

# ***КВАНТОВАЯ ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА***

- 1. Квантовые статистики.**
- 2. Теплоемкость твердых тел.**
- 3. Зонная теория твердых тел.**
- 4. Электропроводность  
полупроводников.**
- 5. Контакт полупроводников.**

# Квантовые статистики

Для описания системы большого числа частиц используют:

а) **классическую** статистику

Максвелла-Больцмана;

б) **квантовую** статистику

Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна.

Состояние системы тождественных (неразличимых) частиц в квантовой механике описывают **симметричными** (не изменяют знака при перестановке  $a \leftrightarrow b$ ) и **антисимметричными** (изменяют знак) функциями.

Вид полной волновой функции зависит от проекции  $L_{sz}$  спина частицы на направление  $B$  и не изменяется при любых внешних воздействиях.

**Различают:**

**1. Фермионы – частицы с нечетным**  
**полуцелым спином  $\pm \frac{\hbar}{2}$  ( ${}_{-1}e^0, {}_1p^1, {}_0n^1,$**   
**ядра с нечетным числом фермионов).**

**Систему тождественных фермионов**  
**описывают антисимметричной**  
**волновой функцией (статистика**  
**Ферми - Дирака).**

**2. Бозоны** – частицы, у которых спин 0 или **четный** полуцелый  $\pm \frac{\hbar}{2}$  (**фотон**,  $\pi$  -**мезоны**, ядра с **четным** числом фермионов).

Система тождественных бозонов описывается **симметричной** волновой функцией (статистика **Бозе - Эйнштейна**).

Функция заполнения ячеек фазового пространства (  $x, y, z, p_x, p_y, p_z$ , объем  $\boxtimes^3$  ) или средняя заселенность частицами состояний с данной энергией  $W_i$

$$f = \frac{1}{e^{\frac{W_i - \mu}{kT}} \pm 1}$$

$\mu$  - химический потенциал,

$k$  - постоянная Больцмана,

$T$  - термодинамическая температура.

Для системы тождественных **фермионов**

$$0 \leq f \leq 1;$$

Для системы тождественных **бозонов**

$$f \geq 0.$$

При  $e^{\frac{W_i - \mu}{kT}} \gg 1$  квантовые распределения

Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна переходят в классическое распределение Максвелла-Больцмана.

Систему частиц называют **вырожденной**, если ее свойства не могут быть описаны классической статистикой.

Температура вырождения

$$T_v = \frac{\hbar^2 n_0^{2/3}}{3mk},$$

где  $n_0$  - концентрация частиц,  
 $m$  - масса частицы.

**Электронный газ в металле всегда вырожден**

$$T_e \approx 2 \cdot 10^4 \text{ K},$$

**электронный газ в полупроводниках не вырожден при  $T > T_e$**

$$T_e \approx 10^{-4} \text{ K},$$

**фотонный газ вырожден при любой температуре.**

**Следовательно, для получения формулы Планка  $r_{\nu,T} = f(\nu, T)$  нужно использовать Статистику Бозе – Эйнштейна.**

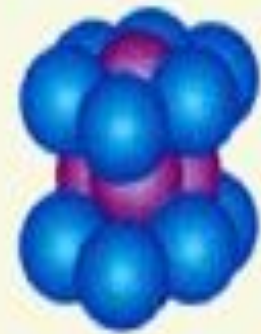
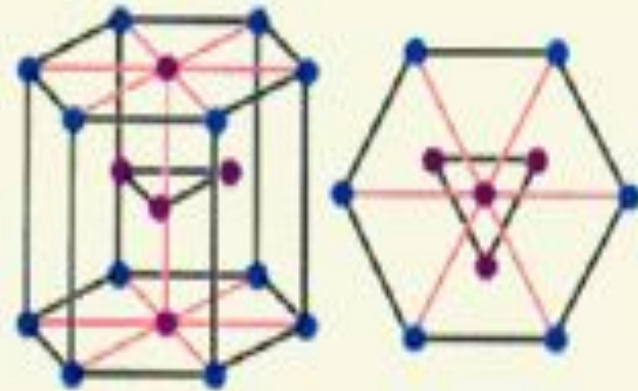
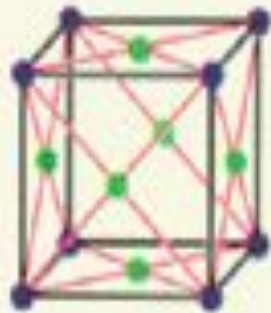
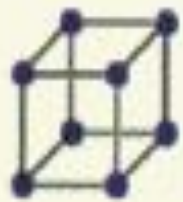


# Типы кристаллических структур

В расположении частиц в кристаллах – дальний порядок.

Узлы кристаллической решетки – средние положения, у которых частицы совершают колебания.

Пространственные решетки (14 решеток Браве) различаются видами переносной симметрии.



(1)

(2)

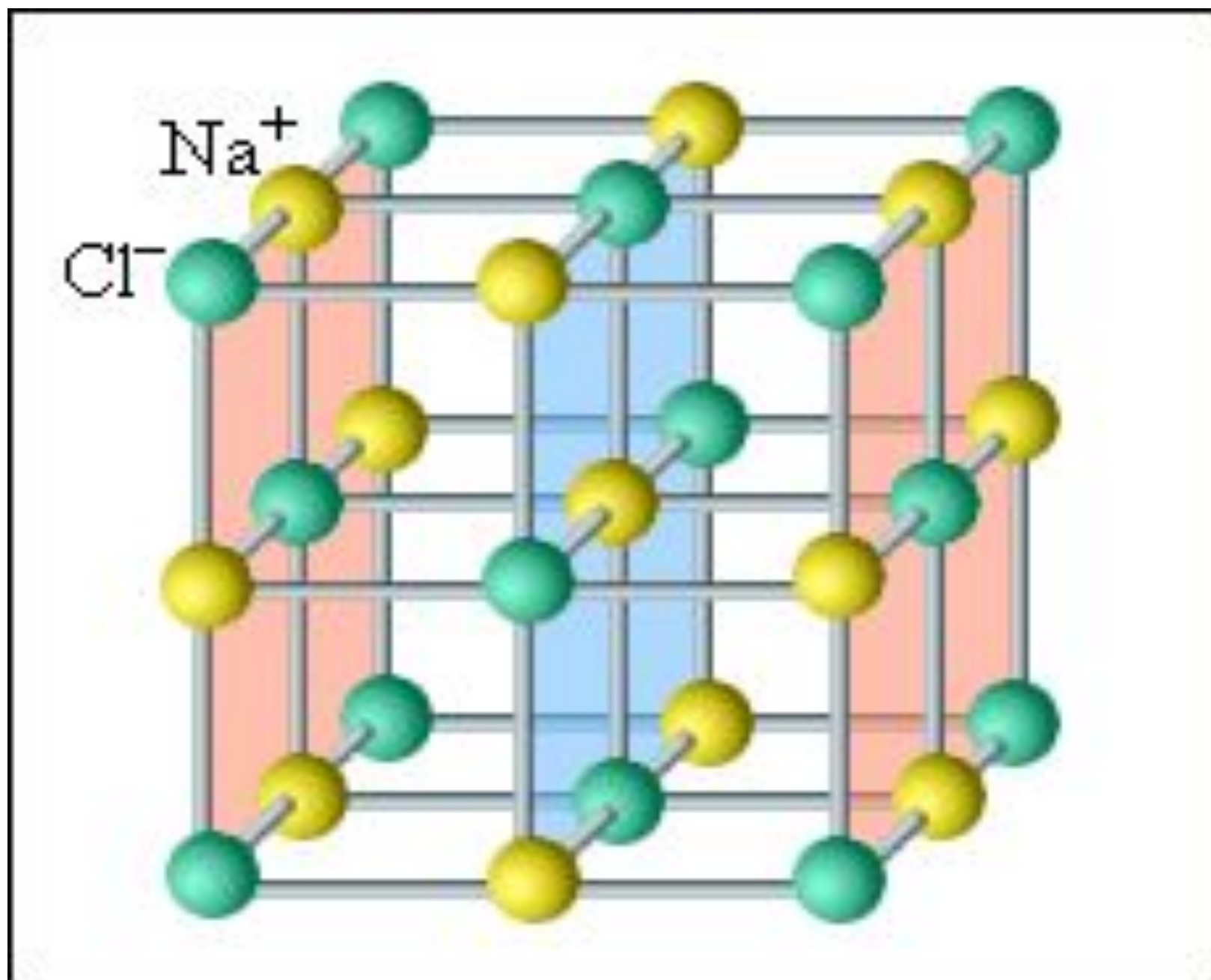
(3)

(4)

# Типы кристаллов

1. **Ионные** – гранецентрированные или объемно центрированные решетки, вставленные одна в другую; ионная (гетерополярная) связь ( $NaCl$ ,  $CsCl$ ,...).

2. **Атомные** – в узлах нейтральные атомы удерживаются ковалентными (гомеополярными) связями ( $Ge$ ,  $Si$ ,  $ZnS$ ,...).

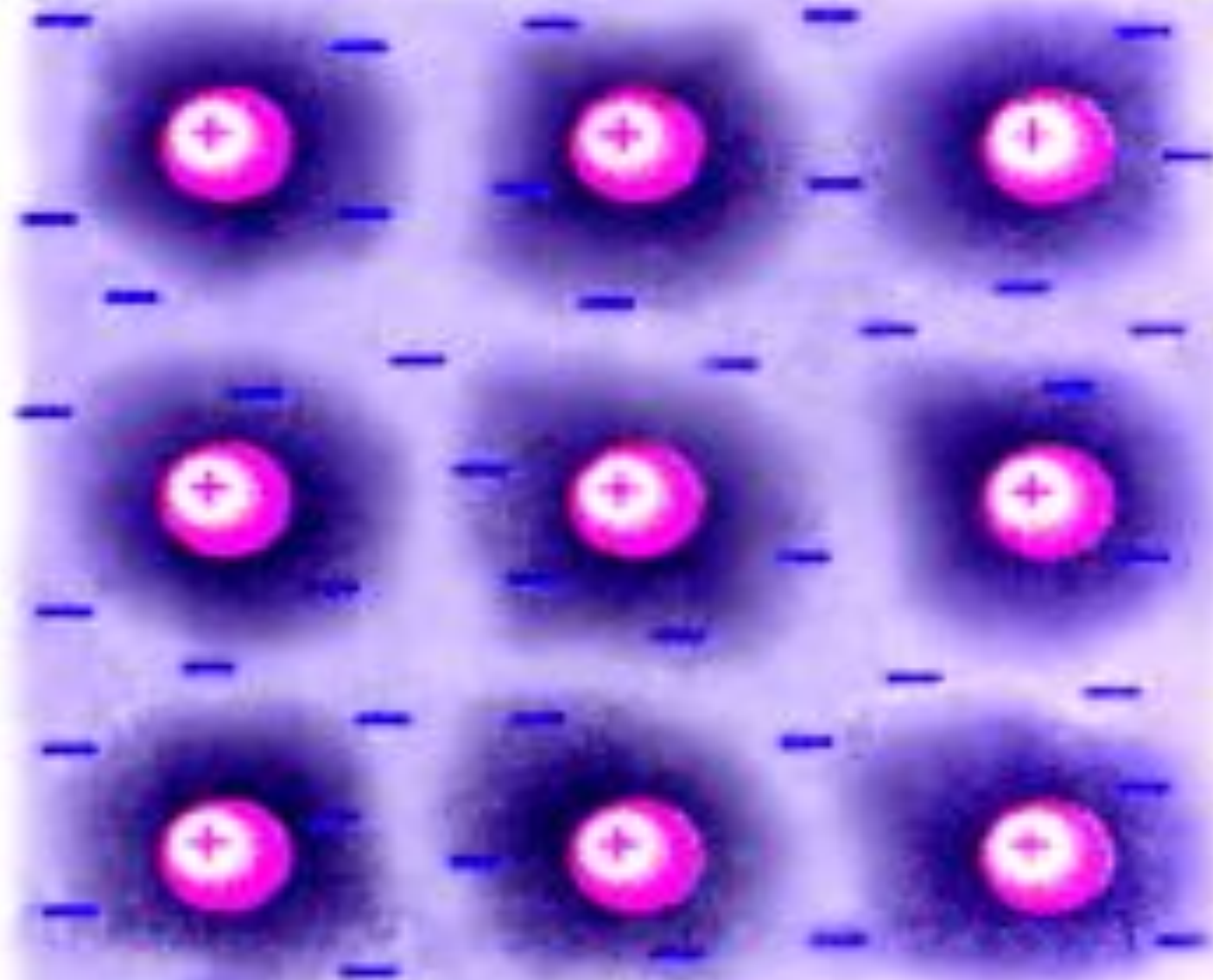


### 3. Металлические

– в узлах решетки положительные ионы металла, свободные электроны обеспечивают хорошую электропроводность

*Cu, Ag, Au, Pt, ...*

4. Молекулярные – в узлах решетки нейтральные молекулы, связанные ван-дер-ваальсовыми силами (парафин, лед,  $Br_2, I_2, \dots$ )



# Теплоемкость твердых тел

Определяется энергией тепловых колебаний частиц в узлах кристаллической решетки.

Молярная теплоемкость с атомной кристаллической решеткой

$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3R = 25 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$$

не зависит от температуры – закон Дюлонга – Пти.

Выводы теории и эксперимента  
**не совпадают!**

# Теория Эйнштейна

Кристалл - система **N независимых** квантовых гармонических осцилляторов.

Средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы осциллятора

$$\langle W \rangle = \frac{1}{2} h\nu + \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

нулевая энергия

Внутренняя энергия одного моля

$$U = U_0 + 3 \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$



## Молярная теплоемкость

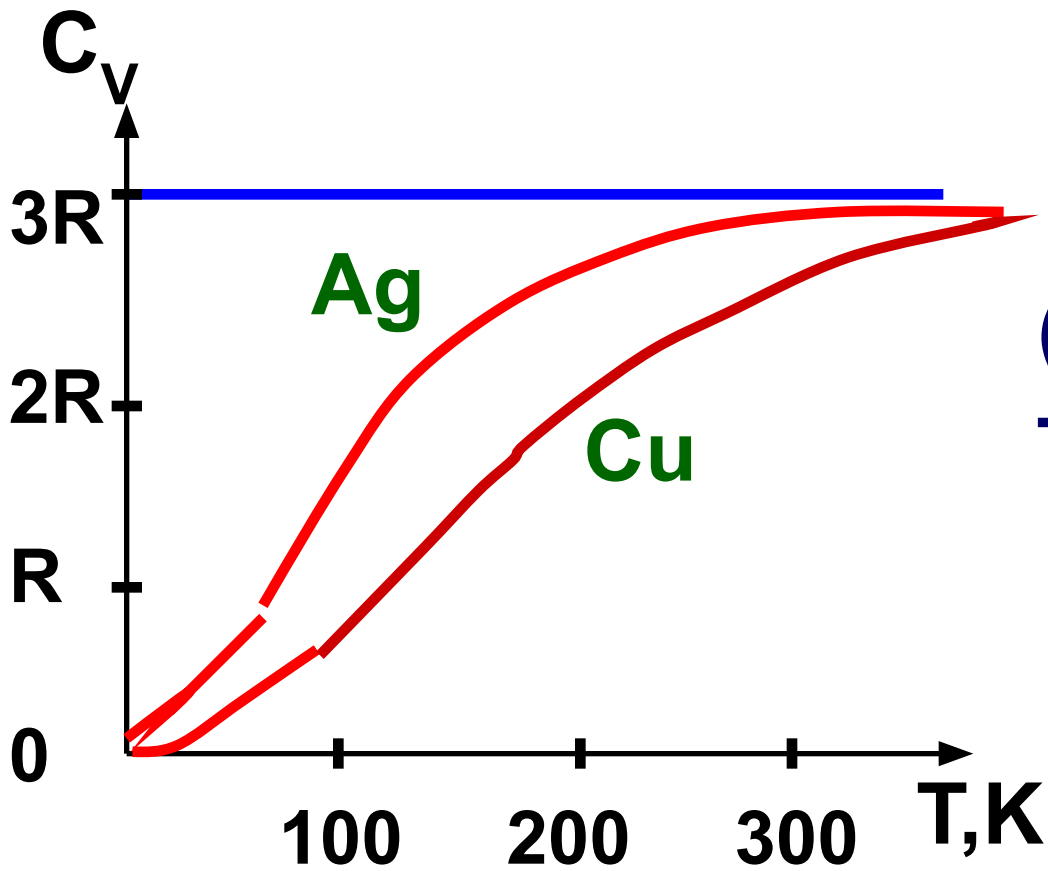
$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3R \left( \frac{h\nu}{kT} \right)^2 \cdot \frac{e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}.$$

Обозначим  $\theta_E = \frac{h\nu}{k}$  - характеристическая температура Эйнштейна.

$$C_V = \left( \frac{\theta_E}{T} \right)^2 \cdot \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2}.$$

Нулевая молярная внутренняя энергия

$$U_0 = \frac{3}{2} \frac{h\nu}{k} R = \frac{3}{2} R \theta_E.$$



При  $h\nu \ll kT$   
 (область высоких температур)

$$C_V = 3R.$$

При  $h\nu \gg kT$  (область низких температур)

$$C_V = 3R \left( \frac{\theta_E}{T} \right)^2 e^{-\theta_E/kT}.$$

# Теория Дебая

Кристалл – система сильно **связанных**, **N** частиц, имеет широкий спектр частот колебаний.

В кристалле распространяются упругие волны, имеющие квантовые свойства.

**Квант энергии упругой волны с частотой  $\nu$  - это квазичастица фонон.**

$W = h\nu$ ;  $p = \frac{h\nu}{v}$  -энергия и импульс фонона,

$v$  -скорость распространения упругой (звуковой) волны.

**Спин** фонона равен **нулю** (статистика Бозе - Эйнштейна), химический потенциал для фононного газа  $\mu = 0$  (фононы испускаются и поглощаются, но их число не постоянно).

**Внутренняя энергия кристалла (энергия фононного газа)**

$$U = \frac{12\pi Vh}{v^3} \int_0^{v_{\max}} \frac{v^3 dv}{e^{hv/kT} - 1},$$

где  $v_{\max} = v \left( \frac{3N}{4\pi V} \right)^{1/3}$  - верхняя граница частот фононов.

# Характеристическая температура Дебая

$$T_D = \frac{h\nu_{\max}}{k}.$$

**Область высоких температур**  $T \geq T_D$

$$U = 3NkT, \quad C_V = 3R.$$

**Область низких температур**  $T \ll T_D$

$$U_0 = \frac{9}{8}R\theta_D, \quad U = \frac{4\pi^5 k^4 V}{5h^2 \nu^3} T^4.$$

**Молярная теплоемкость**

$$C_V = \frac{12\pi^4 R}{5} \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \text{-предельный закон Дебая.}$$

# Зонная теория твердых тел

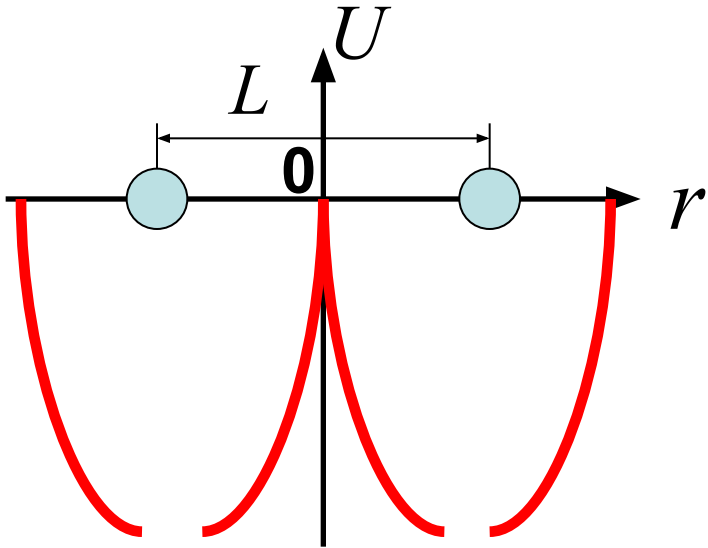
Твердое тело - периодическая структура, электроны находятся в электрическом поле положительных ионов.

Уравнение Шредингера для системы множества частиц решают в приближении:

а) **сильной связи** - валентные электроны переходят от одного атома к другому при их сближении на расстояния порядка размеров атома;

б) **слабой связи** – свободные электроны движутся в периодическом поле кристаллической решетки.

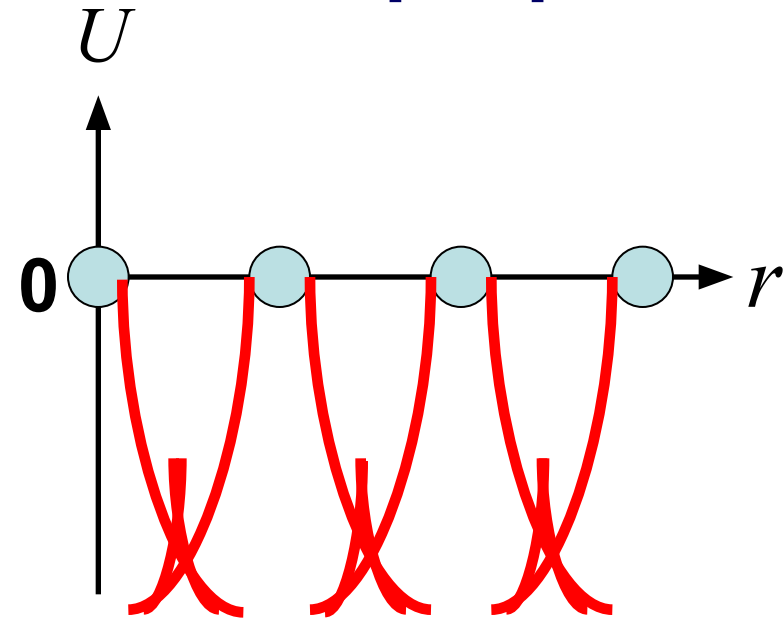
Энергетические спектры изолированного атома - дискретны, их энергия зависит от  $n, \ell$ .  
В газах расстояние между атомами  $L \gg d$ .



Потенциальный барьер для валентных электронов широкий, вероятность просачивания сквозь него равна нулю, в газе нет свободных электронов.

Без внешних воздействий газ-диэлектрик.

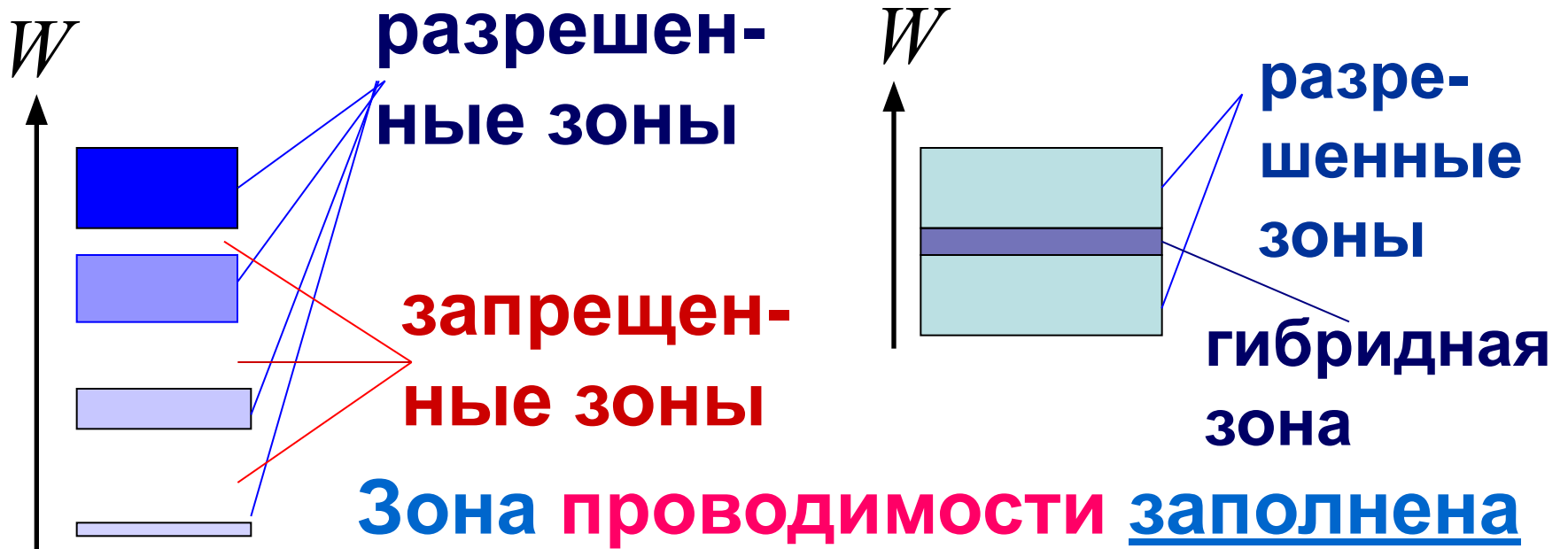
**В кристалле  $L \sim d \sim 10^{-10}$  м, электрические поля перекрываются.**



**Потенциальные кривые накладываются, потенциальный барьер снижается, электрон переходит к соседнему атому (туннельный эффект).**



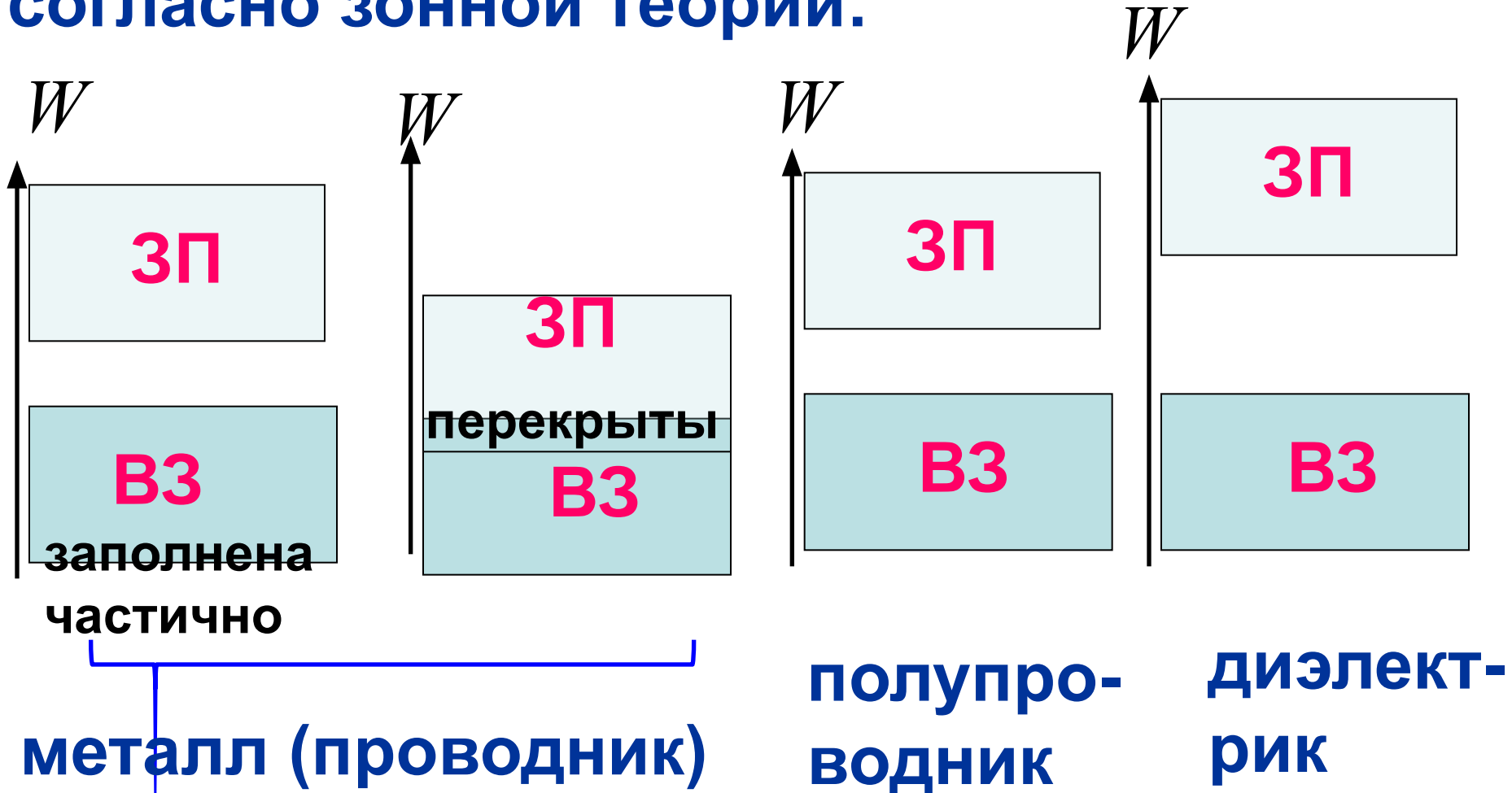
Энергетический уровень валентного электрона изолированного атома в кристалле расширяется, образуя широкую полосу – зону разрешенных значений энергии ( $\sim$  эВ)



или свободна.

Валентная зона заполнена электронами при  $T=0K$  полностью.

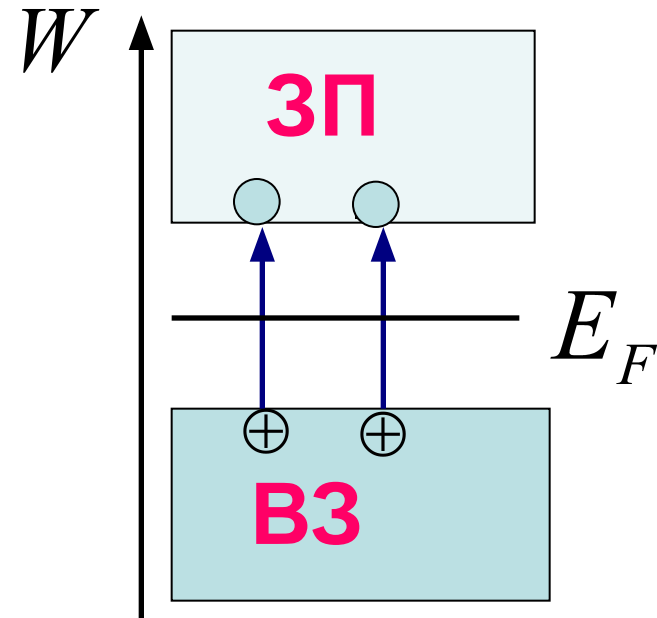
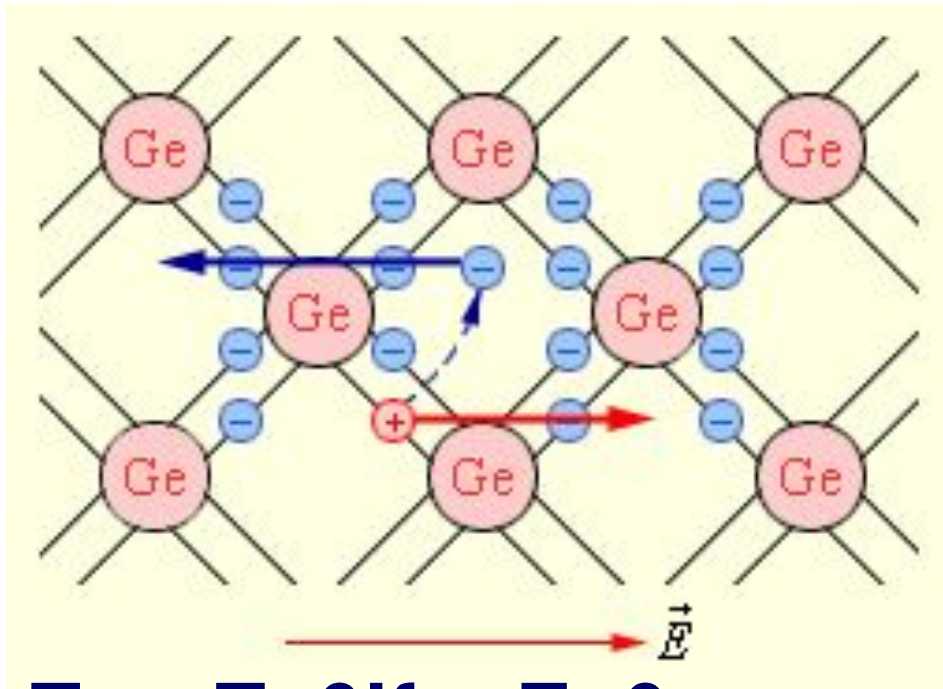
# Электрические свойства твердых тел согласно зонной теории:



Ширина запрещенной зоны:  $\Delta E_{п/п} < \Delta E_{ди}$ .

# Проводимость полупроводников

## 1. Собственная проводимость (чистые П/П)



При  $T=0\text{K}$  и  $E=0$  чистый полупроводник – диэлектрик.

При  $T>0$  и  $E>0$  дырки движутся по полю, электроны – против поля.

Носители тока – **электроны и дырки**,  
их концентрации одинаковы.

Уровень Ферми  $E_F$  расположен в **середине запрещенной зоны**.

$E_F$  - энергия возбуждения электронов и дырок в собственном П/П.

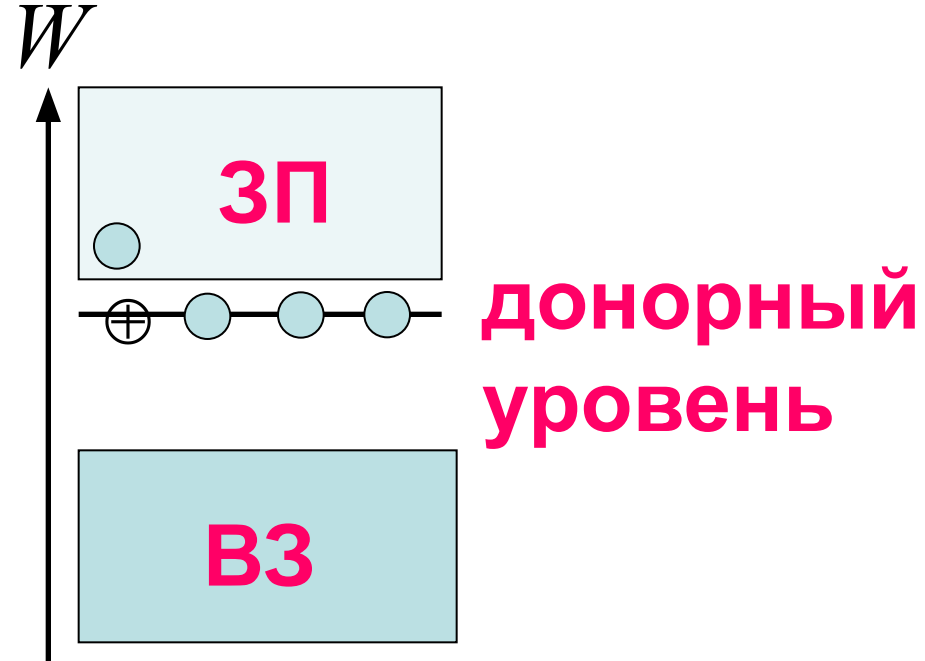
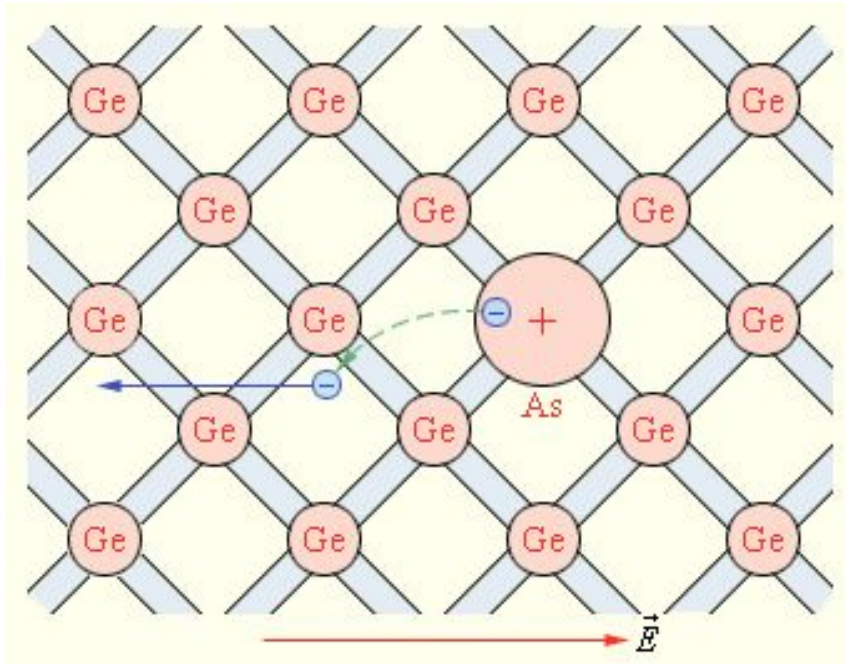
Удельная проводимость собственных П/П

$$\gamma = \gamma_0 e^{-\Delta E / 2kT},$$

где  $\gamma_0$  постоянна для данного П/П.

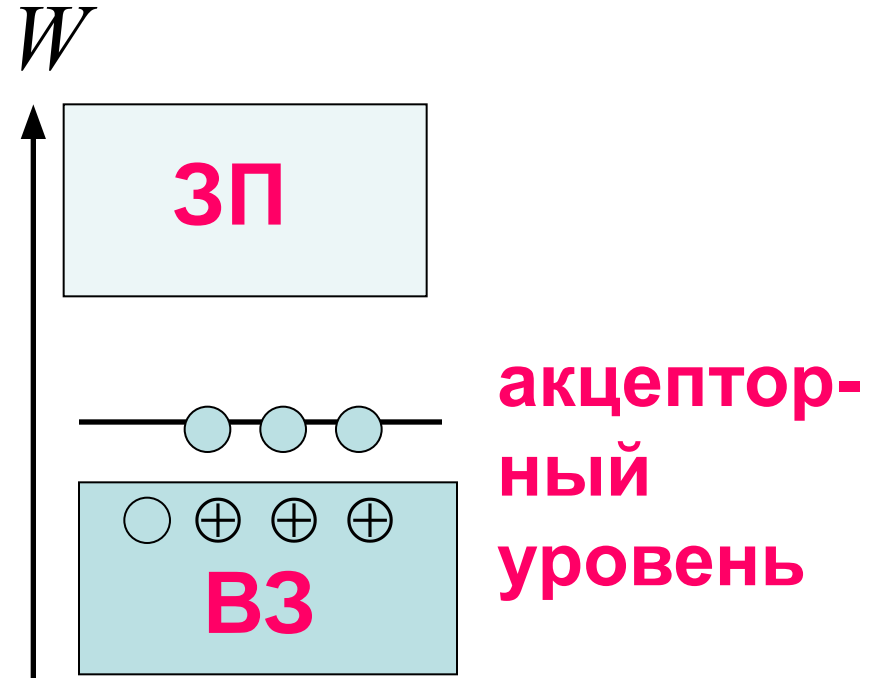
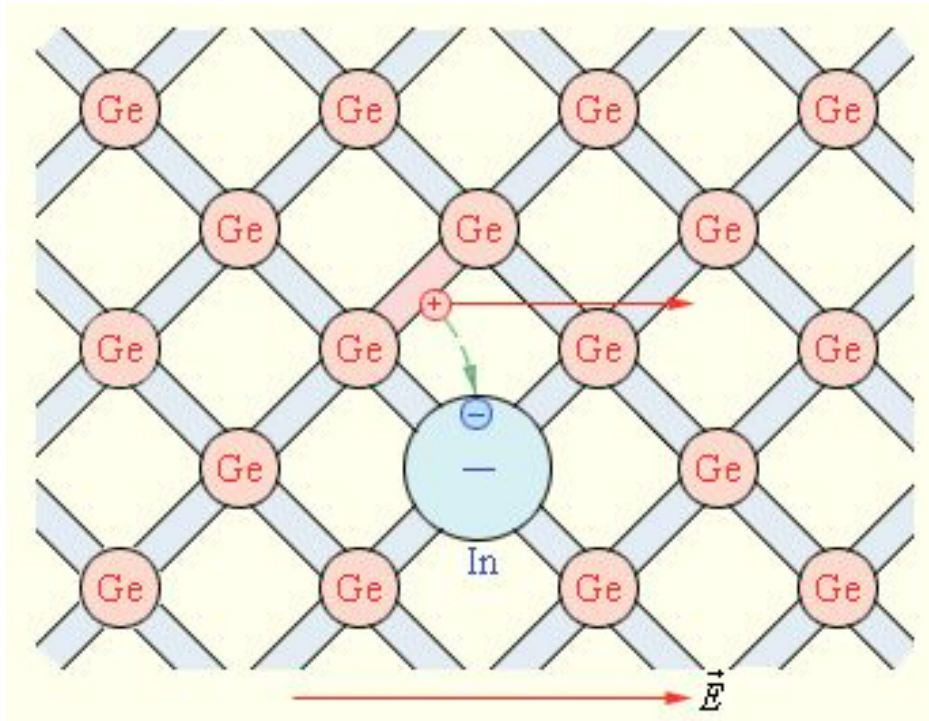
$\Delta E$  - энергия активации (ширина запрещенной зоны).

## 2. Примесная проводимость П/П *n* – типа



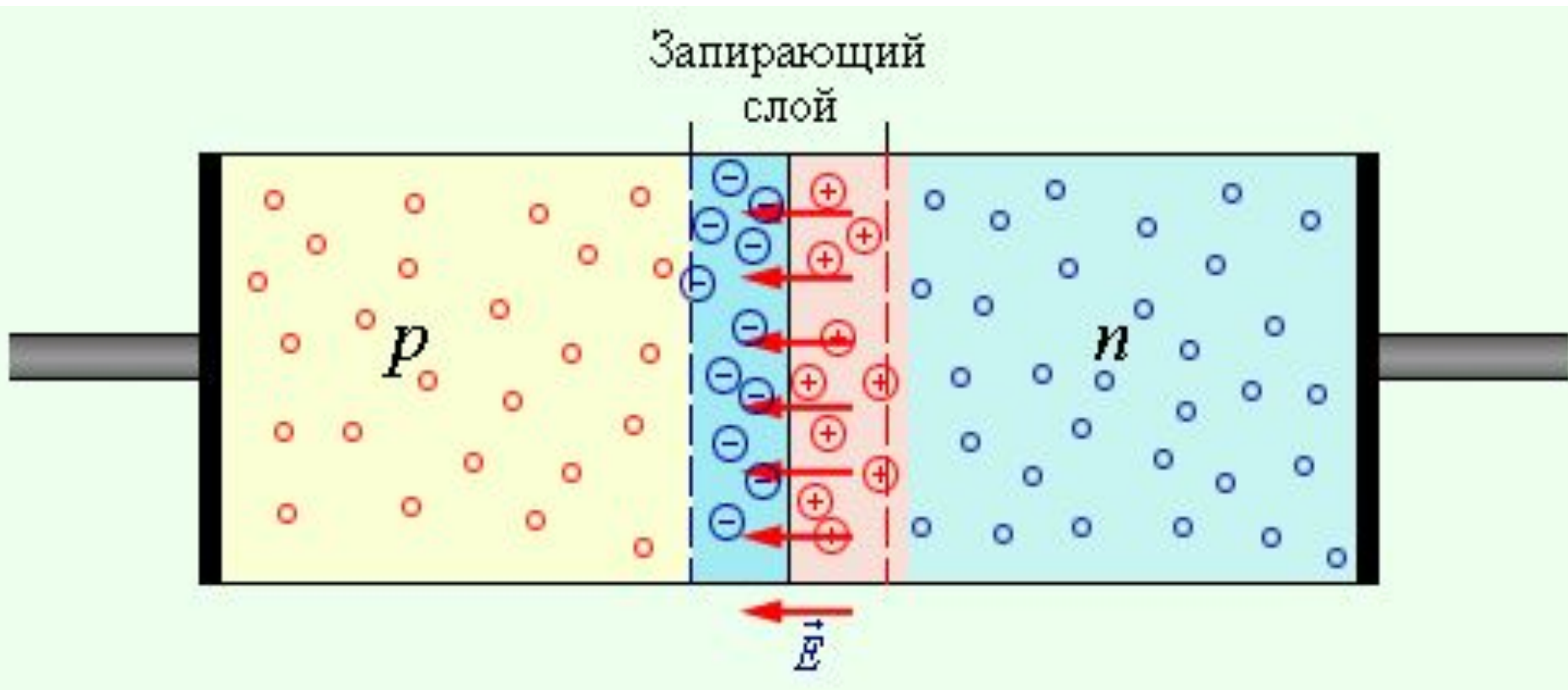
Основные носители – электроны в зоне проводимости, положительные заряды локализуются на неподвижных атомах мышьяка, в проводимости не участвуют, неосновные - дырки в валентной зоне.

## 2. Примесная проводимость П/П *p* – типа



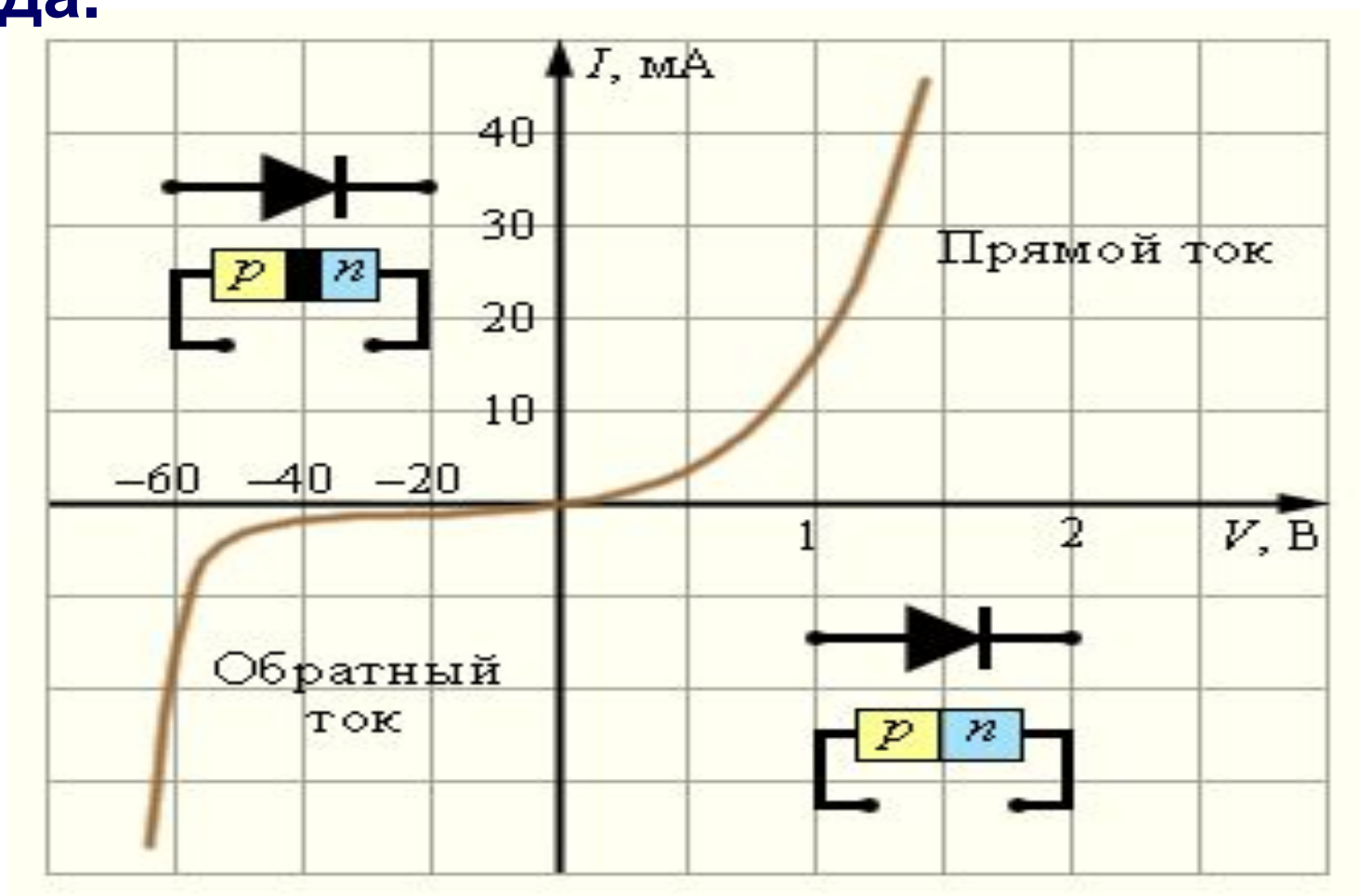
Основные носители – дырки в валентной зоне, избыточный отрицательный заряд связан с атомом индия и по решетке не перемещается, неосновные - электроны в зоне проводимости.

# Запирающий слой при контакте полупроводников $p$ - и $n$ -типов



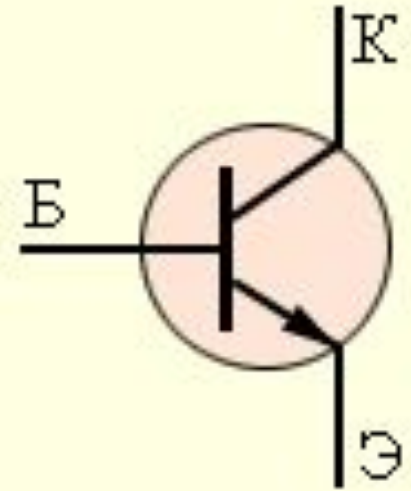
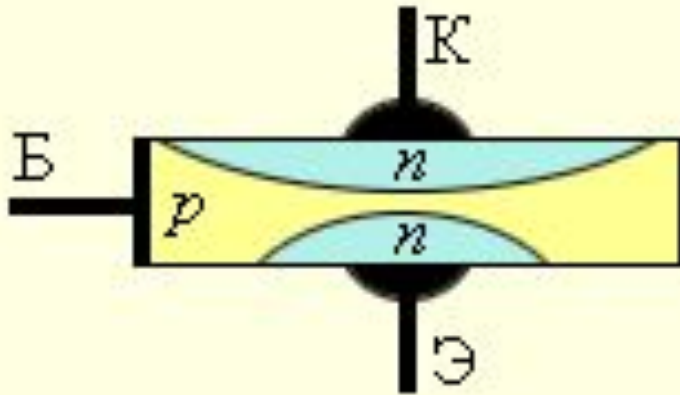


# Вольт-амперная характеристика кремниевого диода.

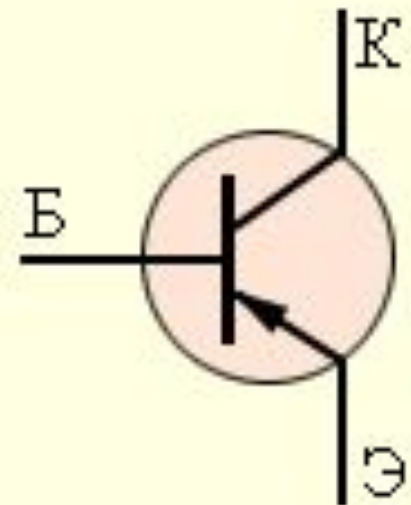
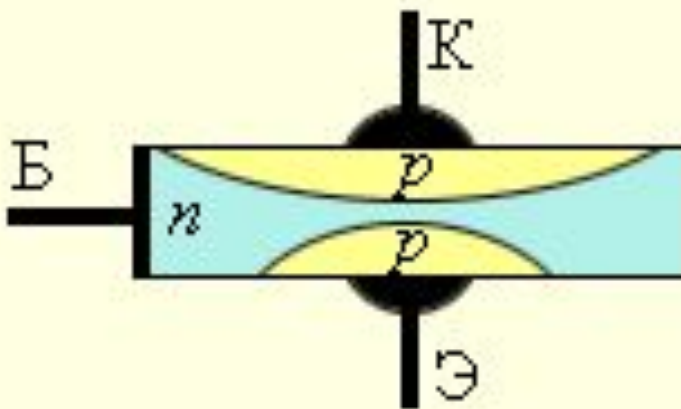


Использованы различные шкалы для положительных и отрицательных напряжений





**Транзистор структуры  $n-p-n$**



**Транзистор структуры  $p-n-p$**