

Презентация на тему: электроны в кристаллах

ПОДГОТОВИЛ: СТУДЕНТ ГРУППЫ РТ-11

ДМИТРИЕВ ИЛЬЯ

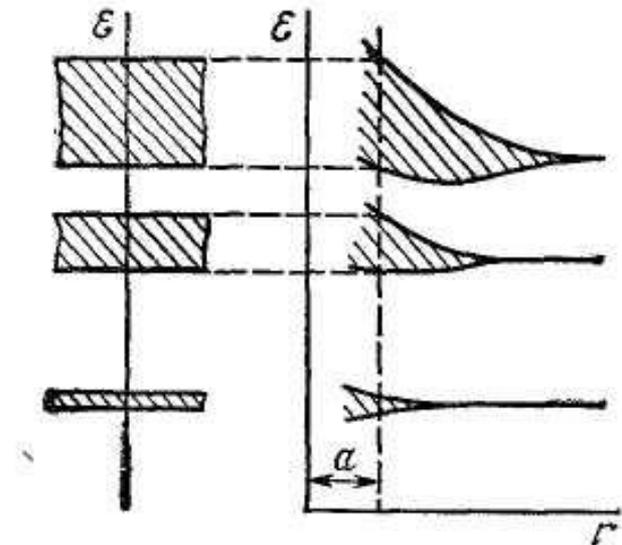
ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Одноэлектронное приближение при котором вместо взаимодействия данного электрона с остальными электронами по отдельности рассматривается его движение в некотором результирующем (**самосогласованном**) поле усредненного пространственного заряда остальных электронов

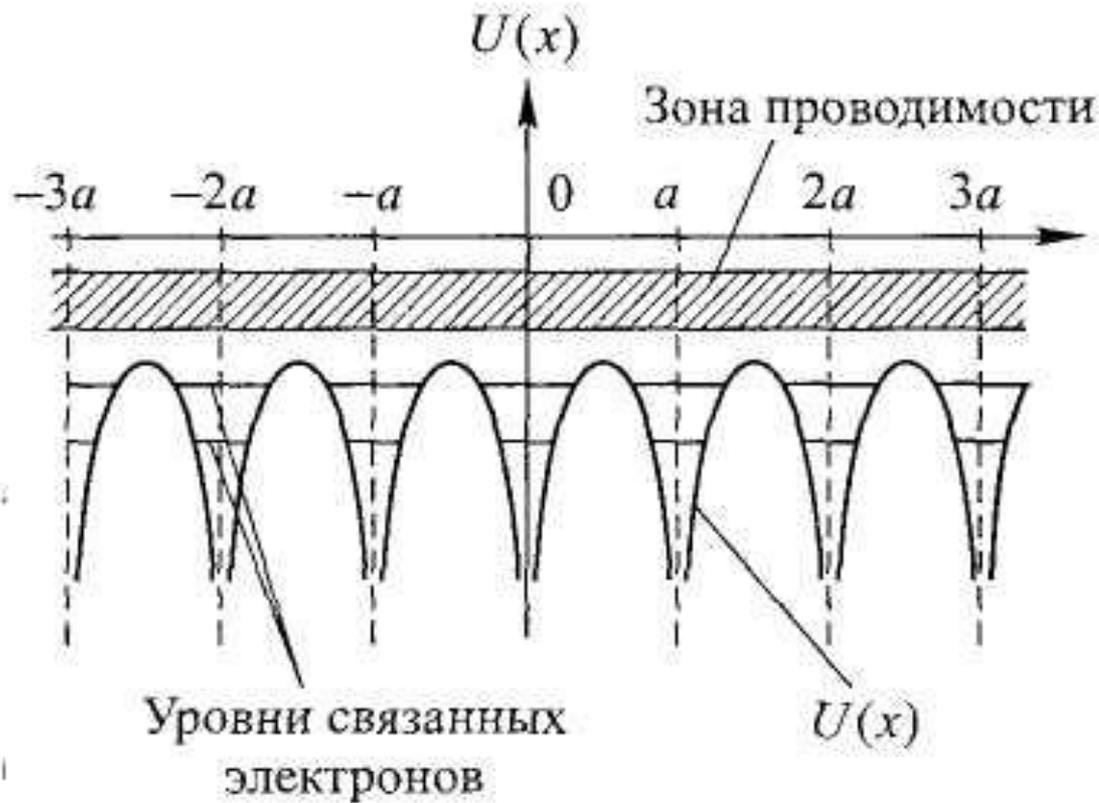
$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - (W_p + W_e)]\Psi = 0$$

В приближении сильной связи предполагается, что во всем объеме кристалла существует сильно изменяющееся потенциальное поле

$$W_p(r) = W_a + \Delta W(r)$$



ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ



Разрешенной зоной называется интервал значений энергии, которой может обладать электрон в кристалле

Запрещенные зоны это энергетические промежутки, отделяющие разрешенные зоны друг от друга

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Свойство 1. Число квантовых состояний в разрешенной зоне равно кратности вырождения атомного уровня энергии, из которого возникла зона, умноженное на полное число атомов в кристалле

Свойство 2. Электроны являются фермионами и подчиняются принципу Паули, два и более тождественных фермиона (частицы с полуцелым спином) не могут одновременно находиться в одном и том же квантовом состоянии, поэтому число электронов в разрешенной зоне не может превзойти числа имеющихся в нем состояний, называемых вакансиями.

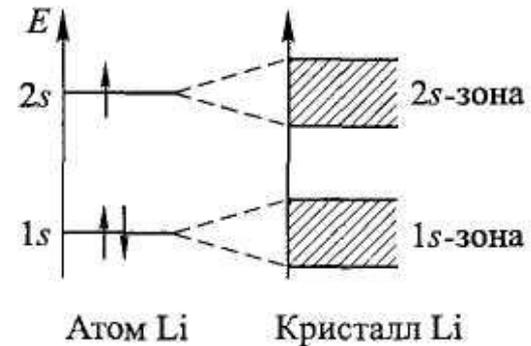
Свойство 3. Низко расположенные уровни образуют узкие зоны, а высоко расположенные – широкие.

Свойство 4. носителями заряда, создающими ток в кристалле могут быть только электроны из обобществленной, частично заполненной зоны. (проводимости)
<https://www.youtube.com/watch?v=qD7eLEvMHVI>

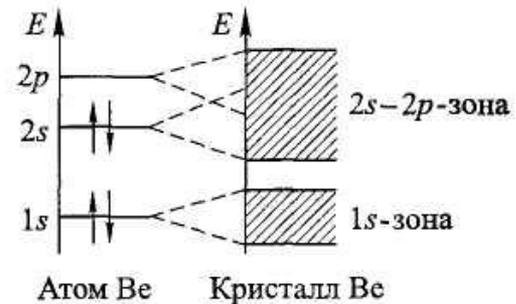
ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Зонная структура некоторых кристаллических проводников и изоляторов

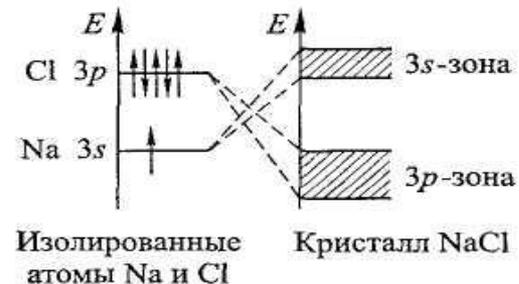
Пример 1. Кристаллы
одновалентных химических
элементов лития, натрия, калия,
меди (проводники) $1s^2 2s^1$



Пример 2. Кристаллы
двухвалентных химических
элементов бериллия,
магния (проводники) $1s^2 2s^2$

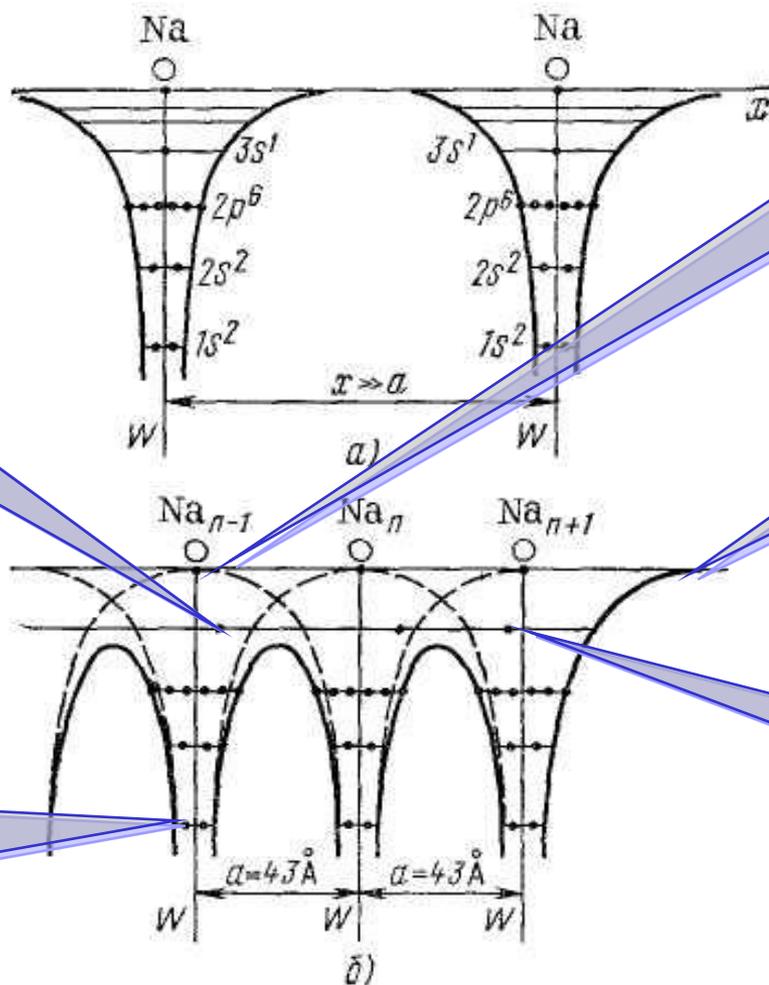


Пример 3. Кристалл
поваренной соли (изолятор)
Натрий $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Хлор $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$



ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Для упрощения анализа применяют *адиабатное приближение* – атомы в узлах кристаллической решетки считаются неподвижными



При сближении атомов оболочки начинают перекрываться

Крайний атом

Валентные электроны $3s$

Свободные электроны

Электроны внутренних оболочек $1s$, $2s$, $2p$

ЗАПОЛНЕНИЕ ЭЛЕКТРОНАМИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА

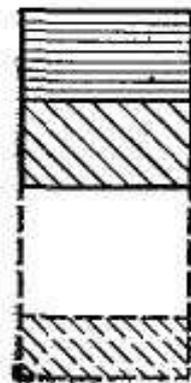
вещества с неполным
заполнением верхних
разрешенных зон – а и
б

б
(металлы)

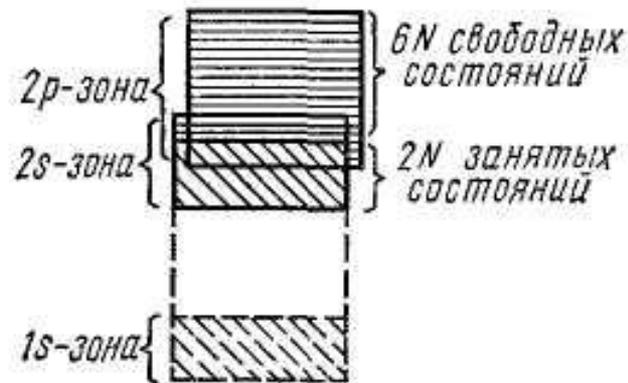
вещества с полным
заполнением
валентной
зоны - в

Запрещенная зона относительно узкая -
собственные полупроводники (0.5 -1.2 эВ)

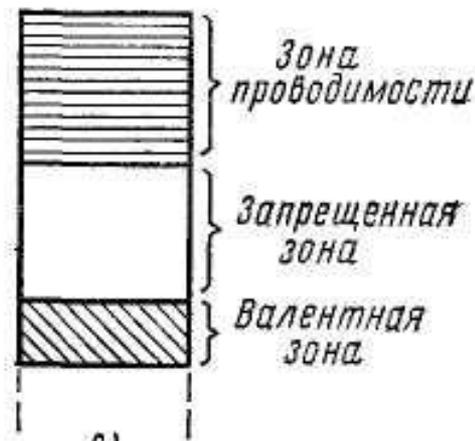
Запрещенная зона относительно широкая
- **диэлектрики (4-5 эВ)**



а)



б)



в)

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

1. Решение уравнения Шредингера с учетом периодичности потенциального поля в кристалле имеет вид волн – волны Блоха, волновая функция частицы (обычно электрона), расположенной в периодическом потенциале.

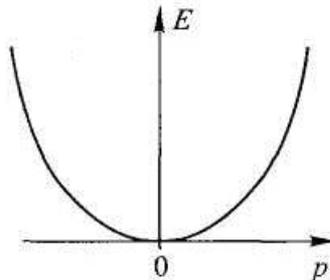
2. В кристалле многие физические величины являются периодическими функциями. Например квазиимпульс

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

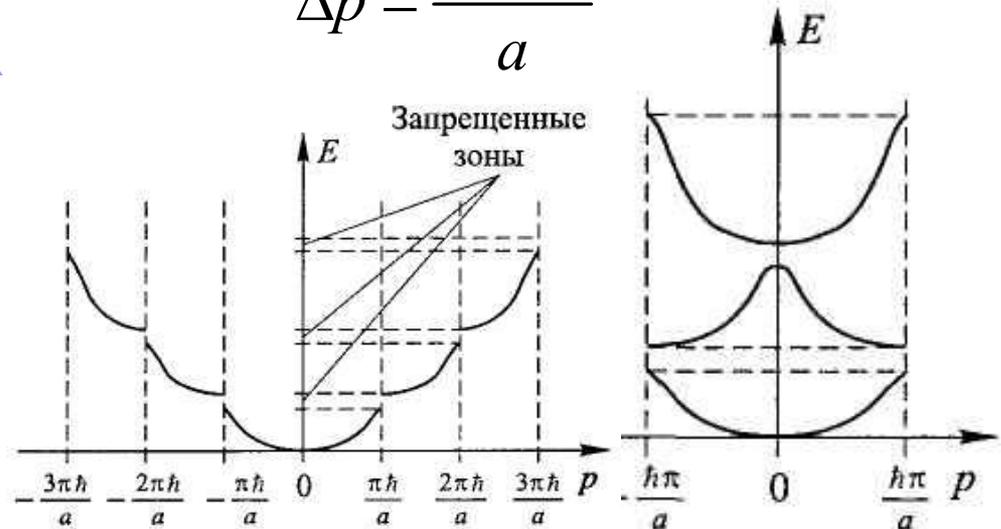
$$-\frac{\pi \hbar}{a} \leq p \leq \frac{\pi \hbar}{a}$$

$$\Delta p = \frac{2\pi \hbar m}{a}$$

$$E = \frac{p^2}{2m}$$



3. Закон-зависимость ее энергии от импульса дисперсии частицы



ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Представим скорость электронов в кристалле, как групповую скорость распространения волн де-Бройля

$$v = v_{gp} = \frac{1}{\hbar} \frac{dW}{dk}$$

Волновой вектор

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\rho}{h} = \frac{\rho}{\hbar}$$

Энергия электрона, выраженная через частоту, соответствующую волне де-Бройля

$$E = \hbar\omega$$

На электрон во внешнем поле действует сила

$$F = eE$$

Работа по перемещению электрона приводит к изменению энергии электрона

$$dW = Fv_{gp} dt = \frac{F}{\hbar} \frac{dW}{dk} dt$$

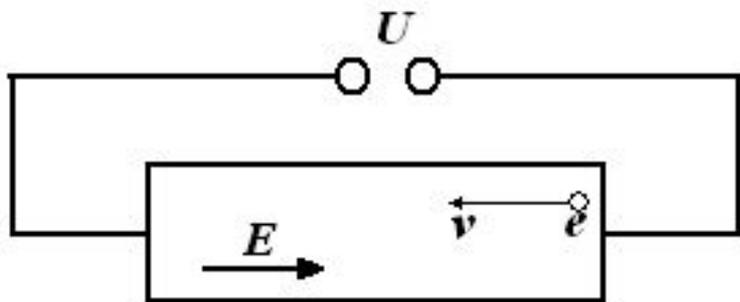
Сила, действующая на электрон

$$a = \frac{dv_{gp}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2W}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2W}{dk^2} F = \frac{F}{m_{эфф}}$$

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

$$m_{эфф} = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2W}{dk^2} \right)^{-1}$$

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ



$$ma = eE \quad a = \frac{eE}{m}$$

$$v_{cp} \approx a\tau = \frac{eE\tau}{m}$$

$$j = env_{cp} = \frac{e^2 n\tau}{m} E$$

$$j = \sigma E$$

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

Удельная проводимость

$$\mu = \frac{v_{cp}}{E}$$

$$\sigma = en\mu$$

ТЕПЛОЕМКОСТЬ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

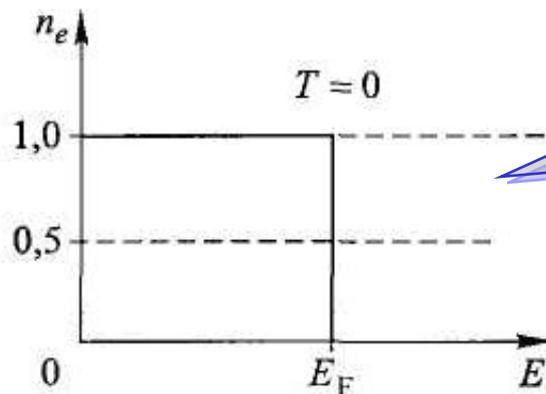
$$n_e = \frac{1}{e^{E-E_F/kT} + 1}$$

Распределение Ферми

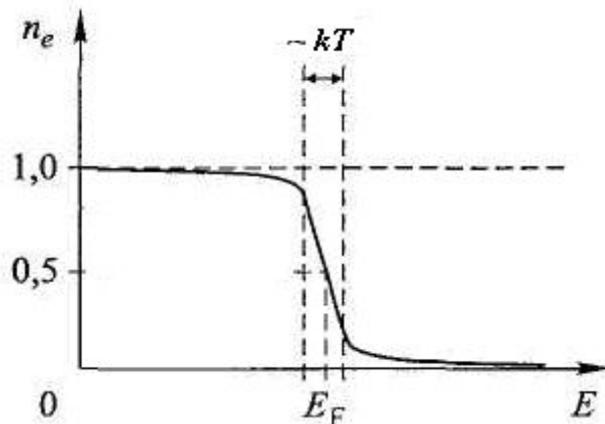
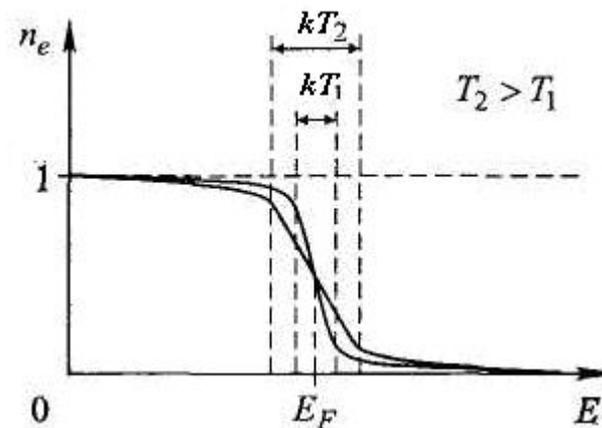
$$kT \ll E_F$$

Условие вырождения электронного газа

$$E_F = \frac{(3\pi^2 n)^{2/3}}{2m}$$



Полностью вырожденный электронный газ



ТЕПЛОЕМКОСТЬ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

$$C_{кр} = C_{реш} + C_e$$

$$U_e = 3n \frac{3kT}{2E_F} \frac{kT}{2} = \frac{9nk^2T^2}{4E_F}$$

Суммарная тепловая энергия электрона

$$U_e = 3n\eta \frac{kT}{2}$$

$$C_e = \frac{dU_e}{dT} \quad C_e = \frac{9}{2} nk \frac{kT}{E_F}$$

1. При больших температурах (больше температуры Дебая) выполняется закон Дюлонга-Пти

η - доля электронов, участвующих в тепловом движении

$$C_{реш} = 3nk \quad C_e = \frac{9}{2} \frac{kT}{E_F} \quad C_{кр} \approx C_{реш}$$

2. При малых температурах

$$\eta = \frac{3kT}{2E_F}$$

$$C_{реш} = \frac{2\pi^2}{5} \frac{k^4 T^3}{\hbar^3 V_s^3} \quad C_e = \frac{9}{2} \frac{kT}{E_F} \quad C_{кр} \approx C_e$$

ЗАПОЛНЕНИЕ ЭЛЕКТРОНАМИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ

Примесные полупроводники отличаются наличием в узлах решетки атомов посторонних примесей или других дефектов



Примесные уровни, передающие электроны в зону проводимости называют **донорными уровнями**, а полупроводник - **донором**

Примесные уровни, на которые могут переходить электроны валентной зоны, называют **акцепторными уровнями**, а полупроводник - **акцептором**

СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Если число частиц N в системе много меньше числа возможных состояний G , то проблем с возможным заселением одного уровня несколькими частицами не существует – это **невыврожденное состояние**.
Условие невырожденности состояния системы
 $N/G \ll 1$

Если число частиц N в системе сравнимо с числом возможных состояний G , то необходимы правила заселения каждого уровня несколькими частицам – это **вырожденное состояние**.
Условие вырожденности состояния системы
 $N/G \sim 1$

Концентрацию электронов в некотором диапазоне энергий можно определить с помощью распределения электронов по энергиям

Функция плотности энергетических состояний

$$f(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m^*)^{3/2} \sqrt{E}$$

$$dn_e = f(E)\omega_E(E)dE$$

Энергия электрона, отсчитанная от границы зоны

Видеоролики

Термоэлектронная эмиссия -

<https://youtu.be/O2-KQhmO5DM>

Опыт Штерна и Герлаха

<https://youtu.be/2F-7uc0jTgo>