
ЛЕКЦИЯ 10

ЭЛЕКТРОННАЯ И ДЫРОЧНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ. ЭЛЕКТРОНЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Мы описываем движение электрона с помощью заданного закона дисперсии и внешних сил.

Теперь подробнее рассмотрим эти внешние силы: \vec{E} , \vec{B} :

$$\vec{F}_{vneshn} = e\vec{E} + \frac{1}{c}[\vec{v}, \vec{B}] \quad \text{— сила Лоренца.}$$

Для правильного описания нужно было бы взять гамильтониан системы:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta^2 + \hat{V}_{resh} + \hat{V}_{vneshn}$$

и решить уравнение Шредингера.

Но мы воспользуемся квазиклассическим приближением. Оно справедливо при: $\lambda_{dB} \ll \lambda_{char}$. Это условие выполняется, поскольку

$$\lambda_{dB} \sim a; \lambda_{dB} \sim \frac{\hbar}{E_F}.$$

Понятно, что электрическое поле не может сильно меняться на расстоянии порядка одного ангстрема.

При этом характерное поле внутри структуры: $E_{resh} \sim \frac{e^2}{a} \sim Figures^8$ В/см, а внешнее на 4 порядка меньше.

Теперь мы заменим оператор внешнего поля просто на потенциальную энергию, т. к. он меняется медленно. А первые два члена гамильтониана дают нам закон дисперсии, который будет являться кинетической энергией электрона: $H = E(\vec{k}) + V_{vneshn}$.

Запишем уравнение Гамильтона:

$$\vec{v} = \frac{\partial E(\vec{k})}{\hbar \partial \vec{k}},$$



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

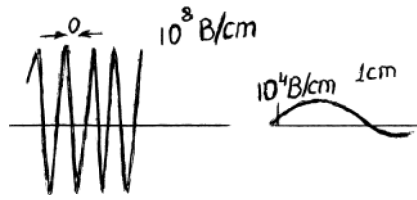


Рис. 10.1

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{\partial V_{vнешн}}{\partial \vec{r}} = \vec{F}_{vнешн}.$$

Можно провести аналогию с радиотехникой: периодическую часть мы назовем несущей волной, а внешнюю — модуляцией. Затем произведем демодуляцию, получив усреднение. В итоге мы и получим квазиимпульс

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}_{period} + \vec{F}_{vнешн}.$$

Выведем уравнение для электрического поля:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = e\vec{E}.$$

Если нет внешних сил, то вектор \vec{k} не меняется, и энергия тоже. Если же произошло изменение \vec{k} , то можно записать приращение энергии:

$$dE(\vec{k}) = e\vec{E}d\vec{x} = e\vec{E} * \vec{v}(\vec{k})dt.$$

Поскольку функция сложная, то нужно записать:

$$\frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dt} dt,$$

$$\vec{v}(\vec{k})\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = e\vec{E} * \vec{v}(\vec{k}).$$

Отсюда получаем требуемое уравнение.

Определим, чем же является электрон в твердом теле. Он задается суперпозицией блоховских волн и является волновым пакетом:

$$\sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}')\psi_{\vec{k}'}.$$

У этой функции должен быть максимум в районе какого-то значения $\vec{k}' \simeq \vec{k}_0$, но все равно он будет обладать шириной в k -пространстве $\Delta\vec{k}$, а это значит, что будет конечное расстояние и в x -пространстве, так как соотношение неопределенностей: $\Delta k \Delta x \simeq 1$.

Волновые числа ограничены зоной Бриллюэна, т. е. $k_0 \sim \frac{1}{a}$. Мы хотим, чтобы $\Delta k \ll k_0$, а значит получим:

$$\Delta x \gg a$$

— значит, волновой пакет размазан на большом количестве постоянных решетки.



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

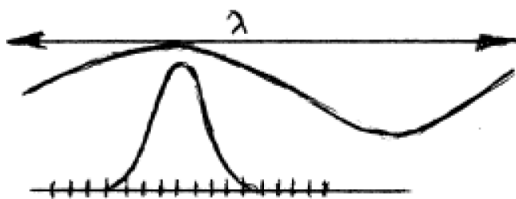


Рис. 10.2

Поскольку мы работаем в квазиклассике, то есть еще характерный размер изменения внешнего поля, и он должен быть больше, чем область, по которой размазан электрон. Значит, картина размеров должна выглядеть следующим образом:

Поскольку есть закон дисперсии, $E(\vec{k})$ — периодическая, ограниченная функция. Она имеет экстремум. Тогда можно разложить вблизи экстремума \vec{k}_0 :

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) + \dots$$

Если мы хотим узнать, как выглядит изоэнергетическая поверхность $E(\vec{k}) = \text{const}$, то нужно диагонализировать матрицу вторых производных. Тогда эффективная масса определяется соотношением:

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}.$$

Получим эффективную массу другим способом. Второе уравнение Гамильтона является по сути вторым законом Ньютона, а значит можно найти ускорение и массу:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = - \frac{\partial V_{\text{нешн}}}{\partial \vec{r}} = \vec{F}_{\text{нешн}}.$$

Выразим ускорение через скорость: $\vec{a} = \frac{d\vec{v}(\vec{k})}{dt}$, сначала для одной компоненты:

$$a_j = \frac{dv_j(\vec{k})}{dt} = \frac{\partial v_i}{\partial k_j} \frac{dk_j}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} (F_{\text{нешн}})_j.$$

Получается, что ускорение не направлено вдоль действия силы, а коэффициент пропорциональности опять есть эффективная масса:

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}.$$

Можно построить направления векторов: волнового, скорости (всегда перпендикулярна волновому вектору), силы.

Рассмотрим движение электрона в зоне проводимости под действием внешнего электрического поля:

$$\vec{k}(0) = \vec{k}_0; \quad \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = e\vec{E}.$$

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

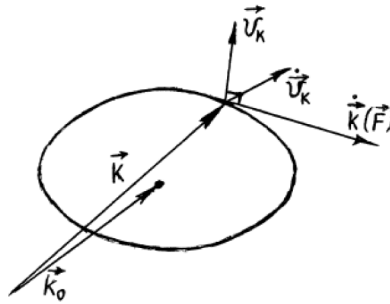


Рис. 10.3

Проинтегрировав это уравнение, получим:

$$\vec{k} = \vec{k}_0 + \frac{e\vec{E}}{\hbar}t.$$

Но поскольку волновой вектор ограничен границей зоны Бриллюэна, то изменение квазиимпульса будет периодическим.

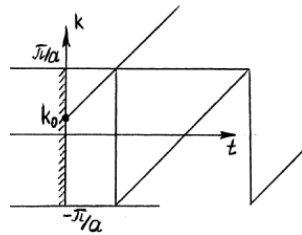


Рис. 10.4

В реальном пространстве, энергия является периодической функцией от волнового вектора, а значит, скорость тоже будет периодической:

$$\vec{v}(k_0 + \frac{eE}{\hbar}t),$$

а значит путь электрона будет периодическим, т. к. электрон будет совершать колебания, так называемые блоховские осцилляции.

Но на практике реализовать такую картину не удастся, потому что нужен идеальный кристалл длиной Figures метров.

Перейдем к магнитным полям:

Пусть есть закон дисперсии в виде эллипсоида:

$$E\vec{k} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right).$$

Встает вопрос — откуда взять эффективные массы, т. к. закон дисперсии мы знаем только вблизи экстремумов. Нужно как-то найти их экспериментально.

Под действием постоянного однородного магнитного поля электрон совершает круговые движения в плоскости поля с частотой:

$$\omega_c = \frac{eB}{m_0c} \text{ — циклотронная частота.}$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Магнитное поле не изменяет энергию электрона, поэтому он будет бегать по изоэнергетической поверхности перпендикулярно направлению магнитного поля.

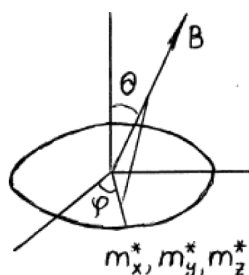


Рис. 10.5

Мы можем найти частоту его движения:

$$\omega_c^2 = \frac{e}{c} \left(\frac{B_x^2}{m_y m_z} + \frac{B_y^2}{m_x m_z} + \frac{B_z^2}{m_x m_y} \right)$$

— это собственная частота вращения электрона.

Нужно ее измерить. Можно это сделать в эксперименте на резонанс: электрон будет поглощать только свою частоту. Поворачивая нужным образом поле, мы находим компоненты попарных произведения эффективных масс, а затем решаем уравнение и получаем сами эффективные массы.

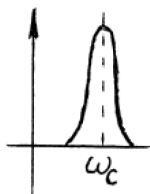


Рис. 10.6

Также этот метод используется для нахождения формы изоэнергетической поверхности. Время оборота $\tau = \frac{2\pi}{\omega} = f(S_{sech})$ зависит от площади сечения. Таким образом, определяя площадь сечения в разных точках, можно восстановить форму изоэнергетической поверхности.



Рис. 10.7

Сведем все данные, которые мы получили по электронам в одну таблицу:

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

	Свободный электронный газ	Электроны в твердом теле
Квантовые числа	$\hbar\vec{k}$ — импульс	$\vec{k} \equiv$ квазиимпульс n -номер зоны
Область изменения квантовых чисел	\vec{k} — любое + граничные условия Борна-фон Кармана	$\vec{k}(T = \text{const}) \in$ зоне Бриллюэна $n \in Z^+$
Энергия	$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$E_n(\vec{k}) \equiv$ закон дисперсии $E_n(\vec{k} + 2\pi\vec{b}) = E_n(\vec{k})$ в n -ой зоне
Скорость	$\vec{v} = \frac{\hbar\vec{k}}{m_0}$	средняя скорость $v_n(\vec{k})$
ψ - функция	$\psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$	$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{nk}(\vec{r})$

Таблица 10.1

Проведем небольшую аналогию. Если ветер дует нам в спину, то мы начинаем приобретать какую-то скорость. Со временем, после нарастания силы ветра, мы понимаем, что находимся в решетке, и от нее тоже начинает дуть ветер, который со временем уравновешивает внешний ветер, а затем и вовсе сводит его влияние на нет. При этом наша эффективная масса изменяется по законам, описанным на графике.

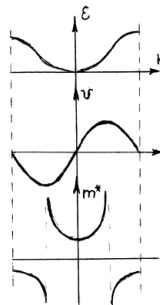


Рис. 10.8

Но этот подход не совсем верен, поскольку при любом \vec{k} , не совпадающим с границей зоны Бриллюэна, решетка не оказывает никакого влияния.

Начнем заполнять нашу картину электронами. Всего $N_{mest} = N_{prim.yach}$. Если рассматривать случай решетки Бравэ, то число мест для электронов совпадает с количеством атомов.

Разрешенные уровни «линейчатые». Поскольку на каждом уровне 2 электрона, они друг друга уравновешивают, и ток не течет:

$$e\vec{v} = \sum_{\vec{k}} = 0.$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

После воздействия внешней силы электроны перераспределятся. Электроны заполненных зон вклада не дадут. Мы добавим электроны на те места, где их нет, а затем вычтем:

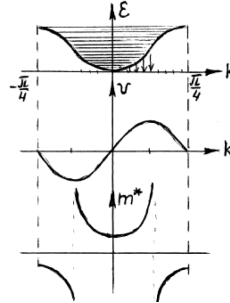


Рис. 10.9

$$e\vec{v} = \sum_{\vec{k} < \vec{k}'} e * \vec{k}_k + e \sum_{\vec{k}' < \vec{k} < \vec{k}_{Br}} \vec{k}_k - e * \sum_{\vec{k}' < \vec{k} < \vec{k}_{Br}} \vec{k}_k.$$

Тогда первые два члена будут составлять ток в заполненной зоне и их сумма равна нулю. А третий член даст нам ток. Мы суммировали по пустым местам.

Рассмотрим, почему элементы второй группы ведут себя как проводники, а не диэлектрики, хотя внешняя оболочка у них заполнена. Это связано с тем, что нужно использовать не одномерную, а трехмерную модель. В ней при выборе разных направлений \vec{k} будут получаться разные значения энергий. И когда одна зона уже полностью заполнена, для другого \vec{k} , она еще может дальше заполняться электронами.

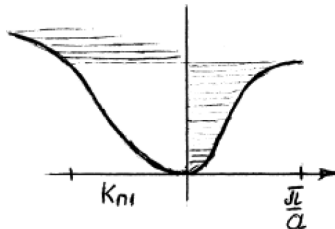


Рис. 10.10

Также возможна ситуация с перекрытием более высокой зоны с более низкой, когда заполнение будет происходить параллельно и там и там, и в одной зоне будут проводить электроны, а в другой — дырки.

Теперь перейдем к полупроводникам.

Мы рассматривали законы дисперсии, например для ПК:

$$E(\vec{k}) = -E_0 - A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a).$$

При этом мы не учитывали свободные зоны над зоной проводимости.

Делали мы так потому, что энергия, которую нужно приобрести электрону для попадания в более высокую зону, равна минимум бэВ. Вероятность попасть туда определяется экспонентой $e^{-\frac{\Delta E}{\kappa T}}$.

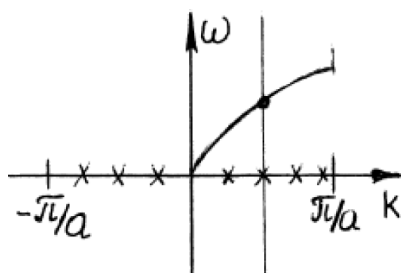


Рис. 10.11

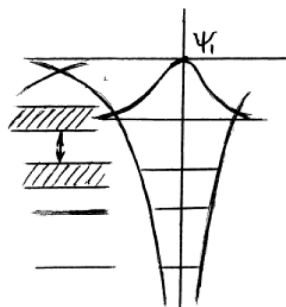


Рис. 10.12

При комнатной температуре $kT = 1/40$ эВ, то есть даже для *Figures*²² электронов получается ничтожно малая вероятность перепрыгнуть запрещенную зону.

Рассмотрим углерод. Его электронная конфигурация — $C 1s^2 2s^2 2p^2$. Валентность должна быть равна двум, т. к. два электрона на внешней оболочке. Это действительно так — в угарном газе CO валентность равна двум.

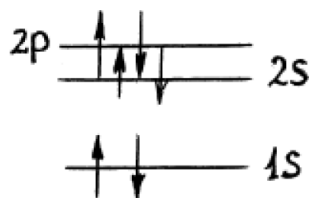


Рис. 10.13

Но также есть углекислый газ CO_2 , в котором у углерода валентность уже четыре. Это происходит из-за того, что уровни энергии $2s$ и $2p$ у углерода очень близки.

Он вступает в связь в возбужденном состоянии $C^* 1s^2 2s^1 2p^3$, и может образовать четыре связи. Вначале получается проигрыш в энергии, но затем, при образовании ковалентной связи, получается уже выигрыш в энергии.

В четвертую группу также входят кремний и германий: $Si 3s^2 3p^3$; $Ge 3s^2 3p^3$.

Алмаз образует вот такую решетку:

Поскольку энергии s и p очень близки, то по сути получается вырождение, и волновую функцию электрона следует рассматривать как суперпозицию:

$$\psi = a\psi_{2s} + b\psi_{2p_x} + c\psi_{2p_y} + d\psi_{2p_z}.$$

Утверждается, что коэффициенты должны быть такими, чтобы в каких-то направлениях существовали максимумы волновой функции, и именно в этих направлениях будут



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

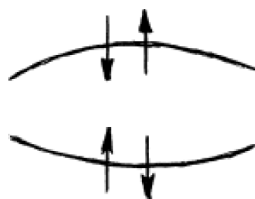


Рис. 10.14

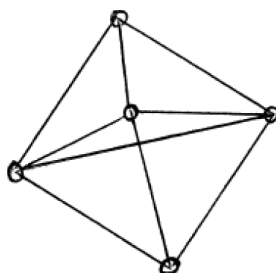


Рис. 10.15

образовываться химические связи. Это так называемая теория направленной валентности.



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu