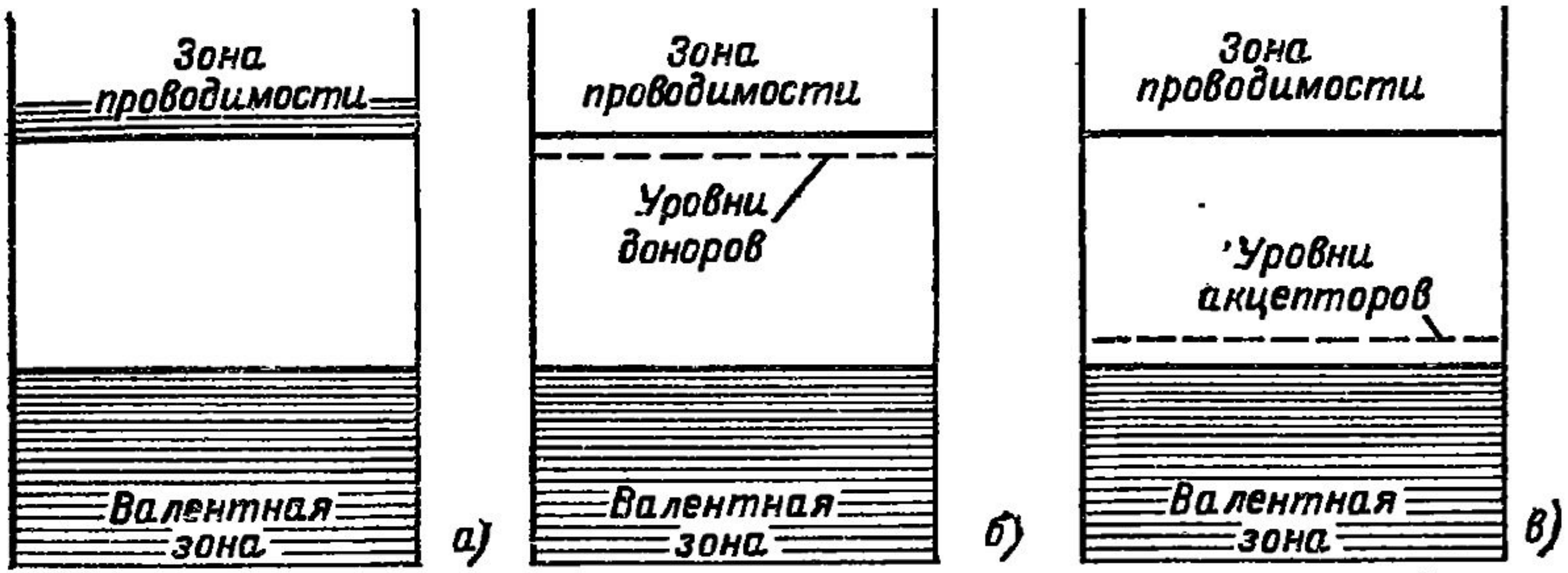
Зонная структура веществ при T=0

Зонная структура при $T = 0$ К.

а — металла; *б* — полупроводника; *в* — диэлектрика.

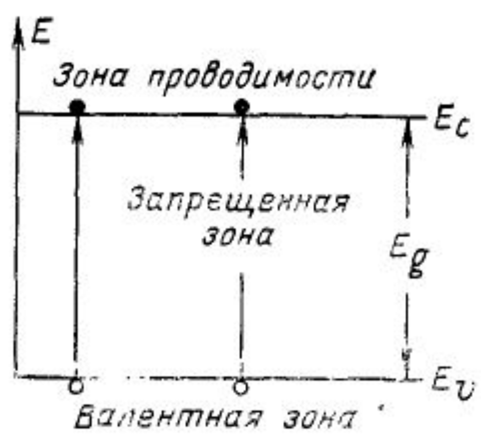
Зонные структуры полупроводников



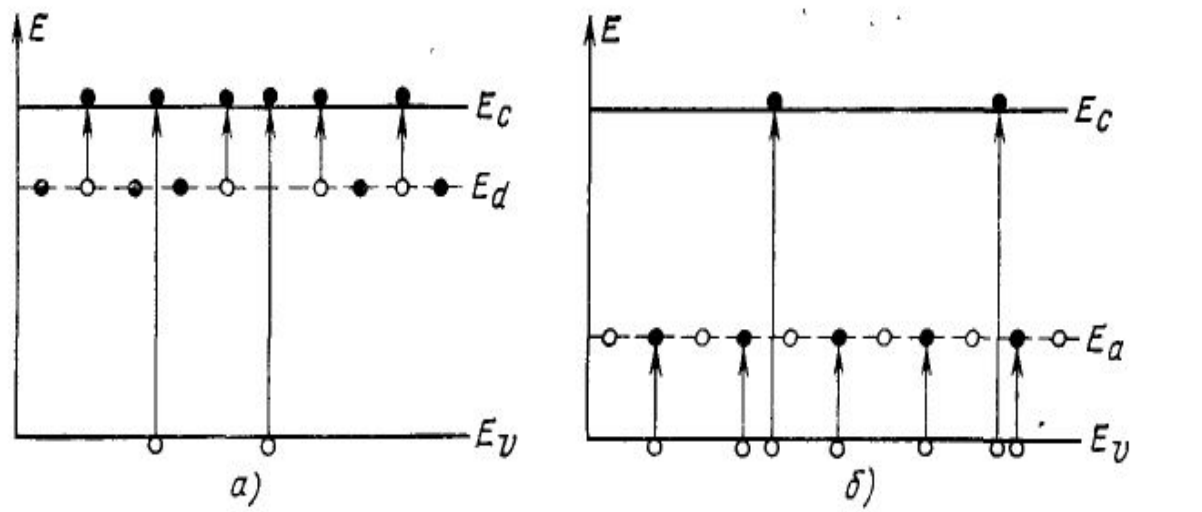
Зонные структуры полупроводников.

а — собственный полупроводяик при $T \neq 0$ K; *б* — электронный полупроводник при $T = 0$ K; *в* — дырочный полупроводник при $T = 0$ K.

Энергетические диаграммы собственного и примесного п/п

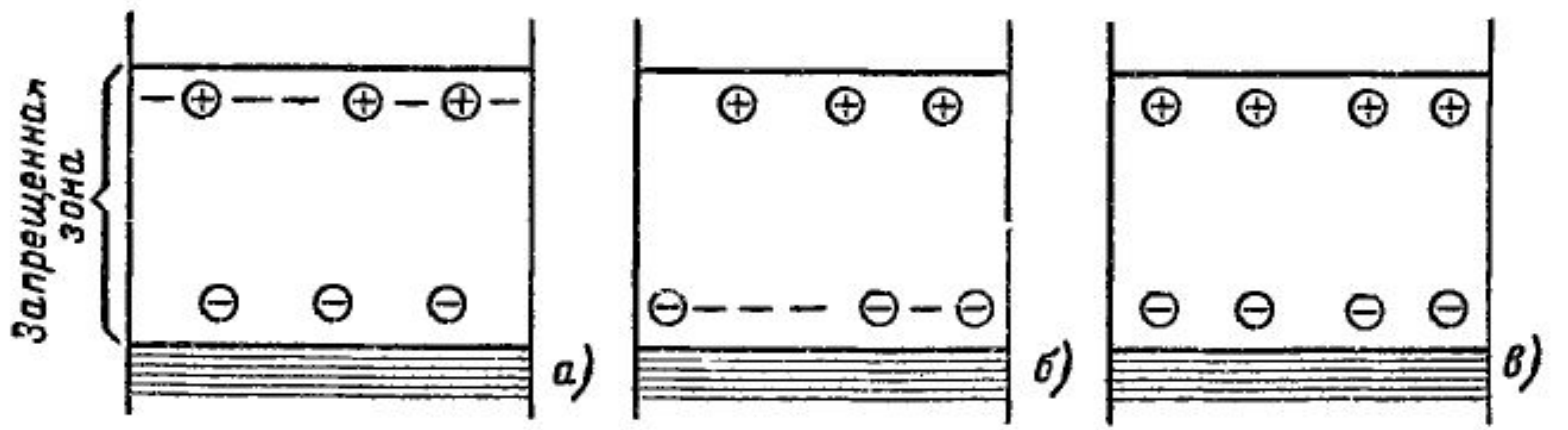


Схематическое изображение энергетических зон собственного полупроводника



Энергетическая диаграмма донорного (*а*) и акцепторного (*б*) полупроводников

Концентрации донорных и акцепторных атомов



Результирующая концентрация донорных и акцепторных атомов при наличии примесей обоих типов для $T = 0$ K.

а — превалирует донорная примесь; *б* — превалирует акцепторная примесь; *в* — количество обеих примесей одинаково.

Движение свободного электрона

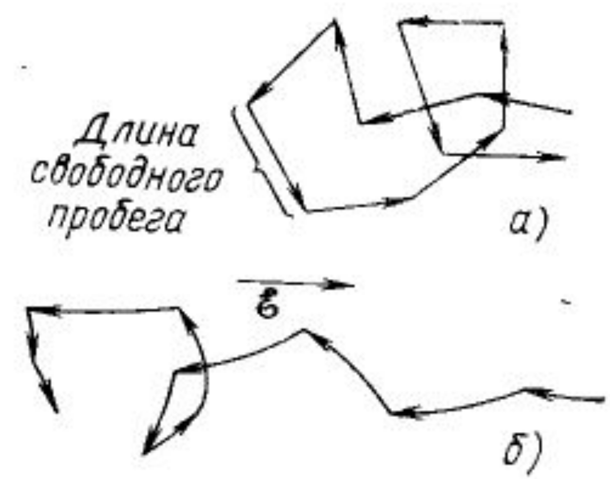
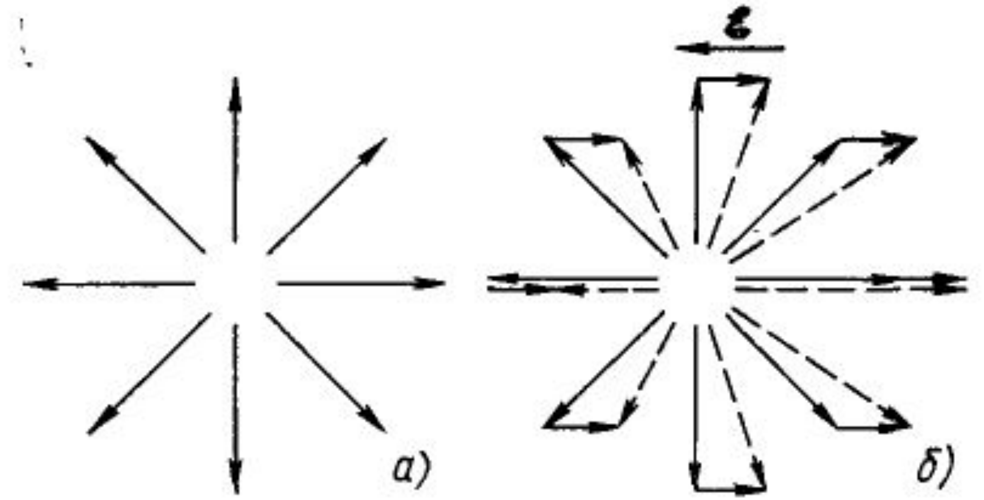


Схема движения свободного электрона при отсутствии (*а*) и наличии внешнего электрического поля (*б*)



Схематическое изображение скоростей электронов проводимости при отсутствии (*а*) и наличии внешнего электрического поля (*б*)

$$l = v_0\tau,$$

Движение электрона

Плотность тока, обусловленная движением одного электрона:

$$\mathbf{J} = -\frac{e}{\Omega}\mathbf{v}.$$

Плотность тока для всей системы электронов:

$$\mathbf{J} = -\frac{e}{\Omega}\sum_{\substack{s \\ \text{По всей} \\ \text{зоне}}} \mathbf{v}_s = 0.$$

Суммарная плотность тока всех электронов валентной зоны:

$$\mathbf{J} = -\frac{e}{\Omega}\sum_{s \neq i}\mathbf{v}_s = -\frac{e}{\Omega}\sum_{\substack{s \\ \text{По всей} \\ \text{зоне}}} \mathbf{v}_s + \frac{e}{\Omega}\mathbf{v}_i.$$

$$\mathbf{J} = \frac{e}{\Omega}\mathbf{v}_i.$$

Теория электропроводности

Объем электронов: $\frac{4}{3}\pi r_0^3 n \approx 10^{-17}$

Связь плотности тока с дрейфовой скоростью: $\mathbf{J} = -en\mathbf{v}.$

Изменение концентрации носителей заряда: $-dn = n\frac{dt}{\tau}.$

Количество электронов, не испытавших соударений: $n(t) = n_0 e^{-t/\tau},$

Ускорение электрона во внешнем электрическом поле: $a = \frac{e\mathscr{E}}{m}$

За время dt электрон приобретет дрейфовую скорость: $v_t = at = \frac{et}{m}\mathscr{E}$

Путь, который пройдет электрон: $x = \frac{e\mathscr{E}}{2m}t^2.$

Теория электропроводности

Расстояние, которое пройдут все электроны по направлени[ю] x, совпадающему с направлением поля:

$$X = \frac{en_0\tau^2\mathscr{E}}{2m}\int_0^\infty \left(\frac{t}{\tau}\right)^2 e^{-t/\tau}\,\frac{dt}{\tau} = \frac{en_0\tau^2\mathscr{E}}{m}.$$

Время движения электронов:

$$T = n_0\bar{t}.$$

$$T = \int_0^\infty \frac{tn\,dt}{\tau}.$$

Среднее время свободного пробега:

$$\bar{t} = \frac{1}{n_0}\int_0^\infty \frac{tn\,dt}{\tau} = \frac{1}{n_0}\int_0^\infty \tau n_0\,\frac{t}{\tau}\,e^{-t/\tau}\,\frac{dt}{\tau} = \tau.$$

Скорость дрейфа электронов:

$$v = \frac{X}{T} = \frac{e\tau\mathscr{E}}{m},$$

$$v = \mu\mathscr{E}$$

Подвижность носителей заряда:

$$\mu = v/\mathscr{E} = e\tau/m$$

Плотность тока:

$$\mathbf{J} = -en\dot{\mathbf{v}} = en\mu\mathscr{E},$$

Удельная проводимость:

$$\sigma = J/\mathscr{E} = en\mu.$$

$$\sigma = \frac{e^2n\tau}{m}.$$

Уравнение Шредингера: $\hat{H}\Phi = \mathscr{E}\Phi$

Волновая функция зависит от координат всех электронов и атомных ядер:

$$\Phi = \Phi(\mathbf{r}_1, \ \mathbf{r}_2, \ldots, \ \mathbf{r}_n, \ \mathbf{R}_1, \ \mathbf{R}_2, \ldots, \ \mathbf{R}_N).$$

Оператор Гамильтона включает в себя:

1) Оператор кинетической энергии электронов $\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta_i\right)$

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

2) Оператор кинетической энергии ядер $\sum_\alpha \left(-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\Delta_\alpha\right)$

$$\Delta_\alpha = \frac{\partial^2}{\partial X_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z_\alpha^2}$$

3) Потенциальную энерг… …вия электронов $\frac{1}{2}\sum_i \sum_{\substack{j \\ i \neq j}} \frac{e^2}{r_{ij}}$

4) Потенциальную энергию попарного взаимодействия ядер

$$V_0(\mathbf{R}_1, \ \mathbf{R}_2, \ldots, \ \mathbf{R}_N)$$

5) Потенциальную энергию взаимо… …рами

$$U(\mathbf{r}_1, \ \mathbf{r}_2, \ldots, \ \mathbf{r}_n, \ \mathbf{R}_1, \ \mathbf{R}_2, \ldots, \ \mathbf{R}_N)$$

$$\Big\{\sum_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta_i\right) + \sum_\alpha\left(-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\Delta_\alpha\right) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_{\substack{j \\ i\neq j}}\frac{e^2}{r_{ij}} + V_0(\mathbf{R}_1, \ \mathbf{R}_2, \ldots, \ \mathbf{R}_N) + U(\mathbf{r}_1, \ \mathbf{r}_2, \ldots, \ \mathbf{r}_n, \ \mathbf{R}_1, \ \mathbf{R}_2, \ldots, \ \mathbf{R}_N)\Big\}\Phi = \mathscr{E}\Phi$$

Заполнение валентной зоны:

- 1) Зона заполнена электронами частично.
- 2) В валентной зоне все возможные электронные состояния заняты, но эта зона перекрывается со свободной зоной, не занятой электронами.
- 3) Число возможных состояний в валентной зоне равно количеству валентных электронов атомов, образовавших кристалл.

Эффективная масса носителей заряда:

В электрическом поле:

$$\mathbf{F} = -e\mathcal{E} \qquad \mathbf{a} = \frac{1}{m_0}\mathbf{F} = -\frac{1}{m_0}e\mathcal{E}$$

Ускорение:

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{\partial v}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2 E}{\partial p^2}F.$$

Ускорение для трехмерного случая:

$$\left.\begin{aligned}
a_x &= \frac{\partial^2 E}{\partial p_x^2}F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial p_x\,\partial p_y}F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial p_x\,\partial p_z}F_z;\\
a_y &= \frac{\partial^2 E}{\partial p_y\,\partial p_x}F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial p_y^2}F_y + \frac{\partial^2 F}{\partial p_y\,\partial p_z}F_z;\\
a_z &= \frac{\partial^2 E}{\partial p_z\,\partial p_x}F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial p_z\,\partial p_y}F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial p_z^2}F_z.
\end{aligned}\right\}$$

Обратный тензор эффективной массы (тензор второго ранга):

$$\mathbf{m}^{-1} = \begin{Vmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial p_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_x\,\partial p_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_x\,\partial p_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p_y\,\partial p_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_y\,\partial p_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p_z\,\partial p_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_z\,\partial p_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_z^2} \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} m_{xx}^{-1} m_{xy}^{-1} m_{xz}^{-1} \\ m_{yx}^{-1} m_{yy}^{-1} m_{yz}^{-1} \\ m_{zx}^{-1} m_{zy}^{-1} m_{zz}^{-1} \end{Vmatrix}.$$