

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЭЛЕКТРОНИКИ

Зонная Теория Твердого Тела

<http://webcenter.ru/~litnevsk>

Содержание

Введение

1. Металлы, диэлектрики, полупроводники
2. Распределение Ферми-Дирака

Введение

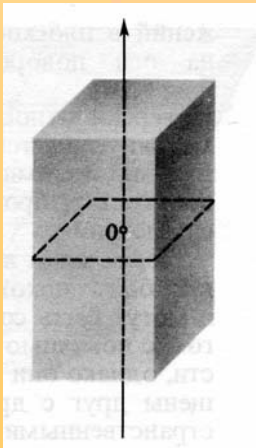
Твердые тела могут быть кристаллическими и аморфными.

Определение кристаллического твердого тела

Кристаллические твердые тела в отличие от газов и жидкостей, имеют не только ближний, но и дальний порядок в расположении атомов.

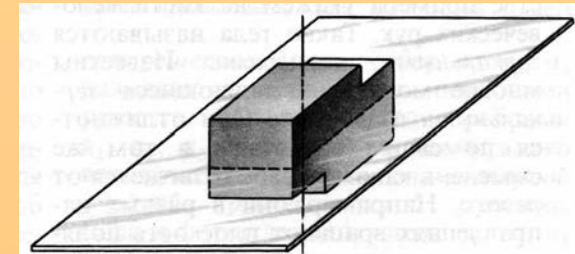
Симметрии

Симметрия твердого тела есть его способность совмещаться с самим собой в результате его движений или воображаемых операций над его точками.



*Ось симметрии,
плоскость симметрии,
центр симметрии*

Пространственными перемещениями не всегда можно совместить тело само с собой: левая перчатка не наденется на правую руку



*Зеркально-поворотная
ось симметрии*

Введение

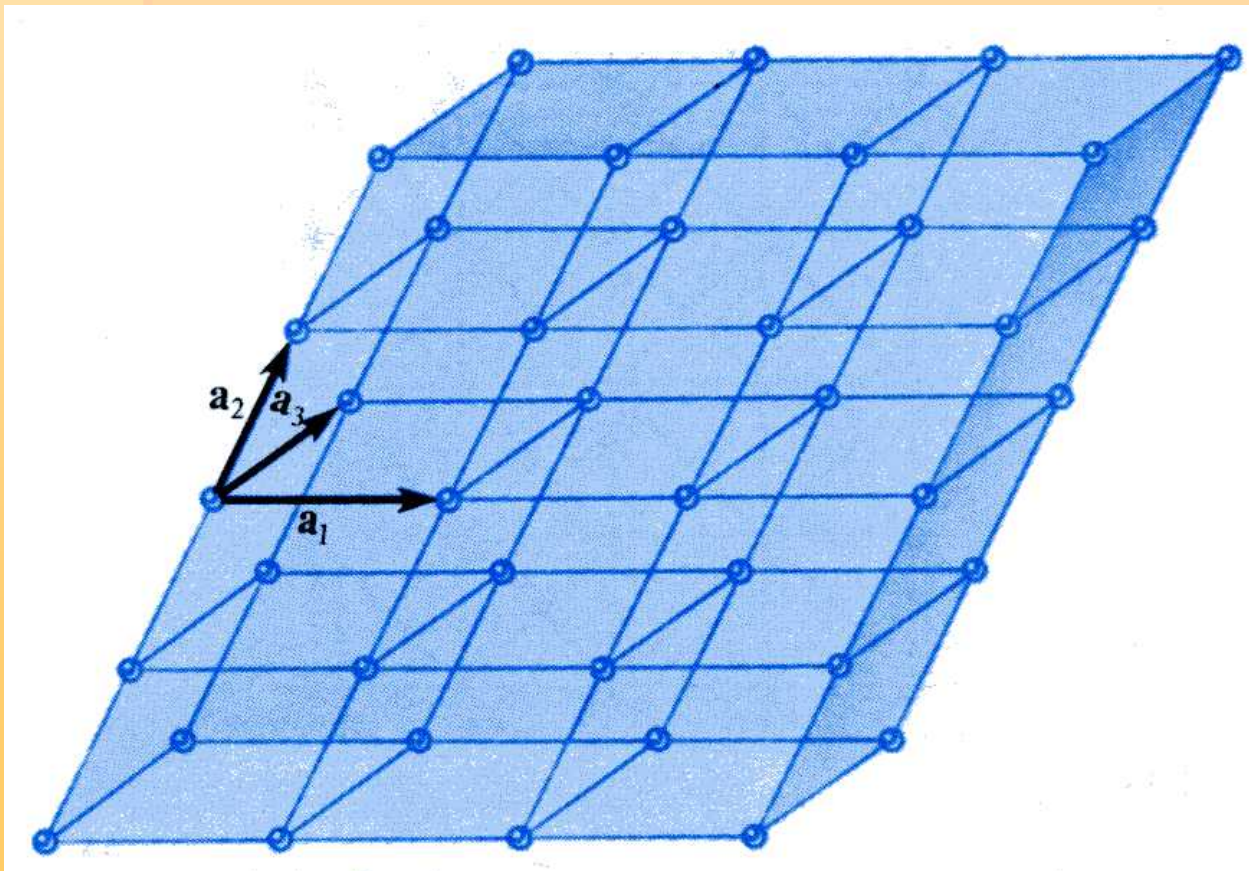
Решетка Браве

$$\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

Параллелепипед с ребрами:

$$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$$

*вместе с атомами
в его вершинах
называется
элементарной
ячейкой
кристаллической
решетки*



Введение

Симметрии примитивных решеток

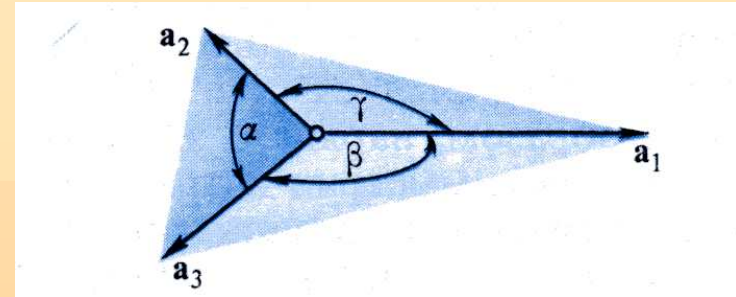
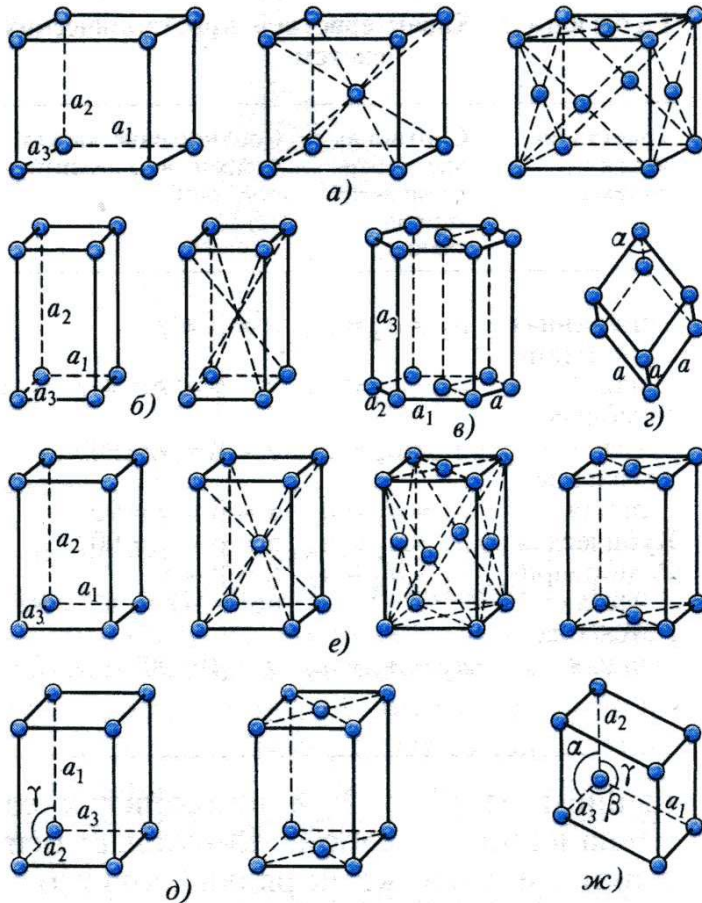


Таблица 5. Характеристики кристаллических систем

Кристаллическая система	Соотношение ребер элементарной ячейки	Соотношение между углами в элементарной ячейке
Триклинная	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Моноклинная	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
Ромбическая	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тетрагональная	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Кубическая	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ромбоэдрическая	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma$, но $< 120^\circ$ и $\neq 90^\circ$
Гексагональная	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

109

Кристаллические классы и типы решеток
 Системы: а – кубическая, б – тетрагональная,
 в – гексагональная, г – ромбоэдрическая,
 д – ромбическая, е – моноклинная, ж – триклинная

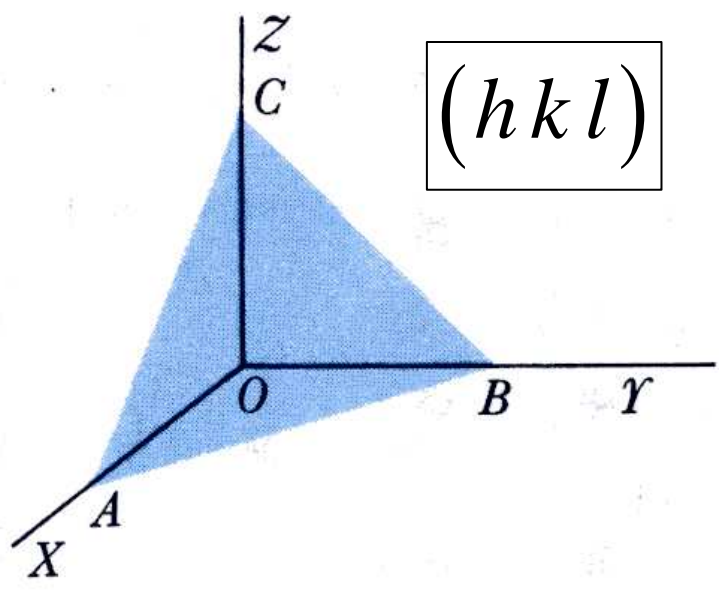
Введение

Индексы Миллера

Уравнение плоскости в
прямолинейных
(не обязательно прямоугольных)
координатах:

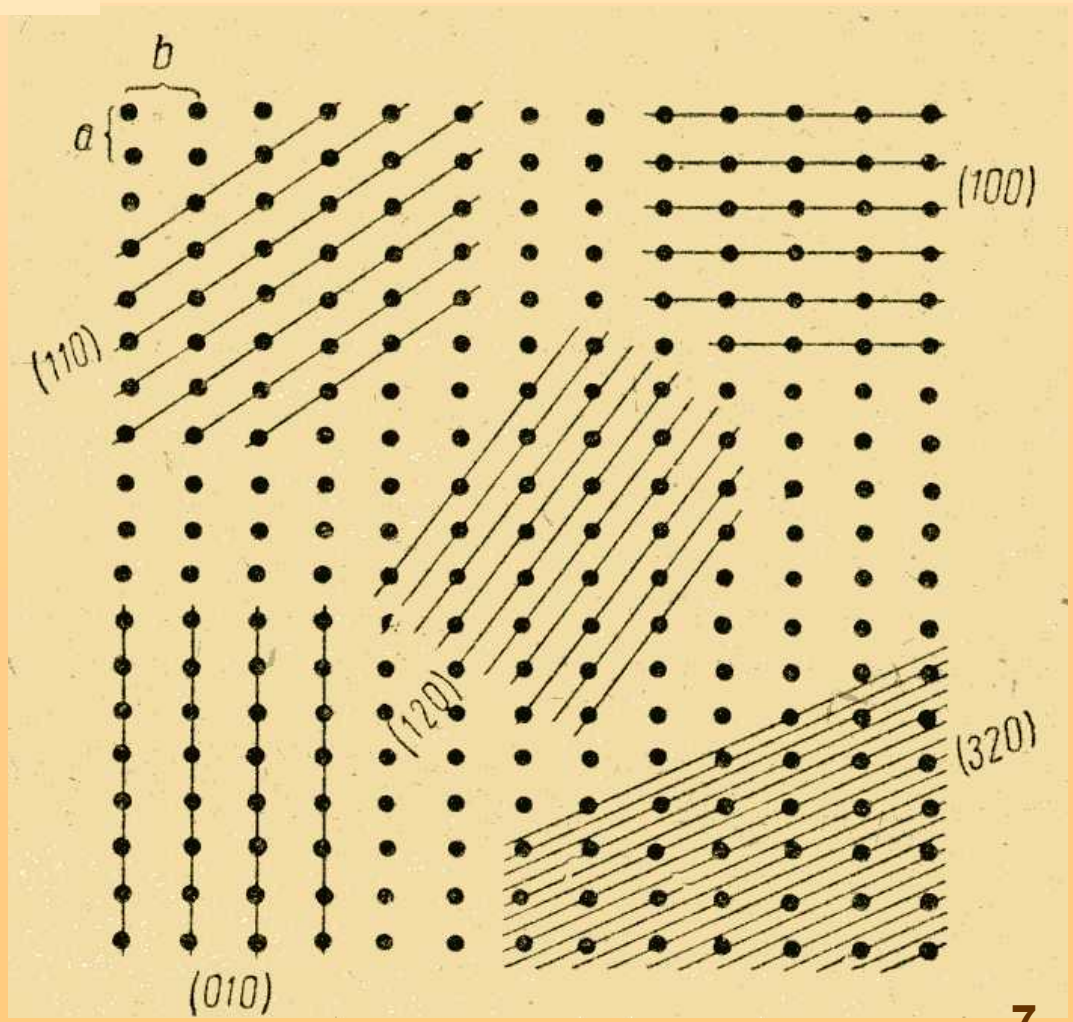
$$\frac{x}{|OA|} + \frac{y}{|OB|} + \frac{z}{|OC|} = 1$$

$$hx + ky + lz = D$$



$$[hkl]$$

- перпендикуляр
к плоскости



Введение

Дефекты в кристаллах

- 1) Дефекты по Шоттки
- 2) Дефекты по Френкелю
- 3) Дислокации
- 4) Примеси



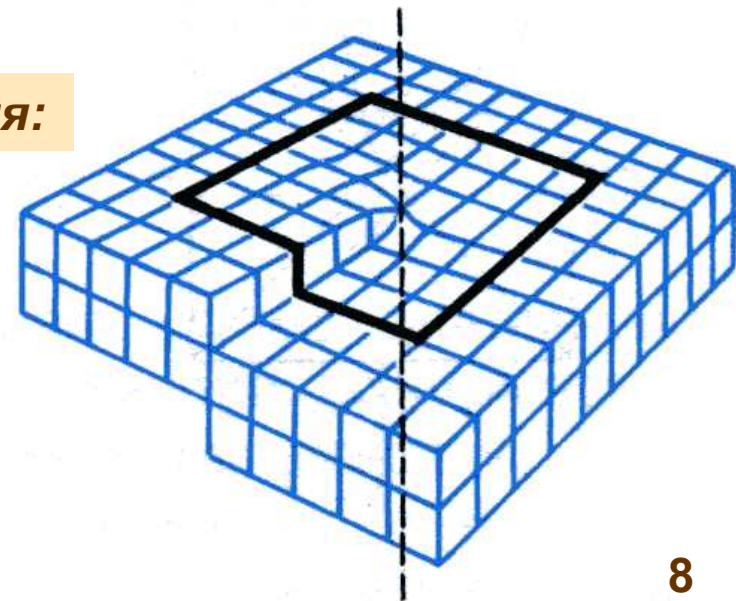
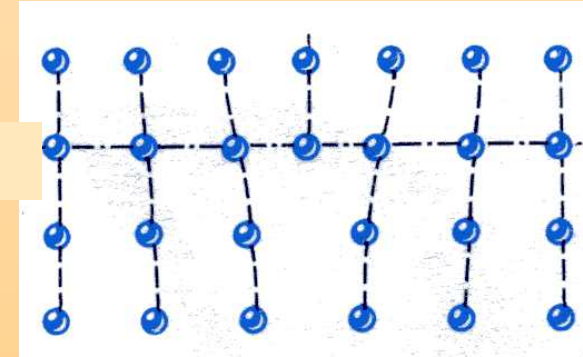
- вакансия (дефект по Шоттки)

Краевая дислокация:

- замещение

Винтовая дислокация:

- внедрение



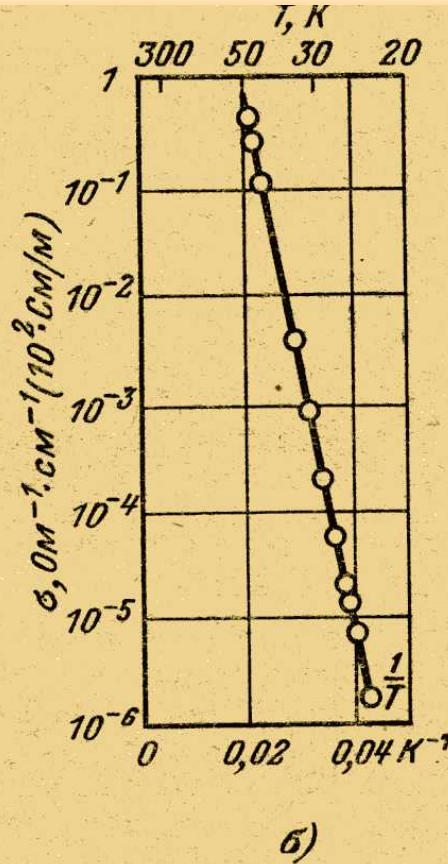
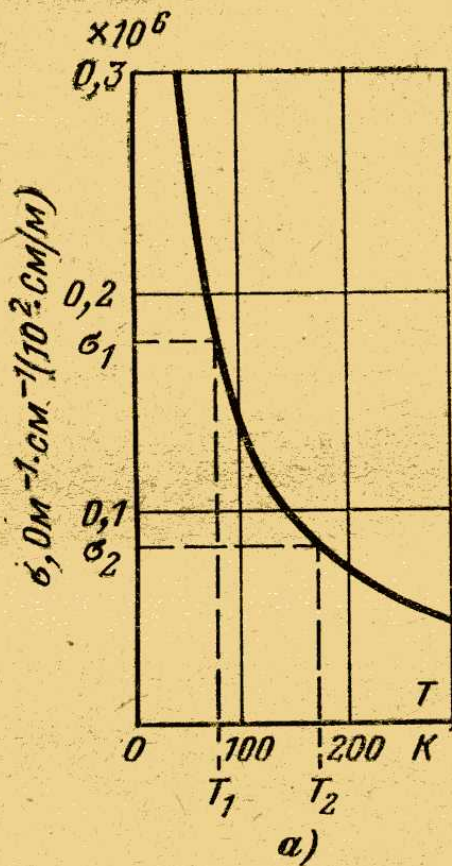
1. Металлы, диэлектрики полупроводники

- Классификация веществ по их проводимости
- Энергетические зоны кристалла

Классификация веществ по их проводимости

Металлы: $\sigma \sim 10^8 - 10^6 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{\sigma_0}{1 + \alpha t} = \frac{\sigma_0 T_0}{T}$$



Полупроводники:

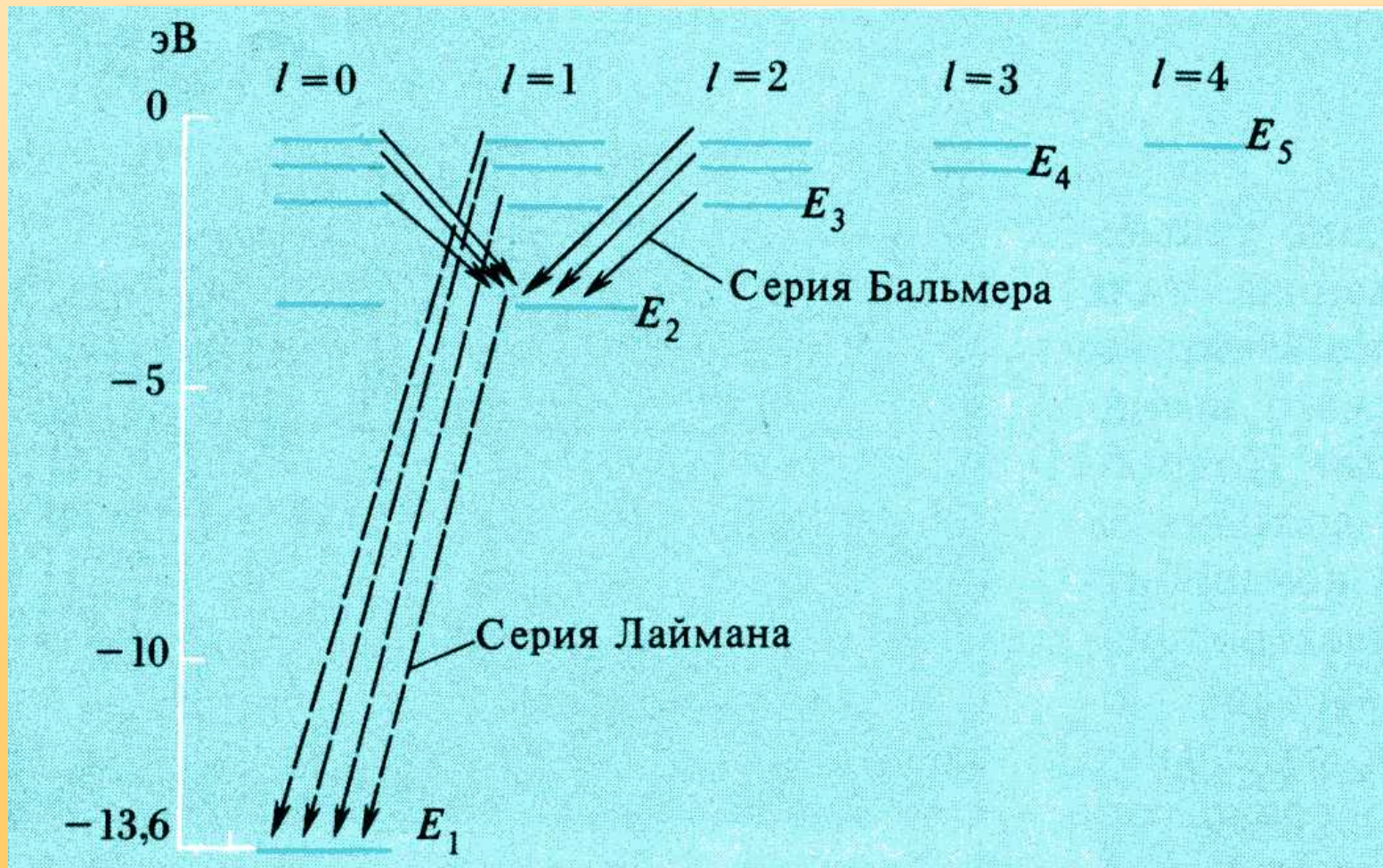
$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\beta}{T}\right)$$

Диэлектрики: $\sigma < 10^{-8} - 10^{-10} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$

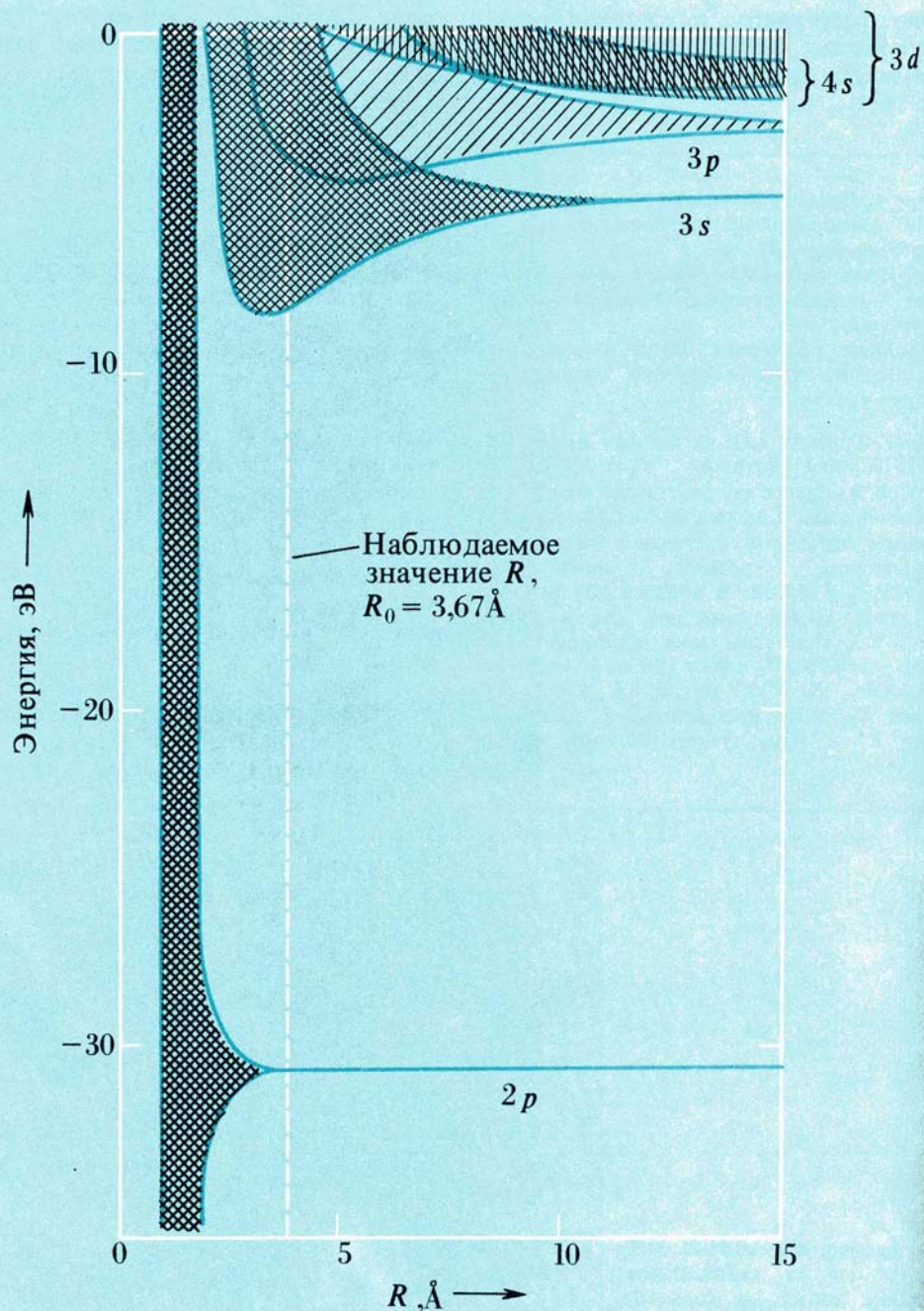
Энергетические зоны кристалла

$$W_n = W_k + W_p$$

$$W_p = k_e \frac{q_1 q_2}{r}$$

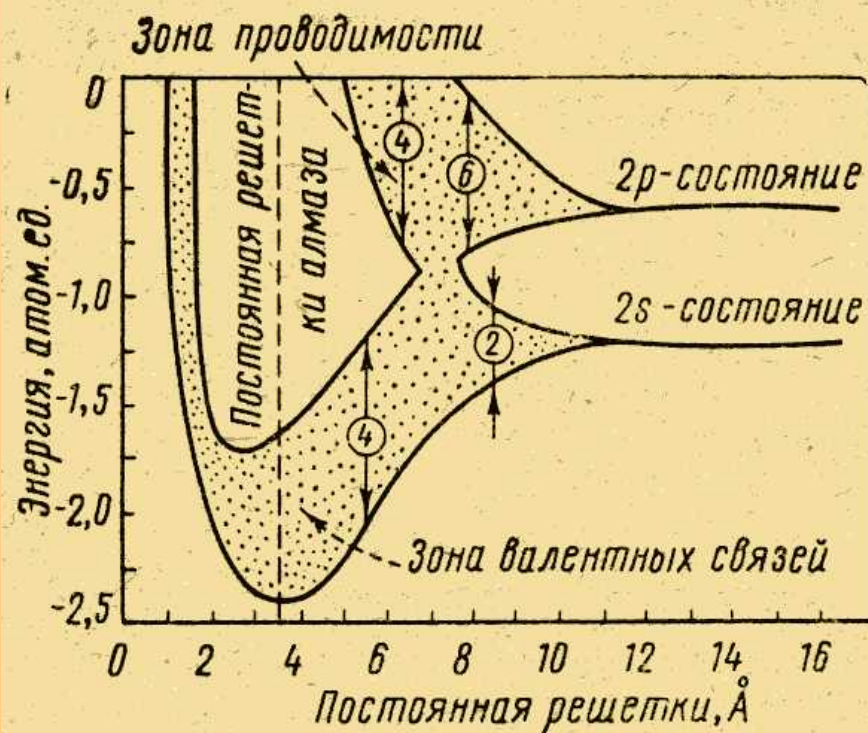


Энергетические зоны кристалла



Натрий $_{11}\text{Na}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Углерод $_6\text{C}$: $1s^2 2s^2 2p^2$



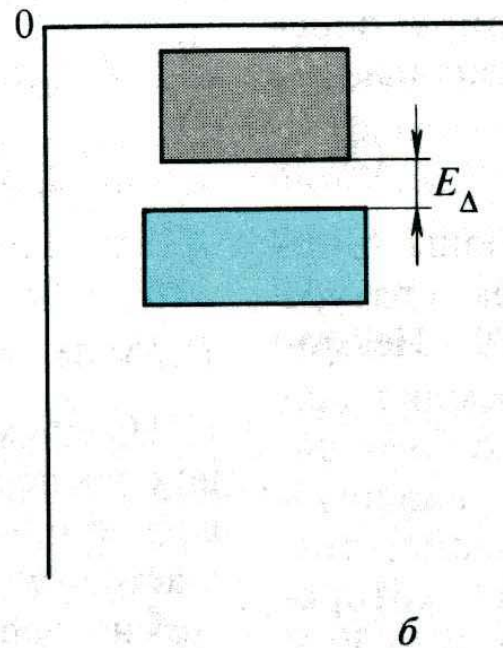
Энергетические зоны кристалла

В зависимости от отсутствия или наличия запрещенной зоны, а также ее ширины можно выделить три характерные ситуации:

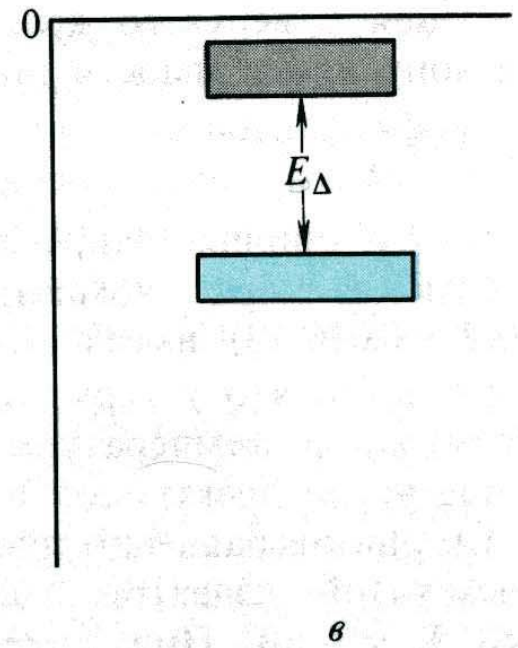
Металлы



Полупроводники



Диэлектрики



2. Распределение Ферми-Дирака

- Распределение Гиббса для переменного числа частиц
- Среднее значение величины, функция распределения которой не нормирована
- Вывод распределения Ферми-Дирака
- График распределения Ферми-Дирака
- Плотность состояний
- Энергия Ферми
- Средняя энергия электронов в металле

Распределение Гиббса для переменного числа частиц

$$f(q, p) = C \exp\left(-\frac{W(q, p)}{kT}\right)$$

- справедливо в тех случаях, если система может обмениваться с окружением только энергией.

Если система может обмениваться с окружением не только энергией, но и частицами, то распределение Гиббса нужно переписать в виде:

$$f(q, p) = C \exp\left(-\frac{W(q, p) - \mu N}{kT}\right)$$

Химический потенциал « μ » по сути – это минимальная энергия, которая вносится в систему при изменении количества частиц в этой системе на единицу.

Среднее значение величины, функция распределения которой не нормирована

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx$$

- если функция распределения нормирована

Если функция распределения не нормирована, умножим ее на нормировочный множитель, который находится из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} C \tilde{f}(x) dx = C \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(x) dx = 1$$

$$C = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(x) dx}$$

Подставляя нормировочную постоянную, находим выражение для среднего значения величины, функция распределения которой не нормирована:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x C \tilde{f}(x) dx = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x \tilde{f}(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(x) dx}$$

$$\langle x \rangle = \frac{\sum_{i=0}^N x_i p(x_i)}{\sum_{i=0}^N p(x_i)}$$

Вывод распределения Ферми-Дирака

Под термодинамической системой будем понимать электроны, находящиеся на одном уровне. Энергия такой системы:

$$W = W_i \cdot N_i$$

Вычислим среднее число частиц (фермионов) в одном энергетическом состоянии:

$$\langle N \rangle = \frac{\sum_{N_i=0}^1 N_i \exp\left(-\frac{W_i N_i - \mu N_i}{kT}\right)}{\sum_{N_i=0}^1 \exp\left(-\frac{W_i N_i - \mu N_i}{kT}\right)} = \frac{\exp\left(-\frac{W_i - \mu}{kT}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{W_i - \mu}{kT}\right)}$$

Умножим сверху и снизу на выражение:

$$\exp\left(\frac{W_i - \mu}{kT}\right)$$

Получим распределение Ферми-Дирака:

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{W - \mu}{kT}\right) + 1}$$

Оно позволяет вычислить среднее число частиц на одном энергетическом уровне, или вероятность заполнения уровня, так как N меняется от 0 до 1.

График распределения Ферми-Дирака

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{W - \mu}{kT}\right) + 1}$$

Анализ :

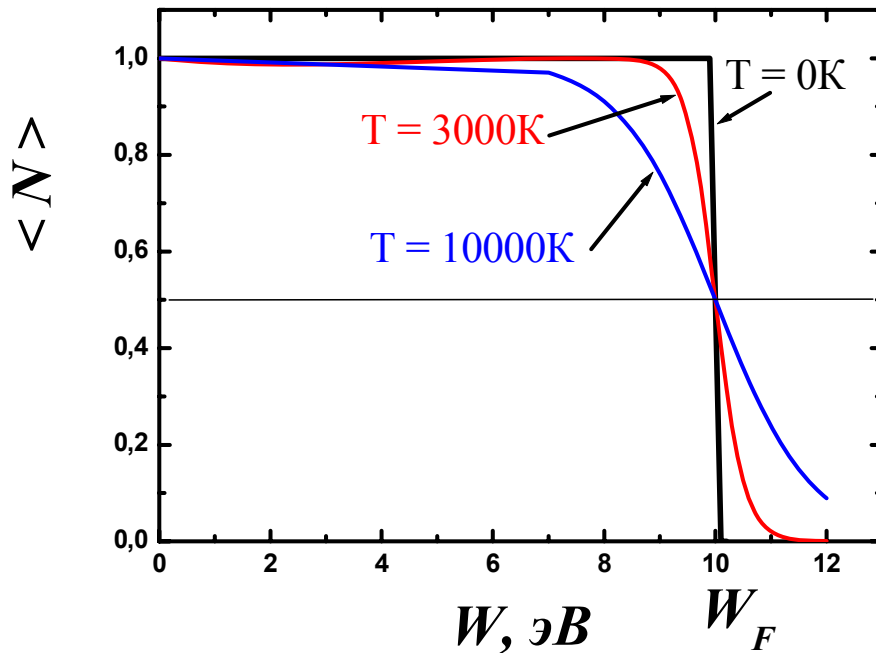
$T = 0 K :$

$$W_i < \mu, \quad e^{-\infty} = 0$$

$$\langle N \rangle = \frac{1}{0 + 1} = 1$$

$$W_i > \mu, \quad e^{\infty} = \infty$$

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\infty} = 0$$



$T > 0 K :$

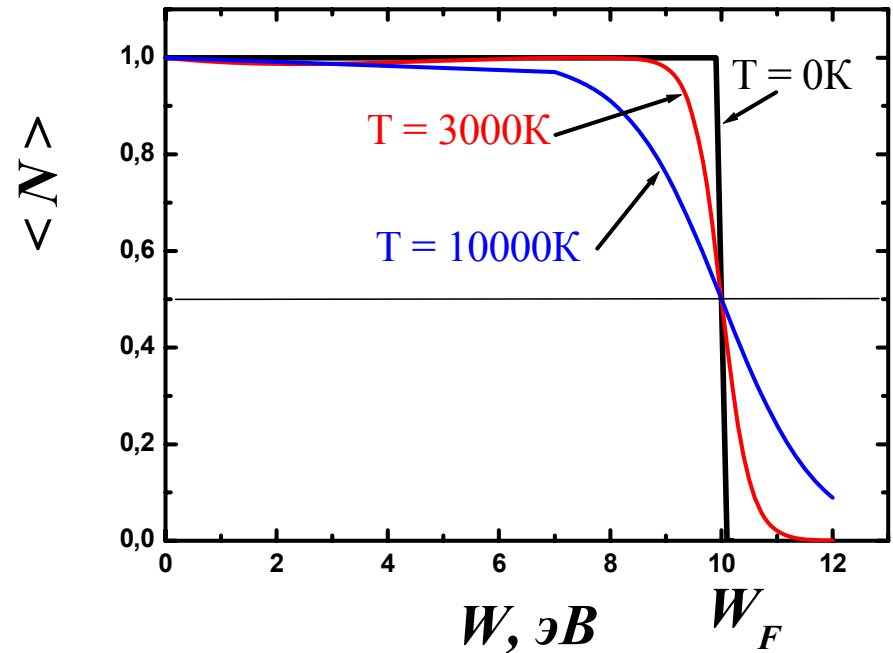
$$W_i = \mu = W_F, \quad e^0 = 1$$

$$\langle N \rangle = \frac{1}{1 + 1} = \frac{1}{2}$$

График распределения Ферми-Дирака (2)

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{W - \mu}{kT}\right) + 1}$$

«Размазка» порядка kT , при комнатной температуре размывается лишь тонкий слой электронов вблизи уровня Ферми:



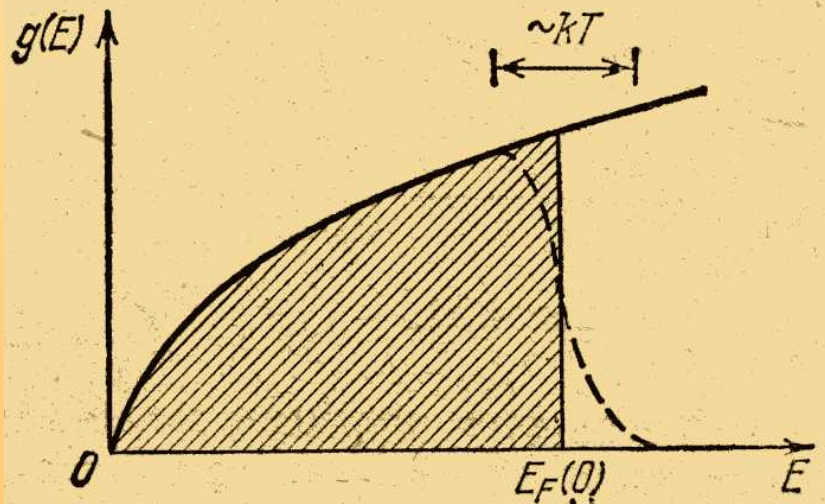
$$T = 300\text{ K}: \quad kT = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,025 (\text{эВ})$$

$$T = 3000\text{ K}: \quad kT = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 3000}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,25 (\text{эВ})$$

$$T = 10000\text{ K}: \quad kT = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 10000}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,86 (\text{эВ})$$

Плотность состояний

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{W - \mu}{kT}\right) + 1} = f(W)$$



$$g(W) = 4\pi V \frac{(2m^*)^{3/2}}{h^3} W^{1/2}$$

$$\int_0^{\infty} f(W) g(W) dW = nV$$

Энергия Ферми

При $T=0$ заполнены все уровни ниже энергии Ферми и свободны уровни выше энергии Ферми.

$$\int_0^{W_F} f(W) g(W) dW = nV = \frac{8\pi V (2m^*)^{3/2}}{3h^3} W_F^{3/2}$$

$$W_F = \frac{h^2}{8m^*} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3}$$

Средняя энергия электронов в металле

При $T=0$

$$\langle W \rangle = \frac{\int_0^{W_F} W f(W) g(W) dW}{\int_0^{W_F} f(W) g(W) dW} = \frac{3}{5} W_F$$