенных значений энергии (энергетические щели).

Волновая функция имеет вид:

$$\Psi_K(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \left(e^{\frac{i\pi mx}{a}} \pm e^{-\frac{i\pi mx}{a}} \right)$$

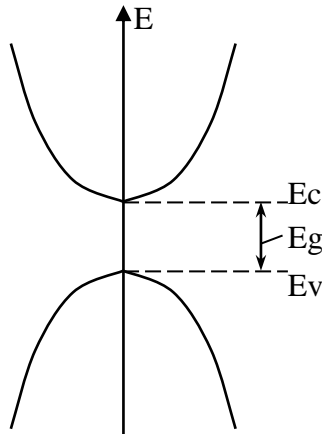
$$m = (\pm 1, \pm 2, \dots), \quad \frac{\pi m}{a} = \frac{G}{2} = K$$

Энергия ε_K не является теперь непрерывной функцией квазиимпульса $\hbar\vec{K} = \vec{P}$, она непрерывна только в зонах разрешенных энергий и претерпевает разрывы на границах зон Бриллюэна. Энергетические зоны являются следствием периодической структуры кристалла и представляют собою фундаментальные характеристики электронной структуры твердого тела. $\frac{\vec{L}}{a}$ – граница зоны, это вектор обратной решетки.



Зонная структура полупроводника

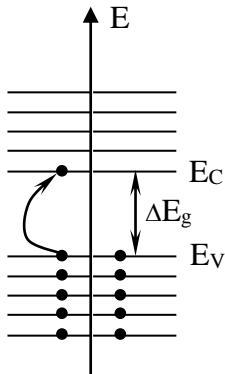
Области значений \vec{K} , при которых энергия электронов изменяется непрерывно, а на границах претерпевает разрыв, называются зонами Бриллюэна.



Энергетический спектр электронов и дырок в координатах $E - K$. В германии и кремнии зона проводимости описывается двумя значениями масс.

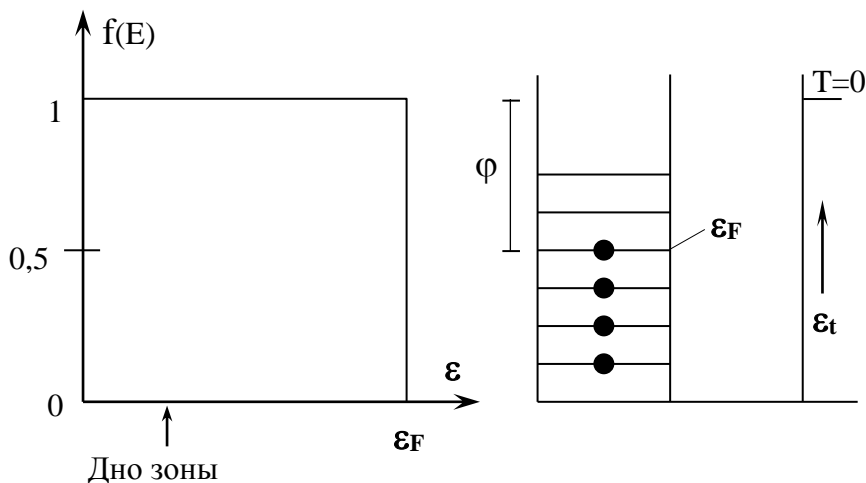
$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_{\text{перп}}^*} + \frac{k_z^2}{m_{\text{парал}}^*} \right)$$

§ Механизм электропроводности собственного полупроводника



Содержащую электроны зону с наибольшей энергией, называют валентной зоной. Первую зону с незанятыми энергетическими уровнями называют зоной проводимости, так как электроны в этой зоне участвуют в переносе заряда. В проводниках валентная зона и зона проводимости либо совпадают, либо перекрываются. В изоляторах и полупроводниках эти зоны отделены друг от друга.

Если материал находится не в состоянии основном, а обладает дополнительной энергией – тепловым возбуждением. Эта энергия играет важную роль в свойствах электропроводности.



Проводник в основном состоянии, если отсутствует тепловая энергия т.е. $T = 0$. Зависимость вероятности заполнения электронами энергетических уровней при $KT = 0$ от энергии ϵ отсчитывается от дна зоны.

$$f(E) = 1$$

для всех значений энергии, соответствующих заполненным уровням.

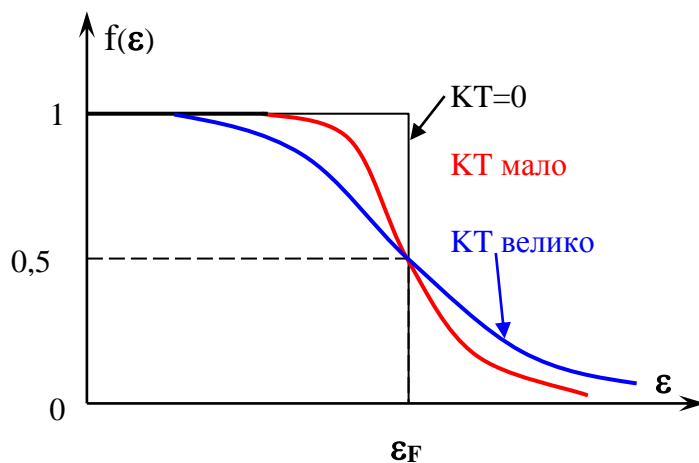
Энергия, отсчитываемая от дна зоны, при которой величина $f(E)$ скачком изменяется от 1 до 0, называется энергией Ферми ϵ_F . В данном случае $\epsilon_F = \varphi$ т.е. работе выхода

При наличии тепловой энергии некоторые электроны возбуждаются и перейдут из первоначальных состояний на свободные энергетические уровни. Для электронов с энергией вблизи ε_F такие переходы более вероятны, так как требуется меньшая энергия возбуждения. Соответственно, и вероятность заполнения состояний уменьшается с ростом их энергии. Если электроны не подчиняются принципу Паули, то их распределение по энергии описывается классическим распределением Максвелла – Больцмана

$$f(\varepsilon \gg \varepsilon_F, kT) = \frac{1}{e^{\varepsilon/kT}} = e^{-\varepsilon/kT}$$

Распределение, учитывающее принцип

Паули, называется распределением Ферми – Дирака



$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} + 1} = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}$$

Распределение Ферми – Дирака при различных значениях kT показано на рисунке. Здесь энергия Ферми имеет смысл энергии уровня, которому отвечает 50%-ная вероятность заполнения.

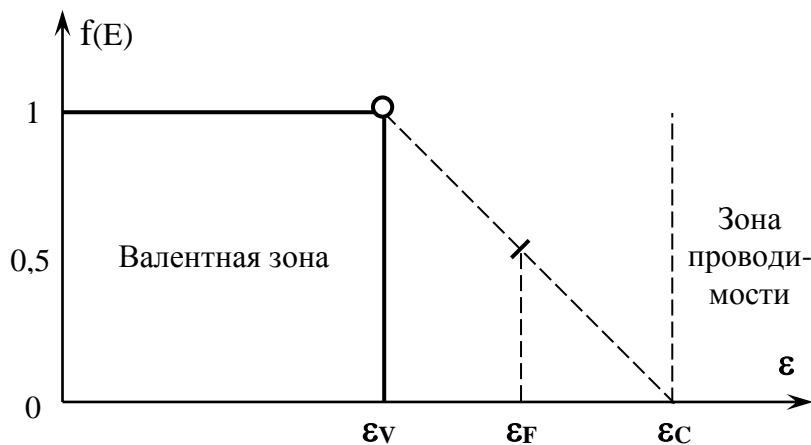
Число свободных уровней (вакансий) ниже уровня Ферми, и их распределение относительно ε_F совпадает с числом и распределением заполненных состояний выше уровня Ферми. Эти состояния отвечают тепловому возбуждению электронной системы и обеспечивают появление

кинетической энергии направленного движения. С ростом температуры (увеличение kT) уменьшается наклон кривой $f(\epsilon)$ вблизи ϵ_F и увеличивается вероятность заполнения состояний с большими энергиями.

Из выражений для $f(E, K, T)$ видно, что проводимость материалов сильно зависит от температуры.

В полупроводниках положение уровня Ферми соответствует формально потолку валентной зоны, но это неверно. Пусть с потолка валентной зоны (с энергией ϵ_V) отдельный электрон от возбуждения перешел на дно (с энергией ϵ_C) пустой зоны проводимости.

ϵ_V – ПОТОЛОК ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ



ϵ_C – ДНО ЗОНЫ ПРОВОДИМОСТИ.

На рисунке уровень Ферми находится в середине запрещенной зоны, учитывая симметрию распределения Ферми – Дирака относительно энергии Ферми ϵ_F и очевидную симметрию функции $f(E)$ в промежутке между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости.

* Определим вероятность перехода электрона в зону проводимости для алмаза, ширина запрещенной зоны $\epsilon_g \approx 5,5$ эВ. при комнатной температуре $kT = 0,026$ эВ. для дна зоны проводимости

$$f(\epsilon_C) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_C - (\epsilon_C - \epsilon_g/2)}{kT}} + 1} = \frac{1}{e^{\epsilon_g/2kT} + 1} = \frac{1}{e^{5,5/0,052} + 1} \approx e^{-5,5/0,052} \approx e^{-100} \approx 5 \cdot 10^{-45}$$

Таким образом, вряд ли даже один из каждых 10^{44} электронов в валентной зоне будет иметь энергию, достаточную для перехода в зону проводимости при комнатной температуре. Поскольку каждый моль вещества содержит около 10^{24} атомов. Следовательно, алмаз – хороший изолятор.

Определим для $Ge(\varepsilon_g = 0,67 \text{ эВ})$ вероятность при $KT = 0,026$ эВ. (комнатная)

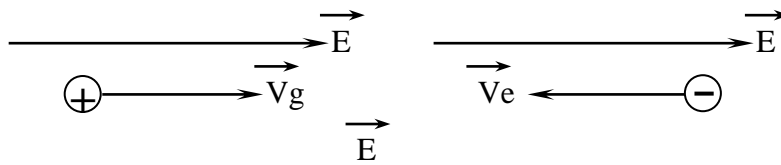
$$f(\varepsilon_c) = \frac{1}{e^{0,67/0,052} + 1} \approx e^{-0,67/0,052} \approx e^{-12,8} \approx 2 \cdot 10^{-6}$$

В этом случае приблизительно один валентный электрон из миллиона может при возбуждении перейти на дно зоны проводимости и в зоне проводимости можно найти электроны.

Их будет значительно меньше, чем в случае проводника, у которого $f(\varepsilon)$ в зоне проводимости составляет порядка единицы. Однако в зоне проводимости полупроводника все же имеется достаточно электронов и они вносят вклад в электропроводность полупроводника. В полупроводниках $f(\varepsilon)$ сильно зависит от температуры. Возрастание температуры на 10^0К относительно комнатной (300^0К) т.е. всего на 3% вероятность перехода электронов в зону проводимости увеличивается приблизительно на 30%. С уменьшением ширины запрещенной зоны чувствительность полупроводников к температуре возрастает.

Возбуждаясь с переходом в зону проводимости, электроны оставляют после себя в валентной зоне незанятые состояния или «дырки». Заполненная первоначально валентная зона становится частично заполненной и, следовательно, в ней возможны энергетические возбуждения электронов, хотя очень небольшого числа. Дырка ведет себя подобно положительно заряженной частице, которая может участвовать в электрической проводимости. Реальному движению электронов соответствует более или

менее свободной фиктивное движение дырок в направлении внешнего электрического поля.



Дырки реагируют на внешнюю силу (например, на внешнее электрическое поле) не так, как свободные электроны, поэтому, чтобы учесть влияние других атомов на подвижность дырок, им приписывают эффективную массу m^* , которая немного больше эффективной массы электрона.

Плотность тока электронов и дырок

$$\vec{j} = \vec{j}_n + \vec{j}_p = e(n\mu_n + p\mu_p)\vec{E}$$

где n – концентрация электронов,

p – концентрация дырок,

μ_n – подвижность электронов,

μ_p – подвижность дырок.

Под действием внешнего электрического поля электроны и дырки приобретают скорости направленного движения, дрейфовые скорости

$$\vec{V}_{др}^{эл} = -\mu_n \vec{E}; \quad \vec{V}_{др}^{дыр} = \mu_p \vec{E}$$

μ_n и $\mu_{др}$ - подвижности

Для собственных полупроводников $n=p$

$$\vec{j} = ne(\mu_n + \mu_p)\vec{E}$$

$$\text{или } \vec{j} = \sigma \vec{E}$$

где $\sigma = ne(\mu_n + \mu_p)$, σ - коэффициент

n – сильно зависит от температуры в зоне проводимости, в то время как подвижности слабо зависят от температуры

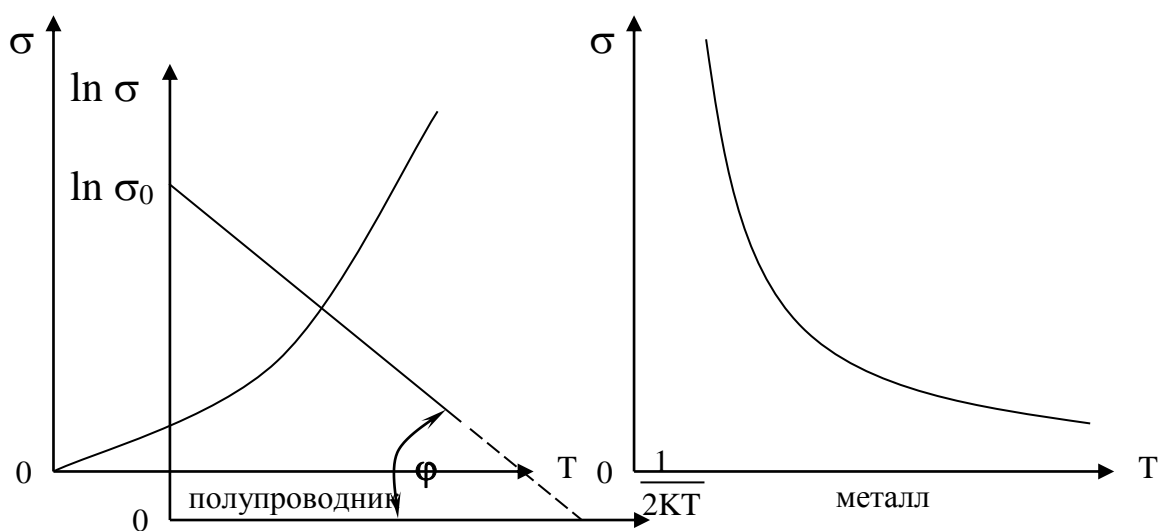
$$\sigma \sim n$$

$$n \sim \frac{1}{\frac{\varepsilon_c - \left(\varepsilon_c - \frac{\Delta\varepsilon_g}{2} \right)}{e^{-\frac{\Delta\varepsilon_g}{2kT}} + 1}} = \frac{1}{e^{\frac{\Delta\varepsilon_g}{2kT}} + 1}$$

Если концентрация электронов в зоне проводимости мала, то вероятность заполнения каждого уровня мала по сравнению с единицей в знаменателе, то ею можно пренебречь.

$$n \sim \exp\left[-\frac{\Delta\varepsilon_g}{2kT}\right] \text{ и следовательно } \sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta\varepsilon_g}{2kT}}, \text{ или } \sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}}$$

Электропроводность собственных полупроводников возрастает с температурой, у проводников уменьшается.



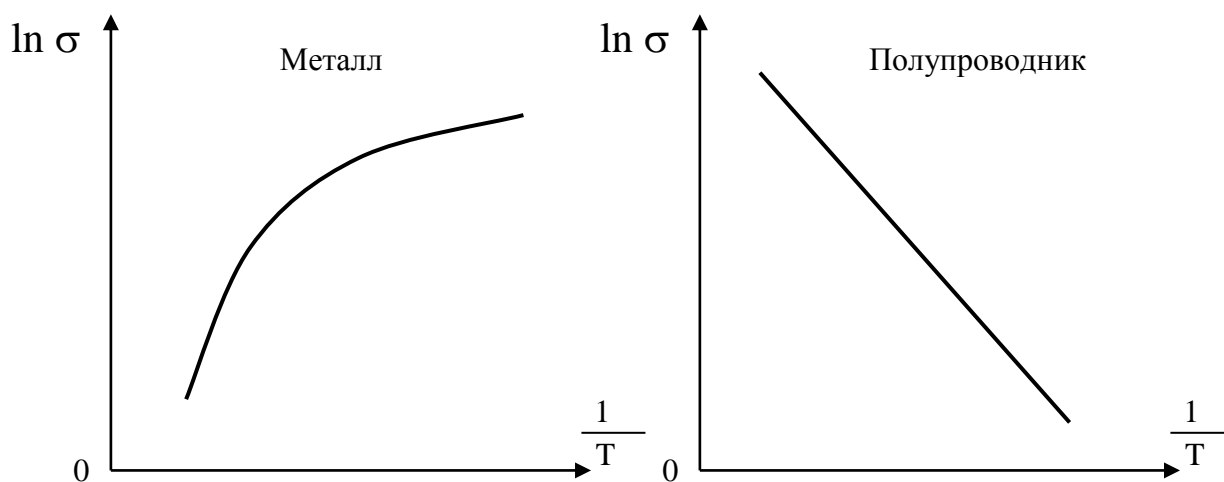
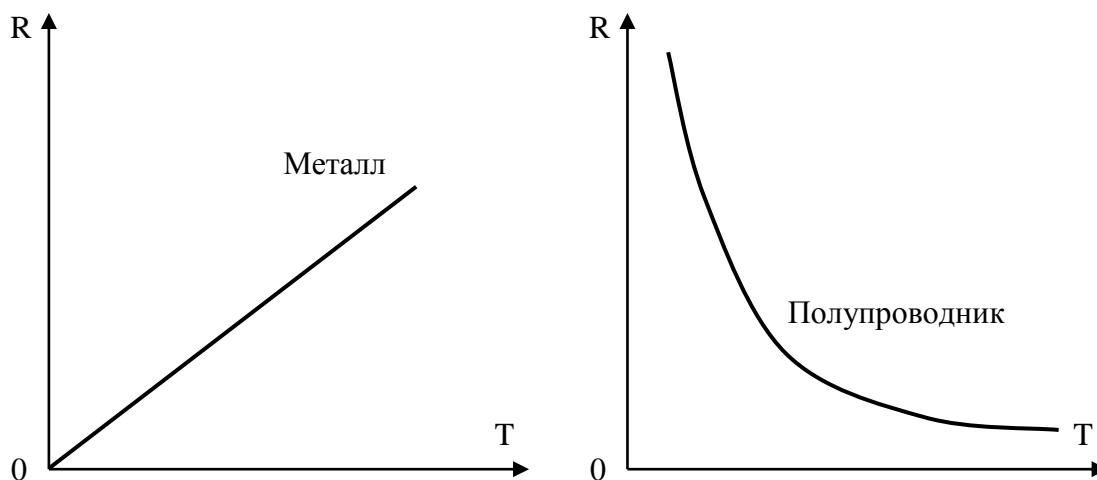
$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}}$$

Если прологарифмировать $\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{\Delta E_g}{2kT}$ и построить график

зависимости $\ln \sigma$ от $\frac{1}{2kT}$, то получим прямую линию, угловой коэффициент

$$\text{которого равен } \Delta E_g = \frac{2k}{|\operatorname{tg} \phi|}$$

Это дает возможность, измеряя электропроводность полупроводника при различных температурах, определить опытным путем ширину запрещенной зоны ΔE_g для данного полупроводника



Для металлов с ростом температуры сопротивление увеличивается

$$R(t) = R_0(1 + \alpha t^0)$$

R_0 – сопротивление при $t = 0^{\circ}\text{C}$

R_t – сопротивление при $t^{\circ}\text{C}$

α – термический коэффициент сопротивления, равный $1/273$

Для металлов $\frac{dR}{dt} = \frac{dR}{dT} > 0$

Для полупроводников сопротивление с ростом температуры быстро уменьшается $R(T) = R_0 e^{\frac{B}{T}}$ или $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{B}{T}}$ где $B = E_a$, то $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{E_a}{kT}}$

где E_a – энергия активизации, она различна для разных интервалов температур.

Наличие энергии активации E_a означает, что для увеличения проводимости к полупроводниковому веществу необходимо подвести энергию. Полупроводники – это вещества, проводимость которых сильно зависит от внешних условий: температуры, давления, внешних полей, облучения ядерными частицами.

Полупроводники – это вещества, имеющие при комнатной температуре удельную электрическую проводимость в интервале от 10^{-8} до 10^6 Сим m^{-1} , которая зависит сильно от вида и количества примеси, и структуры вещества, и от внешних условий.

* В полупроводнике с собственной проводимостью число электронов равно числу дырок, каждый электрон создает единственную дырку.

Число возбужденных собственных носителей экспоненциально зависит от $\frac{E_g}{2K_B T}$, где E_g – ширина энергетической запрещенной зоны.

$$n_i = 2 \left(\frac{m_e K_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{E_F - E_g}{K_B T} \right]$$

$$P_i = 2 \left(\frac{m_h K_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{E_F}{K_B T} \right]$$

$$2 \left(\frac{m_e K_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{E_F - E_g}{K_B T} \right] = 2 \frac{m_h K_B T}{2\pi\hbar^2} \exp \left[-\frac{E_F}{K_B T} \right]$$

$$\exp \left(\frac{2E_F}{K_B T} \right) = \left(\frac{m_h}{m_e} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{E_g}{K_B T} \right)$$

$$E_F = \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} K_B T \ln \frac{m_h}{m_e}$$

Если $m_e = m_h$, то $E_F = \frac{E_g}{2}$ т.е. уровень Ферми лежит в середине

запрещенной зоны.

Индекс I (intrinsic – собственность)

$$n_i p_i = 4 \left(\frac{K_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2KT}\right)$$

Не содержит уровня Ферми.

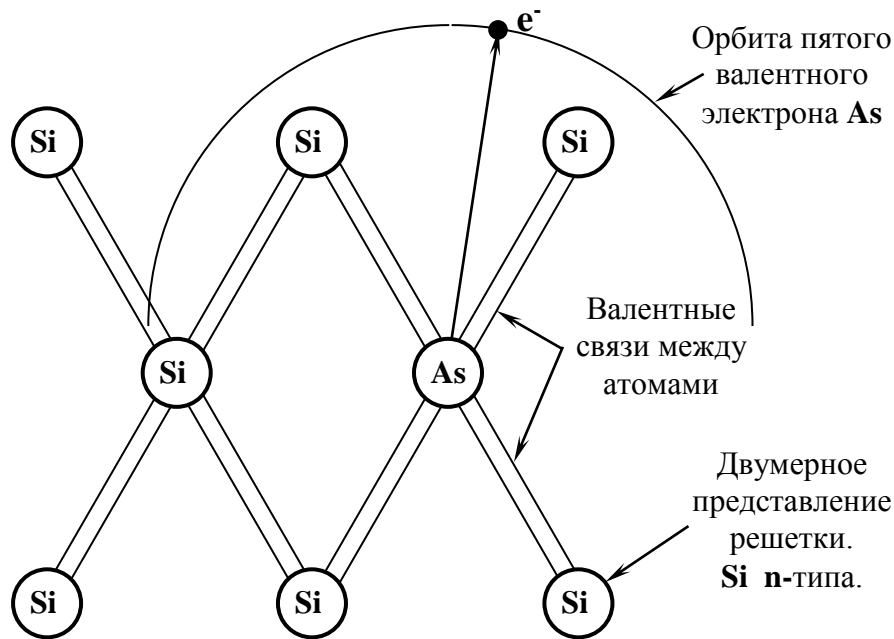
Это закон действующих масс, который утверждает, что расстояние уровня Ферми от краев обеих зон должно быть велико по сравнению с $KT = 0,026$ эв. При 300^0K (комнатная температура), при условии $m_e = m_h = m$, произведение $n_i p_i$

для германия $3,6 \cdot 10^{27} \text{ см}^{-6}$,

для кремния $4,6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-6}$.

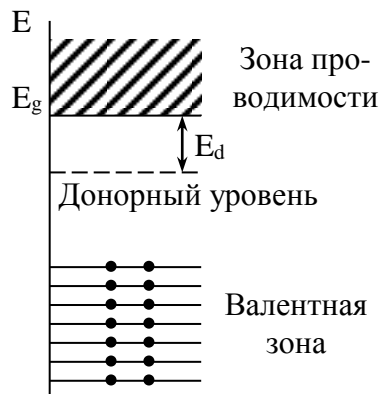
Энергия активации E_a для собственного полупроводника равна половине ширины запрещенной зоны

Примесные полупроводники



Расположение зарядов в решетке кремния. Четыре электрона A_s образуют тетраэдрические ковалентные связи, подобные связям Si , а пятый электрон A_s осуществляет проводимость. Мышьяк (As) имеет пять валентных электронов, а кремний (Si) – только четыре. Атом мышьяка называется донором, он отдает при ионизации электрон в зону проводимости.

Добавка примеси к полупроводнику называется легированием.



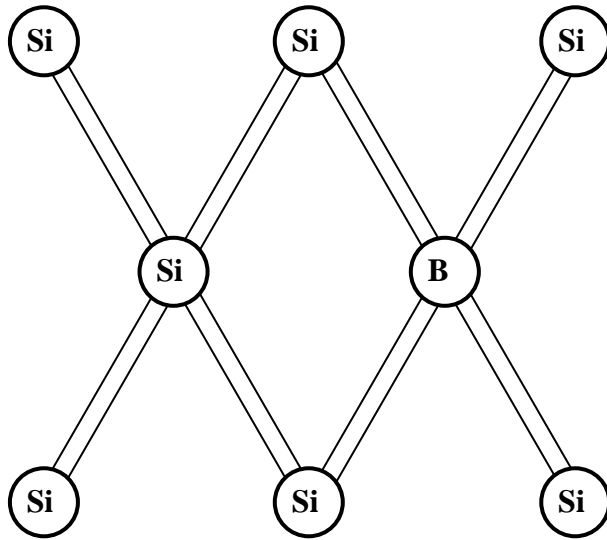
$E_d = 0,020$ эв., энергия ионизации

При $K_B T \ll E_d$ (низкая концентрация электронов проводимости)

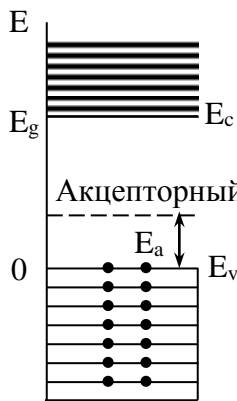
$$n \approx (n_0 N_d)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_d}{2K_B T}\right) \quad \text{где}$$

$$n_0 \equiv 2 \left(\frac{m_e K_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$$

N_d - концентрация доноров



Если в кремний ввести атом бора (B), который имеет три валентных электрона, он может «укомплектовать» свои тетраэдрические связи, лишь заимствовав один электрон из связи Si – Si, образуя дырку в валентной зоне кремния, которая принимает участие в проводимости. Атом бора называется акцептором именно потому, что при ионизации захватывает электрон из валентной зоны.



Примеси, не способные к ионизации, не влияют на концентрацию носителей и могут присутствовать и в больших количествах – электрические измерения не обнаруживают их.

N_a – концентрация акцепторов.

Условием применимости классической статистики является неравенство

$$\frac{E_F - E_c}{KT} < -1, \text{ откуда } E_F < E_c - KT, \text{ т.е. полупроводник является}$$

невырожденным (подчиняется классической статистике), если уровень Ферми лежит ниже зоны проводимости не менее, чем на KT .

Если уровень Ферми лежит выше E_c более чем на $5KT$, то полупроводник полностью вырожденный. Условие вырождения зависит от температуры и положения уровня Ферми относительно дна зоны проводимости.

Концентрация электронов в невырожденном полупроводнике: $F < E_c - KT$,

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_\alpha^* KT}{\hbar^2} \right)^{3/2} = 2,5 \cdot 10^{19} \left(\frac{m_\alpha^*}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}$$

N_c – число состояний в зоне проводимости

$$n = 4,82 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_\alpha^*}{m} \right)^{3/2} T^{3/2} e^{-\frac{E_c - F}{KT}}$$

Вырожденный полупроводник

$$F > E_c + 5KT$$

$$n = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_\alpha^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (F - E_c)^{3/2} \text{ она не зависит от температуры.}$$

Уровень Ферми находится в зоне проводимости выше ее дна не менее чем на $5KT$.

В невырожденном полупроводнике концентрация дырок определяется статистикой Больцмана при условии $F > E_v + KT$ т.е. уровень Ферми лежит выше потолка валентной зоны на величину KT .

В полностью вырожденном полупроводнике $\frac{E_v - F}{KT} > 5$ или $F < E_v - KT$

т.е. в валентной зоне ниже ее потолка на величину не менее $5KT$. N_v – число состояний в валентной зоне.

Невырожденный полупроводник

$$P = N_v e^{-\frac{F-E_v}{KT}}; \quad N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_{pd}^* KT}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

Вырожденный полупроводник

$$P = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_{pd}^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_v - F)^{3/2}$$

В невырожденном:

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - F}{KT}} \quad P = N_v e^{-\frac{F - E_v}{KT}}$$

$$n \cdot P = N_c N_v e^{-\frac{\Delta E_0}{KT}} \quad \text{не зависит от уровня Ферми}$$

В вырожденном

$$n = \frac{1}{4\pi^3} V_F \quad \text{где } V_F \text{ – объем зоны Бриллюэна. Для сферических}$$

$$\text{поверхностей } V_F = \frac{4\pi}{3} K_F^3, \quad n = \frac{1}{3\pi^2} K_F^3 \quad \text{где радиус сферы Ферми}$$

$$K_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

Функция распределения электронов:

$$f = \frac{1}{\frac{1}{g_i} e^{\frac{E_i - F}{KT}} + 1}$$

где g_i – степень вырождения, если $E_i = E_d$ принадлежит донорной примеси, то $g_i = 2$. Если $E_i = E_a$ принадлежит акцепторной примеси, то $g_i = 1/2$

Распределение электронов по донорным уровням

$$f = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_\alpha - F}{KT}} + 1}$$

по акцепторным

$$f = \frac{1}{2e^{\frac{E_\alpha - F}{KT}} + 1}$$

Для дырок:

$$f_p = \frac{1}{2e^{\frac{F - E_D}{KT}} + 1}; \quad f_p = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{F - E_\alpha}{KT}} + 1}$$

Число электронов:

$$n_D = \frac{N_D}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_D - F}{KT}} + 1} \quad n_\alpha = \frac{N_\alpha}{2e^{\frac{E_\alpha - F}{KT}} + 1}$$

Число дырок:

$$P_\alpha = \frac{N_\alpha}{\frac{1}{2} e^{\frac{F - E_\alpha}{KT}} + 1} \quad P_D = \frac{N_D}{2e^{\frac{F - E_D}{KT}} + 1}$$

$N_D = N_\alpha = 0$ собственный полупроводник.

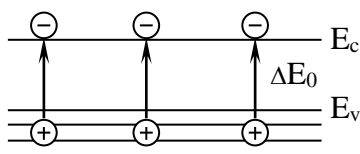
Уравнение электронейтральности $n = P$. Если $N_v = N_c$ т.е. $m_\alpha^* = m_{pd}^*$,

тогда $\frac{F - E_c}{KT} = \frac{E_v - F}{KT}$ откуда $F = \frac{E_v + E_c}{2}$ положение уровня Ферми от

температуры не зависит и лежит посередине запрещенной зоны.

Собственный полупроводник является невырожденным.

Генерация электронов и дырок проводимости в собственном полупроводнике:

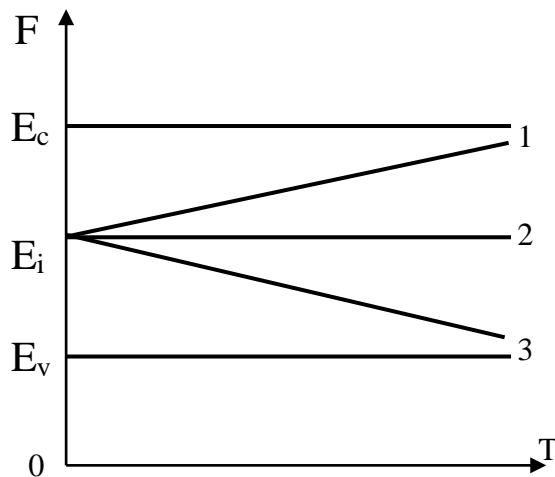


Переход каждого электрона из валентной зоны порождает в ней дырку.

$$E_a = \frac{\Delta E_0}{2}$$

$$n = N_c e^{-\frac{\Delta E_a}{KT}} \quad P = N_v e^{-\frac{\Delta E_a}{KT}}$$

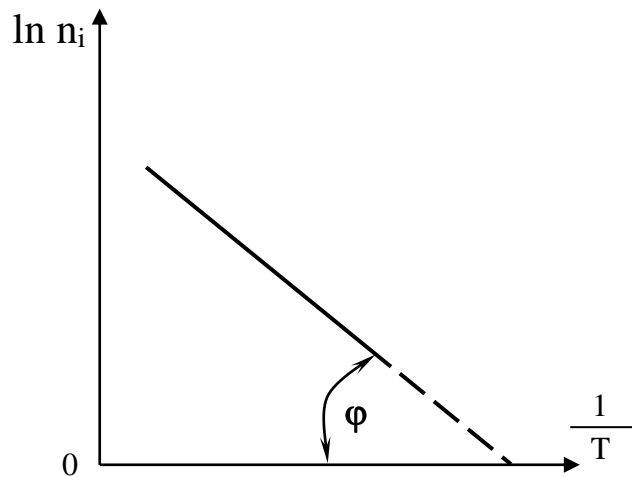
$$\text{Если } N_v \neq N_c, \text{ то } E_F = \frac{E_c - E_v}{2} + \frac{KT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c}$$



Уровень Ферми при $T = 0$, лежит в середине запрещенной зоны, он линейно зависит от температуры.

Температурная зависимость уровня Ферми в собственном полупроводнике. С ростом температуры уровень Ферми приближается к той зоне, которая имеет меньшую плотность состояний и поэтому заполняется быстрее.

$$n_i = n = P = \sqrt{N_v N_c} e^{-\frac{\Delta E_0}{2KT}} \quad \text{или} \quad n_i = 4,82 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_{nd}^* m_{pd}^*}{m^2} \right)^{3/4} T^{3/2} e^{-\frac{\Delta E_0}{2KT}}$$



На рисунке график $\ln n_i$ от обратной температуры представляет прямую линию: $\ln n_i = Const - \frac{3}{2} \ln \frac{1}{T} - \frac{\Delta E_0}{2K} \cdot \frac{1}{T}$

Зависимостью $\ln 1/T$ по сравнению с линейным членом можно пренебречь. Угол наклона прямой определяется шириной запрещенной зоны:

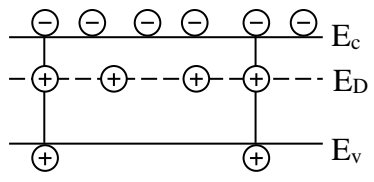
$$\operatorname{tg} \varphi = -\frac{\Delta E_0}{2K} \quad \text{откуда} \quad \Delta E_0 = 2K |\operatorname{tg} \varphi| \quad \operatorname{tg} \varphi \text{ измеряется по графику } (\ln n_i, 1/T)$$

Оценим собственную концентрацию носителей заряда в германии и

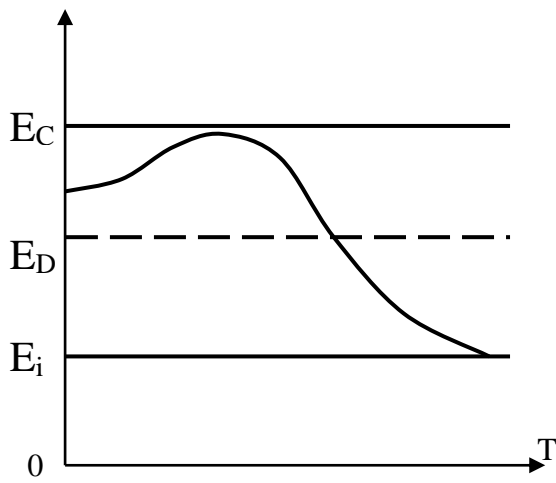
кремнии $\left(\frac{m_{nd}^* m_{pd}^*}{m^2} \right)^{3/2}$ равны 0,299 и 0,719, и при $T \approx 300^\circ\text{K}$,

$$n_i \approx 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3} \quad \text{и} \quad n_i \approx 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$$

Концентрация носителей заряда при $T \rightarrow 0$ обращается в нуль, и сопротивление собственного полупроводника должно расти до



бесконечности. Однако, в реальных полупроводниках всегда остается примесь, которая обеспечивает проводимость при любых температурах.



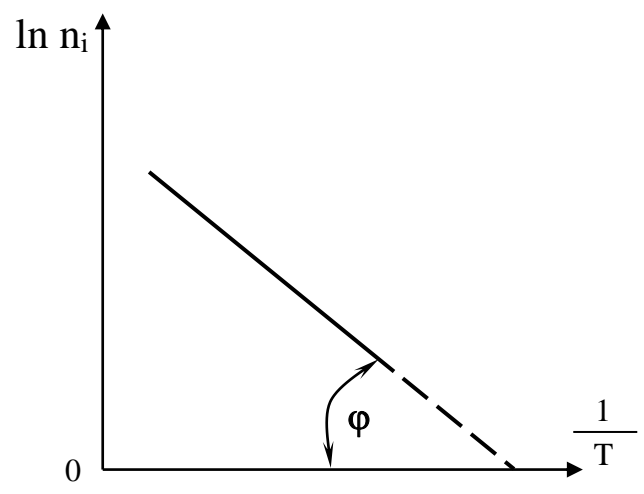
Тепловая генерация на рисунке носителей заряда в полупроводнике с донорной примесью.

Низкие температуры: электроны проводимости определяются концентрацией

примеси, которая возникает за счет ионизации донорной примеси.

$$F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{KT}{2} \ln \frac{N_d}{2N_c}$$

При повышении температуры уровень Ферми повышается, проходит при некоторой температуре через максимум, затем опускается. При $K_d=N_{2c}$ он снова находится в середине между E_c и E_D .



$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\Delta E_D}{2K} \Rightarrow \Delta E_D = 2K |\operatorname{tg} \varphi|$$

$$n = \sqrt{\frac{N_C N_D}{2}} e^{-\frac{\Delta E_D}{2KT}}$$

При достаточно высокой температуре $N_C \gg N_D$, то $\ln \frac{N_D}{N_C} < 0$

$$F = E_c + KT \ln \frac{N_D}{N_C}$$

$$n = N_C e^{\frac{\ln N_D}{N_C}} = N_D$$

концентрация электронов не зависит от температуры и равна концентрации примеси. (Область истощения примеси). Носители заряда называют основными, если их концентрация больше концентрации собственных носителей заряда n_i при данной температуре, если же концентрация меньше n_i , то их называют неосновными носителями заряда. В области истощения примеси концентрация неосновных носителей заряда должна резко возрастать с температурой

$$P = \frac{n_i^2}{n} = \frac{n_i^2}{N_D} = \frac{N_C N_V}{N_D} e^{-\frac{\Delta E_0}{KT}}$$

Последнее справедливо до тех пор, пока концентрация дырок остается много меньше концентрации электронов.

$$P \ll n = N_D$$

Высокие температуры

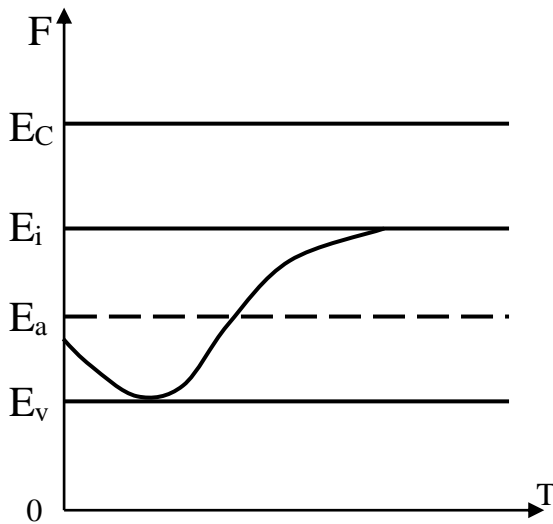
С ростом температуры число дырок возрастает и может стать сравнимой с концентрацией электронов $n = \frac{n_i^2}{n} + N_D$ вся примесь ионизирована и необходимо учитывать ионизацию вещества.

$$\text{Из уравнения } nP = n_i^2 = N_C N_V e^{-\frac{\Delta E_0}{KT}}$$

$$P = \frac{n_i^2}{n} = \frac{N_c N_v e^{-\frac{\Delta E_0}{KT}}}{n}$$

$P=N_D$ или $n=2N_D$ Температура перехода к собственной концентрации, тем выше, чем больше ΔE_0 и чем больше концентрация примесей.

Акцепторный полупроводник.



Температурная зависимость на рисунке уровня Ферми в полупроводнике с акцепторной примесью.

Оценим температуру, при которой наступает истощение примеси.

$$\frac{T}{300} = \frac{m}{m_d^*} 2,5 \left(\frac{N_D}{10^{18}} \right)^{2/3}$$

Когда вся примесь ионизирована:

$$E_F = E_c + KT \ln \frac{N_D}{N_a}$$

Когда вся примесь ионизирована и происходит ионизация основного вещества: $n=N_D+P$

Чем шире запрещенная зона и чем больше концентрация примеси, тем при большей температуре происходит переход к собственной проводимости.

Фотопроводимость

Ширину запрещенной зоны можно определить с помощью явления внутреннего фотоэффекта. Если полупроводник облучать монохроматическим светом, постепенно увеличивая частоту световой волны ν , то, начиная с некоторой частоты, ν_0 , можно обнаружить возрастание электропроводности (фотопроводимость). Эта частота соответствует такой энергии фотона $h\nu_0$, при которой электрон в основной зоне, поглотив фотон, получает от него энергию, достаточную для перехода в зону проводимости. Это имеет место, если выполняется неравенство

$$h\nu \geq h\nu_0 = \Delta E_g$$

Измеряя частоту света, при которой начинается рост электропроводности, можно получить ΔE_g . Получают хорошие результаты.

Эффект Холла в полупроводнике.

Физические явления, возникающие в веществе, находящемся в магнитном поле, при прохождении через вещество электрического тока под воздействием электрического поля, называют гальваномагнитными эффектами. Другими словами, гальваномагнитные явления наблюдаются в веществе при совместном действии электрического и магнитного полей. К гальваномагнитным явлениям относятся:

- 1) эффект Холла;
- 2) магниторезистивный эффект, или магнитосопротивление;
- 3) эффект Эттингсгаузена, или поперечный гальванотермомагнитный эффект;
- 4) эффект Нернота, или продольный гальванотермомагнитный эффект.

Эффект Холла называют также гальваномагнитным эффектом. Указанные выше названия «поперечный» и «продольный» гальванотермомагнитные эффекты отражают направления градиентов

температуры относительно тока; по отношению к магнитному полю они могут быть поперечными или продольными.

Гальваномангнитные эффекты можно представить на основе рассмотрения движения заряженной частицы в электрическом и магнитном полях под действием силы Лоренца:

$$\vec{F} = e\vec{E} + e[\vec{V}\vec{B}] = m^* \vec{r} \quad (1)$$

В параллельных электрическом и магнитном полях частица движется по винтовой линии с непрерывно возрастающим шагом. Частица имеющая в одном магнитном поле скорость $V_{\text{парал}}$ вдоль поля и $V_{\text{перп}}$ перпендикулярно полю, - вращается по окружности радиуса

$$\vec{r} = \frac{m^* \vec{V}_{\text{перп}}}{eB} = \frac{\vec{V}_{\text{перп}}}{\omega_c} \quad (2)$$

с угловой скоростью $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ и перемещается вдоль поля со скоростью $V_{\text{парал}}$

Поскольку электрическое поле не влияет на $V_{\text{перп}}$, но меняет $V_{\text{парал}}$, становится очевидным, что движение происходит по винтовой линии с переменным шагом.

В поперечных (или скрещенных) полях \vec{E} и \vec{B} частица, не имеющая начальной скорости, движется по циклоиде: частица вращается окружности

$$\text{радиуса } r = \frac{m^* E}{eB^2} \quad (3)$$

центр которой движется равномерно в направлении перпендикулярном электрическому и магнитному полям со скоростью дрейфа \vec{U}_d

$$\vec{U}_d = \frac{[\vec{E}\vec{B}]}{B^2} \quad (4)$$

Если частица имеет начальную скорость V_0 , лежащую в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, то траекторией частицы является трахоида (удлиненная или укороченная циклоида).

Если скорость движущейся частицы имеет составляющую вдоль магнитного поля, то на эту составляющую скорости не оказывает воздействие ни электрическое, ни магнитное поля.

При движении частицы в твердом теле необходимо учесть соударения, которые нарушают направленное движение частиц под действием полей. После каждого соударения частица будет двигаться по винтовой линии или трахоиде, которое характеризуется новыми параметрами.

Для характеристики величины поля необходимо сравнить время релаксации с периодом вращения частицы под действием магнитного поля.

Если время релаксации значительно превосходит период $\frac{2\pi}{\omega_c}$, то за время τ

частица совершит несколько оборотов, двигаясь по циклоиде или винтовой линии. Это возможно при больших магнитных полях. Если частица не совершает даже одного оборота за время τ , то магнитные поля считаются малыми. Таким образом, в сильных полях

$$\frac{\omega_c \tau}{2\pi} = \frac{e\tau}{m^*} \frac{B}{2\pi} \gg 1 \quad (5)$$

в слабых полях

$$\frac{\omega_c \tau}{2\pi} = \frac{e\tau}{m^*} \frac{B}{2\pi} \ll 1 \quad (6)$$

Понятие «сильные» поля или «слабые» зависит не только от величины индукции магнитного поля B , но и от подвижности носителей заряда. Условия (5) и (6) можно связать с радиусом окружности r , по которому движется частица, и длиной свободного пробега l :

$$l = v\tau; \quad r = \frac{v}{\omega_c} \quad \frac{1}{r} = \omega_c \tau \quad (7)$$

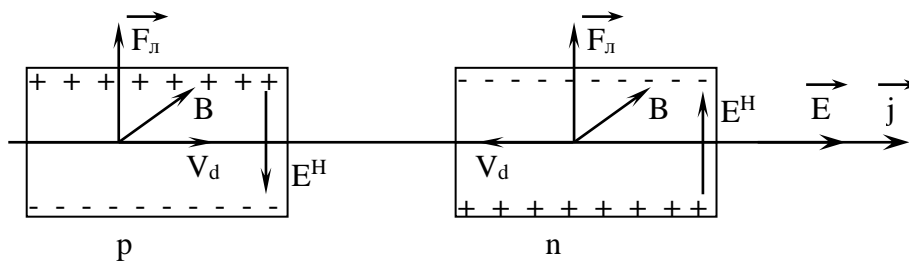
Следовательно, в любых магнитных полях $r \gg l$ – траектория частицы искривляется незначительно, в сильных магнитных полях траектория изменяется очень сильно.

Для понимания одних явлений достаточно учесть только скорость дрейфового движения

$$\vec{V}_d = \mu_d \vec{E}$$

в то время как для понимания других эффектов важно иметь в виду разброс скоростей электронов. Все это учитывается кинетическим уравнением, поэтому оно позволяет получить значительно более точное описание кинетических эффектов

1. Эффект Холла.



На рисунке показано возникновение поля Холла в электронном и дырочном полупроводниках.

Полупроводник имеет вид параллелепипеда сечением $a \cdot c$, по которому течет ток. Электрическое поле направлено вдоль оси X: $\vec{E} = (E, 0, 0)$

магнитное поле вдоль оси Y: $\vec{B} = (0, B, 0)$

При включении электрического поля возникает электрический ток

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (8)$$

Носители получают скорость направленного движения V_d - дрейфовую скорость - по полю для дырок и против поля для электронов.

При включении магнитного поля на электроны и дырки действует сила

$$\vec{F}_\wedge = e[\vec{V}_d \vec{B}] \quad (9)$$

перпендикулярная \vec{V}_d и \vec{B}

$$\vec{V}_d = \mu_d \vec{E} = \frac{e \langle \tau \rangle}{m^*} \vec{E} \quad (10)$$

поэтому

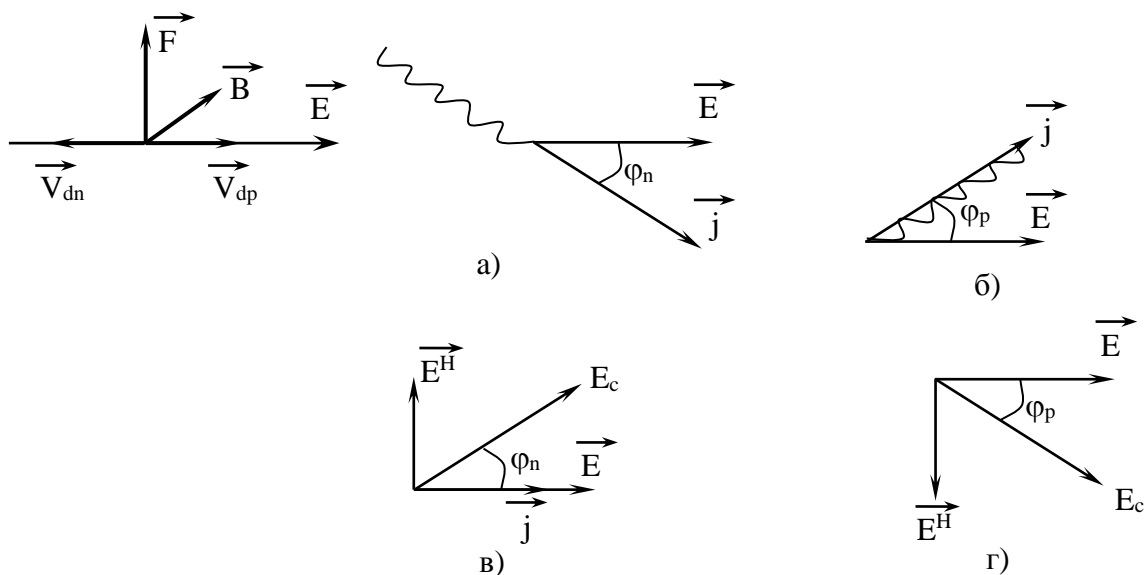
$$\vec{F}_\wedge = \frac{e^2 \langle \tau \rangle}{m^*} [\vec{E} \vec{B}] \quad (11)$$

т.е. сила Лоренца не зависит от знака носителей заряда, а определяется только направлением полей \vec{E} и \vec{B} , или \vec{j} и \vec{B} . На рисунке она направлена вверх

Носители заряда – электроны и дырки – отклоняются в одну и ту же сторону, если их скорость определяется электрическим полем.

В результате действия полей \vec{E} и \vec{B} и столкновений электроны и дырки будут двигаться по траекториям в виде прямой линии, усредняющей отрезки циклоид, под углом φ к полю \vec{E} . Другими словами вектор \vec{j} будет повернут на угол φ относительно вектора \vec{E} , причем направление поворота зависит от знака носителей заряда, в силу того, что электроны и дырки отклоняются в одну и ту же сторону (на рисунке, а, б).

Таким образом должно протекать в неограниченном веществе.



Если же полупроводник имеет конечные в направлении оси Z размеры, то в результате того, что компонент $j_z \neq 0$, произойдет накопление носителей на верхней (на рисунке) стороне образца, возникнет их дефицит на нижней. Противоположные стороны образца заряжаются, и возникает поперечное по отношению к \vec{F} электрическое поле. Это поле носит название поля Холла, а

явление возникновения поперечного поля под действием магнитного поля называют эффектом Холла. Направление поля Холла \vec{E}^H зависит от знака носителей заряда, в данном случае \vec{E}^H направлено вверх в n – образце и вниз в p – образце. До наложения на образец магнитного поля эквипотенциальные поверхности представляли собой плоскости, перпендикулярные оси X, т.е. вектору \vec{j} величина E^H будет расти до тех пор, пока поперечное поле не скомпенсирует силу Лоренца. После этого носители заряда будут двигаться как бы только под действием одного поля \vec{E} , и траектория носителей заряда будет представлять собой снова прямую линию вдоль оси X, тем самым вектор \vec{j} будет направлен по полю \vec{E} . но суммарное электрическое поле $E' = E + E''$ будет повернуто на некоторый угол φ относительно оси X или \vec{j} (рис. в,2).

Таким образом, в неограниченном полупроводнике поворачивается вектор тока, а в ограниченном – вектор электрического поля и в любом случае между \vec{j} и \vec{E}' (или \vec{E}) возникает угол φ , называемый углом Холла. Эквипотенциальные поверхности в ограниченном образце повернуты на угол φ относительно их первоначального положения, поэтому в точках, лежащих в одной плоскости, перпендикулярной \vec{j} появляется разность потенциалов.

$$V^H = cE^H$$

где E^H – напряженность поля Холла, а c – размер образца в направлении, перпендикулярном \vec{E} и \vec{B} : V^H носит название Холловой разности потенциалов.

Холл экспериментально нашел, что E^H определяется плотностью тока \vec{j} и индукцией магнитного поля \vec{B} , а также свойствами образца.

Свойства образца определяются некоторой величиной R , называемой коэффициентом Холла. Четыре величины: E^H, \vec{j}, \vec{B} и R связаны эмпирическим соотношением

$$\vec{E}^H = R[\vec{B}j] = -R[j\vec{B}] \quad (12)$$

Легко найти R, если учесть, что холлово поле должно компенсировать силу Лоренца:

$$e\vec{E}^H + \vec{F} = 0 \quad (13)$$

Отсюда следует:

$$(14) \quad \vec{E}^H = -\frac{1}{e}\vec{F} = -\frac{1}{e}e[\vec{V}_d\vec{B}] = -[\vec{V}_d\vec{B}] = -\mu_d[\vec{E}\vec{B}]$$

С другой стороны, согласно (12)

$$\vec{E}^H = -R[j\vec{B}] = -R\sigma[\vec{E}\vec{B}] \quad (15)$$

Сравнивая (14) и (15), получаем

$$R\sigma = \mu_d \quad R = \frac{\mu_d}{\sigma} = \frac{1}{en}$$

n – концентрация носителей заряда (электронов или дырок).

Коэффициент Холла обратно пропорционален концентрации носителей заряда и его знак совпадает со знаком носителей заряда.

Определив R, можно найти знак носителей заряда или тип проводимости. Знак же R определяется по знаку \vec{E}^H , или V^H , если соответствующим образом определить знак V^H . Угол Холла φ можно определить:

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{\vec{E}^H}{E} = -\frac{RB\sigma\vec{E}}{\vec{E}} = -R\sigma B = -\mu_d B$$

При заданных \vec{E} и \vec{B} поле Холла определяется только подвижностью носителей заряда.

Оценим R. Пусть $n = 10^{16} \text{ см}^{-3}$, тогда

$$R = \frac{1}{1,6 \cdot 10^{16}} \frac{\text{см}^3}{\text{Кл}} \approx 600 \frac{\text{см}^3}{\text{Кл}} = 6 \cdot 10^{-4} \frac{\text{м}^3}{\text{Кл}}$$

Сопротивление в магнитном поле $\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \mu^2 B^2$ возрастает, поскольку

холлово поле компенсирует действие магнитного поля лишь в среднем, как если бы все носители заряда двигались с одной и той же скоростью. Однако скорости электронов (и дырок) различны, поэтому на частицы, движущиеся со скоростями, большими средней скорости, сильнее действует магнитное поле, чем холлово. Наоборот, более медленные частицы отклоняются под действием превалирующего холлова поля. В результате разброса частиц по скоростям уменьшается вклад в проводимость быстрых и медленных носителей заряда, что приводит к увеличению сопротивления, но в значительно меньшей степени, чем в неограниченных полупроводниках.