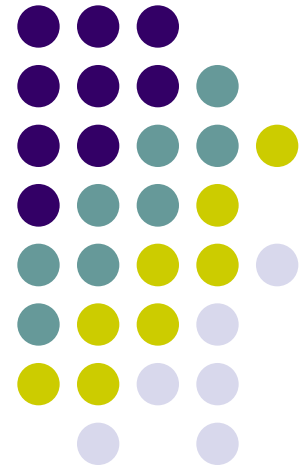


ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Лекция 2

(ФАКУЛЬТЕТ ЭЛЕКТРОНИКИ)

Зонная теория твёрдых тел





1. Основные особенности и принципы квантовой механики. Соотношение неопределенностей Гейзенберга
2. Понятие о зонной теории твердых тел. Основные положения
3. Образование энергетических зон
4. Особенности зонной схемы
5. Деление твердых тел на проводники, полупроводники и диэлектрики
6. Электропроводность металлов и полупроводников
7. Собственная и примесная проводимость полупроводников
8. Уровень Ферми в примесных полупроводниках

Основные особенности и принципы квантовой механики.



Луи де Бройль
1892 - 1987

Гипотеза де Бройля (1924) – корпускулярно-волновой дуализм присущ не только оптическим явлениям, но имеет универсальное значение. Частицы вещества наряду с *корпускулярными* также имеют *волновые* свойства. Де Бройль перенёс на случай частиц вещества те же правила перехода от классической картины мира к квантово-механической, какие справедливы для света. Свет можно представить как фотоны с энергией:

$$E = h\nu = \hbar\omega, \text{ где } E = h\nu = \hbar\omega, \quad - \text{ постоянная Планка}$$

$$E = h\nu = \hbar\omega, \text{ - приведенная постоянная Планка (постоянная Дирака)}$$

Импульс фотона света - $E = h\nu = \hbar\omega$, где $E = h\nu = \hbar\omega$, - длина волны света.

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

При этом $E = h\nu = \hbar\omega,$

$E = h\nu = \hbar\omega, E = h\nu = \hbar\omega, E = h\nu = \hbar\omega,$

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \mathcal{G}_\phi \geq c$$

$$\mathcal{G}_{ep} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar d\omega}{\hbar dk} = \frac{dE}{dp} = \mathcal{G}$$

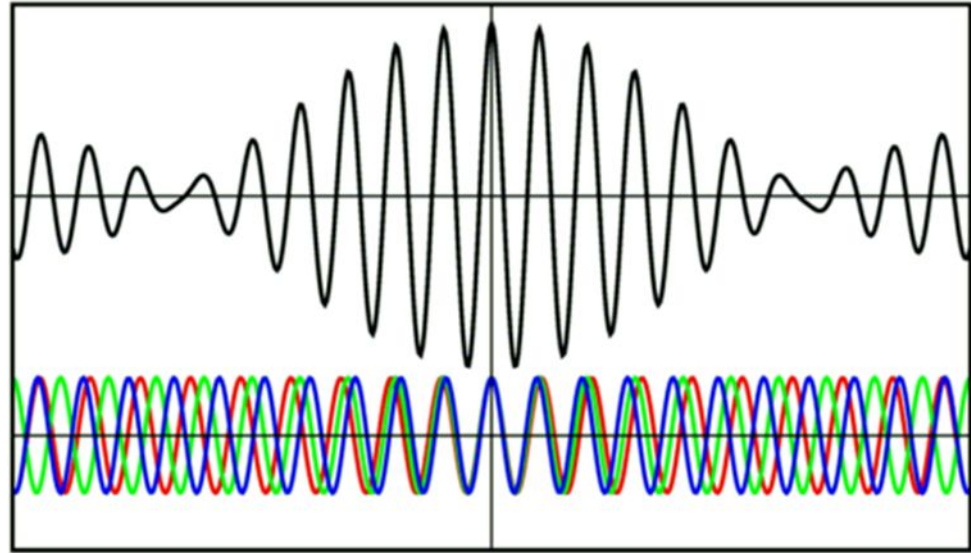
В нерелятивистском случае:

$$E_k = \frac{p^2}{2m} \quad \frac{dE_k}{dp} = \frac{p}{m} = \mathcal{G}$$

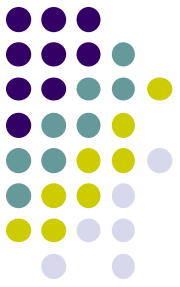
В релятивистском случае:

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$$

$$\frac{dE_k}{dp} = \frac{1}{2\sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}} \cdot 2pc^2 = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = \mathcal{G}$$



Волны де Бройля не являются электромагнитными, это волны особой природы.





Движение электрона или другой микрочастицы можно представить как суперпозицию плоских гармонических волн, образующих волновой пакет. Значение волновых чисел этих волн должны быть заключены в пределах Δk , причем Δk не велико. Максимум амплитуды результирующей волны перемещается с групповой скоростью. Наиболее вероятное местонахождение микрочастицы совпадает с центром групповых волн, поэтому волновая скорость является скоростью перемещения микрочастицы.

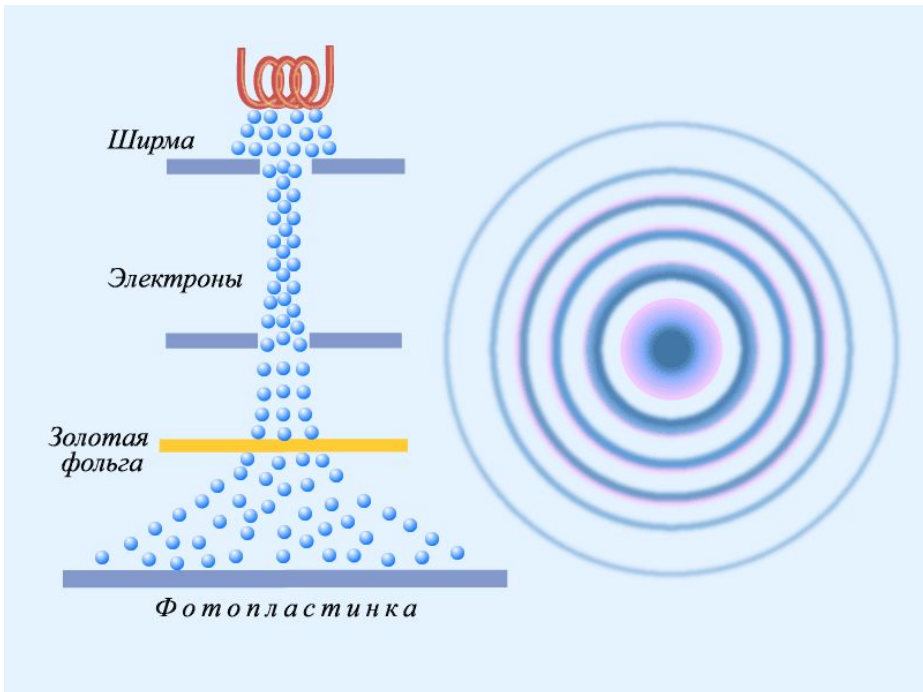
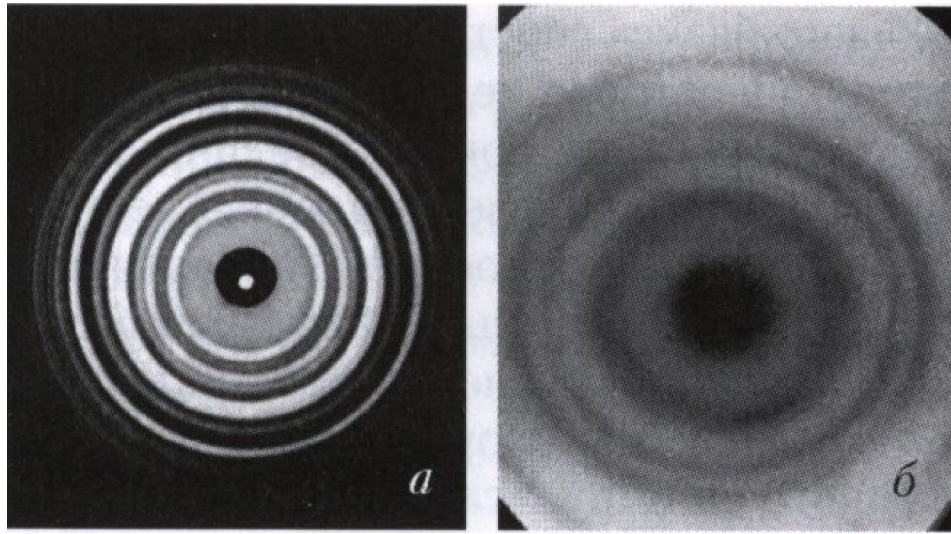
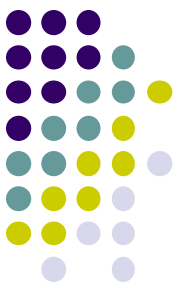


Схема опыта, демонстрирующего интерференцию электронов



Интерференционная картина:
а – рентгеновское излучение;
б – электронный пучок
(приведена оригинальная фотография, полученная Дж. П. Томпсоном в 1927 г.)

Соотношение неопределенностей Гейзенберга



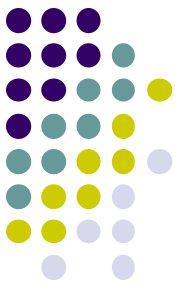
В классической механике состояние материальной точки определяется координатами, энергией, импульсом и т.д. Эти величины имеют строго **определенные** значения и могут быть измерены с **какой угодно точностью**. Указанные величины называются динамическими переменными и не могут быть приписаны микрообъекту.

Информацию о микрочастицах получают при наблюдении их взаимодействия с приборами (макрообъектами). Поэтому результаты измерений приходится выражать в терминах, применяемых к характеристикам макротел.

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

Измеренные значения динамических переменных приписываются микрочастицам, но своеобразие микрочастиц проявляется в том, что не для всех переменных при измерениях получаются определённые значения. В частности, электрон не может иметь одновременно точное значение координаты « x » и проекции импульса на ось Ox p_x .

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq h \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq h$$



Чем меньше неопределенность одной из переменных, тем больше неопределенность другой. Возможно такое состояние микрочастицы, когда одна величина точно определена, а другая оказывается совершенно неопределенной (ее неопределенность равна ∞).



Соотношение вида $\Delta a \Delta b \geq h$ принято называть **соотношением неопределенности Гейзенберга**, где величины a и b должны быть канонически сопряженными.

Утверждение о том, что произведение неопределенности значений двух сопряженных величин не может быть по порядку меньше h , называется **принципом неопределенности Гейзенберга**. Кроме координат и импульсов сопряженными являются энергия и время:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

Вернер Гейзинберг
1901 - 1976

Корпускулярный подход требует, чтобы частицу можно было локализовать в пространстве и времени. В этом случае волновое поле должно иметь ограниченную протяженность. Это означает, что невозможно определить длину волны.



Соотношения неопределенности Гейзенберга показывают, что волновая механика дает возможность одновременно использовать два, казалось бы, противоречащих друг другу понятия для описания физических явлений - плоской однородной бесконечно протяженной волны и локализованной корпускулы. Эти два столь различных понятия никогда не вступают в противоречие между собой; один из аспектов всегда ослабевает, когда усиливается другой.

Принцип неопределенности отнюдь не отрицает существования импульса и координаты как точных физических величин; он только утверждает, что эти величины не существуют одновременно как точные. Каждая из них в отдельности может быть измерена, или задана, сколь угодно точно.

Рассмотрим понятие траектории. $\Delta x \cdot \Delta \vartheta_x \geq \frac{h}{m}$

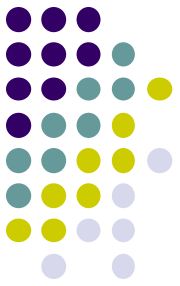
При увеличении массы m уменьшаются Δx и $\Delta \vartheta_x$

Для электрона $\Delta x = 1 \text{ \AA}$ $\Delta \vartheta_x = 7.27 \cdot 10^6 \text{ м/с}$

Радиус орбиты электрона $R = 0.5 \text{ \AA}$,
при этом $\vartheta_x = 2.3 \cdot 10^6 \text{ м/с}$



Неопределённость скорости больше чем сама скорость.
У электрона в атоме неопределённость скорости больше самой скорости, поэтому строго говорить о траектории электрона в вакууме нельзя, используют понятие электронное облако.



Классическая
механика



Частица движется по
траектории



В любой момент
времени у частицы
можно определить
координату и
импульс

Квантовая
механика



Понятие траектории
неприменимо (частица обладает
волновыми свойствами)



Невозможно говорить
об одновременных
значениях координаты
и импульса

Для микрочастиц невозможно говорить
об одновременных значениях
координаты и импульса



Существует принципиальный предел
точности, с которым такие переменные
как координата, импульс, энергия и
другие могут быть указаны и измерены



Смысл выражений

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$$



$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

Микрочастица не может иметь и определенную координату (x,y,z) и соответствующую проекцию импульса

Невозможно одновременно измерить энергию микрочастицы в определенном состоянии и **время пребывания** в этом микросостоянии

Если положение микрочастицы определено абсолютно точно, то совершенно невозможно определить проекцию импульса и наоборот

Если значение энергии состояния определено абсолютно точно, то совершенно невозможно определить время пребывания в этом состоянии и наоборот

Эта невозможность не связана с несовершенством измерительных приборов, а является следствием специфики микрообъектов

Соотношение неопределенностей является **квантовым ограничением** применимости классической механики к микрообъектам



1. Невозможно состояние, в котором частица находилась бы в состоянии покоя.
2. При рассмотрении движения квантового объекта во многих случаях отказываемся от понятия траектории
3. Часто теряет смысл деления энергии на кинетическую и потенциальную (первая зависит от импульса, вторая от координат, которые не могут быть измерены одновременно).

Понятие о зонной теории твердых тел.

Основные положения



Твердое тело – многоядерная и многоэлектронная система, в которой действуют электростатические (кулоновские) силы. Магнитное взаимодействие значительно слабее и вносит лишь небольшие поправки.

Допущения:

- 1) адиабатическое приближение – деление системы на легкие и тяжелые частицы. Тогда скорость движения ядер много меньше скорости движения электронов. Ядра рассматриваются как неподвижные.
- 2) полагают, что рассматриваемый «выделенный» электрон находится в усредненном **заданном внешнем поле** – сферически симметричном поле, образованном всеми другими электронами и ядром. Такое поле называют «самосогласованным».

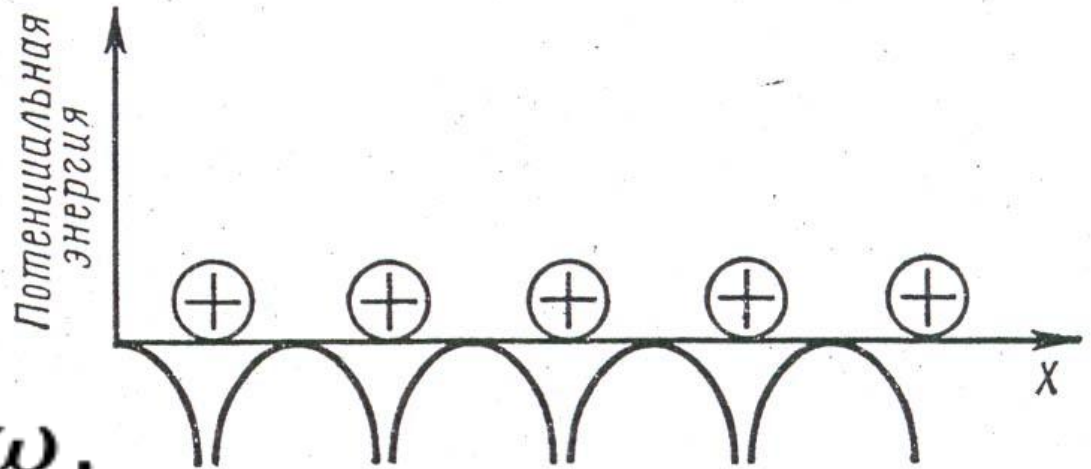
Образование энергетических зон



При образовании кристалла происходит сближение атомов; связь электронов с собственным ядром ослабляется: происходит обобществление электронов.

τ – время жизни электрона в определённом узле;

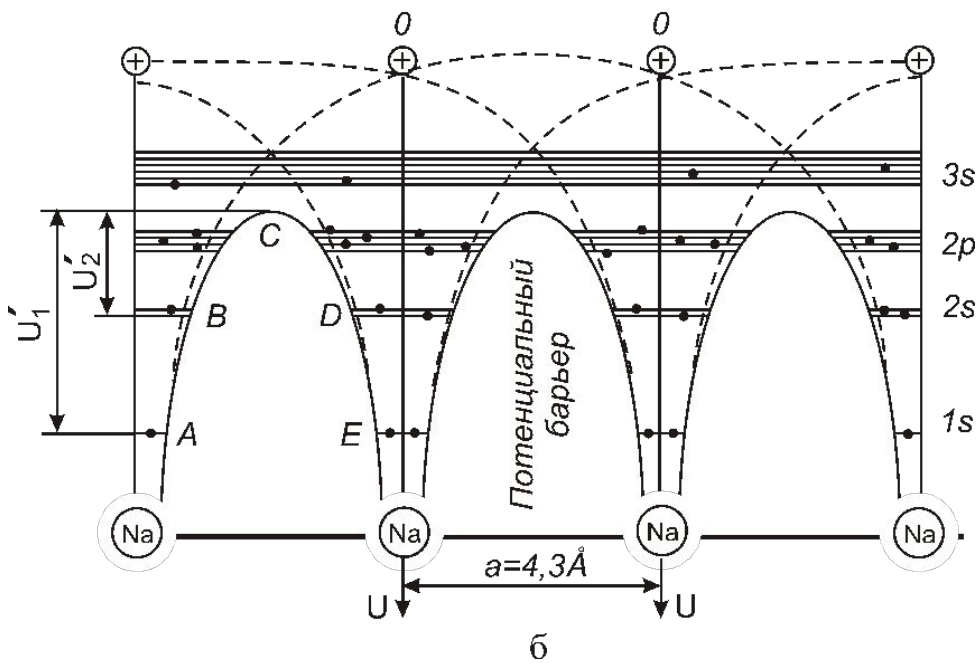
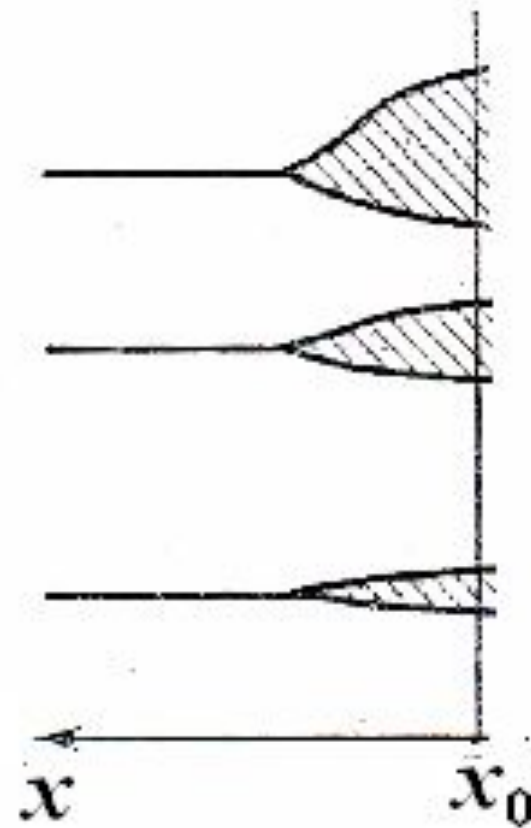
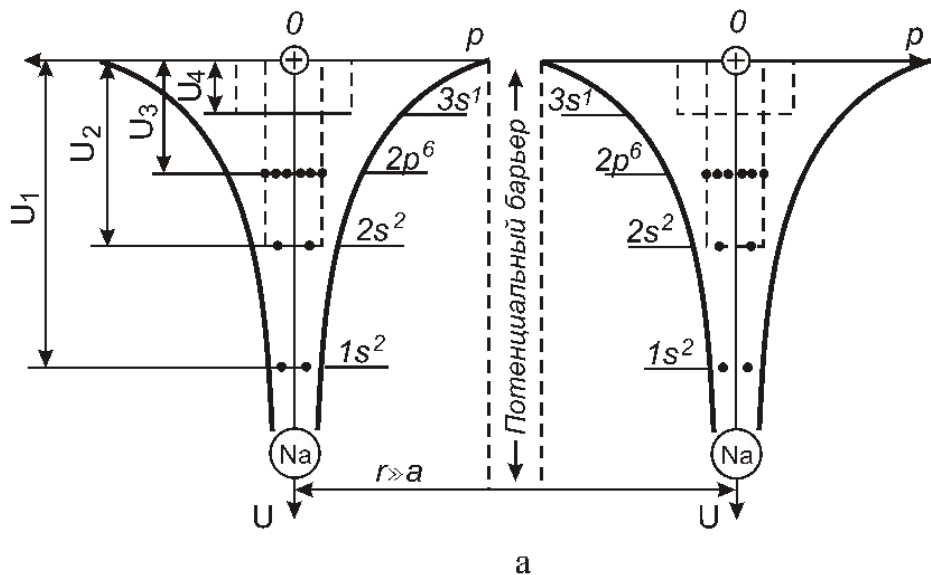
ΔE – ширина энергетического уровня.



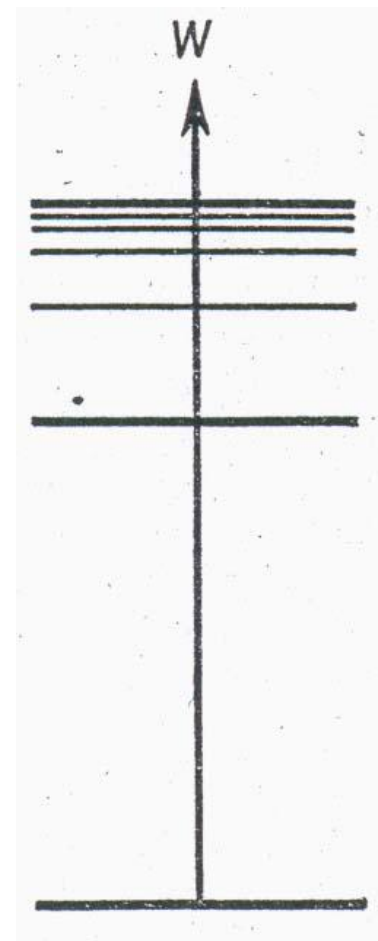
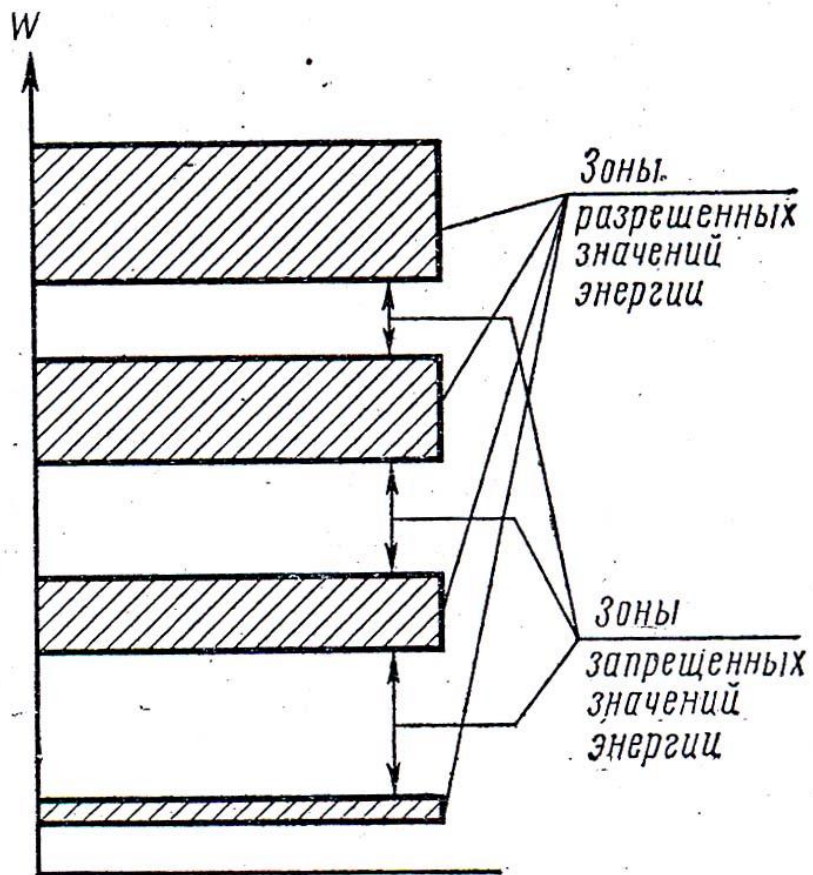
$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

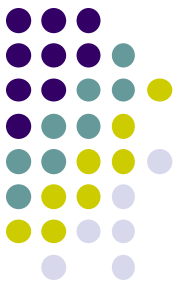
Расщепление уровня в зону



Зонная схема

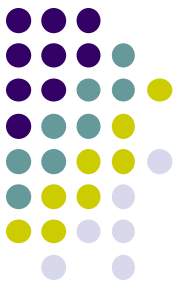


Особенности зонной схемы



1. Зоны энергетических уровней образуются как уровнями, занятыми электронами, так и свободными уровнями.
1. В изолированном атоме дискретные уровни энергии разделены областями недозволенных значений энергии. Разрешенные энергетические зоны разделены зонами запрещенных значений энергии (запрещенными зонами). Ширина запрещенных зон соизмерима с шириной разрешенных зон. С увеличением энергии ширина разрешенных зон увеличивается, а ширина запрещенных зон уменьшается.
2. В изолированном атоме дозволенные энергетические уровни могут быть заняты электронами или свободны. В кристалле может быть различное заполнение зон. В отдельных случаях они могут быть целиком свободны или целиком заняты.
3. В изолированном атоме электроны могут переходить с одного уровня на другой. В кристалле электроны могут переходить из одной разрешенной зоны в другую, а также совершать переходы внутри одной и той же зоны.
4. Особенно сильно расщепляются вышележащие энергетические уровни, и особенно, уровни с внешним валентным электроном. Эта зона называется **валентной**. Разрешенная зона, лежащая над валентной, называется зоной **проводимости**.

Деление твердых тел на проводники, полупроводники и диэлектрики

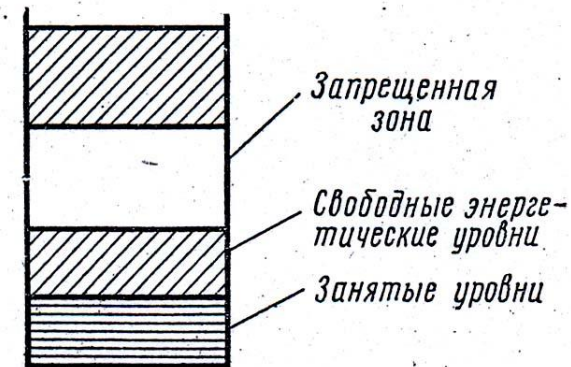


С позиций зонной теории различие в электрических свойствах твердых тел объясняется:

- а) шириной запрещенных зон;
- б) различным заполнением электронов разрешенных энергетических зон, а именно валентной зоны.

Необходимое условие проводимости — наличие свободных электронов в валентной зоне.

В зависимости от степени заполнения валентной зоны электронами и ширины запрещенной зоны кристаллы подразделяются на металлы, полупроводники и диэлектрики.





Электропроводность металлов

Согласно квантовой теории проводимость металлов

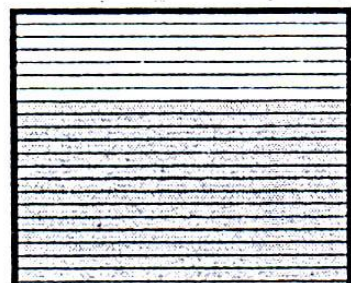
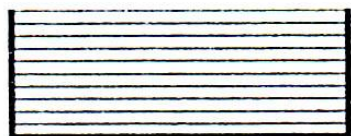
τ — время релаксации.
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}.$$

В проводимости участвуют не все электроны, а только те из них, которые имеют энергию вблизи уровня Ферми. Это — малая часть всех свободных электронов

Физическая причина электрического сопротивления — рассеяние электронных волн на примесях и дефектах решетки, а также на ее тепловых колебаниях.



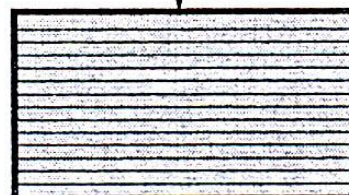
Зонная схема металлов, полупроводников и диэлектриков



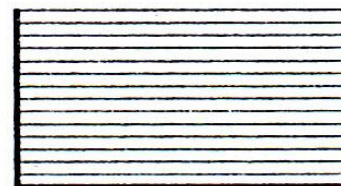
• *Металл*



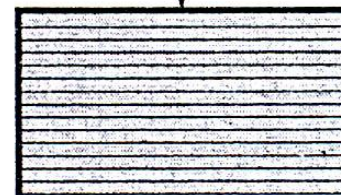
ΔE



Полупроводник

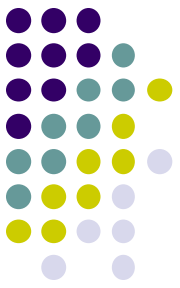


ΔE



Диэлектрик

Собственная проводимость полупроводников



У полупроводников и диэлектриков валентная зона полностью заполнена электронами. При $T = 0$ К они могут принять участие в проводимости, если им сообщить энергию, превышающую энергию запрещенной зоны и они перейдут в свободную зону. Свободная зона станет для них зоной проводимости.

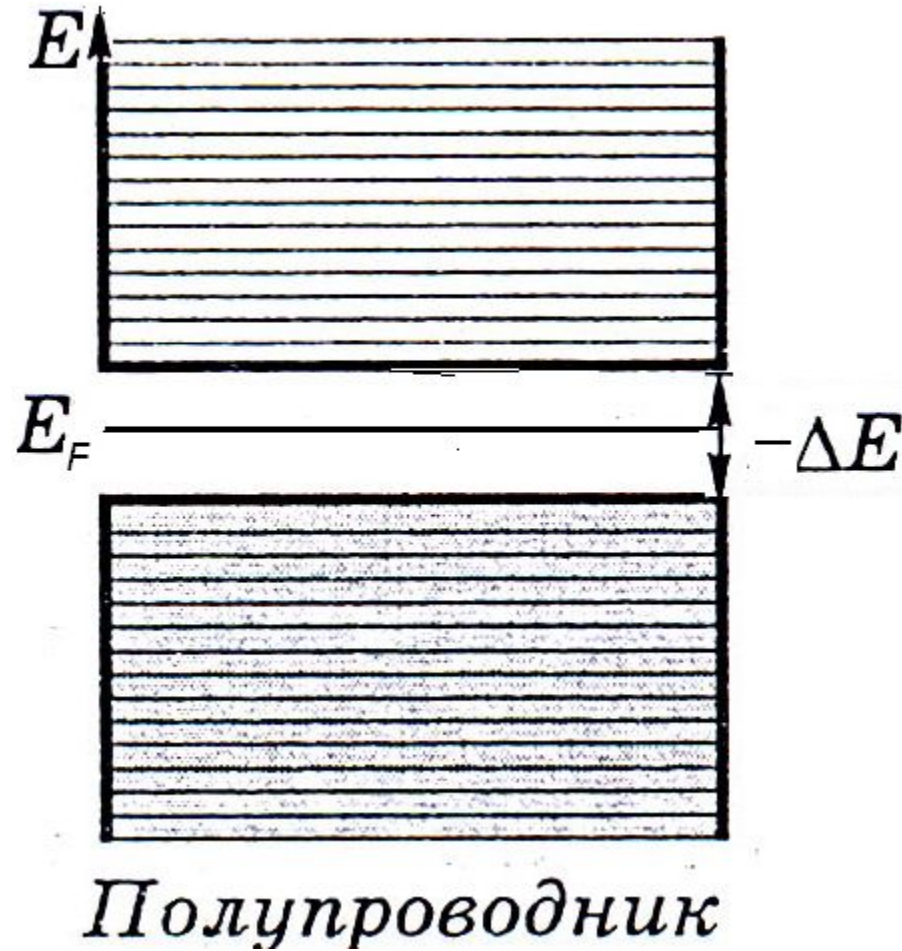
Уровень Ферми, как показывает расчет, расположен в собственных полупроводниках и диэлектриках посередине запрещенной зоны и не связан с реальным электроном.

Собственная проводимость полупроводников зависит от температуры по закону

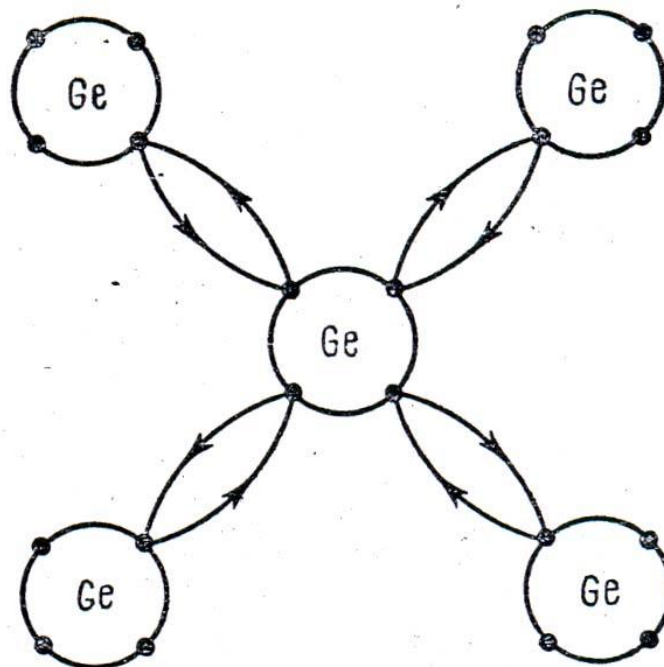
$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}.$$

Наиболее важными собственными полупроводниками являются кремний (Si $Z=14$) и германий (Ge $Z=32$).

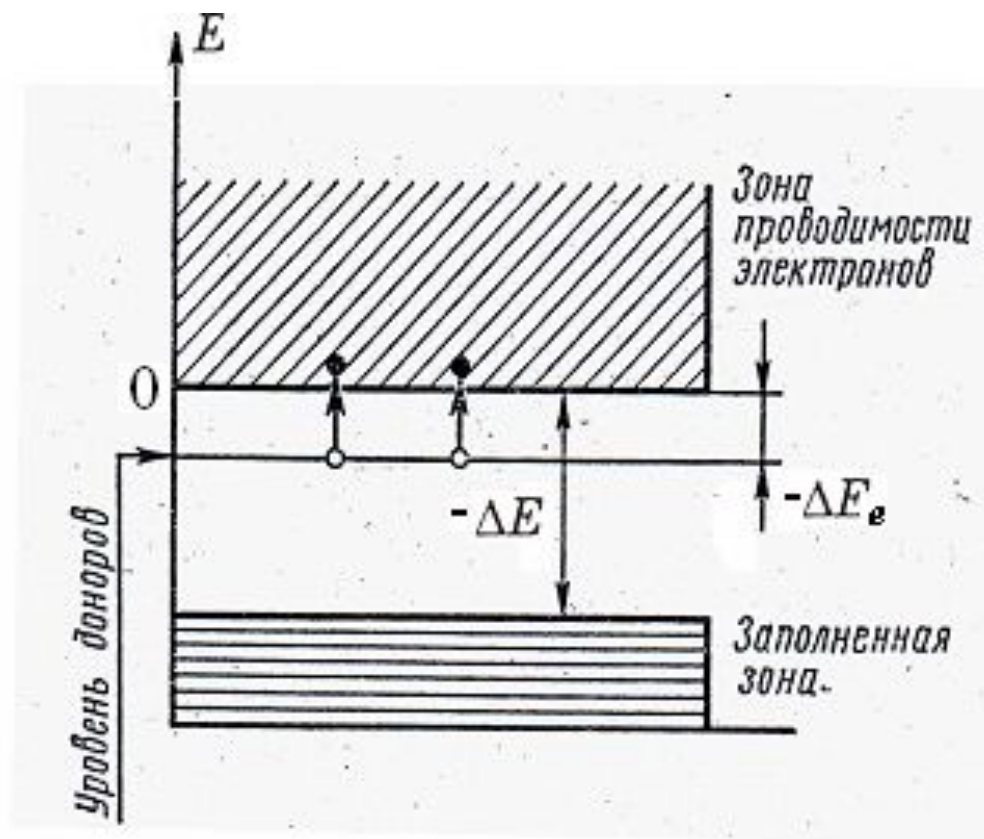
Уровень Ферми в собственном полупроводнике



Ковалентная связь в Ge

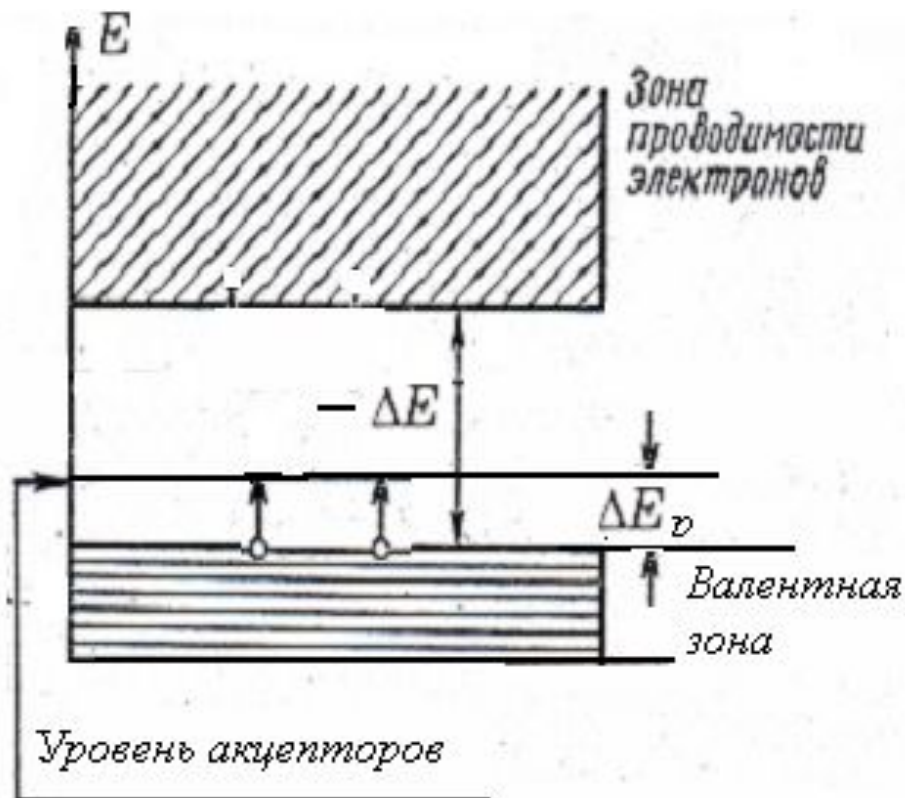


Донорные уровни





Акцепторные уровни



Возникает, когда в чистом полупроводнике некоторые

атомы замещают другими атомами. Примесь может

быть как поставщиком электронов, так и образовывать центры прилипания.



- Если атом Si или Ge заменить атомами примеси, обладающими пятью валентными электронами (фосфор, мышьяк, сурьма). Четыре образуют связь с соседними атомами Si или Ge, а пятый оказывается лишним и не может образовать ковалентную связь - проводимость *n*-типа.
- Если примесь, например In, В содержит три валентных электрона, то одна двойная связь не укомплектована – дырочная проводимость – проводимость *p*-типа.