

МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИМ.М.АКМУЛЛЫ»

**Классификация кристаллов на металлы,  
полупроводники и диэлектрики с точки  
зрения зонной теории**

Багаутдинова О.З.  
Научный руководитель:  
д.ф.-м.н., профессор  
Екомасов Е.Г.

Уфа-2014

# ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ.

## ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

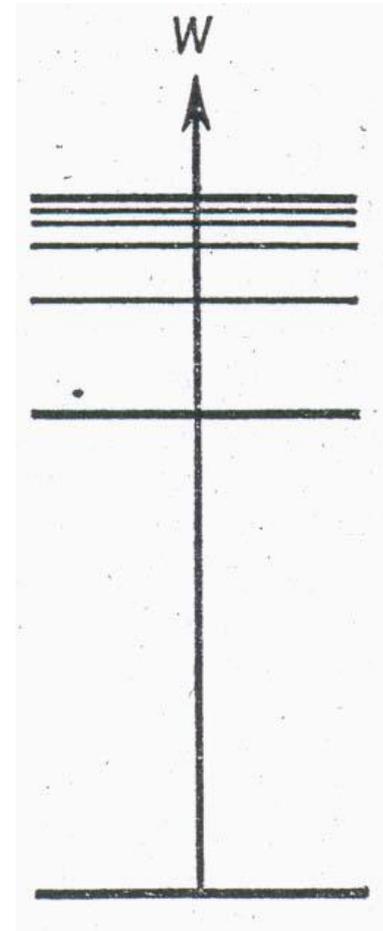
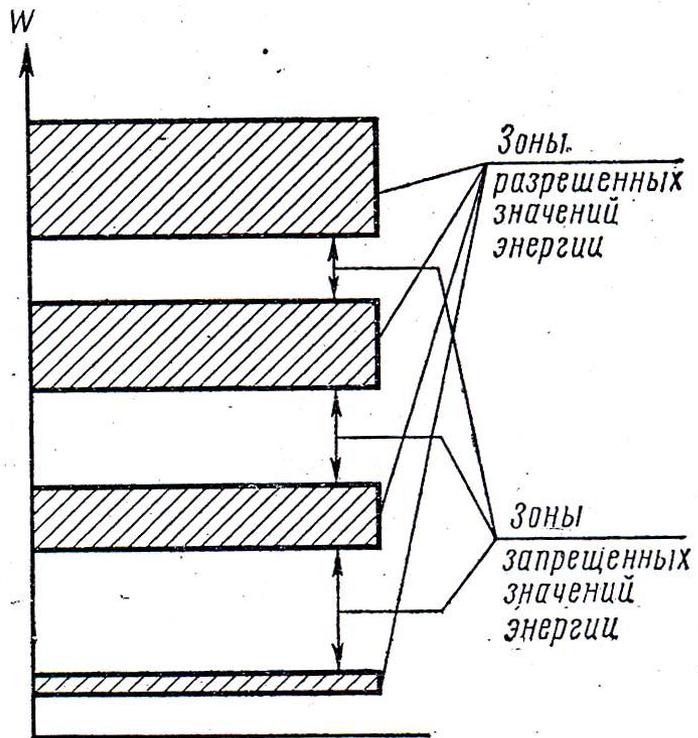
**Твердое тело** – многоядерная и многоэлектронная система, в которой действуют электростатические (кулоновские силы). Магнитное взаимодействие значительно слабее и вносит лишь небольшие поправки.

### **Главные приближения:**

- Твердое тело представляет собой идеально периодический кристалл
- Равновесные положения узлов кристаллической решетки фиксированы, т.е. ядра атомов считаются неподвижными (адиабатическое приближение). Малые колебания атомов вокруг равновесных положений, которые могут быть описаны как фононы, вводятся впоследствии как возмущение электронного энергетического спектра.
- Многоэлектронная задача сводится к одноэлектронной: воздействие на данный электрон всех остальных описывается некоторым усредненным периодическим полем.



# ЗОННАЯ СХЕМА



# ОСОБЕННОСТИ ЗОННОЙ СХЕМЫ

1. Зоны энергетических уровней образуются как уровнями, занятыми электронами, так и свободными уровнями.
2. 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.
3. 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.
4. 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.
5. Особенно сильно расщепляются вышележащие энергетические уровни, и особенно, уровни с внешним валентным электроном. Эта зона называется валентной. Зона, лежащая над валентной называется свободной.



# Методы расчета зонной структуры

$$H_{at}\psi_n = E_n\psi_n \quad (1)$$

$$H\psi(r) = (H_{at} + \Delta U(r))\psi(r) = E(k)\psi(r) \quad (2)$$

$$\psi_{nk}(r) = \sum R e^{ikr} \psi_n(r - R) \quad (3)$$

$$[\psi(r + R) = \exp(ikr) \psi(r)]:$$

$$\begin{aligned} \psi_{nk}(r + R) &= \sum R'' e^{ikr} \psi_n(r + R - R'') \\ &= e^{ikr} \sum R'' e^{ikr(R - R'')} \psi_n(r - (R - R'')) = e^{ikr} \sum R'' e^{ikR''} \psi_n(r - R'') = \\ &= e^{ikR} \psi_{nk}(r) \end{aligned} \quad (4)$$

# Метод Вигнера-Зейца

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 + U(r)\psi_k(r) = E(k)\psi_k(r) \quad (1.0)$$

$$\psi_{1m}(r) = Y_{1m}(\Theta, \varphi)\chi_1(r) \quad (1.1)$$

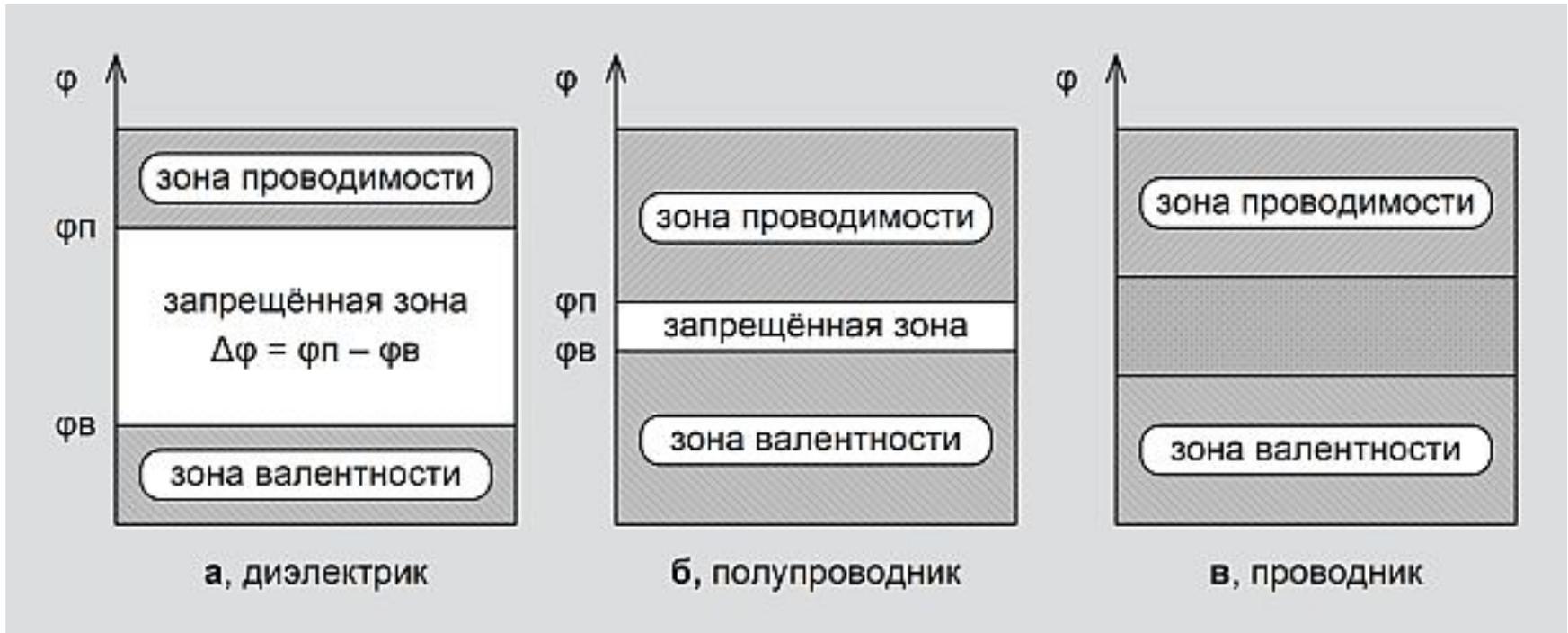
$$\chi_1''(r) + \left(\frac{2}{r}\right)\chi_1'(r) + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\left\{E - V(r) - \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[\frac{2}{r^2}\right]\right\}\chi_1'(r) = 0 \quad (1.2)$$

$$\psi(r, E) = \sum_{1,m} A_{1,m} Y_{1,m}(\vartheta) \chi_{1,E}(r) \quad (1.3)$$

$$\psi(r) = \exp(-ikr)\psi(r + R) \quad (1.4a)$$

$$n(r)\nabla\psi(r) = -\exp(-ikr)n(r + R)\nabla\psi(r + R) \quad (1.4b)$$

# ЗОННАЯ ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА



Упрощенная зонная диаграмма для проводников, полупроводников и диэлектриков.



# 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.

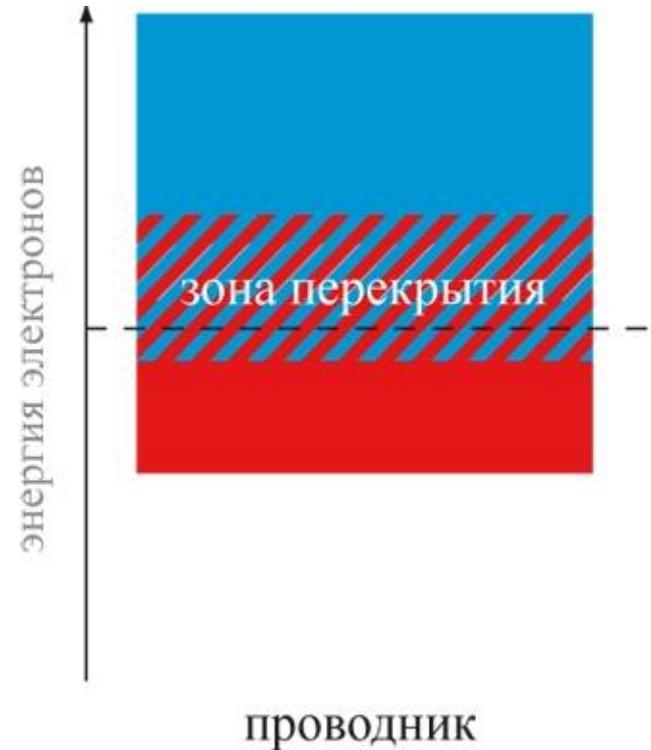
Необходимое условие проводимости — наличие свободных электронов в валентной зоне.

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



# МЕТАЛЛЫ

Металлом оказывается и кристалл, у которого валентная зона заполнена полностью, а ширина запрещенной зоны равна нулю. Зона проводимости примыкает к валентной зоне или даже частично перекрывает его. Энергия тепловых движений достаточно для перевода электронов из заполненных состояний в свободные.



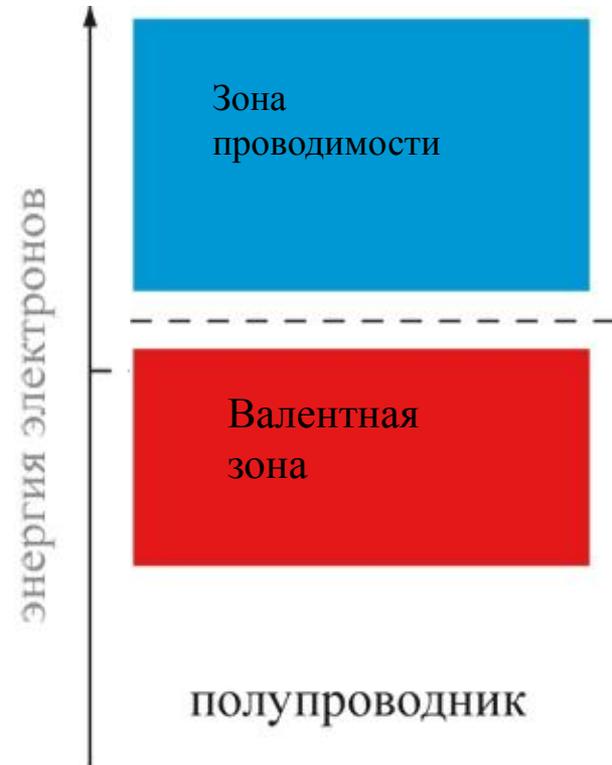
# ПОЛУПРОВОДНИКИ

При  $\Delta W < 3$  эВ кристаллические вещества проявляют полупроводниковые свойства. При возбуждении электроны валентной зоны переходят в зону проводимости.

В результате в зоне проводимости (ЗП) появляются подвижные электроны, а в валентной зоне (ВЗ) – вакансии или положительно заряженные *дырки*.

Наличие подвижных электронов и дырок обеспечивает *собственную* **проводимость** полупроводников. При наложении электрического поля

появляется движение электронов в одном, а дырок – в противоположном направлении. Собственную проводимость имеют бездефектные химически чистые (беспримесные) кремний и германий



# ДИЭЛЕКТРИКИ

Диэлектрики – вещества, энергетические зоны у которых не перекрываются и расстояние между ними составляет более 3 эВ. Таким образом, для того, чтобы перевести электрон из валентной зоны в зону проводимости требуется значительная энергия, поэтому диэлектрики ток практически не проводят. Четырехвалентный углерод (алмаз) имеет полностью заполненную валентную зону, отделенную от зоны проводимости запрещенной зоной порядка 5 эВ; алмаз оказывается хорошим изолятором. Ионные кристаллы, являющиеся диэлектриками, также состоят из атомов с полностью заполненными валентными зонами.



# ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ ЗОННОЙ ТЕОРИИ

Зонная теория имеет границы применимости, которые исходят из трех основных предположений:

а) потенциал кристаллической решетки строго периодичен;

б) взаимодействие между свободными электронами может быть сведено к одноэлектронному самосогласованному потенциалу (а оставшаяся часть рассмотрена методом теории возмущений);

в) взаимодействие с фононами слабое (и может быть рассмотрено по теории возмущений)



# **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Зонная теория является основой современной теории твердых тел. Она позволила понять природу и объяснить важнейшие свойства металлов, полупроводников и диэлектриков. Величина запрещенной зоны (энергетическая щель между зонами валентности и проводимости) является ключевой величиной в зонной теории и определяет оптические и электрические свойства материала. Например, в полупроводниках проводимость можно увеличить, создав разрешенный энергетический уровень в запрещенной зоне путем легирования — добавления в состав исходного основного материала примесей для изменения его физических и химических свойств. В этом случае говорят, что полупроводник примесный. Именно таким образом создаются все полупроводниковые приборы: солнечные элементы, диоды, транзисторы, твердотельные лазеры и др. Переход электрона из валентной зоны в зону проводимости называют процессом генерации носителей заряда (отрицательного — электрона, и положительного — дырки), а обратный переход — процессом рекомбинации



# **ЛИТЕРАТУРА**

1. **Калистратова Л.Ф., Данилов С.В., Суриков Н.П.** Основы физики твердого тела. Конспект лекций. - Омск: Изд-во ОмГТУ, 2010.-62с.
2. **Леонтьев А.Б.** Основы спектроскопии. МГИУ, 2008.-10с.
3. **Прохоров А.М.** Физическая энциклопедия, 584с.



**СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ**

