## Раздел 6 Основы квантовой статистики и физики твердого тела

Тема 33 Основы зонной теории твердого тела

Лекция 1: Основные понятия теории твердого тела

**Цель лекции** – познакомиться с основами зонной теории твердого тела.

#### Вопросы лекции:

- 1. Возникновение энергетических зон в кристалле
- 2. Заполнение зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники

Литература: БЭУ п. 33.1 – 33.4; Доп. [1, стр. 450-454].

Техническое обеспечение: Комплект мультимедийных средств обучения. База данных анимаций физических процессов.

# Лекцию записывать в режиме слайд-шоу!!!!

#### Предпосылки появления зонной теории TT

Классическая теория объясняет теплопроводность и электропроводность металлов поведением электронного газа, который заполняет весь кристалл.

#### Классическая теория не объясняет:

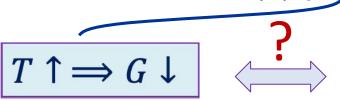
- ✓ Как образуется электронный газ?
- ✓ Почему в одних кристаллах (металлах) он есть, а в
- ✓ других (диэлектриках) его нет?
- ✓ Зависимость G(T) проводимости металлов от температуры:

Классическая теория:

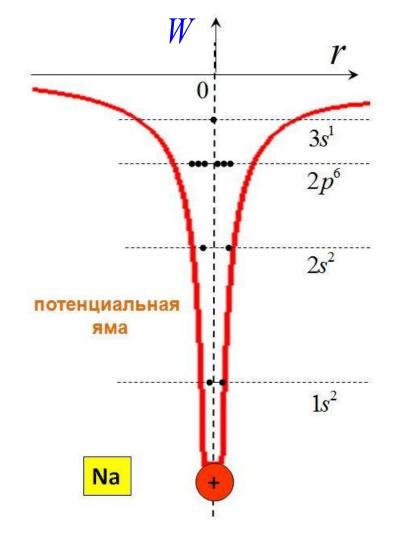
Опыт:

 $G \sim 1/\sqrt{T}$   $G \sim 1/T$ 

 $\checkmark$  Различную зависимость G(T) у металлов и полупроводников







«Потенциальная яма» - это ограниченная область пространства, в которой энергия частицы меньше, чем вне ее.

«Потенциальная яма» для электрона – область вокруг ядра атома, где проявляются силы Кулона между ядром и электронами.

#### 33.1. Возникновение энергетических зон в кристалле

Тепловые, электрические, магнитные и оптические свойства кристаллов определяют квантовые состояния электронов.

Рассмотрим два атома натрия

<sub>11</sub>Na (
$$1s^22s^22p^63s^1$$
)

удаленных на большое расстояние r друг от друга, при котором взаимодействием между ними можно пренебречь  $(r \gg d - \text{постоянная кристаллической решетки}).$ 

Переходу электронов между атомами препятствует потенциальный барьер шириной r.

Взаимодействие двух атомов осуществляется путем обмена ими внешними (валентными) электронами.

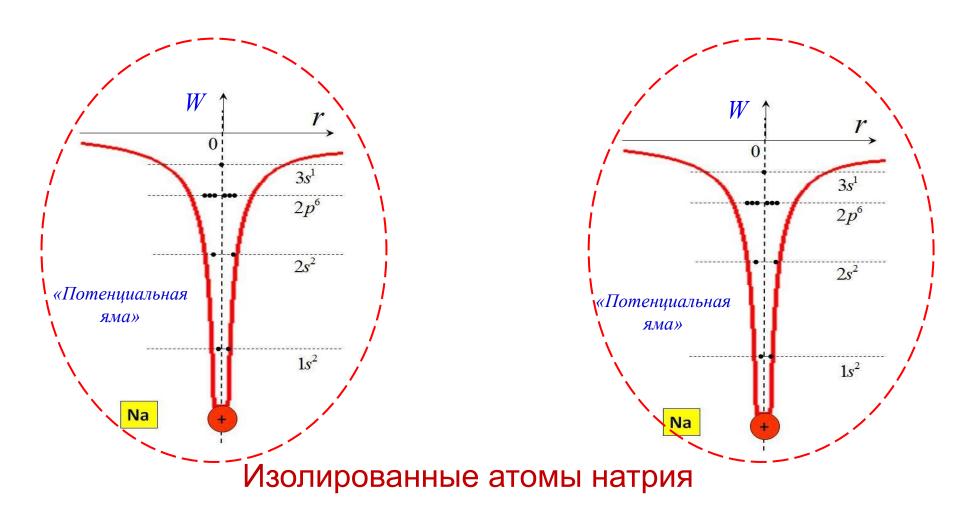


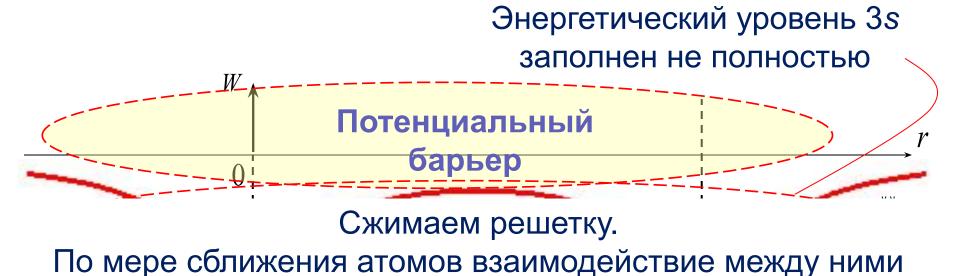
Необходимо создать условия для понижения «потенциального барьера»

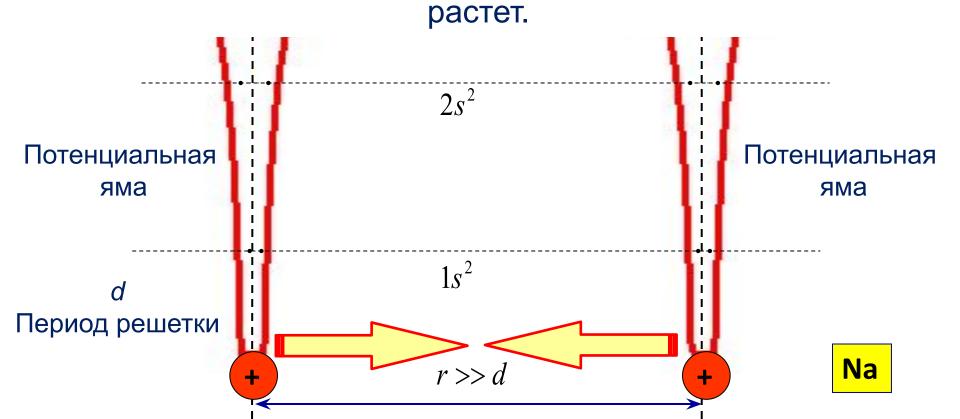
Как понизить барьер?

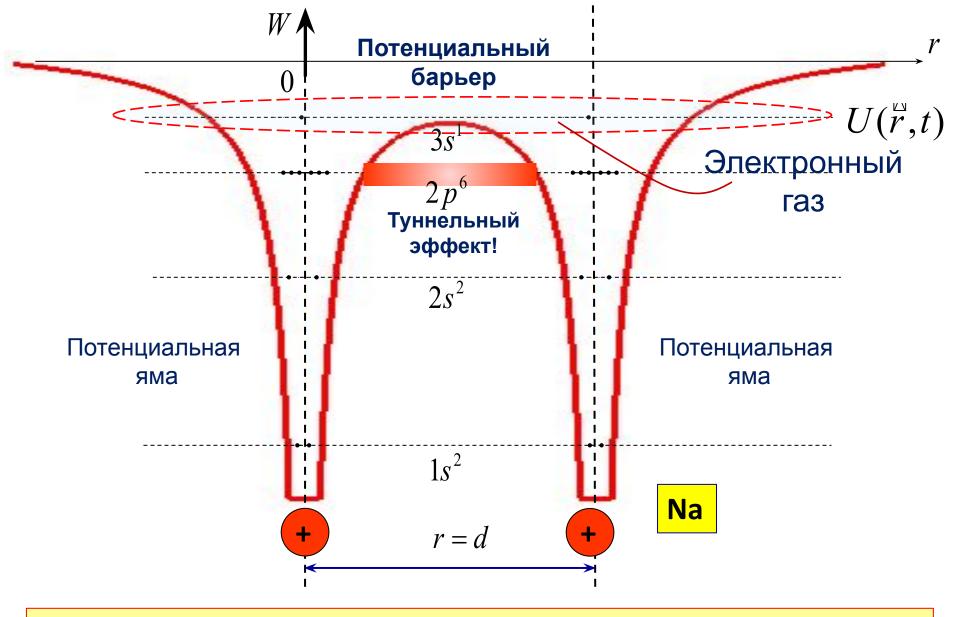
### Атомы Na расположены на большом расстоянии друг от друга (r >> d).

Энергетическое состояние электронов аналогично состоянию в изолированном атоме.

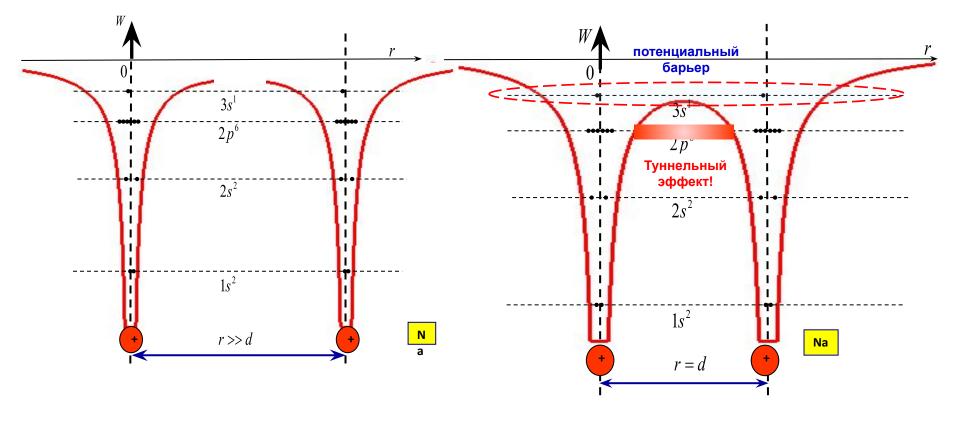








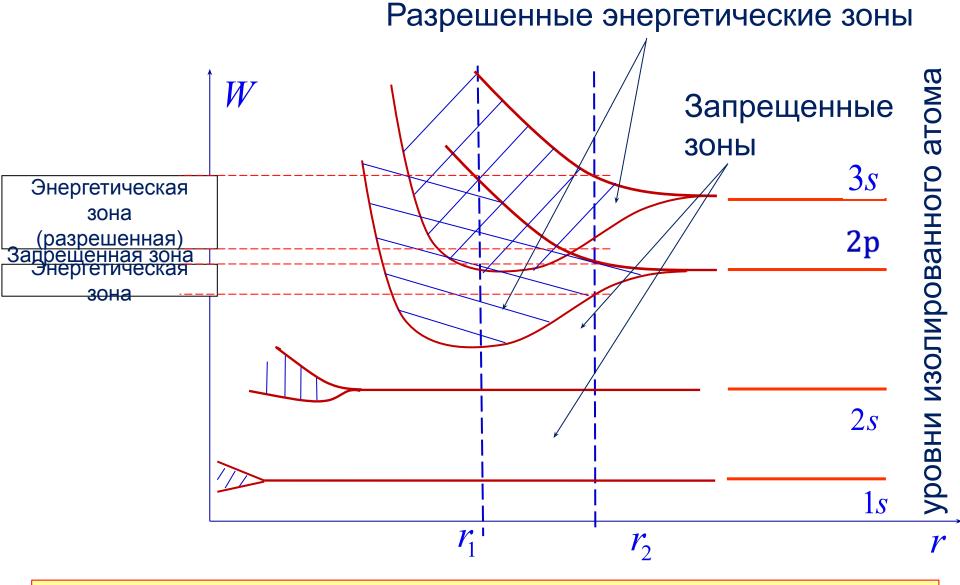
Результат сближения атомов - образование кристаллической решетки



- 1. Понижается высота потенциального барьера (валентные электроны беспрепятственно могут переходить от одного атома к другому).
- 2. Уменьшается толщина потенциального барьера (электроны между атомами обмениваются путем «туннельного эффекта).

- 3. Потенциальная энергия электронов при образовании кристалла уменьшается. Это приводит к смещению вниз их энергетических уровней.
- 4. Вследствие переходов электронов от одного атома к другому уменьшается степень локализации электронов.

**Результат:** энергетические уровни атомов смещаются, расщепляются и превращаются из линий в энергетические зоны



Ширина разрешенных зон возрастает с увеличением энергетического уровня в изолированном атоме, ширина запрещенных зон – сокращается.

#### 33.2. Заполнение зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники

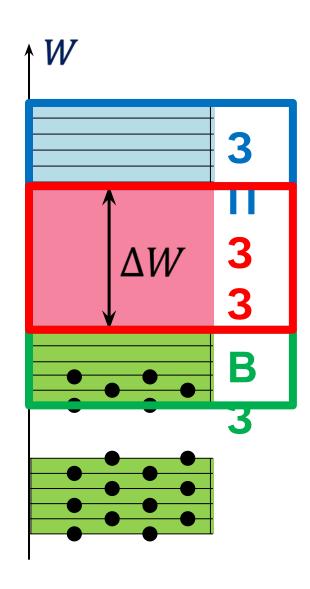
- ✓ Расстояние между энергетическими уровнями в разрешенной зоне мало (порядка 10<sup>-19</sup> эВ).
- При переходе между уровнями в зоне энергия электрона меняется практически непрерывно (квазинепрерывно).
- На каждом уровне могут находиться только два электрона с разными магнитными спиновыми квантовыми числами

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Валентная зона — самая верхняя разрешенная зона, полностью или частично заполненная электронами при T=0.

Зона проводимости — первая над валентной разрешенная зона, при T=0 пустая. В ней электроны могут быть только при T>0.

Запрещенная зона разделяет валентную зону и зону проводимости.

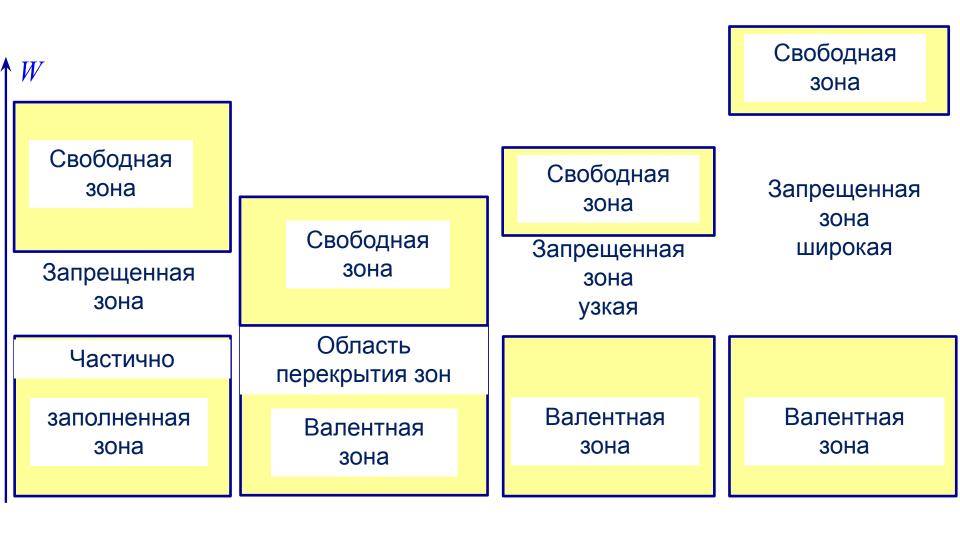


!!! Свойства твердых тел в основном определяются характером валентной и свободной зон.

Различия в электрических свойствах тел объясняются шириной запрещенной зоны и различным заполнением разрешенных энергетических зон.

Запрещенные зоны разделяют разрешенные зоны, но могут и отсутствовать, если разрешенные зоны перекрывают друг друга.

#### Зонная классификация тел

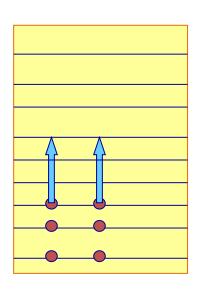


Проводники

Полупроводник Диэлектрик

#### Проводники

1. Электроны частично заполненной зоны (электроны сосредоточены у "дна" зоны)



Свободных уровней много (на расстояниях порядка  $\approx 10^{-22}$  эВ).

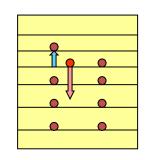
Слабое электрическое поле способно вызвать упорядоченное движение электронов вверх.

В теле возникает электрический ток!

#### Металлы

2. Электроны сильно заполненной зоны (свободные уровни имеются только у "потолка" зоны)

Перемещение электрона на верхний уровень приводит к возникновению" дырки", которая может двигаться вниз по энергетической шкале.

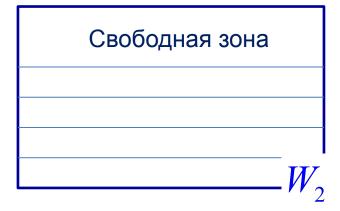


Электрическое поле способно вызвать упорядоченное движение "дырок" по полю – в теле возникает электрический ток.

Щелочно-земельные элементы (Be, Mg, Ca ...)

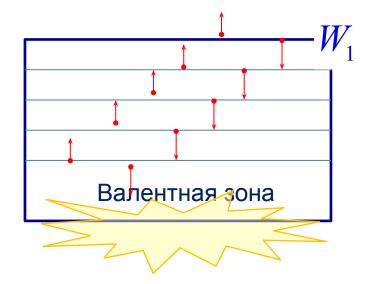
Различают электронную и дырочную проводимость.

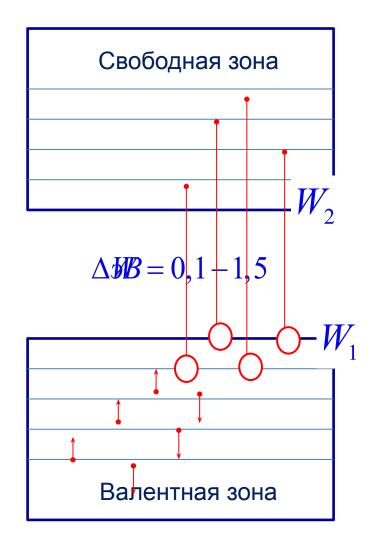
#### Полупроводники



Запрещенная зона узкая

$$\Delta MB = 0, 1 - 1, 5$$





При нагреве валентные электроны проникают в зону проводимости. Появляются дырки.

Имеем электронную и дырочную проводимость при равной концентрации электронов и дырок.

Под действием внешнего поля возникает ток!

С ростом температуры концентрация электронов и дырок увеличивается.

Удельная проводимость тела увеличивается.

У проводников проводимость с ростом температуры падает!

#### Диэлектрики

Внешнее электрическое поле не может изменить энергию электронов и не оказывает на их движение никакого влияния.

Свободная зона

Запрещенная зона широкая

$$\Delta W = 5 - 10 \text{ } \text{9B}$$

Заполненная электронами зона

Пример диэлектрика *NaCl* 

 $Na^+$ 

Запрещенная зона широкая

$$\Delta W = 6 \text{ BB}$$

 $Cl^-$ 

#### Зонная классификация твердых тел (итог)

