

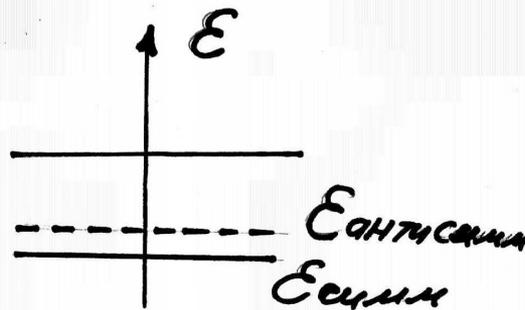
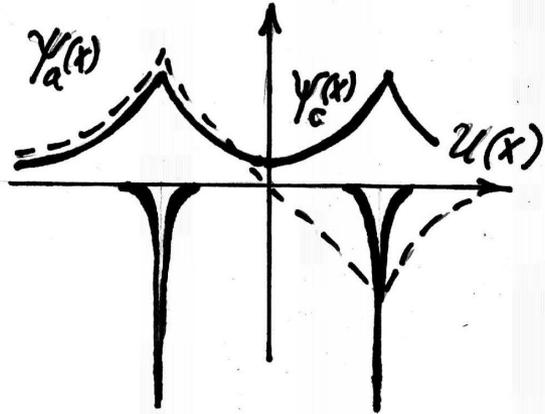
# **Лекция 3: Элементы зонной теории твердого тела**

## **Разрешённые и запрещённые по энергии зоны в кристаллах.**

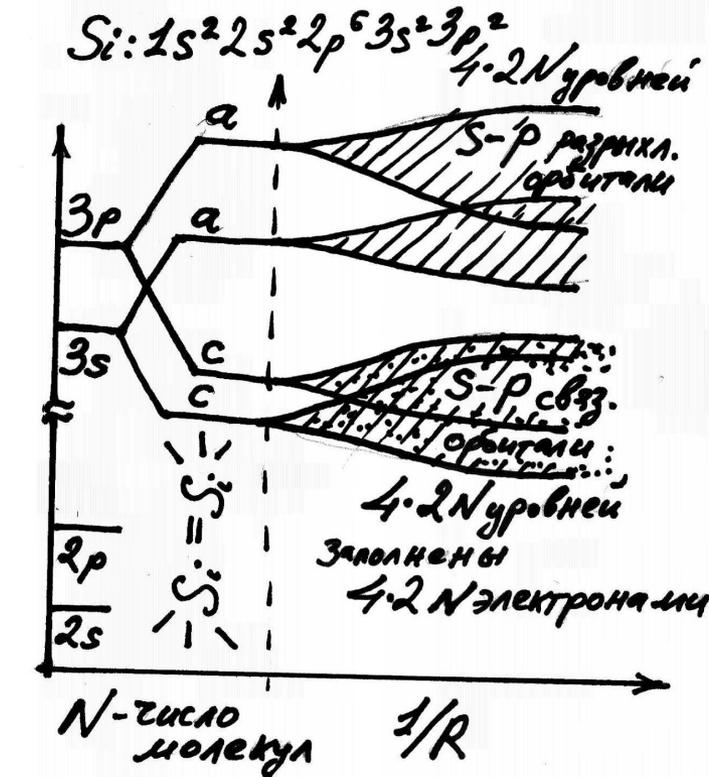
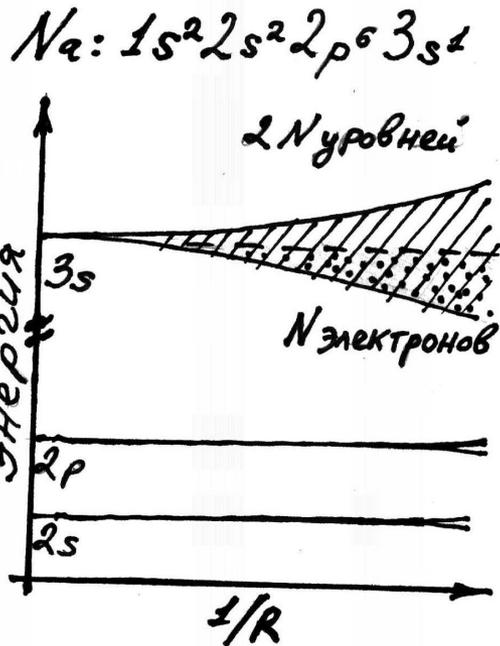
- Расщепление атомных уровней в зоны.**
- Металлы, диэлектрики и полупроводники с точки зрения зонной теории.**
- Уравнение Шредингера для кристалла - адиабатическое приближение, одноэлектронное приближение, электрон в периодическом потенциале, Блоховские волны.**
- Квазиимпульс, модель расширенных и приведённых зон Бриллюэна.**
- Электрон в твердом теле как квазичастица.**

# Таблица Менделеева

периоды	группы элементов												
	а I б	а II б	а III б	а IV б	а V б	а VI б	а VII б	а VIII б					
1	<b>H</b> водород						<b>H</b> водород	<b>He</b> гелий	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; text-align: center;">           атомный номер              название         </div>				
2	<b>Li</b> литий	<b>Be</b> бериллий	<b>B</b> бор	<b>C</b> углерод	<b>N</b> азот	<b>O</b> кислород	<b>F</b> фтор	<b>Ne</b> неон					
3	<b>Na</b> натрий	<b>Mg</b> магний	<b>Al</b> алюминий	<b>Si</b> кремний	<b>P</b> фосфор	<b>S</b> сера	<b>Cl</b> хлор	<b>Ar</b> аргон					
4	<b>K</b> калий	<b>Ca</b> кальций	<b>Sc</b> скандий	<b>Ti</b> титан	<b>V</b> ванадий	<b>Cr</b> хром	<b>Mn</b> марганец	<b>Fe</b> железо	<b>Co</b> кобальт	<b>Ni</b> никель			
	<b>Cu</b> медь	<b>Zn</b> цинк	<b>Ga</b> галлий	<b>Ge</b> германий	<b>As</b> мышьяк	<b>Se</b> селен	<b>Br</b> бром	<b>Kr</b> криптон					
5	<b>Rb</b> рубидий	<b>Sr</b> стронций	<b>Y</b> иттрий	<b>Zr</b> цирконий	<b>Nb</b> ниобий	<b>Mo</b> молибден	<b>Tc</b> технеций	<b>Ru</b> рутений	<b>Rh</b> родий	<b>Pd</b> палладий			
	<b>Ag</b> серебро	<b>Cd</b> кадмий	<b>In</b> индий	<b>Sn</b> олово	<b>Sb</b> сурьма	<b>Te</b> теллур	<b>I</b> йод	<b>Xe</b> ксенон					
6	<b>Cs</b> цезий	<b>Ba</b> барий	<b>La*</b> лантан	<b>Hf</b> гафний	<b>Ta</b> тантал	<b>W</b> вольфрам	<b>Re</b> рений	<b>Os</b> осмий	<b>Ir</b> иридий	<b>Pt</b> платина			
	<b>Au</b> золото	<b>Hg</b> ртуть	<b>Tl</b> таллий	<b>Pb</b> свинец	<b>Bi</b> висмут	<b>Po</b> полоний	<b>At</b> астат	<b>Rn</b> радон					
7	<b>Fr</b> франций	<b>Ra</b> радий	<b>Ac*</b> актиний	<b>Ku</b> курчатовий	<b>Ns</b> нильсборий								
* Л А Н Т А Н О Й Д Ы													
<b>Ce</b> церий	<b>Pr</b> празеодим	<b>Nd</b> неодим	<b>Pm</b> прометий	<b>Sm</b> самарий	<b>Eu</b> европий	<b>Gd</b> гадолиний	<b>Tb</b> тербий	<b>Dy</b> диспрозий	<b>Ho</b> гольмий	<b>Er</b> эрбий	<b>Tm</b> тулий	<b>Yb</b> иттербий	<b>Lu</b> лютеций
* А К Т И Н О И Д Ы													
<b>Th</b> торий	<b>Pa</b> протактиний	<b>U</b> уран	<b>Np</b> нептуний	<b>Pu</b> плутоний	<b>Am</b> америчий	<b>Cm</b> кюриум	<b>Bk</b> берклиум	<b>Cf</b> калифорний	<b>Es</b> эйнштейний	<b>Fm</b> фермий	<b>Md</b> менделевий	<b>No</b> нобелий	<b>Lr</b> лоуренсий
<div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="width: 20px; height: 10px; background-color: red; margin-right: 5px;"></div> - s - элементы           <div style="width: 20px; height: 10px; background-color: orange; margin-right: 5px; margin-left: 20px;"></div> - p - элементы           <div style="width: 20px; height: 10px; background-color: blue; margin-right: 5px; margin-left: 20px;"></div> - d - элементы           <div style="width: 20px; height: 10px; background-color: black; margin-left: 20px;"></div> - f - элементы         </div>													



**Иллюстрация образования энергетических зон.**



Запрет Паули,  
«спиновая»  
двойка для  
электронов

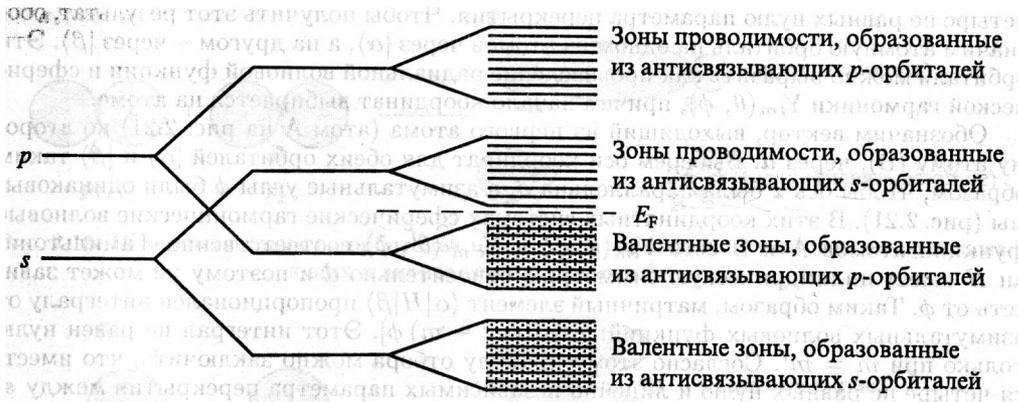
«Вытягивание»  
электронных  
облаков при s-p  
гибридации

Образование молекулы  
и s-p - гибридизация

R – расстояние между  
ближайшими атомами.

# Электронный спектр твёрдого тела.

## 1. Расщепление атомных уровней в зоны



Эволюция атомных орбиталей, приводящая к образованию зоны проводимости и валентной зоны в полупроводнике

## 2. Квантово-механическая задача многих тел

Гамильтониан кристалла

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_j \frac{P_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{jj'} \frac{Z_j Z_{j'} \cdot e^2}{|R_j - R_{j'}|} - \sum_{ij} \frac{Z_j \cdot e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{ii'} \frac{e^2}{|r_i - r_{i'}|}$$

Первое упрощение:  
**валентные электроны**  
и **ионный остов**

Приближение **Борна-Оппенгеймера** или **адиабатическое приближение** – частота колебаний ионов  $\approx 10^{13}$  Гц, частота колебаний электронов  $\approx 10^{15}$  Гц.

$$H = H_{ions}(R_j) + H_e(r_i, R_{j0}) + H_{e-ions}(r_i, \delta R_j)$$

Далее - **одноэлектронное приближение**, тогда уравнение Шрёдингера имеет вид

$$H_{1e} \Phi_n(r) = \left( \frac{p^2}{2m} + V(r) \right) \Phi_n(r) = E_n \Phi_n(r) \quad \text{где } V(r)\text{-периодическая функция}$$

# Трансляционная симметрия.

Решение Гамильтониана  
ищем в виде **Блоховских  
функций**

$$H_{1e} \Phi_n(\mathbf{r}) = \left( \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \Phi_n(\mathbf{r}) = E_n \Phi_n(\mathbf{r})$$

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = f(\mathbf{r}) \cdot e^{i\varphi}, \Phi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

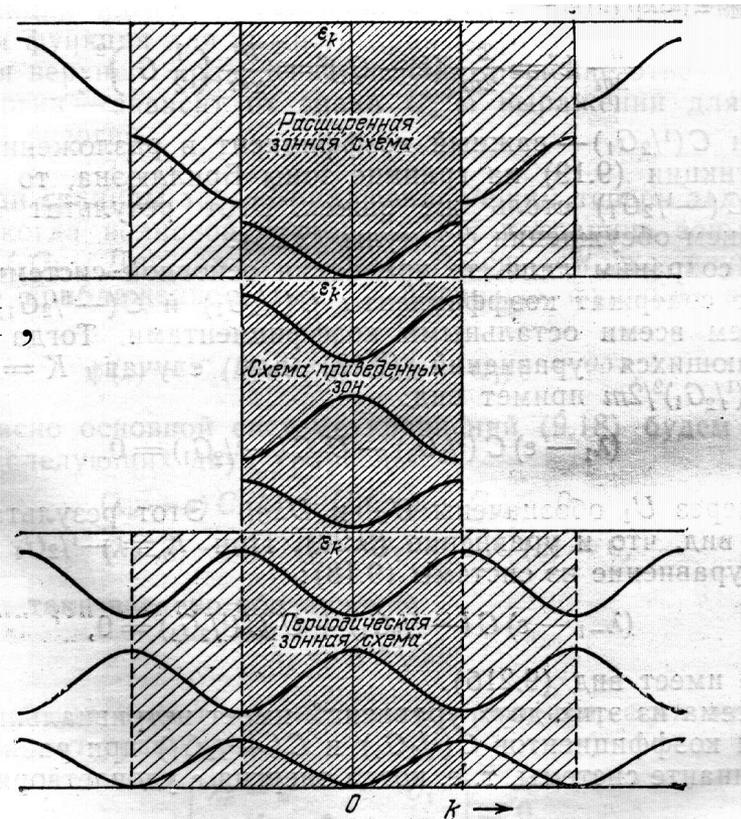
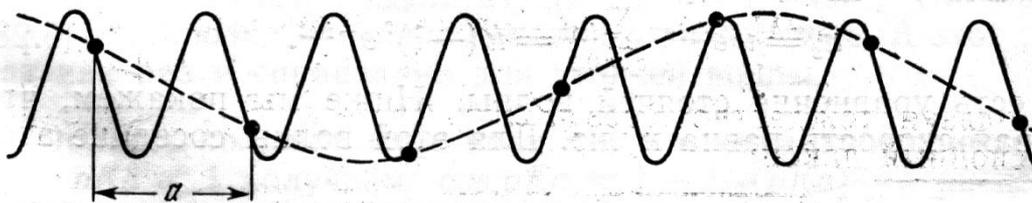
Где  $U(\mathbf{r})$ -периодическая  
функция, с той же точечной  
симметрией, что и  $V(\mathbf{r})$ .

$\Phi(\mathbf{r})$ -волна с волновым вектором  $\mathbf{k}$ .

Обратное пространство  
(пространство волновых векторов)

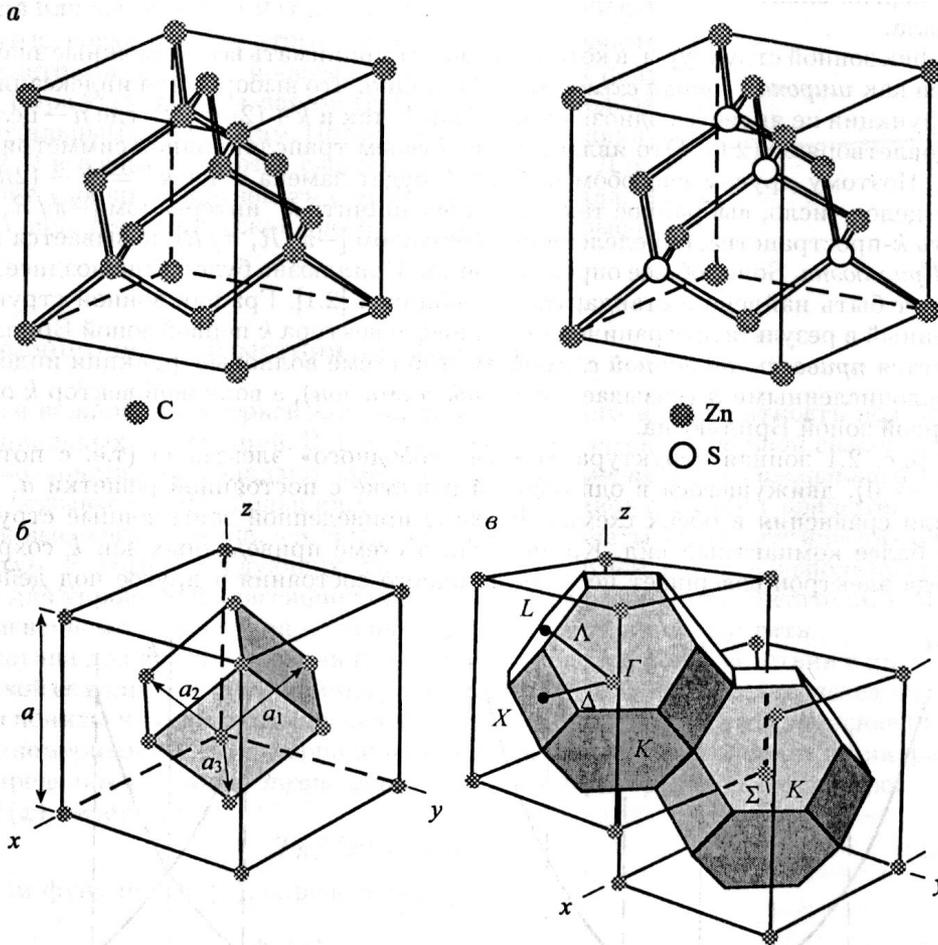
Так как волновой вектор определён с  
точностью до вектора обратной решётки,  
то **КВАЗИИМПУЛЬС**

Почти свободные электроны



# Зоны Бриллюэна. Точечная симметрия.

Обратная решётка  $\Lambda = 2\pi[\mathbf{b} \times \mathbf{c}] / a[\mathbf{b} \times \mathbf{c}]$



А) Кристаллическая структура алмаза и цинковой обманки

Б) ГЦК решётка с набором примитивных векторов трансляции

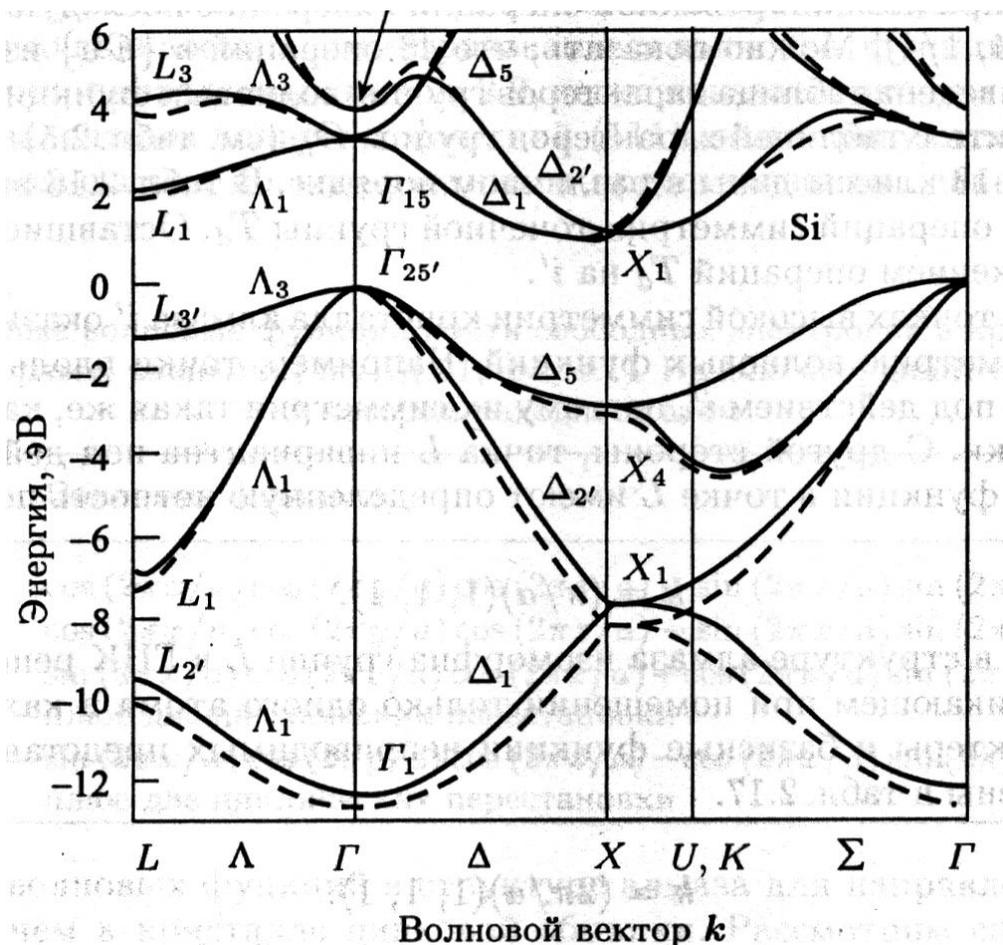
В) Обратная решётка. Зона Бриллюэна. Особые точки симметрии.

# Энергетический спектр электрона в кристаллах. Дырки

- **Некоторые методы расчёта электронного спектра в кристаллах. Модель почти свободных электронов. Метод сильной связи.**
- **Минимумы и максимумы энергии в спектре, долины.**
- **Эффективная масса, изоэнергетические поверхности, анизотропия эффективной массы.**
- **Понятие дырки.**

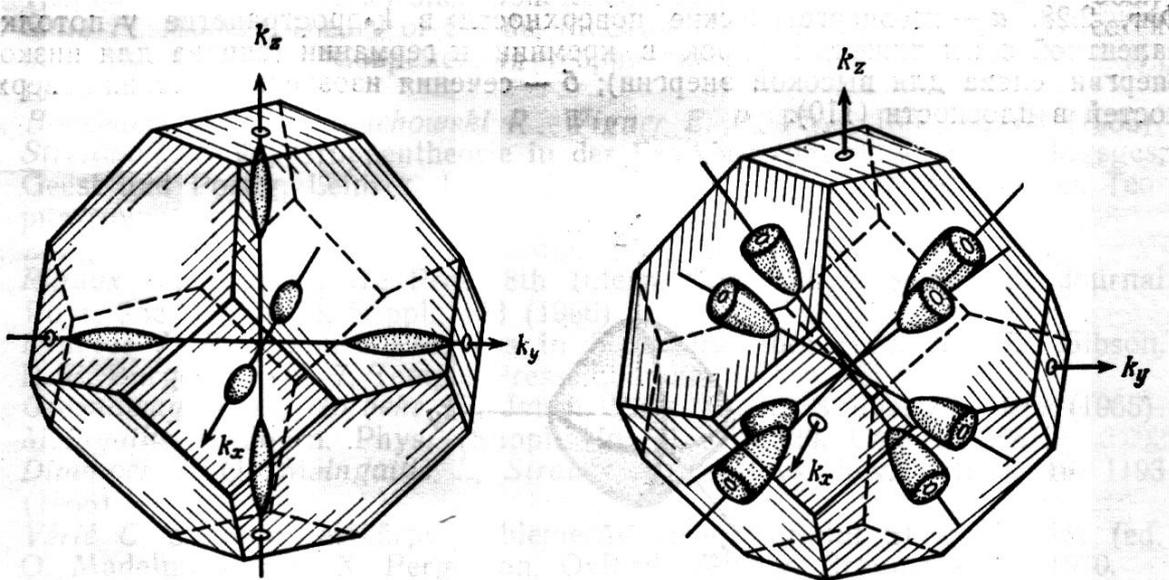
# Методы расчёта зонной структуры

1. Почти свободные электроны.
2. Метод сильной связи (tight binding).
3. «Квази» *ab-initio* методы: (k-p) метод, метод псевдопотенциала, метод линейной комбинации атомных орбиталей.



# Электроны и дырки. Эффективная масса.

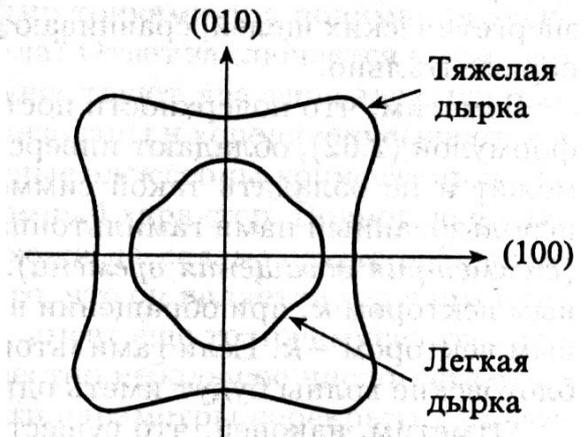
## Анизотропия эффективной массы



$$\Delta E = \frac{(\Delta k)^2}{2m_{eff}}$$

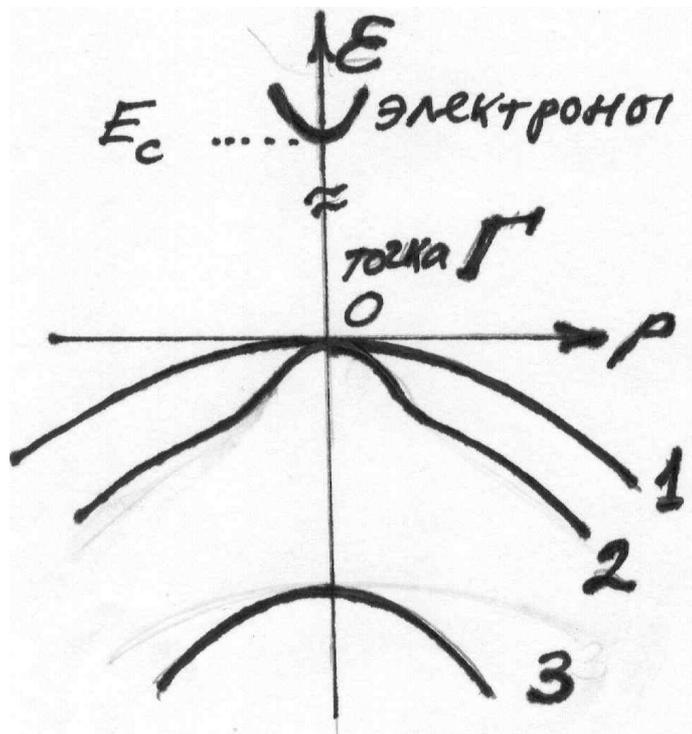
$$m_{i,j} = \left( \left. \frac{\partial \varepsilon(p)}{\partial p_i \partial p_j} \right|_{p=p_0} \right)^{-1}$$

Изоэнергетические поверхности в  $k$ -пространстве у дна зоны проводимости в кремнии (слева) и германии (справа)



# Зонная структура полупроводников. Некоторые экспериментальные методы её исследования.

- Прямозонные и непрямозонные полупроводники.
- Зонная структура основных полупроводников (Si, Ge, GaAs).
- Оптические и электрофизические методы исследования зонной структуры.



Увеличенная область центра зоны Бриллюэна GaAs:

- 1) зона тяжёлых дырок;
- 2) зона легких дырок;
- 3) отщеплённая за счет спин-орбитального взаимодействия зона.

# Запрещённая зона. Прямозонные и непрямозонные полупроводники.

