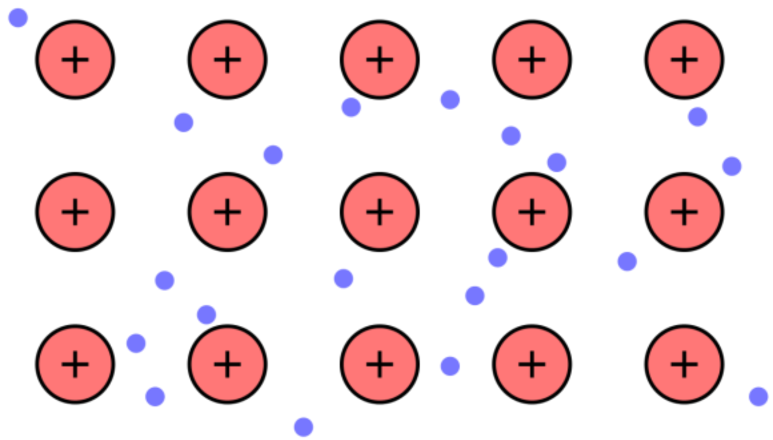
Сегодня: среда, 11 октября 2023 г.

Лекция: Зонная теория электропроводности.

1. Волновые свойства частиц
2. Движение в потенциальной яме
3. Энергия Ферми
4. Зонная структура
5. Полупроводники

Электронный газ в металле



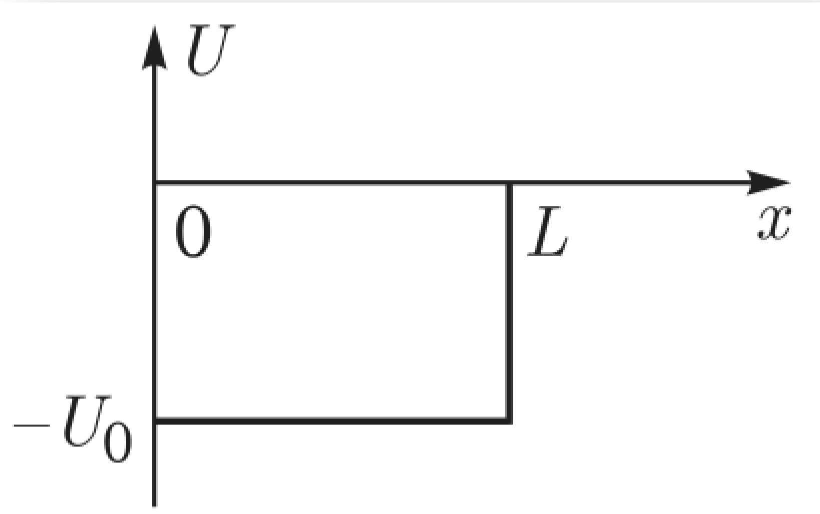
1. Металл = совокупность колеблющихся в узлах кристаллической решетки N положительно заряженных ионов и $N_e = ZN$ коллективизированных валентных электронов (Z — валентность), потерявших связь с атомами и перемещающихся по кристаллу

2. Электронная и ионная системы взаимодействуют между собой.

3. электроны не могут покинуть объем кристалла: для выхода на поверхность над электроном следует совершить работу.

4. Нормировка: если обнулить потенциальную энергию электрона вне кристалла, то внутри кристалла его потенциальная энергия отрицательна: электрон находится внутри кристалла в потенциальной яме.

Движение в потенциальной яме



1. Пусть кристалл = параллелепипед со сторонами $L_x, \quad L_y, \quad L_z$, ориентированными вдоль соответствующих координатных осей.

2. Будем использовать для описания поведения электрона волну с постоянной амплитудой и «позволяющую» электрону с равной вероятностью находиться во всех точках доступного ему пространства

$$\Psi(\vec{r},t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = Ce^{ikx}$$

3. Потребуем, чтобы функция была периодической с периодом *L*:

$$\boxed{\psi(x) = \psi(x+L)}$$

периодическое граничное условие Борна–Кармана

$$Ce^{ikx} = Ce^{ik(x+L)}$$

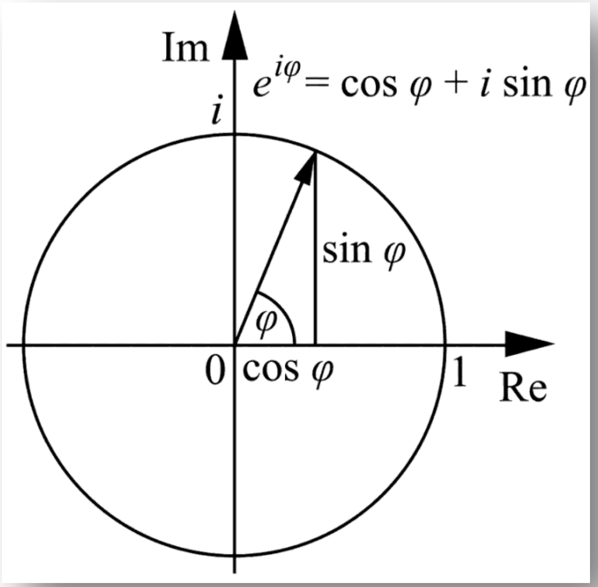
$$e^{ikx} = e^{ikx}e^{ikL}$$

$$1 = e^{ikL}$$

$$kL = 2\pi n, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$$

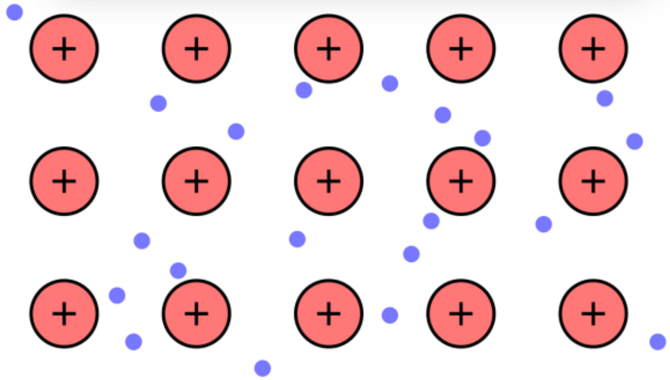
$$\boxed{k = \frac{2\pi n}{L}}$$

волновой вектор дискретный



$$\boxed{E(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2m}}$$

Энергия дискретная



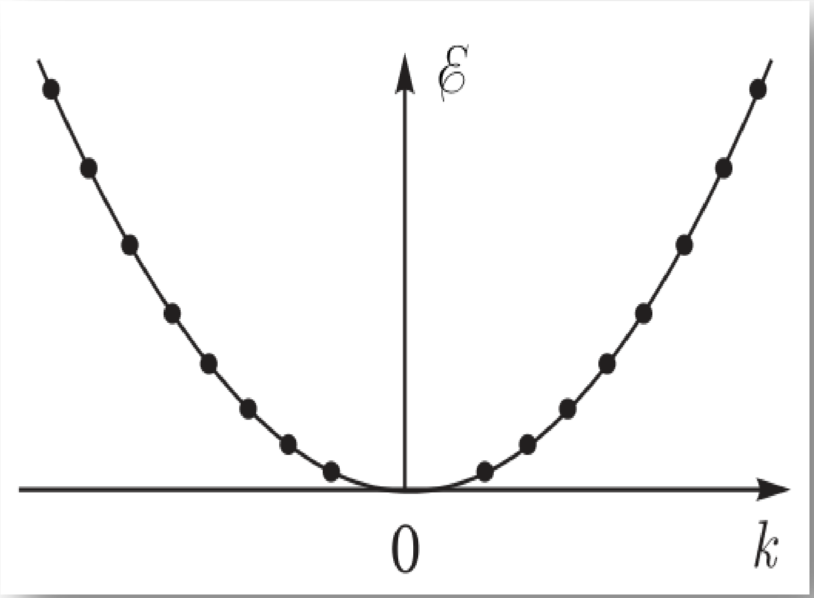
Условия квантования волнового вектора и энергии

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}$$

$$k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}$$

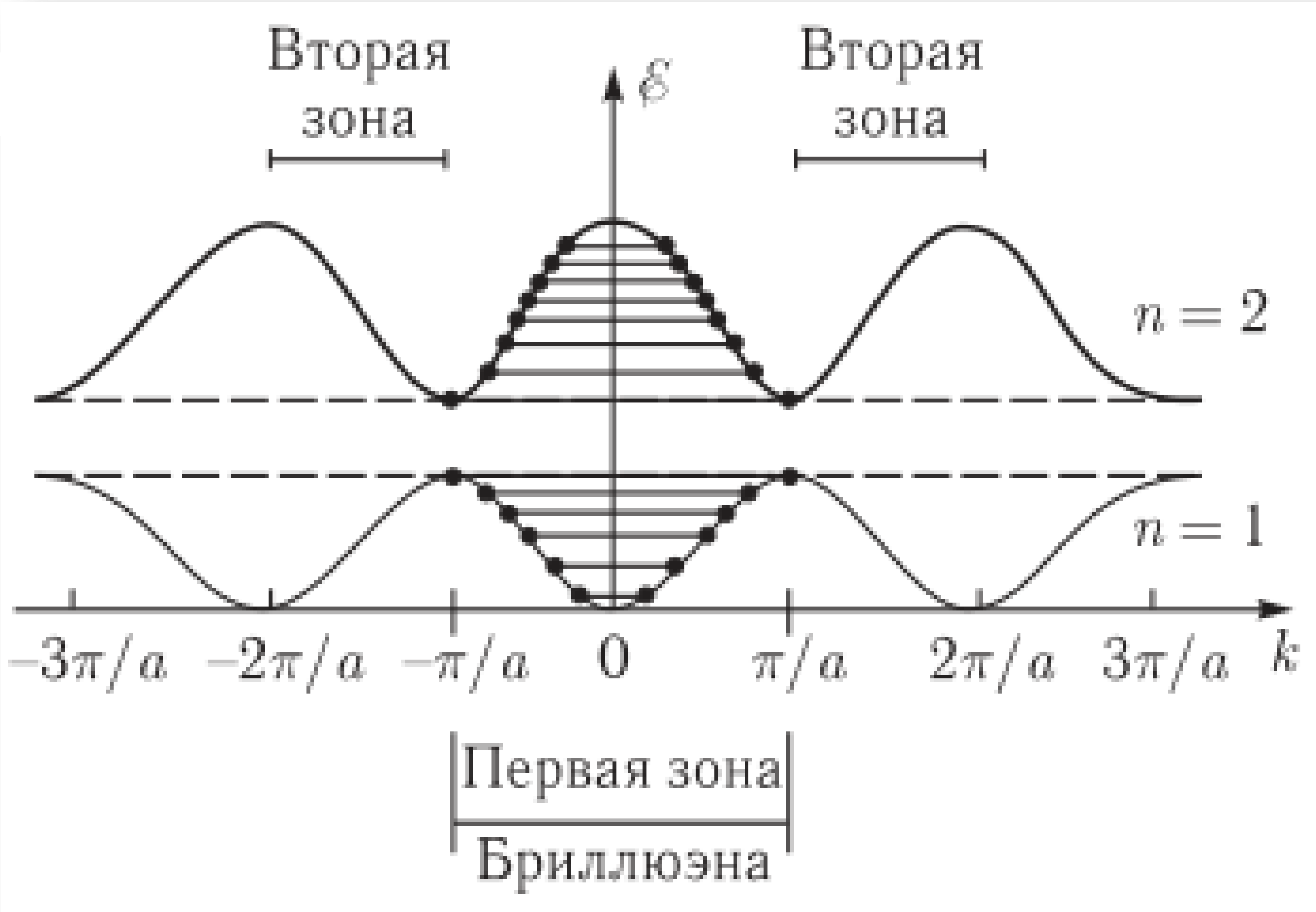
$$k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z}$$

Если частица обладает некоторой энергией, то частица находится на энергетическом уровне с этим значением энергии



$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)$$

$$E(k) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$


Вторая
зона
Вторая
зона
$\mathscr{E}$
$n = 2$
$n = 1$
$-3\pi/a$
$-2\pi/a$
$-\pi/a$
0
π/a
$2\pi/a$
$3\pi/a$
k
Первая зона
Бриллюэна

Квантовое состояние электрона

Вопрос: каким образом ZN электронов проводимости, перемещающиеся в замкнутом объеме $V = L^3$(удобно $L_x = L_y = L_z = L$), будут «расселяться» по уровням энергии?

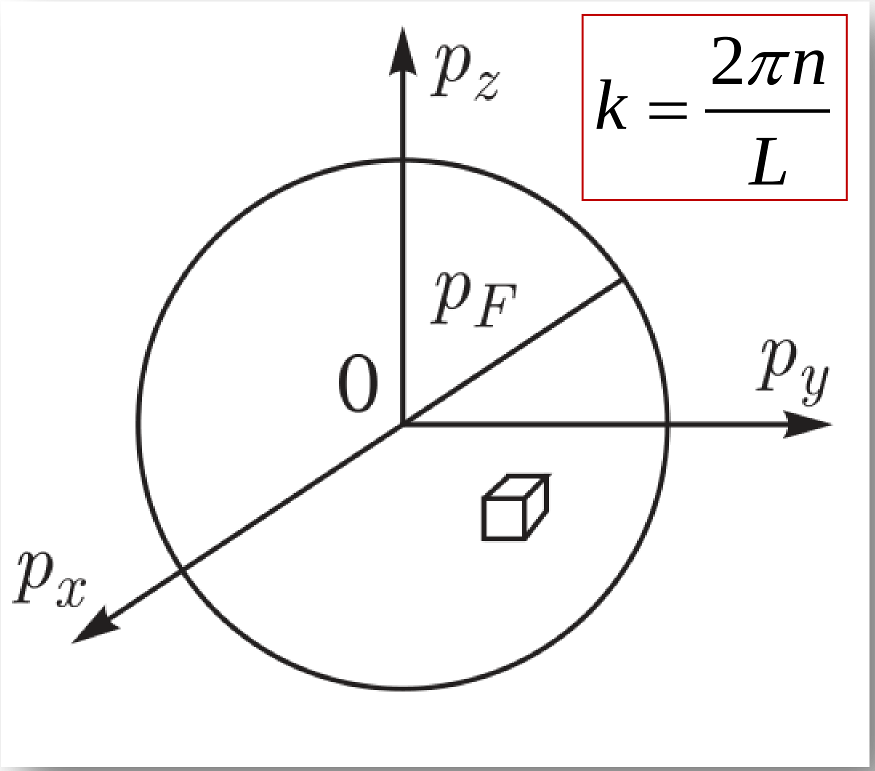
Число уровней ничем не ограничено, а число частиц конечное

Введем понятие квантового состояния электрона в импульсном пространстве

При изменении целого числа на $\Delta n = 1$, электрон переходит в другое состояние.

При этом изменение волнового числа равно $\Delta k = \dfrac{2\pi}{L}$,

а импульса $\Delta p = \hbar \Delta k = \dfrac{2\pi\hbar}{L}$



«Объем» квантового состояния

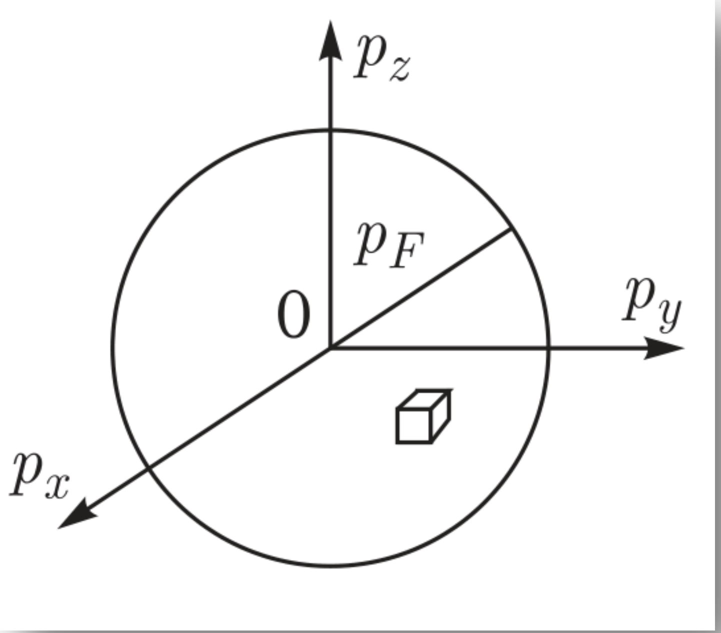
в импульсном пространстве равен объему элементарного кубика

$$\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}$$

Принцип запрета Паули: в каждом квантовом состоянии может находиться не более одного электрона

Это означает, что число занятых ячеек будет равно числу электронов проводимости

Совокупность свободных невзаимодействующих электронов, подчиняющихся принципу Паули, называется электронным газом Ферми



Энергия Ферми

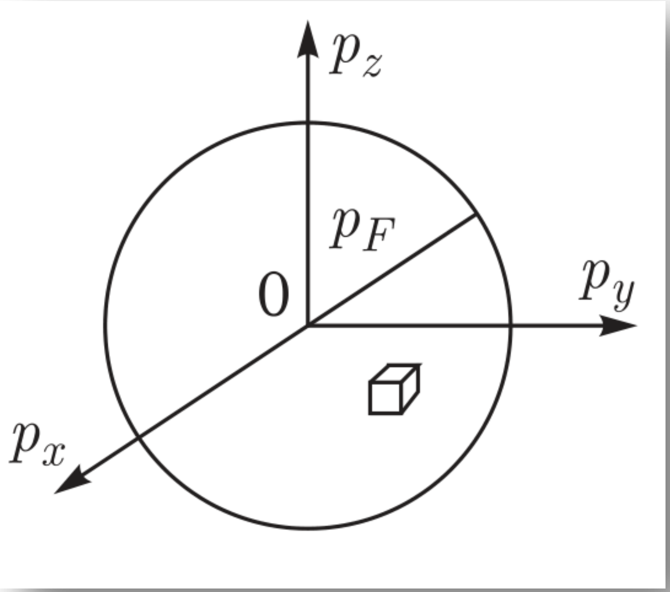
$$\boxed{\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}}$$

При T = 0 K «заселение» начинается на низших уровнях и заканчивается на (некотором/некоторых) самом верхнем уровне с энергией E_F = энергия Ферми

Радиус сферы (импульс Ферми) :

$$ZN = 2\frac{\frac{4}{3}\pi p_F^3}{\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}$$

Множитель 2 «разрешает» двум электронам с противоположными спинами находиться в одной ячейке



Энергия Ферми:

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 ZN}{V}\right)^{2/3}$$

$$\boxed{E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 Zn\right)^{2/3}}$$

Скорость Ферми

Скорость электронов на поверхности Ферми

$$\upsilon_F = \frac{p_F}{m} = \frac{\hbar}{m}\left(\frac{3\pi^2 ZN}{V}\right)^{1/3}$$

Электроны со скоростью, близкой к скорости Ферми, называют фермиевскими электронами

В металлах

$n = \frac{N}{V} \approx 10^{22} - 10^{23}$ см$^{-3}$,

энергия Ферми $E_F \sim 1 - 10$ эВ,

тогда скорость Ферми $\upsilon_F \sim 10^8$ **см/с**

Температура вырождения
(температура Ферми)

$$\boxed{T_F = \frac{E_F}{k}}$$

Характерные значения температуры Ферми для металлов $E_F \sim 10^4$–10^5 К

При всех температурах металла (вплоть до температуры плавления) энергия теплового движения электронов

$$\boxed{kT \ll E_F}$$

Следовательно, в столкновениях участвуют электроны, движущиеся главным образом со скоростью υ_F, а длина свободного пробега $\lambda = \upsilon_F \tau$. Поэтому

$$\boxed{\sigma = \frac{ne^2}{2m}\tau = \frac{ne^2\lambda(T)}{2m\upsilon_F}}$$