

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**, π -**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

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

μ - 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.

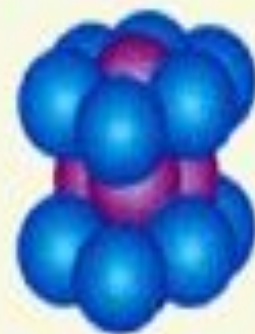
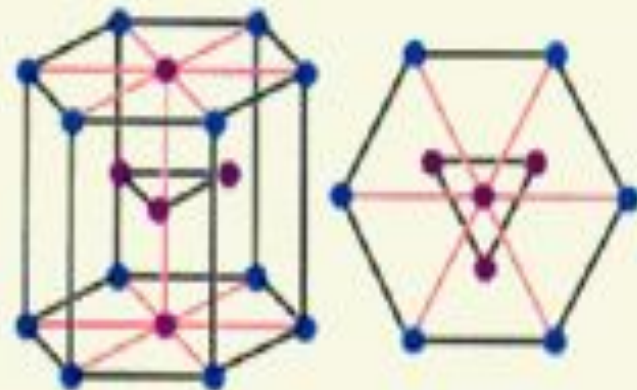
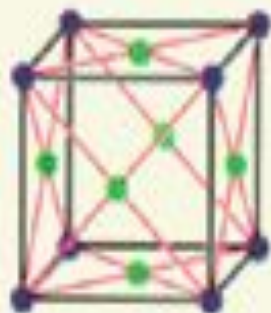
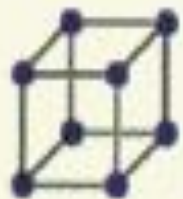
Следовательно, для получения формулы Планка $r_{\nu,T} = f(\nu, T)$ нужно использовать Статистику Бозе – Эйнштейна.

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)

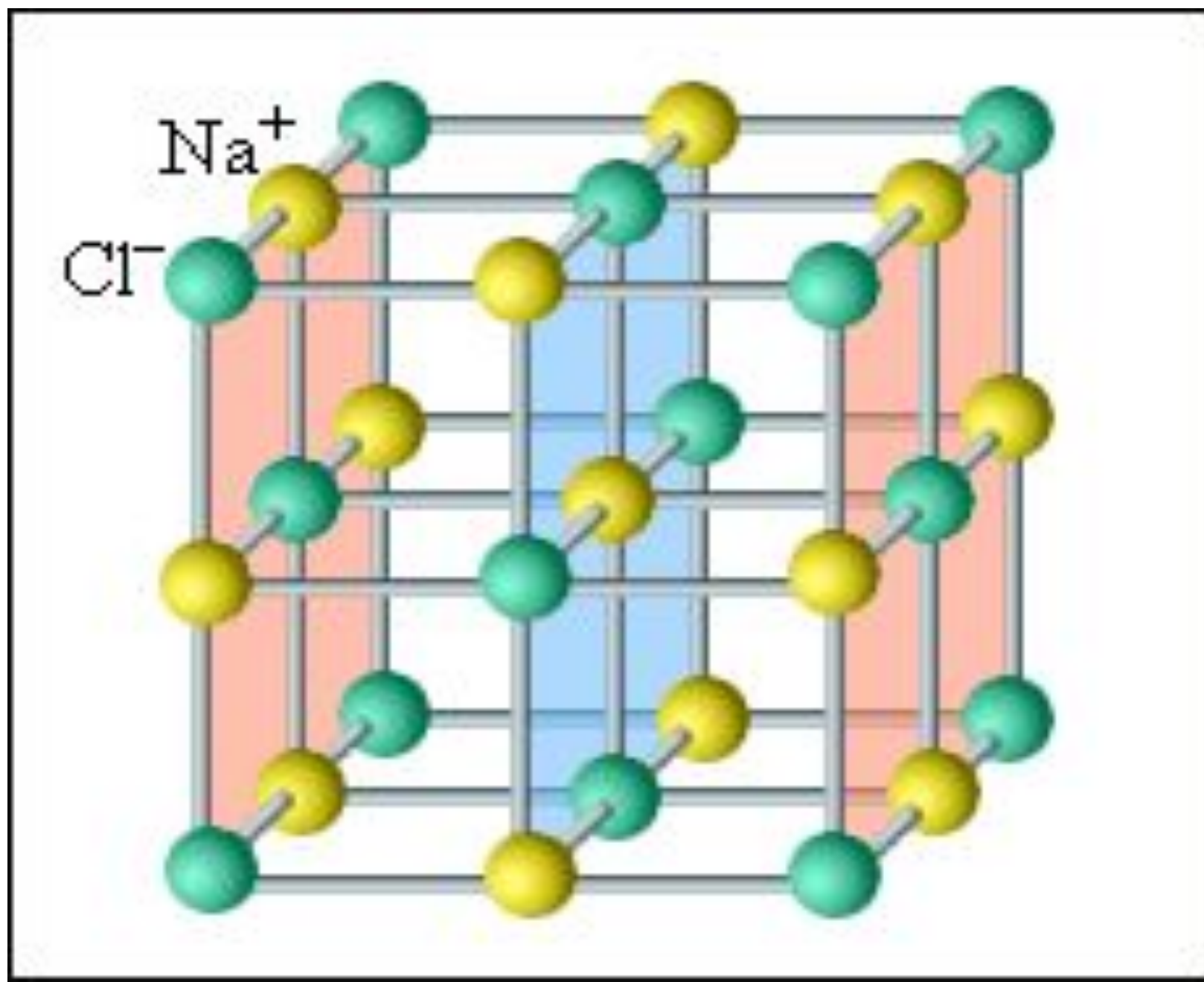
(3)

(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 ,...).

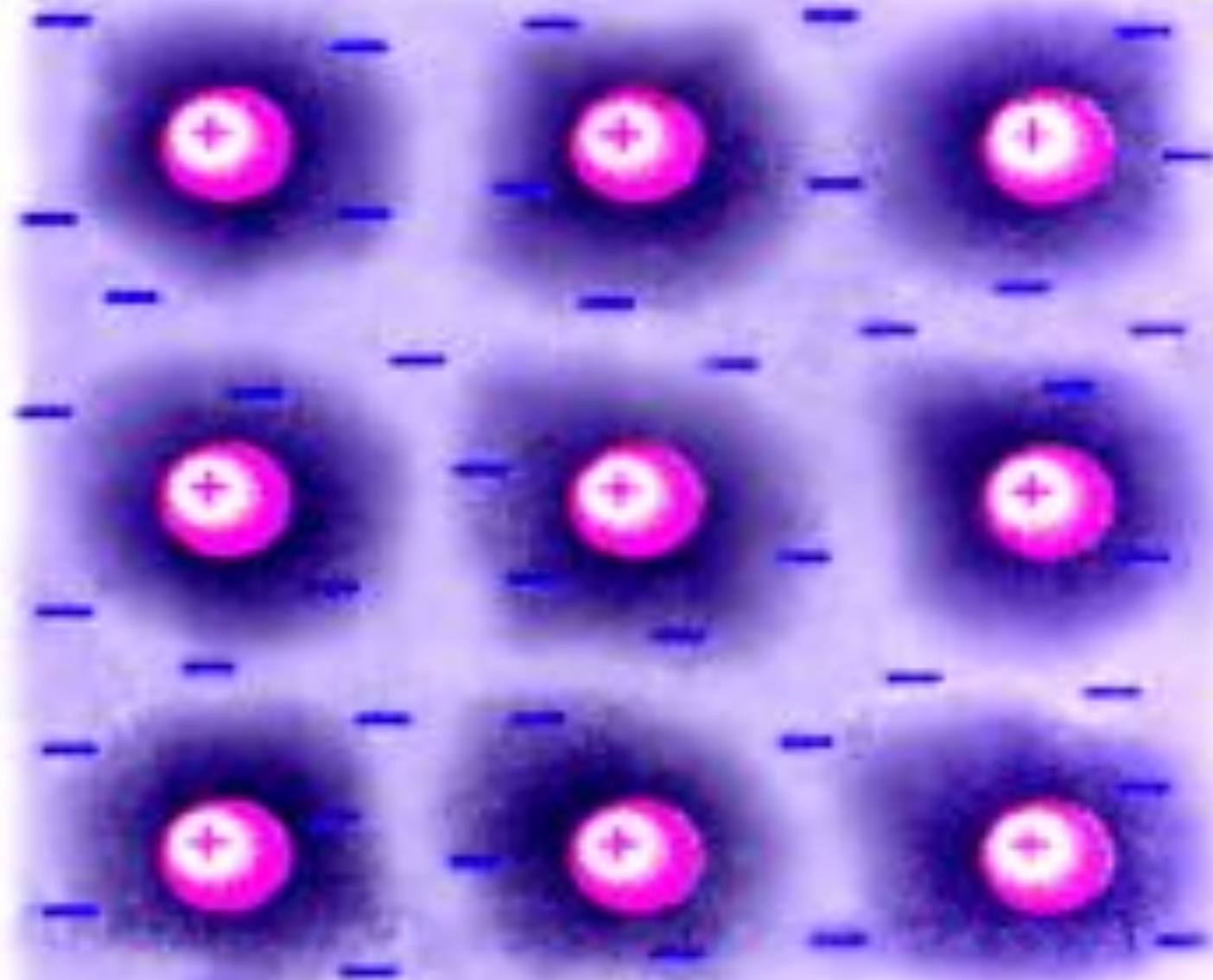


3. Металлические

– 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

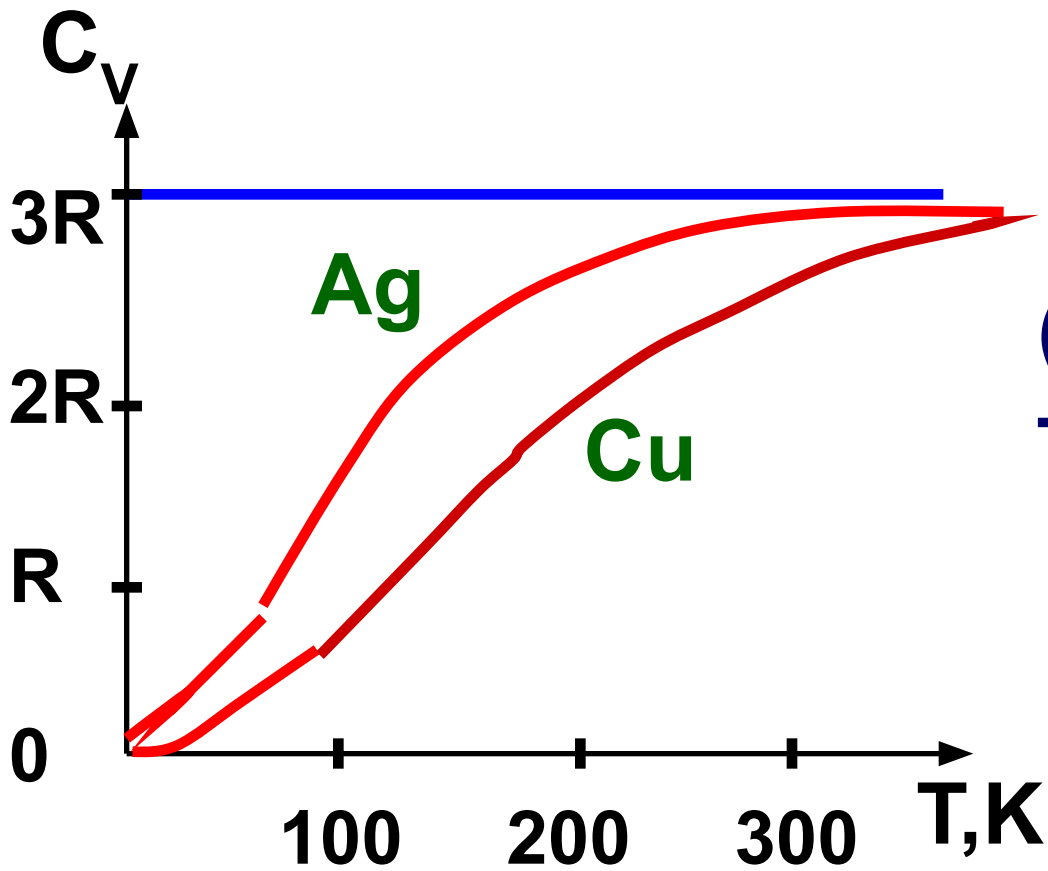
$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3R \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 \cdot \frac{e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}.$$

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 ν - 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

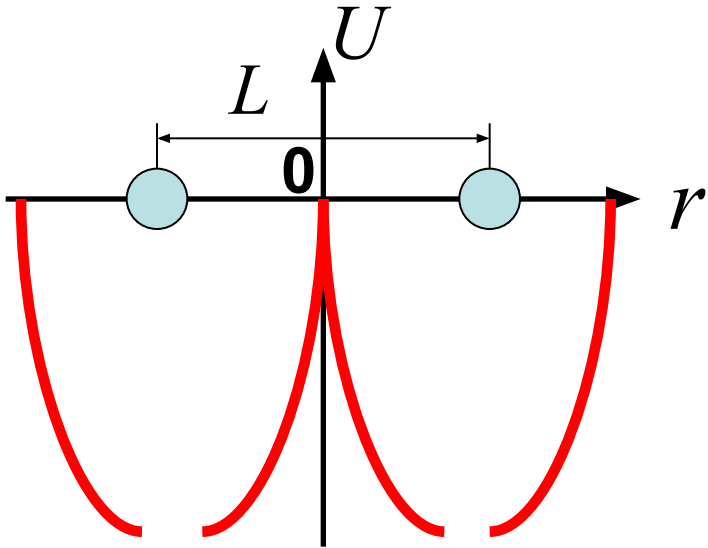
Твердое тело - периодическая структура, электроны находятся в электрическом поле положительных ионов.

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.

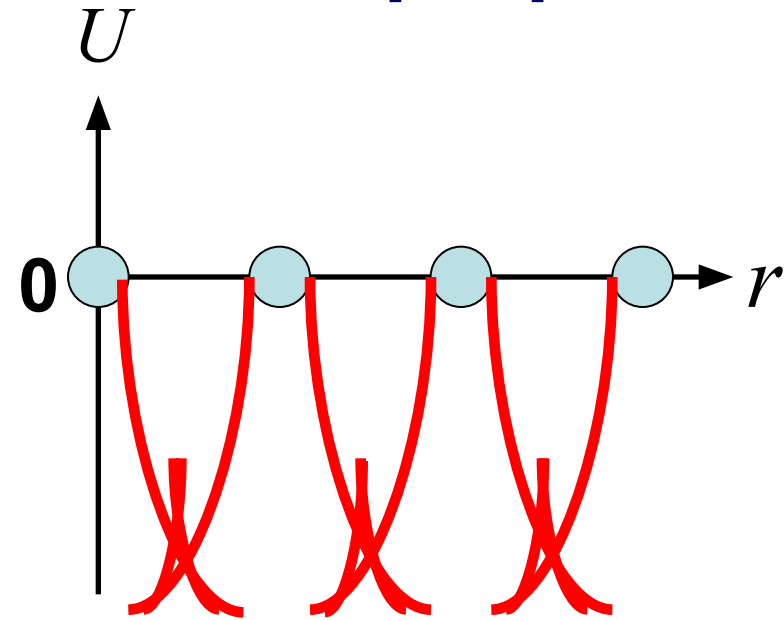
Энергетические спектры изолированного атома - дискретны, их энергия зависит от n, ℓ .
В газах расстояние между атомами $L \gg d$.



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

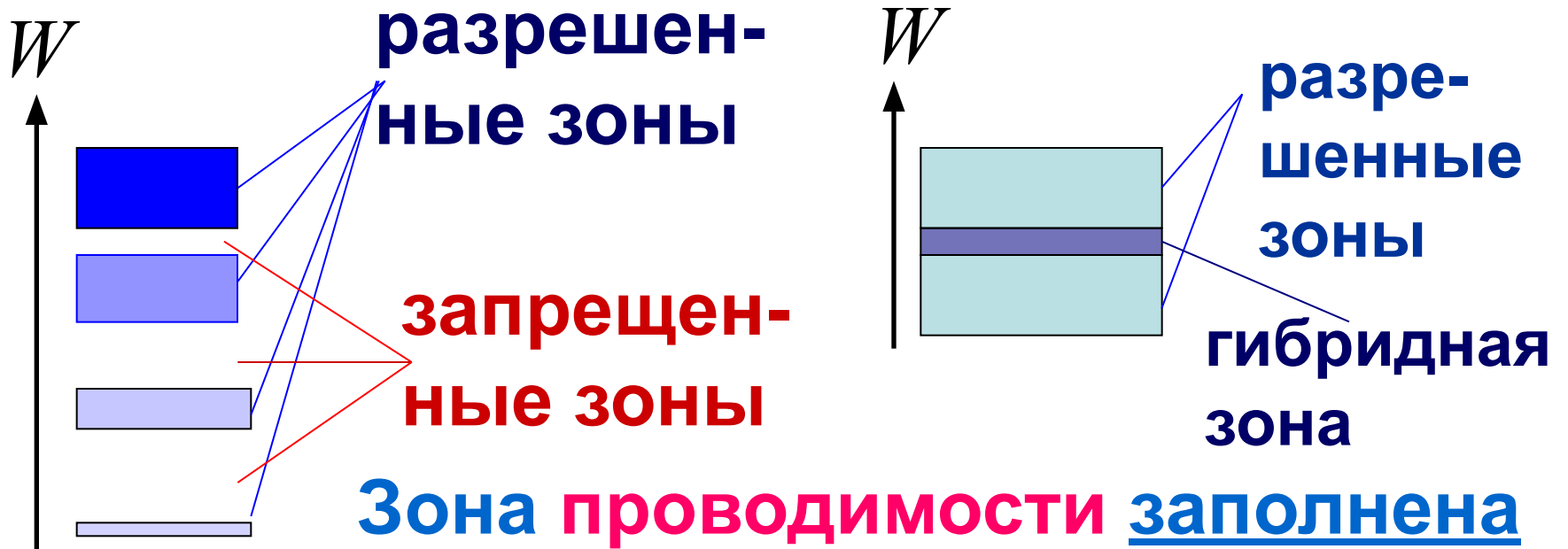
Без внешних воздействий газ-диэлектрик.

В кристалле $L \sim d \sim 10^{-10} \text{ м}$, 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)

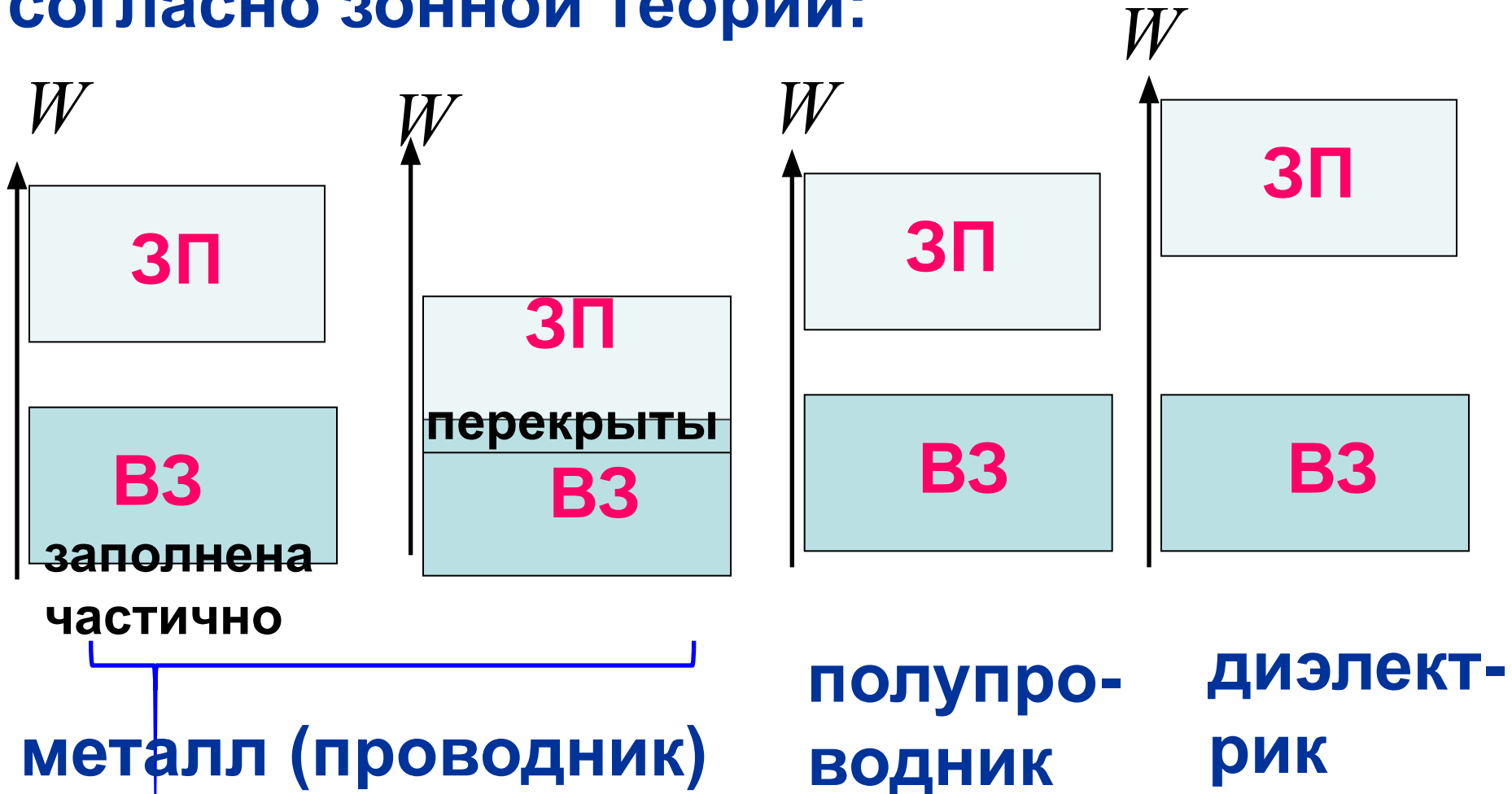


Зона проводимости заполнена электронами при $T=0K$ частично

или свободна.

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

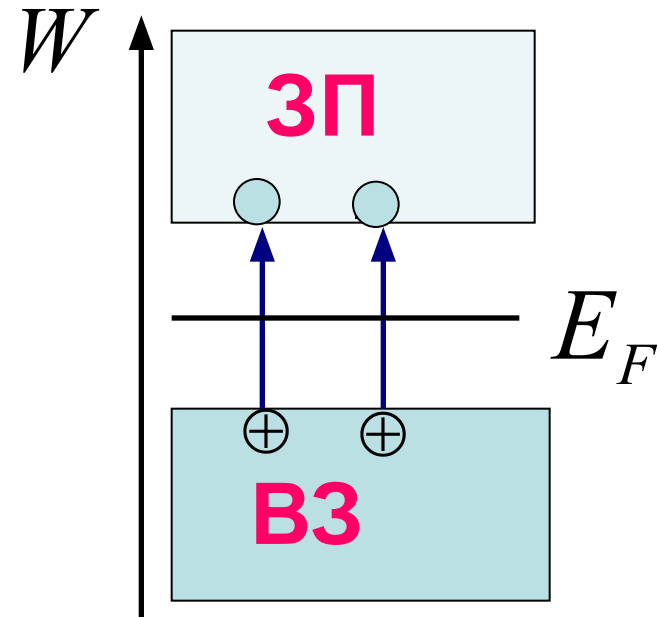
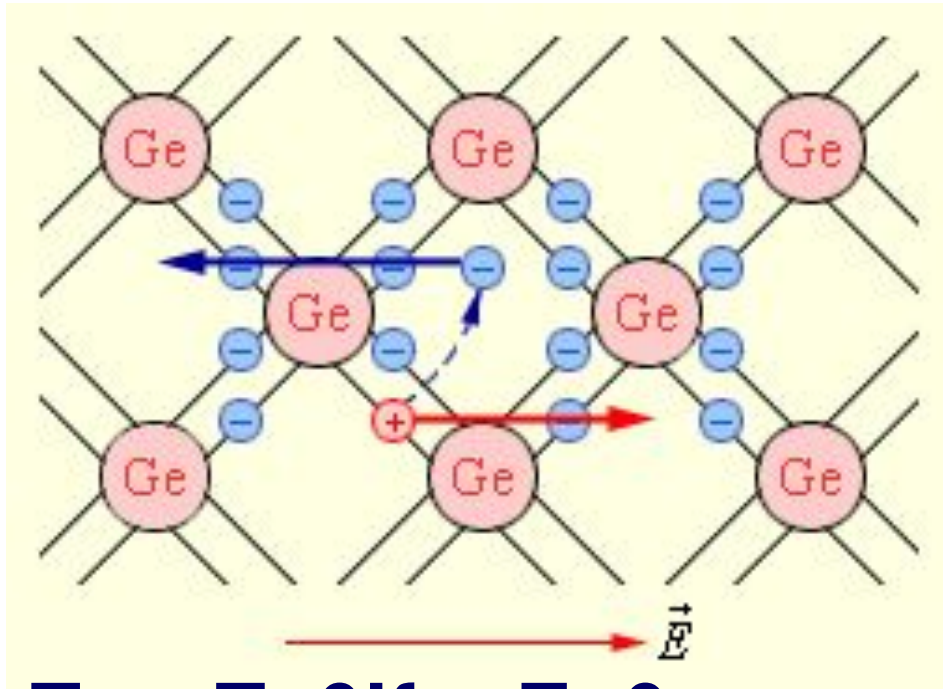
Электрические свойства твердых тел согласно зонной теории:



Ширина запрещенной зоны: $\Delta E_{\text{П/П}} < \Delta E_{\text{ДИ}}$.

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.

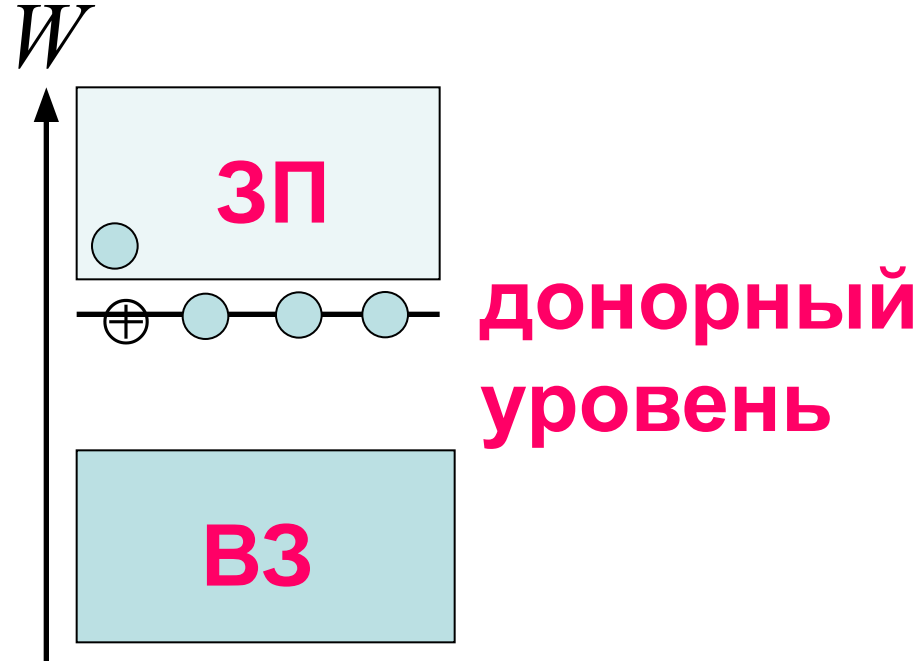
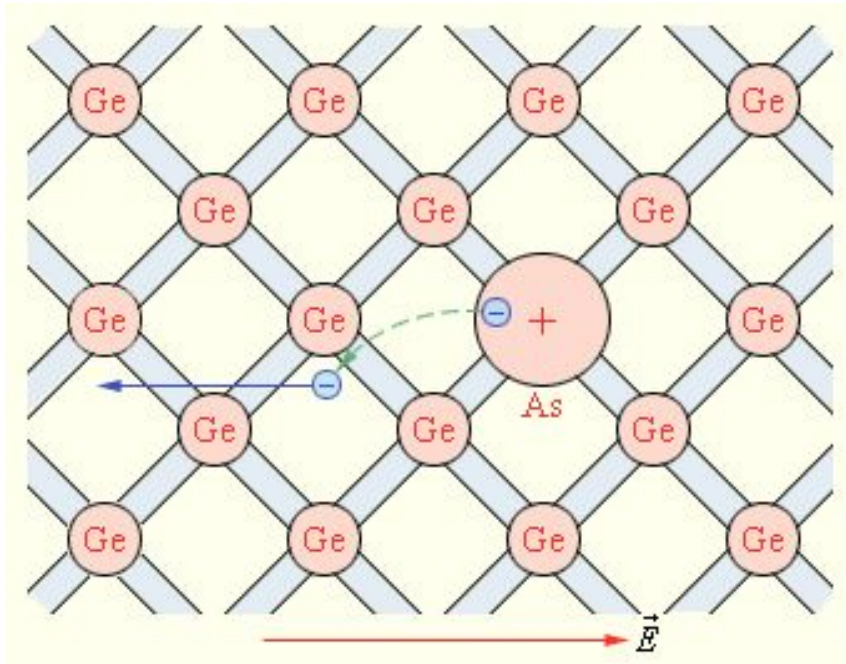
Удельная проводимость собственных П/П

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

где γ_0 постоянна для данного П/П.

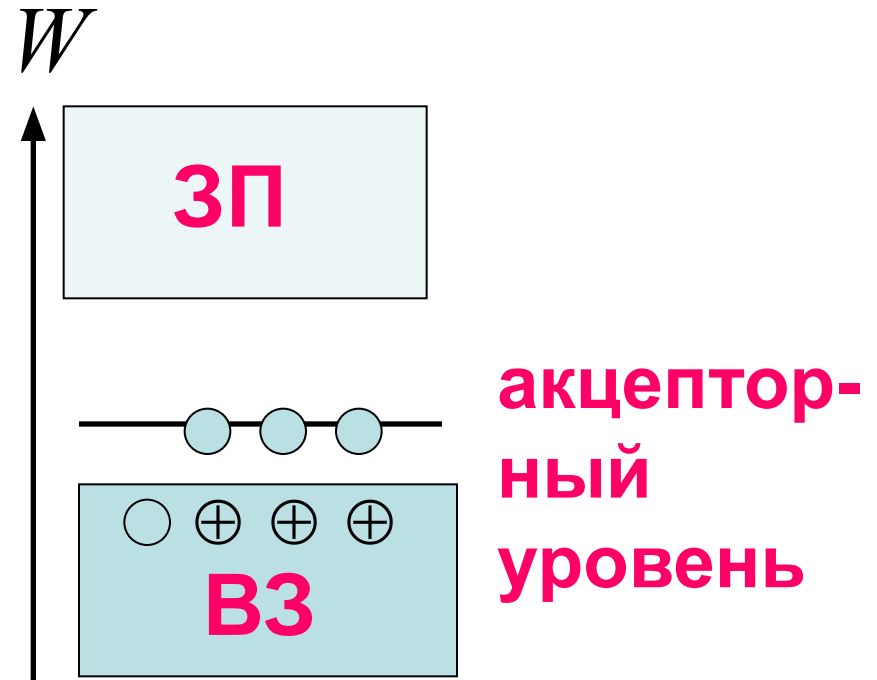
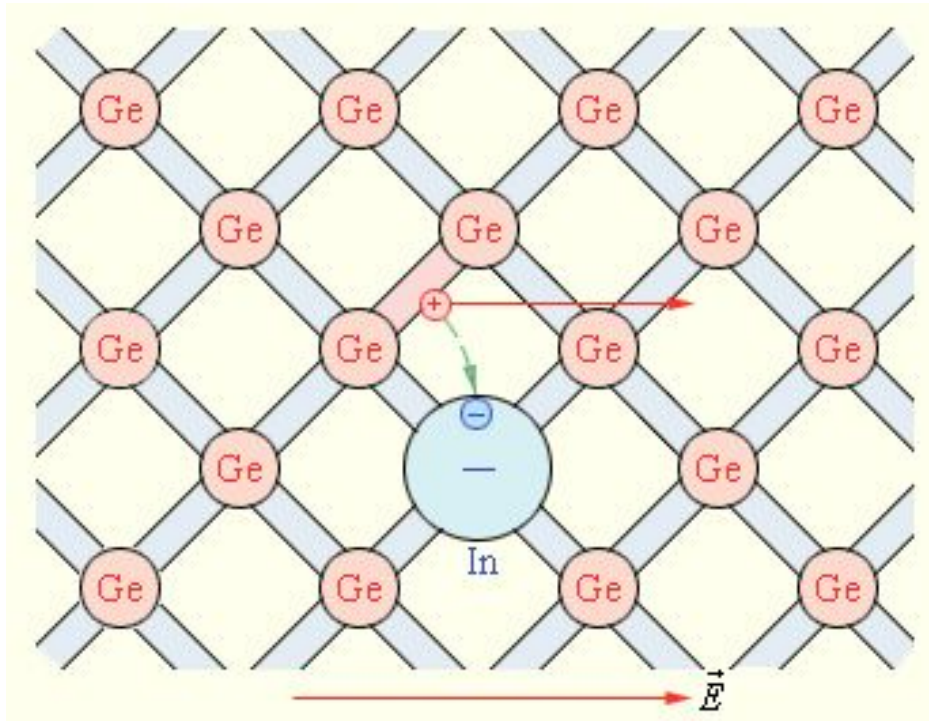
ΔE - энергия активации (ширина запрещенной зоны).

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



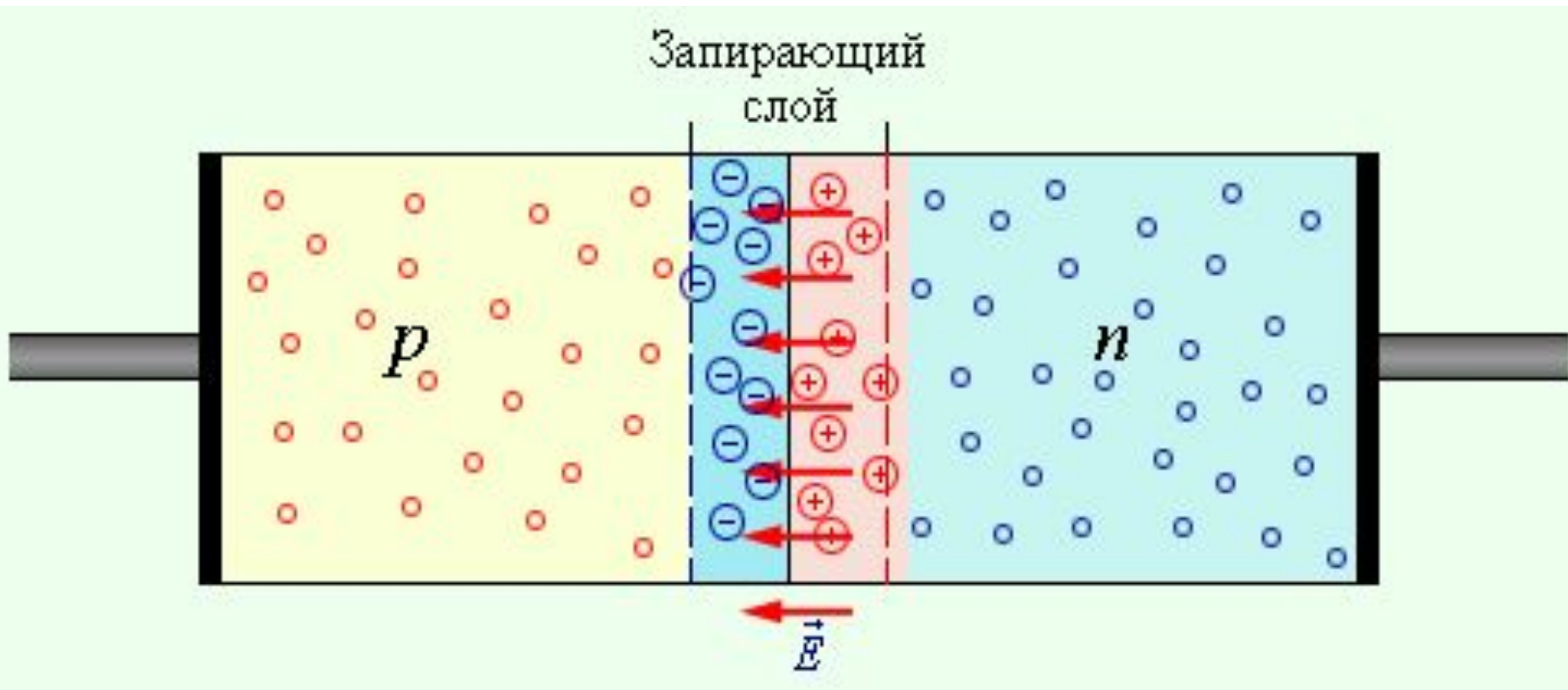
Основные носители – электроны в зоне проводимости, положительные заряды локализуются на неподвижных атомах мышьяка, в проводимости не участвуют, неосновные - дырки в валентной зоне.

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

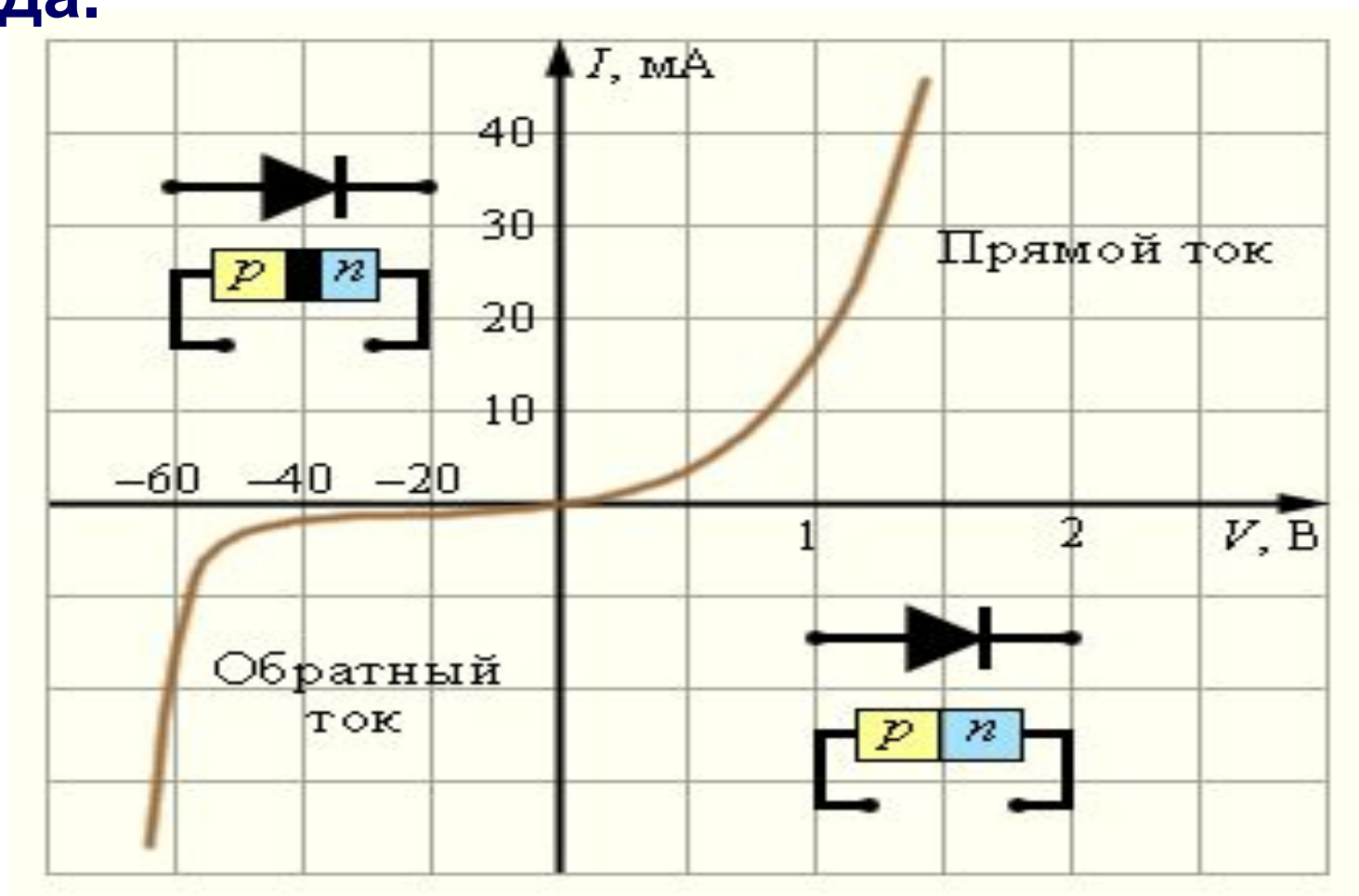


Основные носители – дырки в валентной зоне, избыточный отрицательный заряд связан с атомом индия и по решетке не перемещается, неосновные - электроны в зоне проводимости.

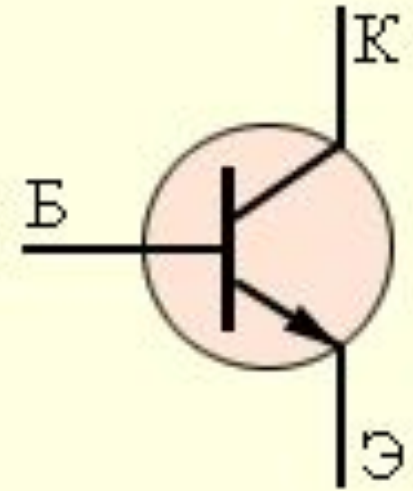
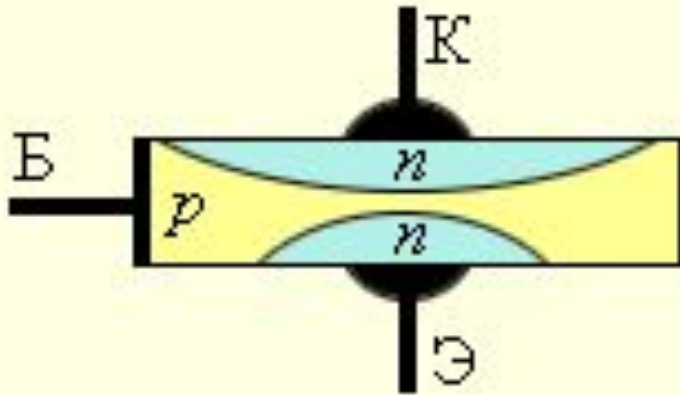
Запирающий слой при контакте полупроводников p - и n -типов



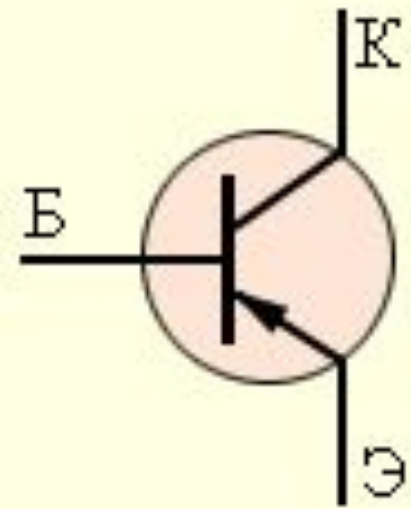
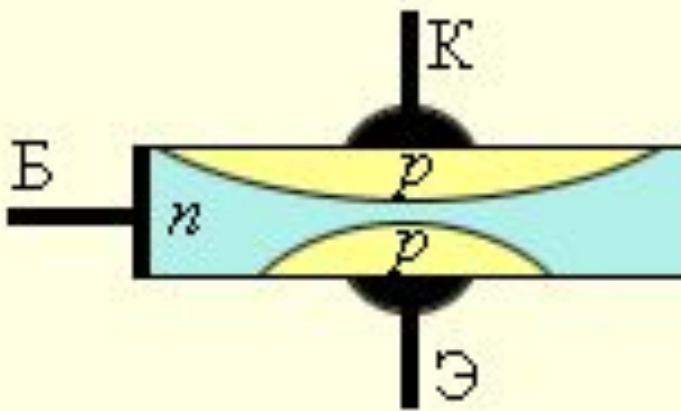
Вольт-амперная характеристика кремниевого диода.



Использованы различные шкалы для положительных и отрицательных напряжений



Транзистор структуры $n-p-n$



Транзистор структуры $p-n-p$