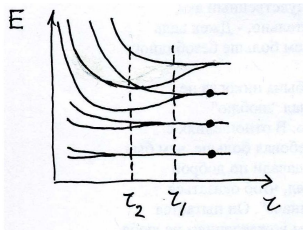


Раздел VII Физика твердого тела

Глава I. Зонная теория.

Металлы.

1. Образование энергетических зон в кристаллах.

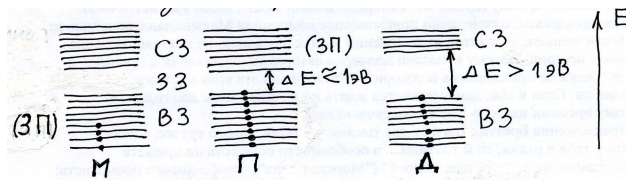


А) По мере сближения атомов между ними возникает взаимодействие, которое приводит к изменению

энергетических уровней. Каждый атомный уровень в системе из N атомов расщепляется на N близко лежащих уровней - зоны.

Б) Наибольшее расщепление происходит у валентных уровней. Оно составляет несколько эВ. Сильно связанные расщепляются слабо.

В) Возможны различные ситуации: r_1 -зоны не перекрываются, r_2 -появляется перекрытие зон.



Энергетические зоны позволяют с единых позиций объяснить существование металлов, полупроводников и диэлектриков.

У металлов валентная зона (ВЗ) заполнена не полностью, поэтому электроны под действием электрического поля имеют возможность перейти на близко лежащие свободные уровни, это приводит к появлению электрического тока. Валентная зона металлов является одновременно зоной проводимости (ЗП).

В полупроводниках электрический ток могут создавать только те электроны, которые под влиянием тепловой энергии или другим способом (фотоэффект) переходят в свободную зону (СЗ), она для полупроводников является зоной проводимости. Кроме того, вакансии в валентной зоне (дырки) так же принимают участие в создании электрического тока.

В диэлектриках из-за большой ширины запрещенной зоны (ЗЗ) переход электронов в свободную зону невозможен. Диэлектрики не проводят электрический ток.

2. Динамика электронов в кристаллической решетке. Эффективная масса.

Электроны проводимости в металлах и полупроводниках, а также дырки в валентной зоне движутся как почти свободные частицы.

С точки зрения квантовой механики им соответствуют волновые функции де Бройля

$$\psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}, \text{ но в отличие от реально}$$

свободных частиц $E = \hbar \omega \neq \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, то есть

появляется явление аналогичное дисперсии света. В этом случае под скоростью движения электрона в кристалле следует понимать

$$\text{групповую скорость: } V_{gp} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}.$$

Тогда ускорение электрона под действием внешних сил (не кристаллических)

$$\text{равно: } a = \frac{dV_{gp}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}.$$

Связь $\frac{dk}{dt}$ с внешними силами получается из

предположения, что изменение энергии происходит под влиянием только внешних

$$dE = dA^{внеш} = F^{внеш} V_{gp} dt = F^{внеш} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt$$

сил:

$\Downarrow$

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

Тогда связь ускорения электрона с внешними

$$\text{силами имеет вид: } \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} a = F^{внеш}$$

$$\boxed{m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}}$$

Величина m^* называется эффективной массой.

$$\text{Для свободной частицы } E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

эффективная масса совпадает с обычной

$$m^* = m. \text{ При движении в кристалле}$$

эффективная масса может сильно отличаться от обычной и даже быть отрицательной.

Введение эффективной массы m^* позволяет рассматривать движение электрона в кристалле под влиянием внешних сил, абстрагируясь от взаимодействия с кристаллическим полем.

3. Электроны проводимости в металлах.

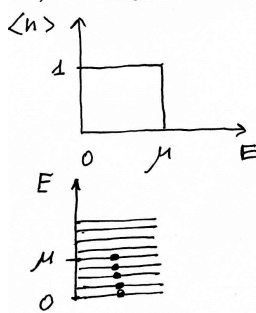
В металлах электроны проводимости ведут себя как практически свободные частицы, их эффективная масса почти не отличается от обычной $m^* \simeq m$. Среднее число электронов в квантовых состояниях определяются функцией Ферми - Дирака:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$$

A) $T=0^0K$

Положение химического потенциала при

$T = 0^0 K$ находится из условия:



$$\int_0^{\infty} \langle n \rangle g(E) dE = N$$

$\Downarrow$

$$\int_0^{\mu} 1 \cdot g(E) dE = N$$

$\Downarrow$

$$\int_0^{\mu} \frac{V 4\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E} dE = \frac{V 4\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \frac{\mu^{3/2}}{3/2} = N$$

$$\mu(0^0 K) = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3} = E_F$$

Химический потенциал при $T = 0^0 K$ часто называют энергией Ферми E_F . При типичных концентрациях электронов проводимости $n \approx 10^{23} \text{ см}^{-3}$ $E_F \approx 5 - 10 \text{ эВ}$, поэтому $kT \ll E_F$ вплоть до температур плавления ($kT \approx 0,03 \text{ эВ}$ при $T \approx 300^0 K$).

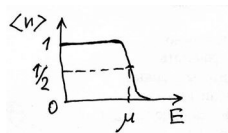
Химический потенциал в металлах находится на границе между заполненными квантовыми состояниями и свободными. Физический

смысл химического потенциала,
отсчитываемого от дна ЗП, при $T = 0^0 K$
(энергия Ферми) – максимальная
кинетическая энергия электронов
проводимости.

Средняя энергия электронов проводимости:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} E \langle n(E) \rangle g(E) dE = \frac{1}{N} \int_0^{E_F} E g(E) dE = \frac{3}{5} E_F$$

Б) $T \neq 0^0 K, kT \ll E_F$



$$\mu(T) \approx E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right]$$

Приближением $T = 0^0 K$ для металлов можно
пользоваться вплоть до температур плавления.

Вопросы:

1. Отличия металлов, полупроводников и диэлектриков с точки зрения зонной теории.
2. Что такое эффективная масса.
3. Где находится химический потенциал у металлов.
4. Физический смысл энергии Ферми.
5. Зависимость химического потенциала от температуры.