

Раздел 6
Основы квантовой статистики и физики
твёрдого тела

Тема 33
Основы зонной теории твёрдого тела

Лекция 1:
Основные понятия теории твёрдого 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 ТТ

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

Классическая теория не объясняет:

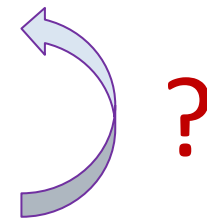
- ✓ Как образуется электронный газ?
- ✓ Почему в одних кристаллах (металлах) он есть, а в других (диэлектриках) его нет?
- ✓ Зависимость $G(T)$ проводимости металлов от температуры:

Классическая теория:

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

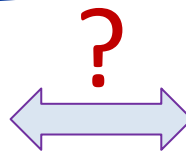
Опыт:

$$G \sim 1/T$$



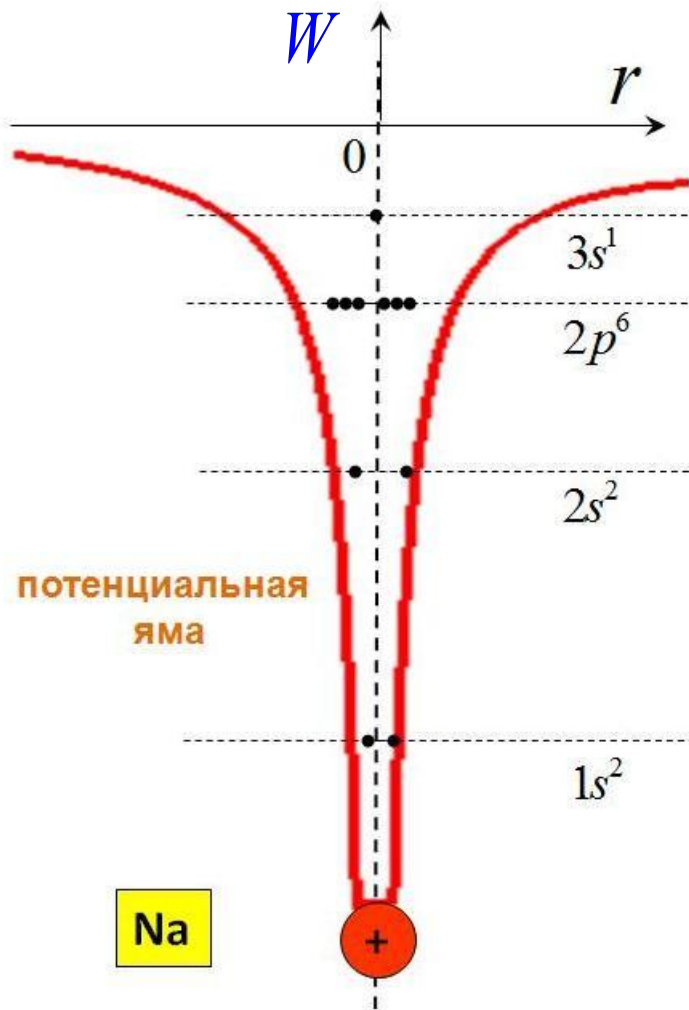
- ✓ Различную зависимость $G(T)$ у металлов и полупроводников

$$T \uparrow \Rightarrow G \downarrow$$



$$T \uparrow \Rightarrow G \uparrow$$





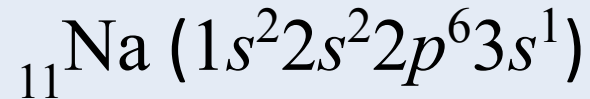
«Потенциальная яма» - это ограниченная область пространства, в которой энергия частицы меньше, чем вне ее.

«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.

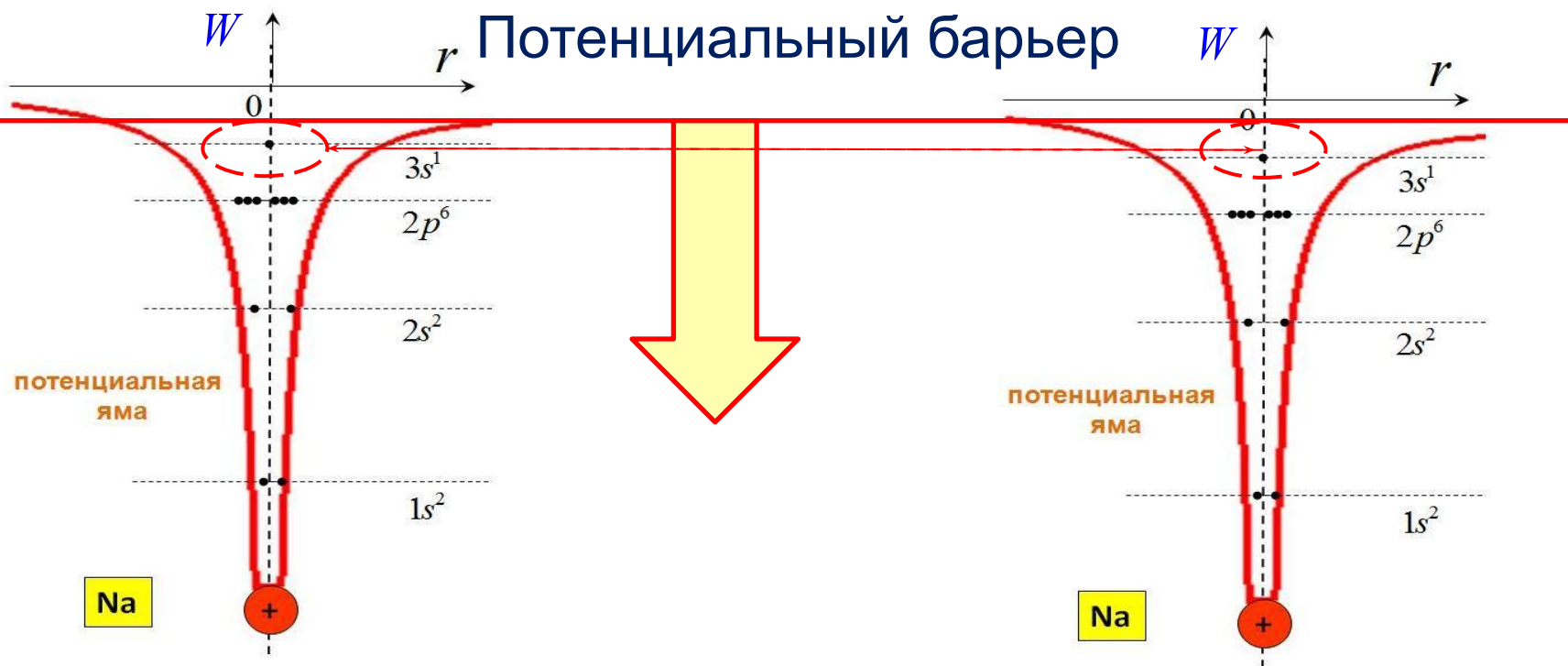
Рассмотрим два атома натрия



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

Переходу электронов между атомами препятствует потенциальный барьер шириной r .

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

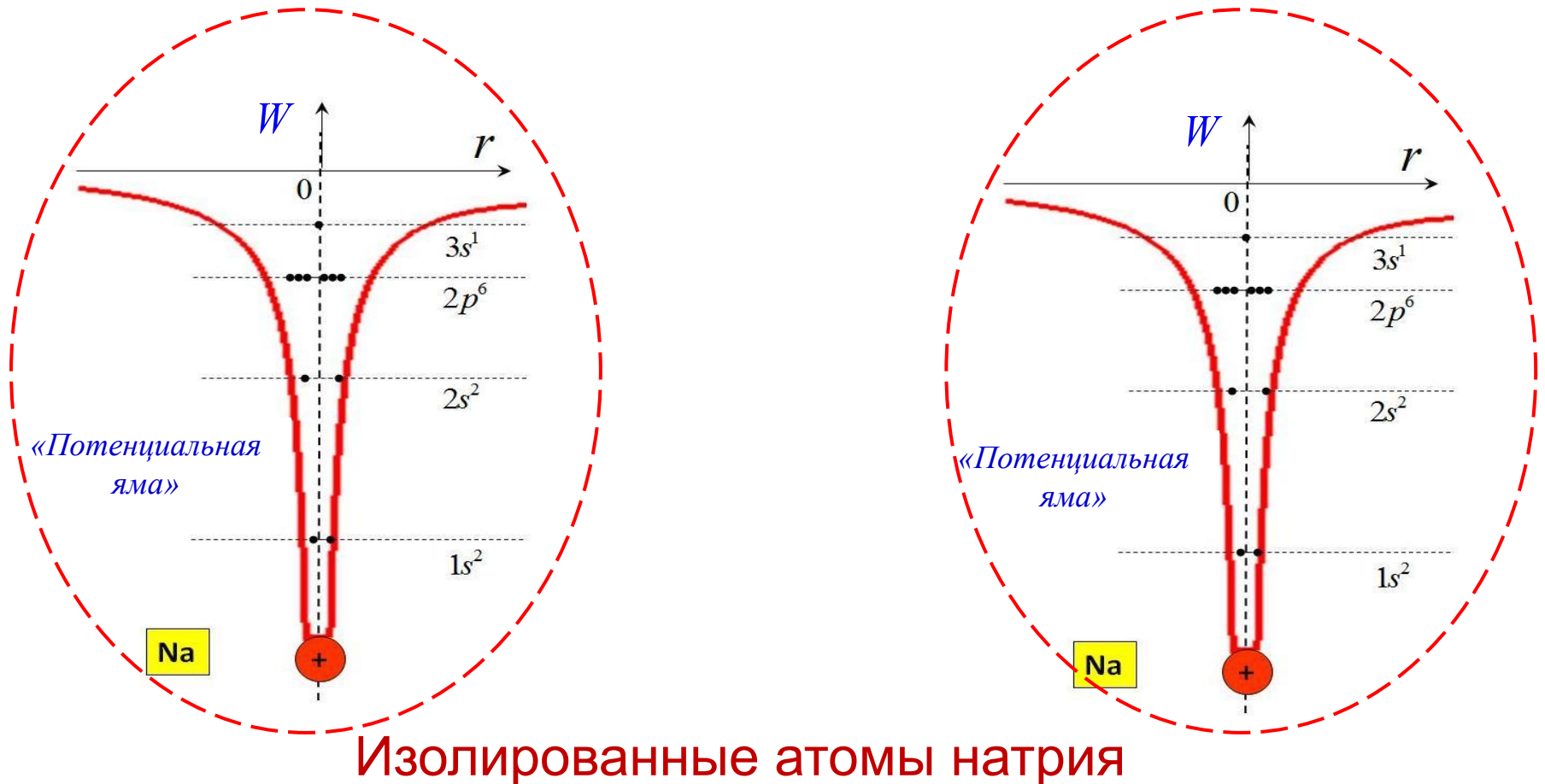


Необходимо создать условия для понижения «потенциального барьера»

Как понизить барьер ?

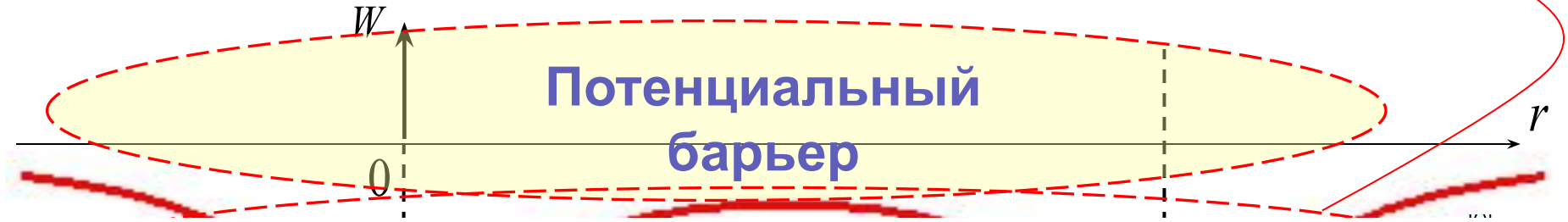
Атомы Na расположены на большом расстоянии друг от друга ($r \gg d$).

Энергетическое состояние электронов аналогично состоянию в изолированном атоме.



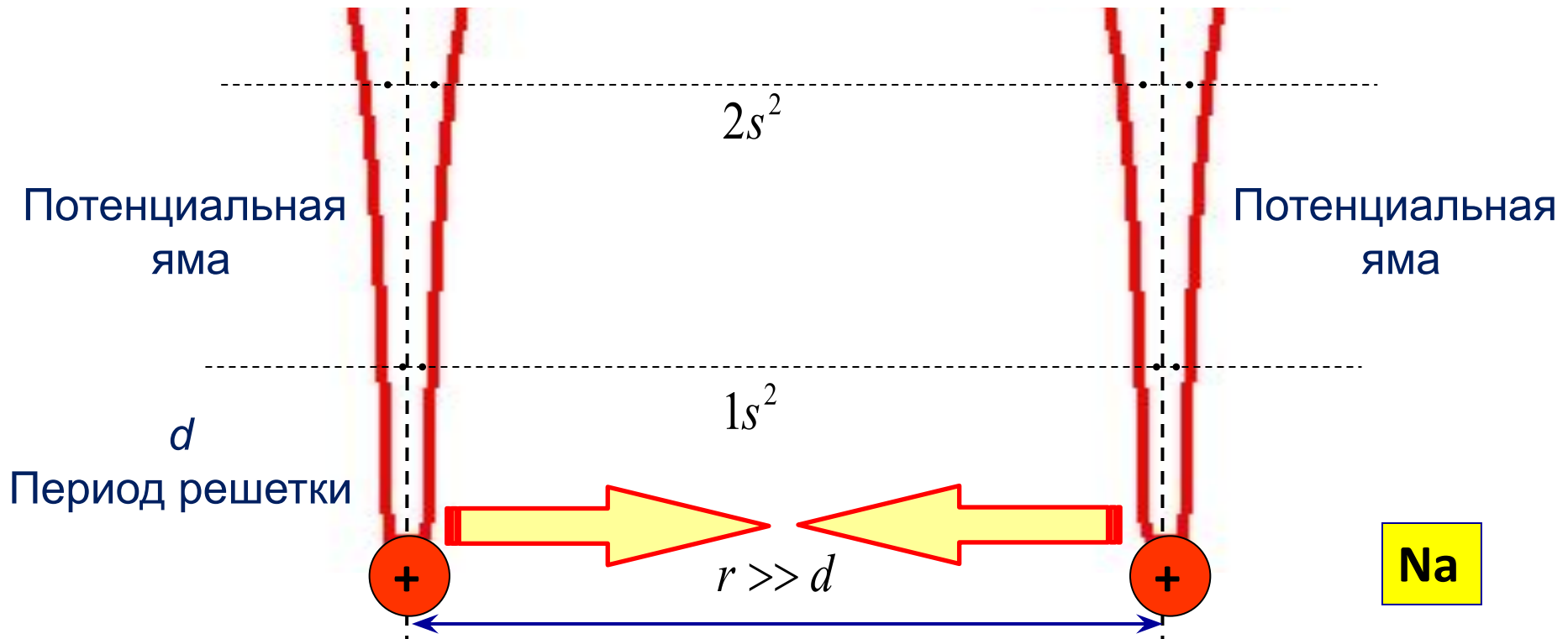
Изолированные атомы натрия

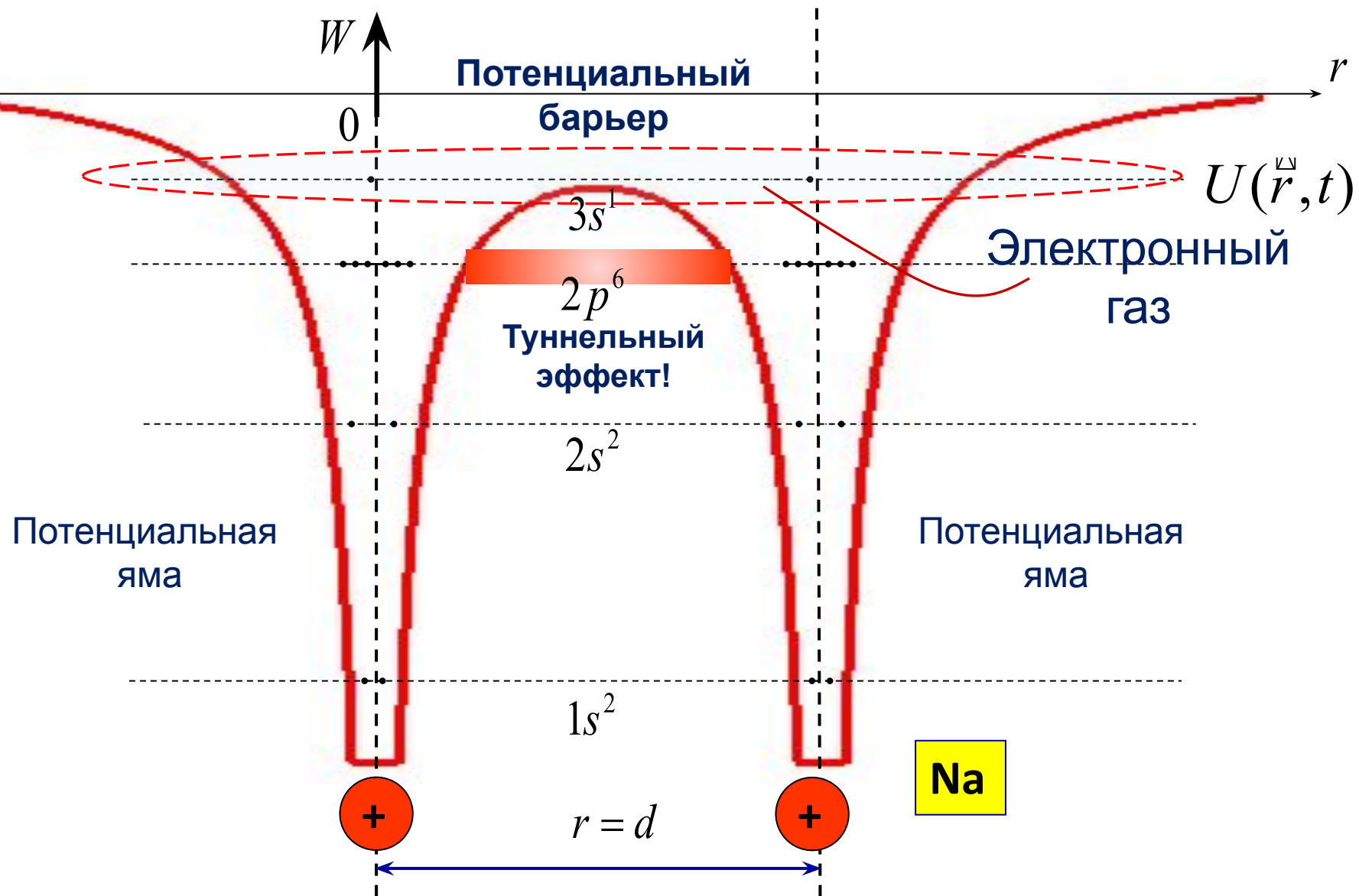
Энергетический уровень $3s$
заполнен не полностью



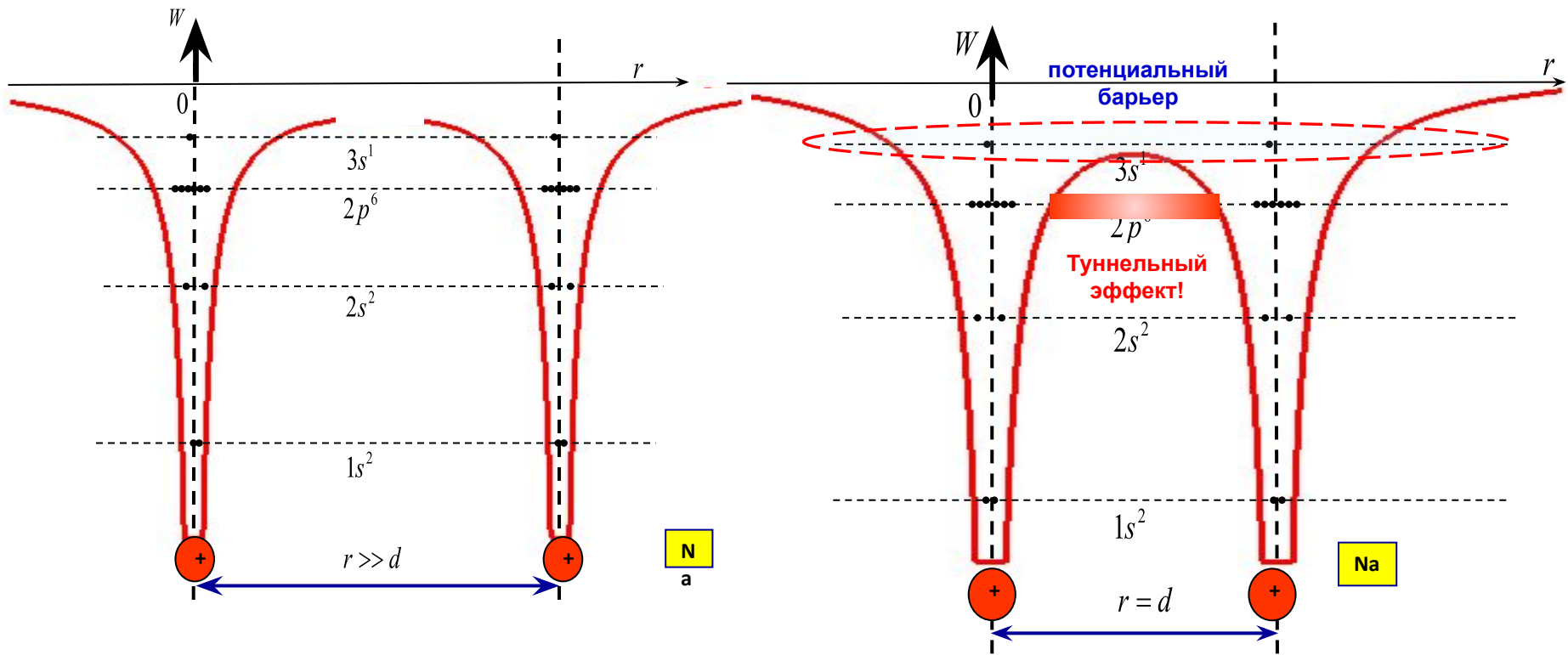
Сжимаем решетку.

По мере сближения атомов взаимодействие между ними
растет.





Результат сближения атомов - образование
 кристаллической решетки



1. Понижается высота потенциального барьера (валентные электроны беспрепятственно могут переходить от одного атома к другому).

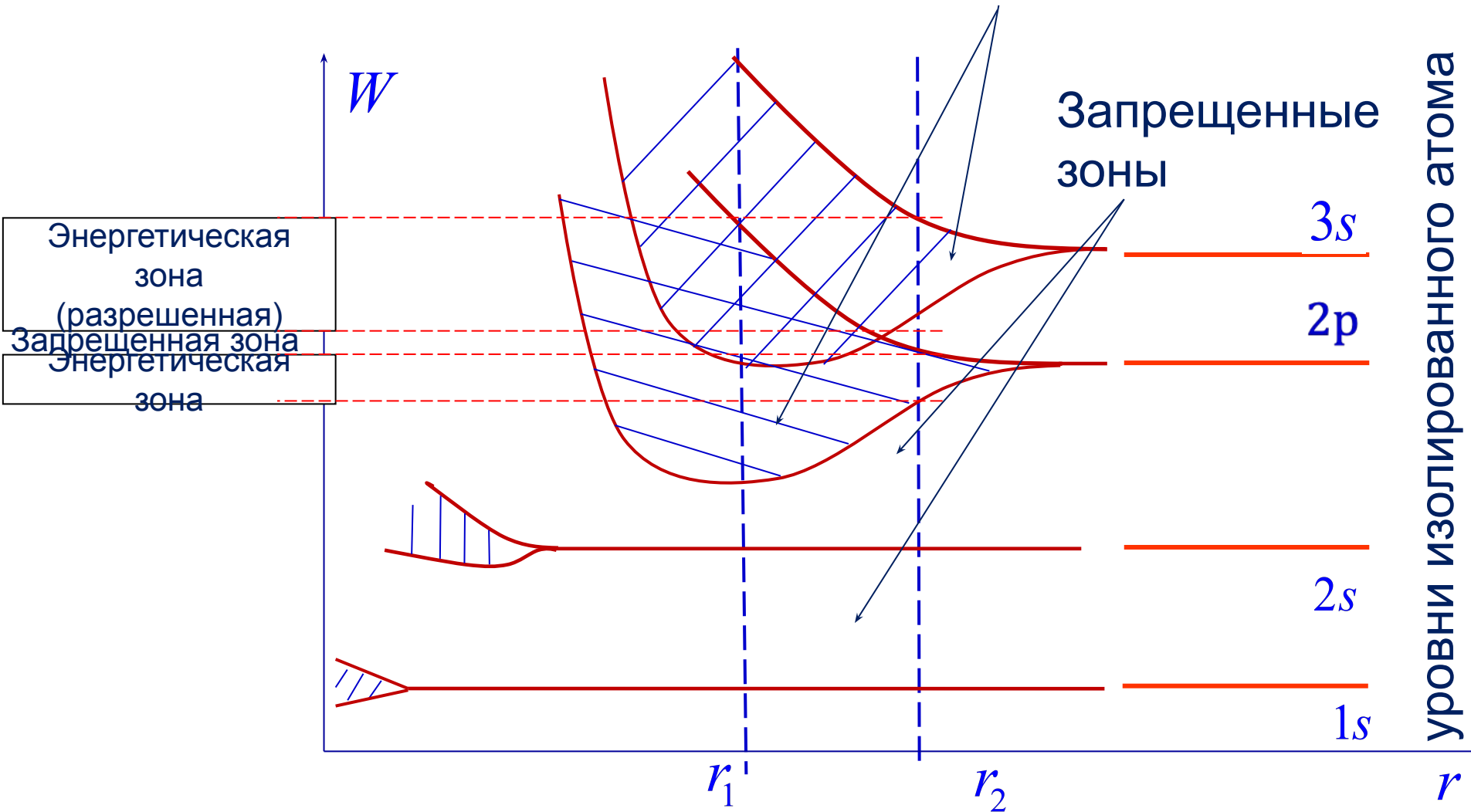
2. Уменьшается толщина потенциального барьера (электроны между атомами обмениваются путем «туннельного эффекта»).

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

Разрешенные 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

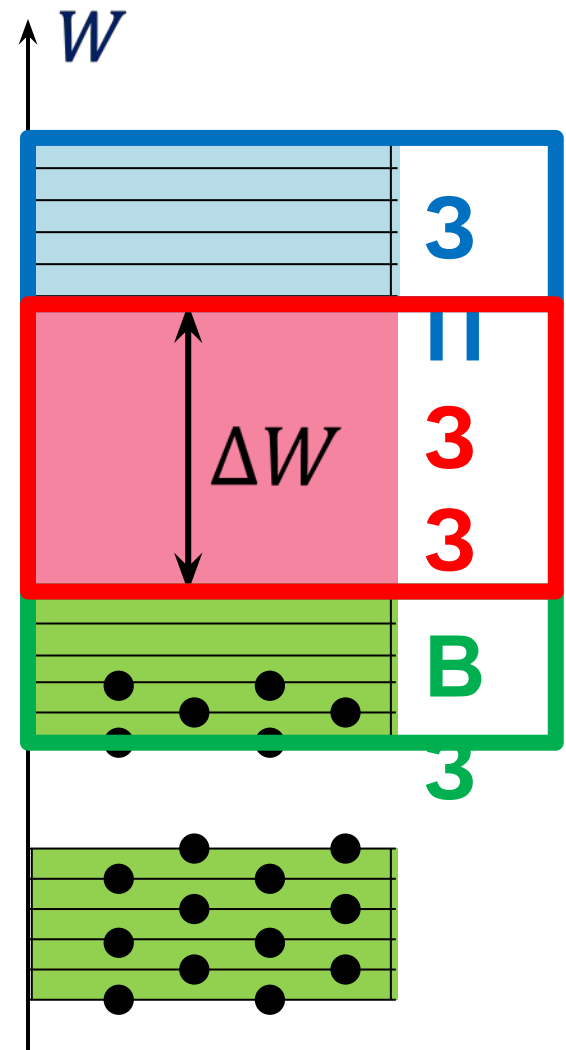
- ✓ Расстояние между энергетическими уровнями в разрешенной зоне мало (порядка 10^{-19} эВ).
- ✓ При переходе между уровнями в зоне энергия электрона меняется практически непрерывно (квазинепрерывно).
- ✓ На каждом уровне могут находиться только два электрона с разными магнитными спиновыми квантовыми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

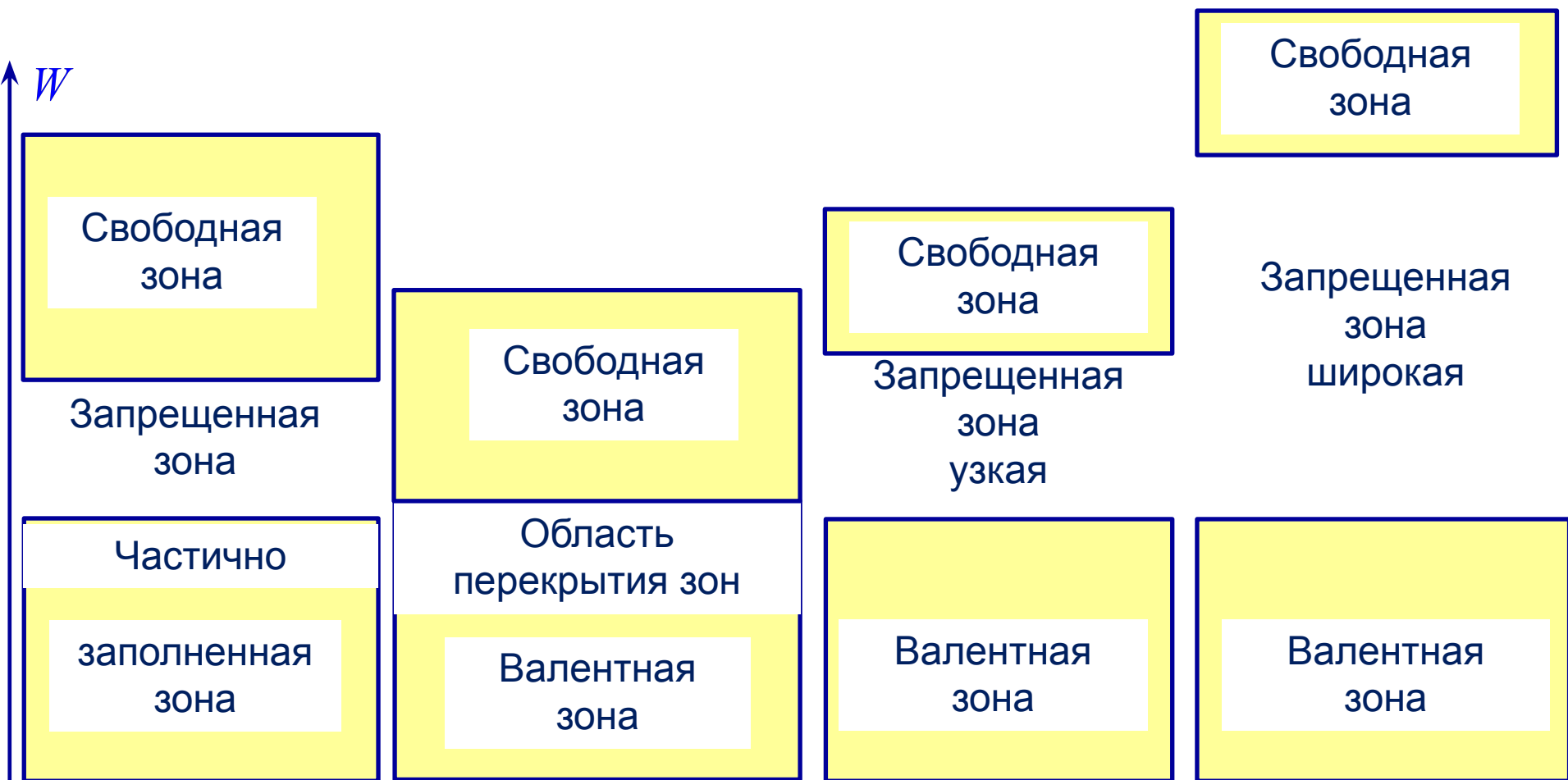


!!! Свойства твердых тел в основном определяются характером валентной и свободной зон.

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



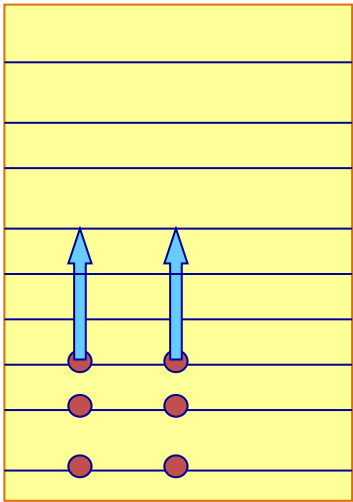
Проводники

Полупроводник

Диэлектрик

Проводники

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



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

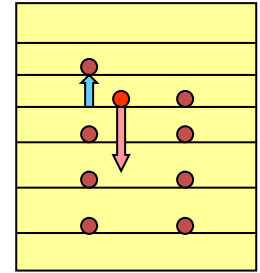
Слабое электрическое поле способно вызвать упорядоченное движение электронов вверх.

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.

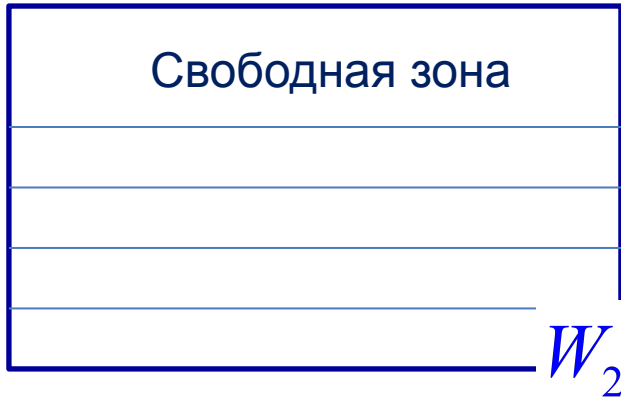


Электрическое поле способно вызвать упорядоченное движение “дырок” по полю – в теле возникает электрический ток.

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

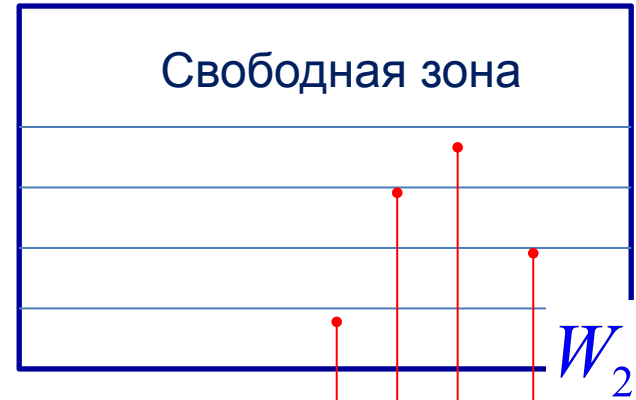
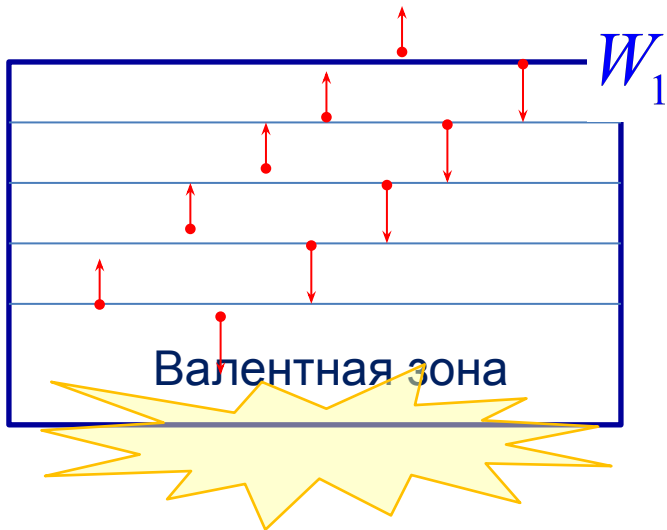
Различают электронную и дырочную проводимость.

Полупроводники

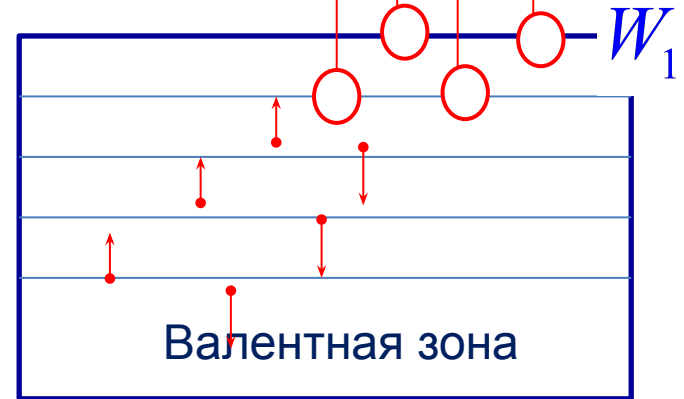


Запрещенная зона узкая

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



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



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

$$\Delta W = 5 - 10 \text{ эВ}$$

Заполненная
электронами зона

Пример диэлектрика

NaCl

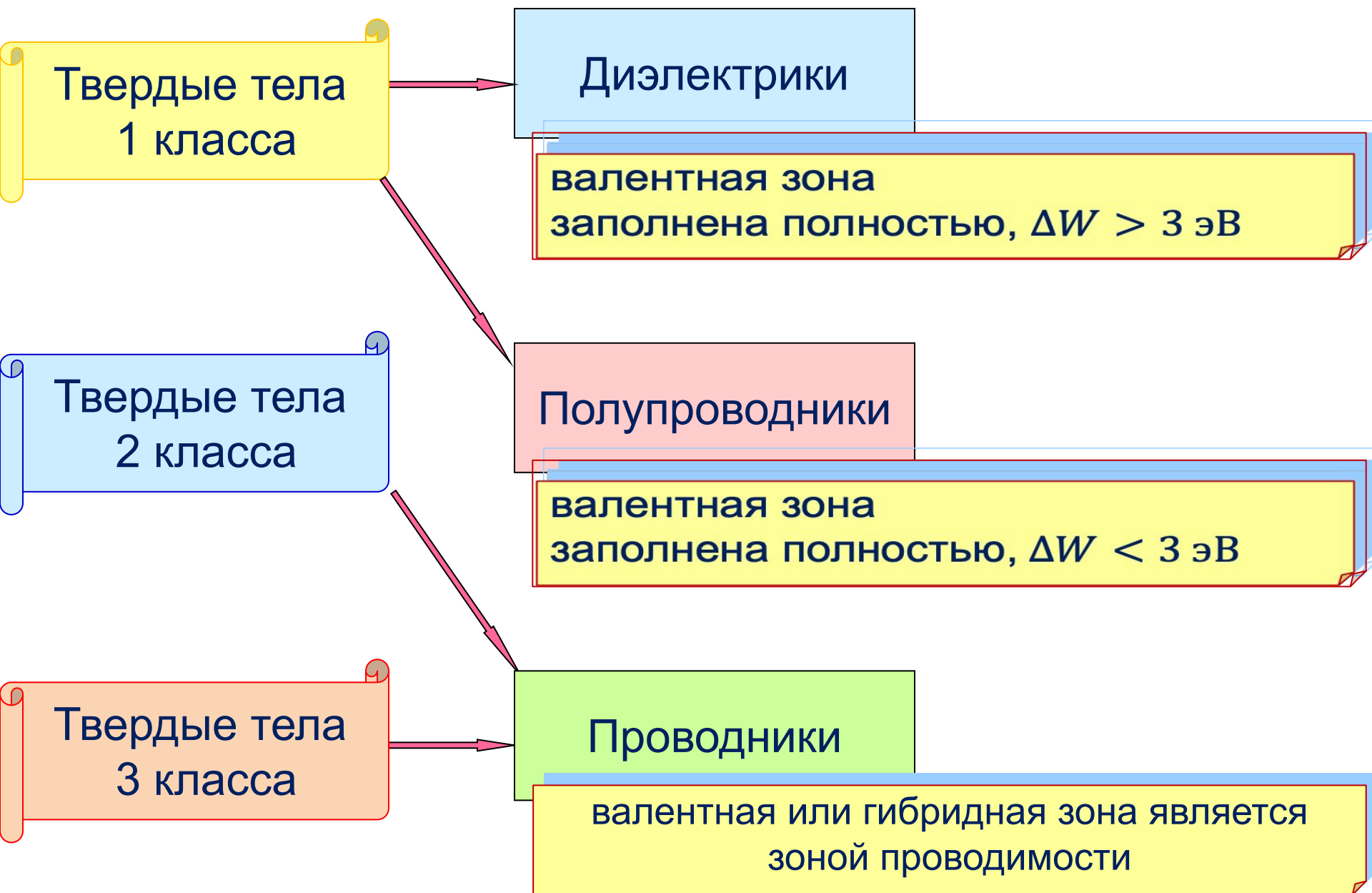
Na⁺

Запрещенная зона
широкая

$$\Delta W = 6 \text{ эВ}$$

Cl⁻

Зонная классификация твердых тел (итог)



Твердые тела
1 класса

Диэлектрики

валентная зона
заполнена полностью, $\Delta W > 3$ эВ

Твердые тела
2 класса

Полупроводники

валентная зона
заполнена полностью, $\Delta W < 3$ эВ

Твердые тела
3 класса

Проводники

валентная или гибридная зона является
зоной проводимости