

Лекция 3: Элементы зонной теории твердого тела

Разрешённые и запрещённые по энергии зоны в кристаллах.

- Расщепление атомных уровней в зоны.**
- Металлы, диэлектрики и полупроводники с точки зрения зонной теории.**
- Уравнение Шредингера для кристалла - адиабатическое приближение, одноэлектронное приближение, электрон в периодическом потенциале, Блоховские волны.**
- Квазиимпульс, модель расширенных и приведённых зон Бриллюэна.**
- Электрон в твердом теле как квазичастица.**

Таблица Менделеева

периоды	группы элементов												
	а I б	а II б	а III б	а IV б	а V б	а VI б	а VII б	а VIII б	а VIII б	а VIII б			
1	H водород							He гелий	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content;"> атомный номер 92 U уран название </div>				
2	Li литий	Be бериллий	B бор	C углерод	N азот	O кислород	F фтор	Ne неон					
3	Na натрий	Mg магний	Al алюминий	Si кремний	P фосфор	S сера	Cl хлор	Ar аргон					
4	K калий	Ca кальций	Sc скандий	Ti титан	V ванадий	Cr хром	Mn марганец	Fe железо	Co кобальт	Ni никель			
	Cu медь	Zn цинк	Ga галлий	Ge германий	As мышьяк	Se селен	Br бром	Kr криптон					
5	Rb рубидий	Sr стронций	Y иттрий	Zr цирконий	Nb ниобий	Mo молибден	Tc технеций	Ru рутений	Rh родий	Pd палладий			
	Ag серебро	Cd кадмий	In индий	Sn олово	Sb сурьма	Te теллур	I йод	Xe ксенон					
6	Cs цезий	Ba барий	La* лантан	Hf гафний	Ta тантал	W вольфрам	Re рений	Os осмий	Ir иридий	Pt платина			
	Au золото	Hg ртуть	Tl таллий	Pb свинец	Bi висмут	Po полоний	At астат	Rn радон					
7	Fr франций	Ra радий	Ac* актиний	Ku курчатовий	Ns нильсборий								
* ЛАНТАНОИДЫ													
Ce церий	Pr празеодим	Nd неодим	Pm прометий	Sm самарий	Eu европий	Gd гадолиний	Tb тербий	Dy диспрозий	Ho гольмий	Er эрбий	Tm тулий	Yb иттербий	Lu лютеций
* АКТИНОИДЫ													
Th торий	Pa протактиний	U уран	Np нептуний	Pu плутоний	Am америчий	Cm кюриум	Bk берклиум	Cf калifornий	Es эйнштейний	Fm фермий	Md менделевий	No нобелий	Lr лоуренсий
<div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="width: 20px; height: 10px; background-color: red; margin-right: 5px;"></div> - s - элементы <div style="width: 20px; height: 10px; background-color: orange; margin-right: 5px; margin-left: 20px;"></div> - p - элементы <div style="width: 20px; height: 10px; background-color: blue; margin-right: 5px; margin-left: 20px;"></div> - d - элементы <div style="width: 20px; height: 10px; background-color: black; margin-left: 20px;"></div> - f - элементы </div>													

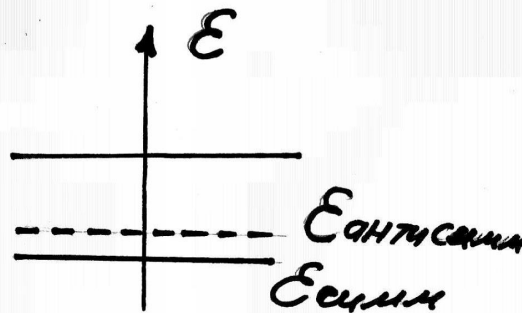
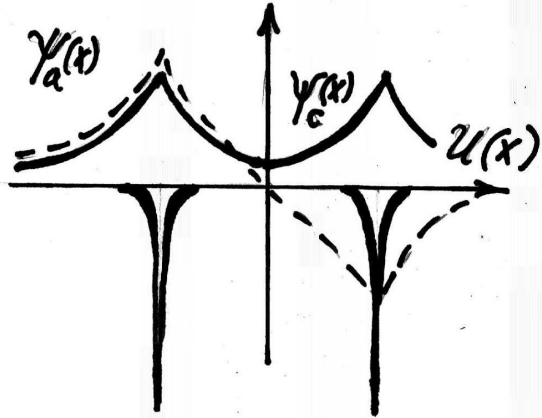
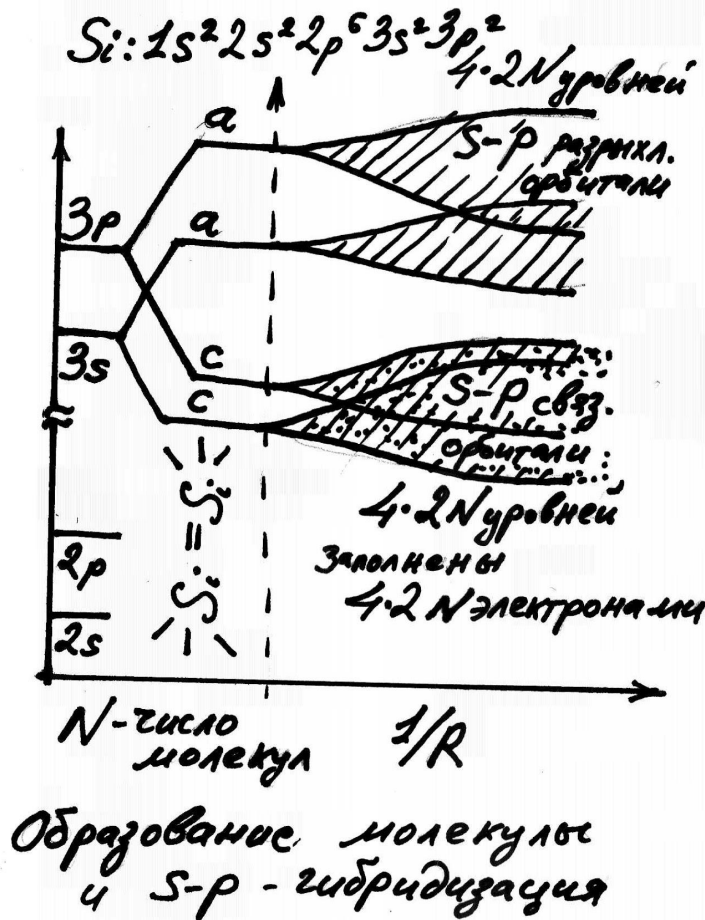
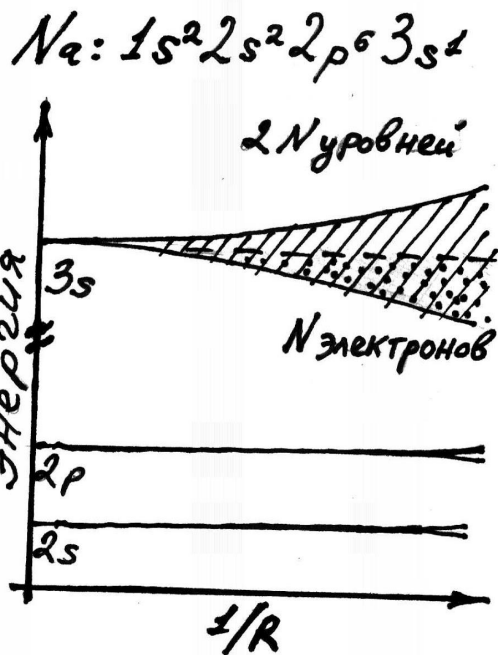


Иллюстрация образования энергетических зон.



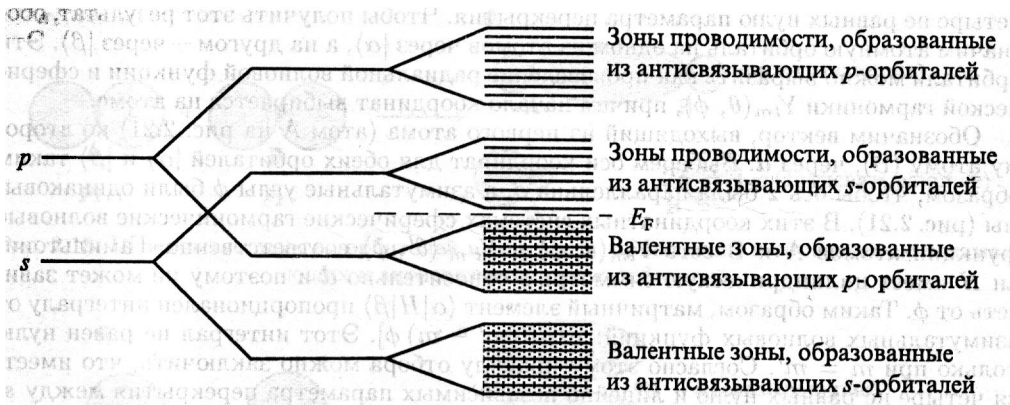
Запрет Паули,
«спиновая»
двойка для
электронов

«Вытягивание»
электронных
облаков при s-p
гибридации

R – расстояние между
ближайшими атомами.

Электронный спектр твёрдого тела.

1. Расщепление атомных уровней в зоны



Эволюция атомных орбиталей, приводящая к образованию зоны проводимости и валентной зоны в полупроводнике

2. Квантово-механическая задача многих тел

Гамильтониан кристалла

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_j \frac{P_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{jj'} \frac{Z_j Z_{j'} \cdot e^2}{|R_j - R_{j'}|} - \sum_{ij} \frac{Z_j \cdot e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{ii'} \frac{e^2}{|r_i - r_{i'}|}$$

Первое упрощение:
валентные электроны
и **ионный остов**

Приближение **Борна-Оппенгеймера** или **адиабатическое приближение** – частота колебаний ионов $\approx 10^{13}$ Гц, частота колебаний электронов $\approx 10^{15}$ Гц.

$$H = H_{ions}(R_j) + H_e(r_i, R_{j0}) + H_{e-ions}(r_i, \delta R_j)$$

Далее - **одноэлектронное приближение**, тогда уравнение Шрёдингера имеет вид

$$H_{1e} \Phi_n(r) = \left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \right) \Phi_n(r) = E_n \Phi_n(r)$$

где $V(r)$ -периодическая функция

Трансляционная симметрия.

Решение Гамильтониана
ищем в виде **Блоховских
функций**

$$H_{1e} \Phi_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \Phi_n(\mathbf{r}) = E_n \Phi_n(\mathbf{r})$$

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = f(\mathbf{r}) \cdot e^{i\varphi}, \Phi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

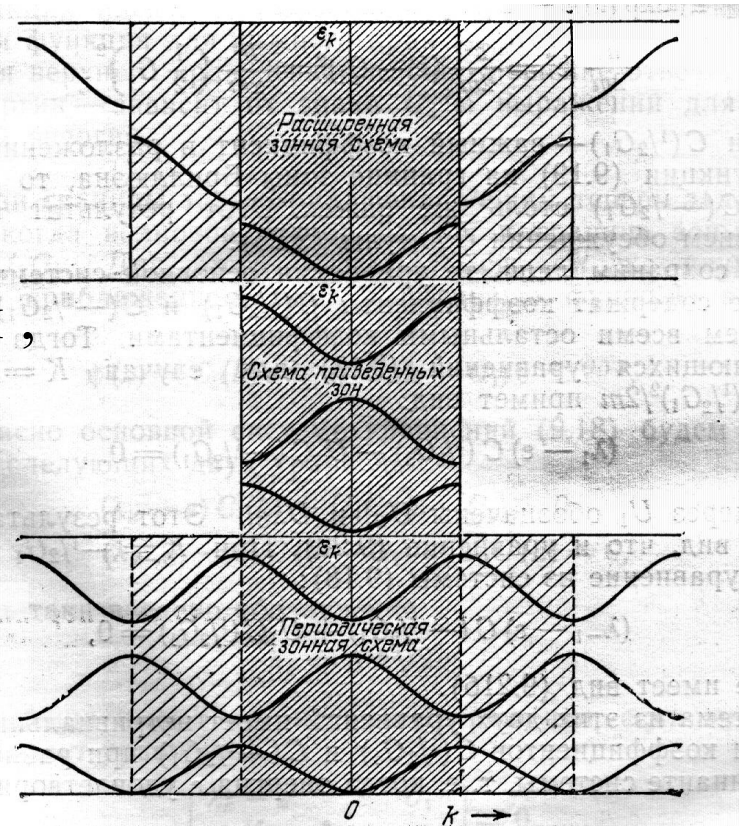
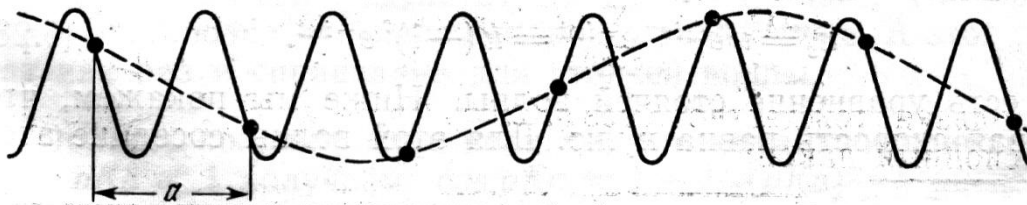
Где $U(\mathbf{r})$ -периодическая
функция, с той же точечной
симметрией, что и $V(\mathbf{r})$.

$\Phi(\mathbf{r})$ -волна с волновым вектором \mathbf{k} .

Обратное пространство
(пространство волновых векторов)

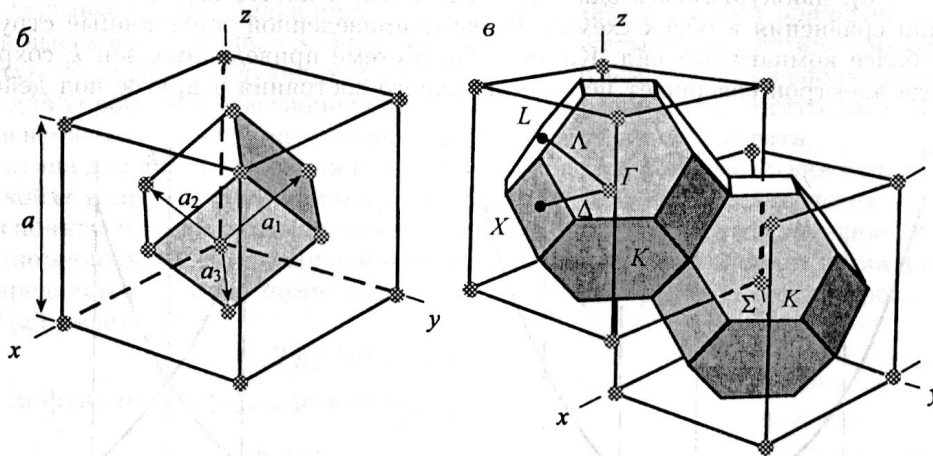
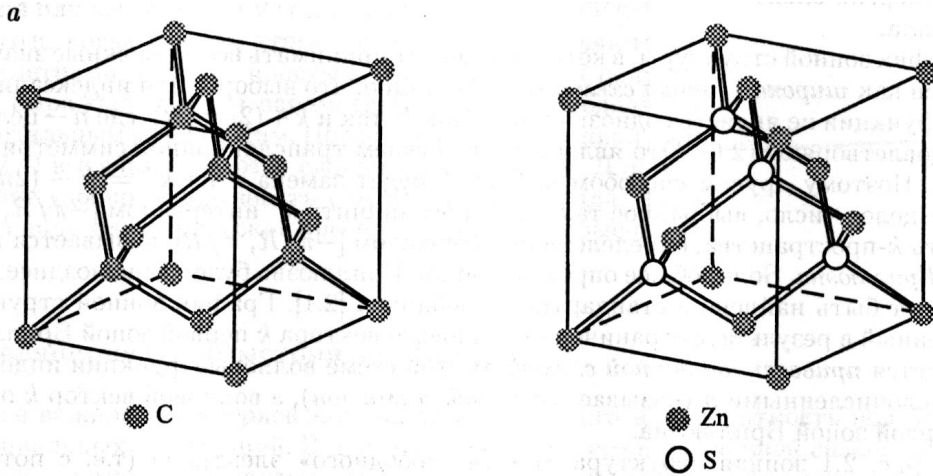
Так как волновой вектор определён с
точностью до вектора обратной решётки,
то **КВАЗИИМПУЛЬС**

Почти свободные электроны



Зоны Бриллюэна. Точечная симметрия.

Обратная решётка $\Lambda = 2\pi[\mathbf{b} \times \mathbf{c}] / a[\mathbf{b} \times \mathbf{c}]$



А) Кристаллическая структура алмаза и цинковой обманки

Б) ГЦК решётка с набором примитивных векторов трансляции

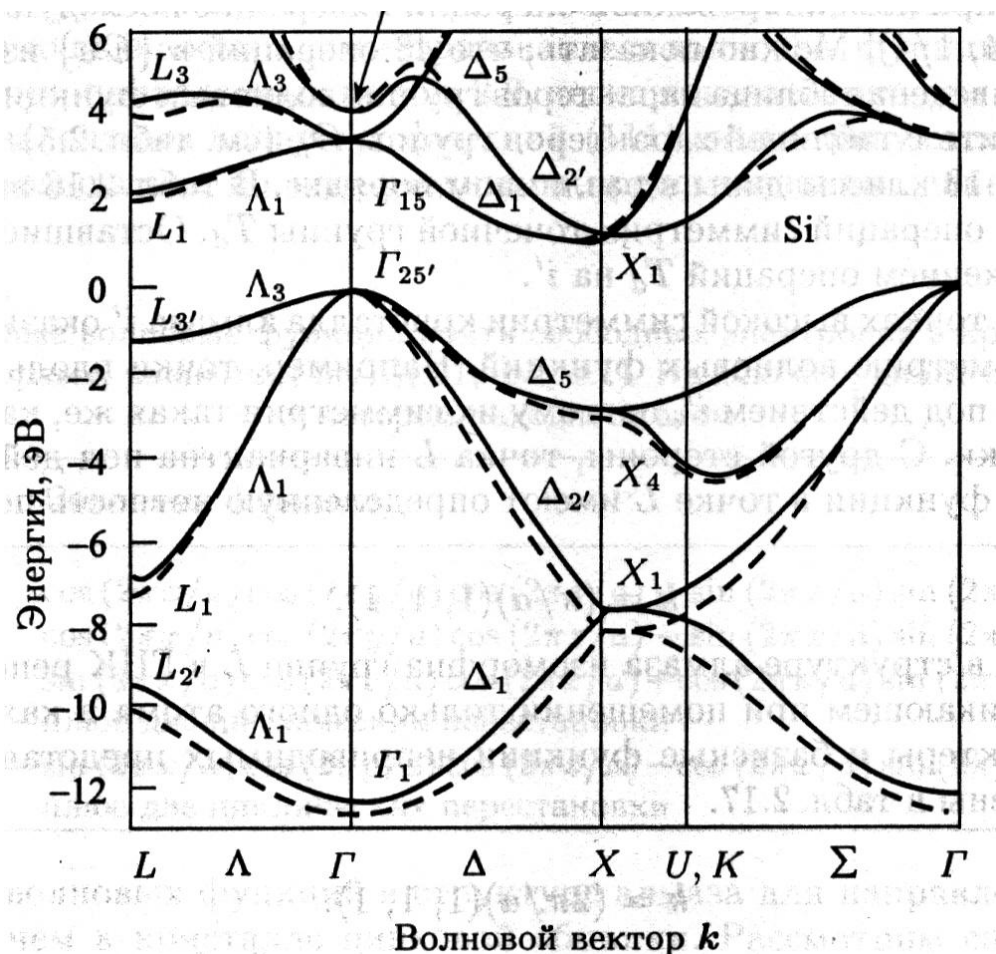
В) Обратная решётка. Зона Бриллюэна. Особые точки симметрии.

Энергетический спектр электрона в кристаллах. Дырки

- **Некоторые методы расчёта электронного спектра в кристаллах. Модель почти свободных электронов. Метод сильной связи.**
- **Минимумы и максимумы энергии в спектре, долины.**
- **Эффективная масса, изоэнергетические поверхности, анизотропия эффективной массы.**
- **Понятие дырки.**

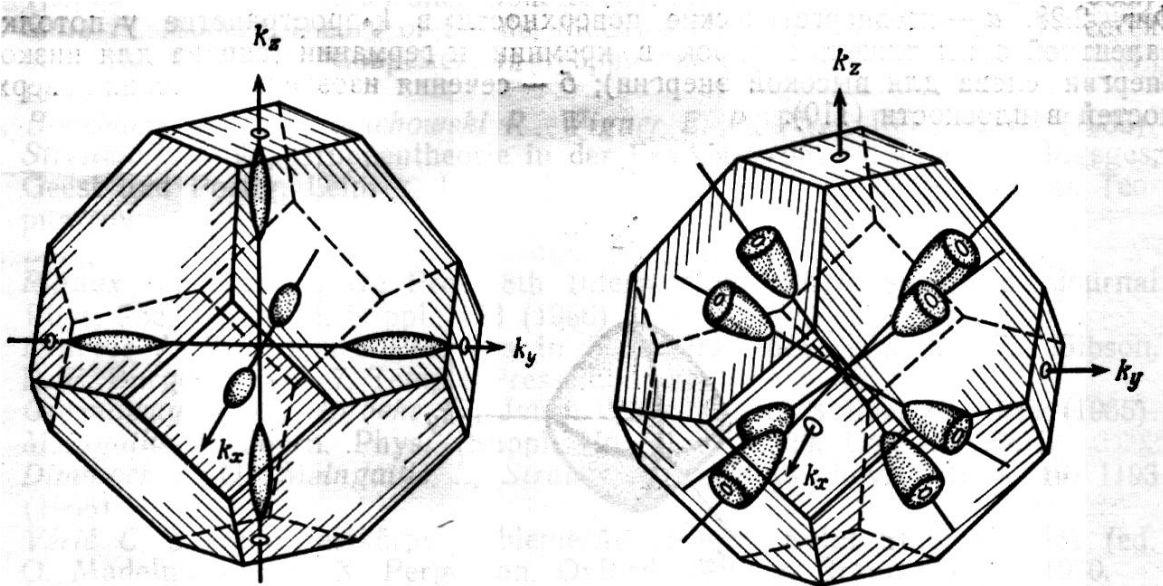
Методы расчёта зонной структуры

1. Почти свободные электроны.
2. Метод сильной связи (tight binding).
3. «Квази» *ab-initio* методы: (k-p) метод, метод псевдопотенциала, метод линейной комбинации атомных орбиталей.



Электроны и дырки. Эффективная масса.

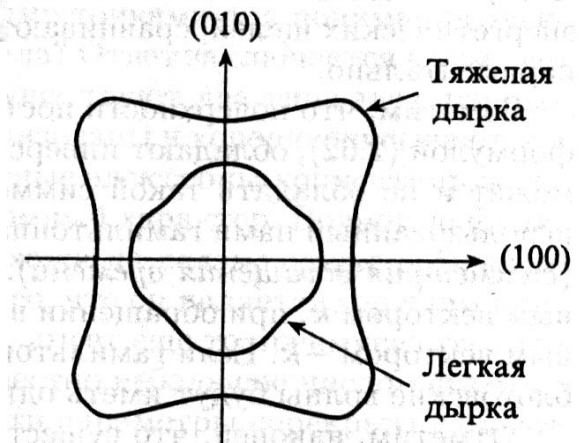
Анизотропия эффективной массы



$$\Delta E = \frac{(\Delta k)^2}{2m_{eff}}$$

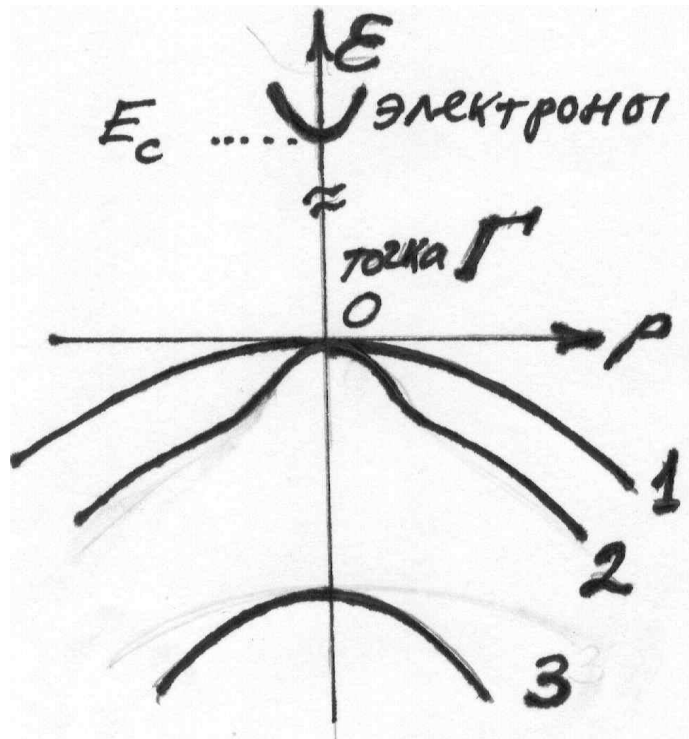
$$m_{i,j} = \left(\left. \frac{\partial \varepsilon(p)}{\partial p_i \partial p_j} \right|_{p=p_0} \right)^{-1}$$

Изоэнергетические поверхности в k-пространстве у дна зоны проводимости в кремнии (слева) и германии (справа)



Зонная структура полупроводников. Некоторые экспериментальные методы её исследования.

- Прямозонные и непрямозонные полупроводники.
- Зонная структура основных полупроводников (Si, Ge, GaAs).
- Оптические и электрофизические методы исследования зонной структуры.



Увеличенная область центра зоны Бриллюэна GaAs:

- 1) зона тяжёлых дырок;
- 2) зона легких дырок;
- 3) отщеплённая за счет спин-орбитального взаимодействия зона.

Запрещённая зона. Прямозонные и непрямозонные полупроводники.

