

## *Тема 3. Квантовая теория электропроводности.*

**П.1. Классическая модель электропроводности.**

**П.2. Квантовая теория движения свободных электронов в веществе**

**П.3. Запрещенные зоны**

**П.4. Зоны Бриллюэна.**

**П.5. Зонная теория проводимости.**

## П.1. Классическая модель электропроводности.

Электрическим током называется направленное движение заряженных частиц.

Электропроводностью (проводимостью) называется свойство вещества “проводить” электрический ток, т.е. обеспечивать направленное движение заряженных частиц от одной границы до другой.

### Необходимые условия наличия тока:

Наличие в веществе свободных заряженных частиц, способных перемещаться по всему объему вещества.

Наличие сил, действующих в одном направлении на каждую из таких частиц.

Локальной характеристикой тока является «плотность тока»  $j$ .

Закон Ома в локальной форме:  $\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}$ ,

где коэффициент пропорциональности  $\sigma$  называется проводимостью.

$$\sigma = qn\mu,$$

т.е. пропорциональна заряду каждой свободной заряженной частицы ( $q$ ), концентрации заряженных частиц ( $n$ ) и подвижности заряженных частиц ( $\mu$ ).

Для электронов в металле:  $\sigma = \frac{n_e e^2 \lambda}{m_e v_T}$ .

Средняя тепловая скорость для классических частиц  $v_T = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_e}}$ .

Следовательно  $\sigma \sim \frac{1}{\sqrt{T}}$ , что не всегда выполняется.

## П.2. Квантовая модель движения свободных электронов в веществе.

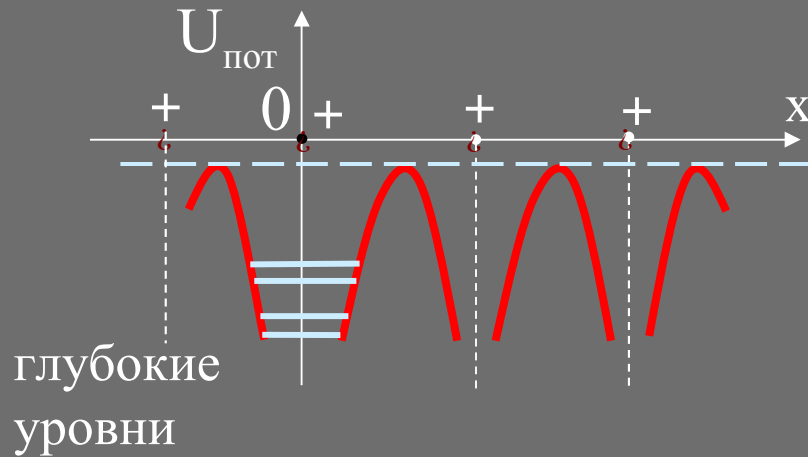
Нам уже известна модель, применимая для описания теплового движения электронов в металле - «ферми-газ» электронов.

В ней учитывается хаотическое движение свободных электронов и принцип Паули при заполнении электронами уровней энергии в квантовой системе, которой является весь объем проводника.

Теперь надо исследовать направленное движение свободных электронов, обеспечивающее протекание электрического тока.

При таком движении электроны взаимодействуют с периодическим электрическим полем, создаваемым ионами кристаллической решетки.

## График потенциальной энергии



Картина аналогична по осям  $OY$  и  $OZ$ .

## Особенности:

- Есть периодическое электрическое поле решетки.
- Глубокие уровни слабо чувствуют наличие других ионов, а верхние искажены (общие электроны свободны).
- Движение свободных электронов инфинитно.

## Периодичность потенциальной энергии:

$$U(x, y, z) = U(x + n_x a, y + n_y b, z + n_z c).$$

$a, b, c$  – периоды кристаллической решетки по каждой из осей  $x, y, z$ .

$n_x, n_y, n_z$  – целые положительные и отрицательные числа, показывающие кратность сдвига.

*Периодом решетки называется минимальное расстояние, при сдвиге на которое форма потенциальной энергии повторяется.*

Подставляем эту  $U(x,y,z)$  в уравнение Шредингера:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0.$$

Ответ - набор волновых функций, удовлетворяющих этому уравнению.

### П.3. Запрещенные зоны.

Задача. Исследовать волновые функции свободных электронов.  
Известно: они испытывают дифракцию на каждом ионе.

При некоторых значениях импульса и длины волны электрона, дифракция приводит к возникновению стоячей волны, в которой нет переноса энергии.

Пространственный период для стоячей волны  $\psi$ :  $\lambda = 2a, a, a/2, \dots$

Стоячая волна соответствует электрону, не движущемуся направленно. Этому электрону отвечает нереализуемая длина волны деБройля

$$\lambda_n = \frac{2a}{n}, \quad k_n = \frac{n\pi}{a}.$$

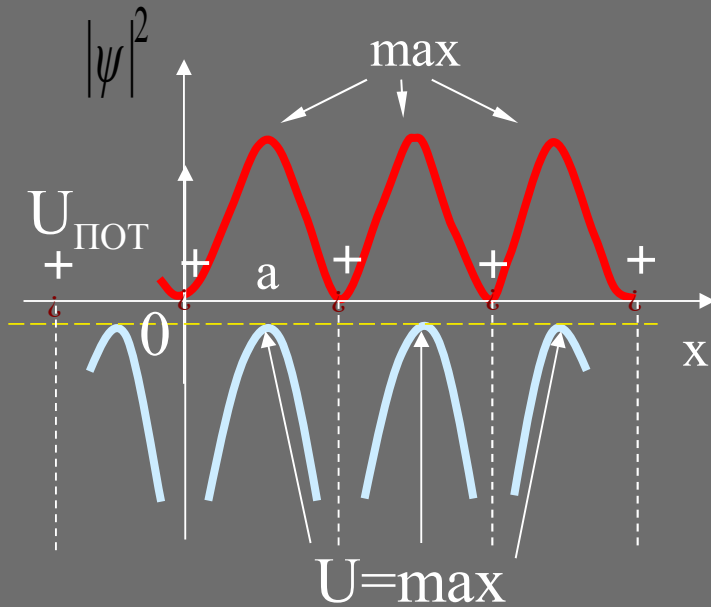
Запрещенные волновые векторы  $k_n$  соответствуют волновым функциям и стоячим волнам, имеющим данную  $\lambda_n$ .

$E_n = \frac{p_n^2}{2m_e}$  - недоступная кинетическая энергия направленного движения. 7

ТЕСТ

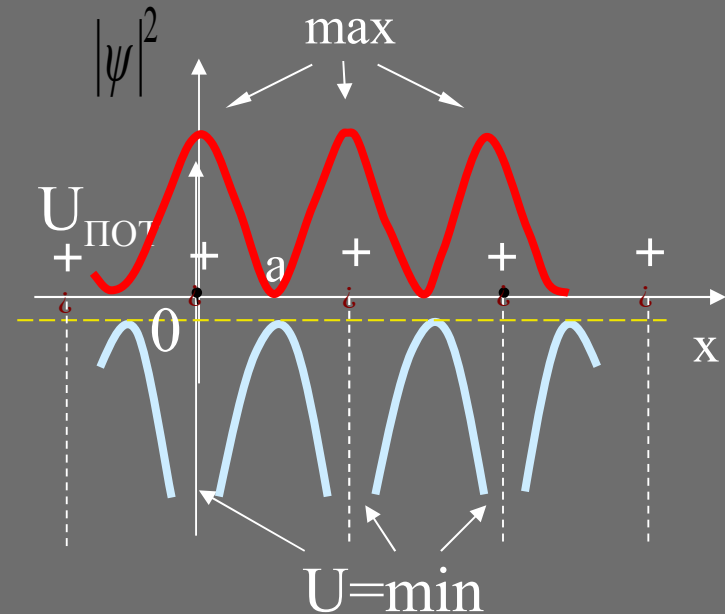
$\lambda_1 = 2a$  Первое положение ВФ

Максимум плотности заряда расположен в области между ядрами. Кинетическая энергия минимальна  $E_1 - \Delta E$ .



Второе положение ВФ

Максимум плотности заряда расположен в области ядра. Кинетическая энергия максимальна  $E_1 + \Delta E$ .



Движение отсутствует при  $E_1 - \Delta E < E_k < E_1 + \Delta E$ .

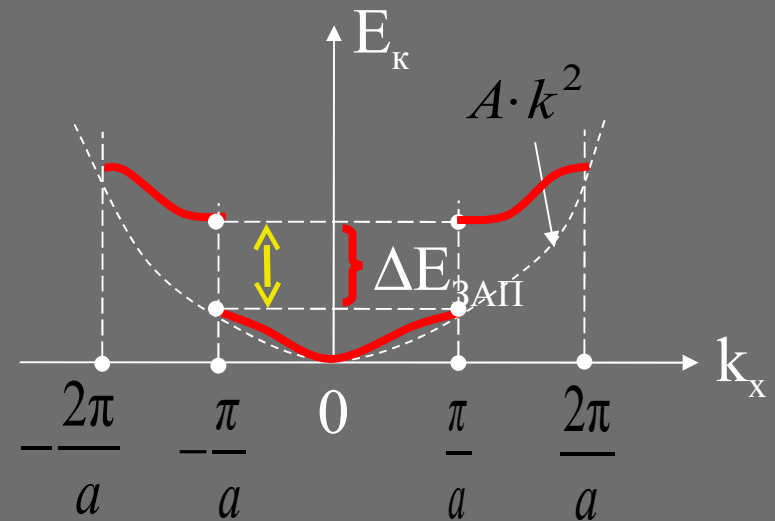


Зависимость кинетической энергии от волнового числа:

Кинетическая энергия

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = A \cdot k^2 \quad \text{— парабола.}$$

Волновое число  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ .



Нет направленного движения электронов при  $k_n = n \frac{\pi}{a}$ .

Зона недопустимых (недоступных) энергий, т.е. зона запрещенных энергий имеет ширину  $\Delta E_{\text{зап}}$ .

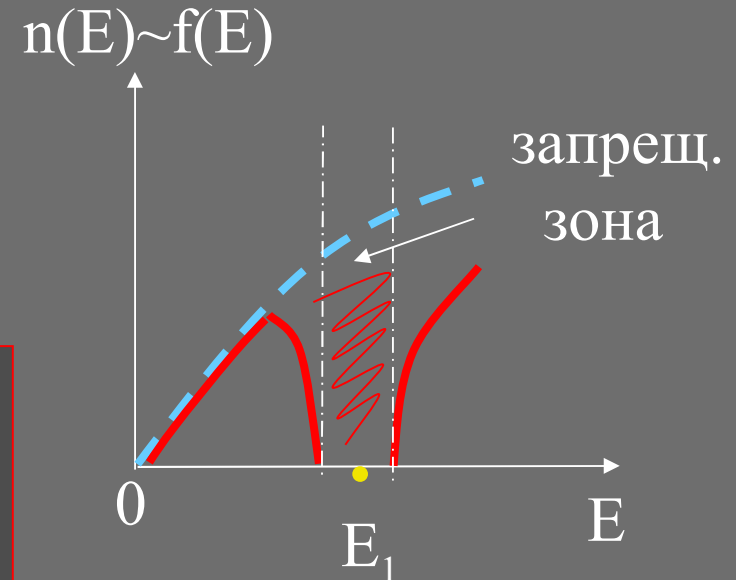
Параболическая зависимость разрывается на отдельные куски и появляются зоны нереализуемых (запрещенных) энергий.

Следствие: Концентрация электронов равна нулю, если энергия электронов находится в запрещенной зоне.

Запрещенной зоной называется диапазон значений энергии, которой не может обладать электрон.

Разрешенной энергетической зоной называется совокупность значений энергии, которыми может обладать электрон.

Разрешенные зоны могут быть пустыми, частично или полностью заполненными электронами.



ТЕСТ

ТЕСТ

Вывод: Данная модель направленного движения электронов проводимости вещества является основой зонной теории проводимости, в которой имеют место разрешенные и запрещенные зоны энергии направленного движения свободных электронов.

## П.4. Зоны Бриллюэна.

Проблема: Как отражается трехмерная структура вещества на его электропроводности?

Известно, что при определенных условиях электроны не могут свободно передвигаться по веществу, поскольку волновые функции имеют вид стоячих волн, длины которых связаны с постоянной кристаллической структуры.

Недопустимые волновые числа для распространения по соответствующим осям зависят от периодов решетки по этим осям:

$$k_{X,n} = n_X \frac{\pi}{a}, \quad k_{Y,n} = n_Y \frac{\pi}{b}, \quad k_{Z,n} = n_Z \frac{\pi}{c}.$$

В общем случае постоянные  $a$ ,  $b$ , и  $c$  имеют разную величину.

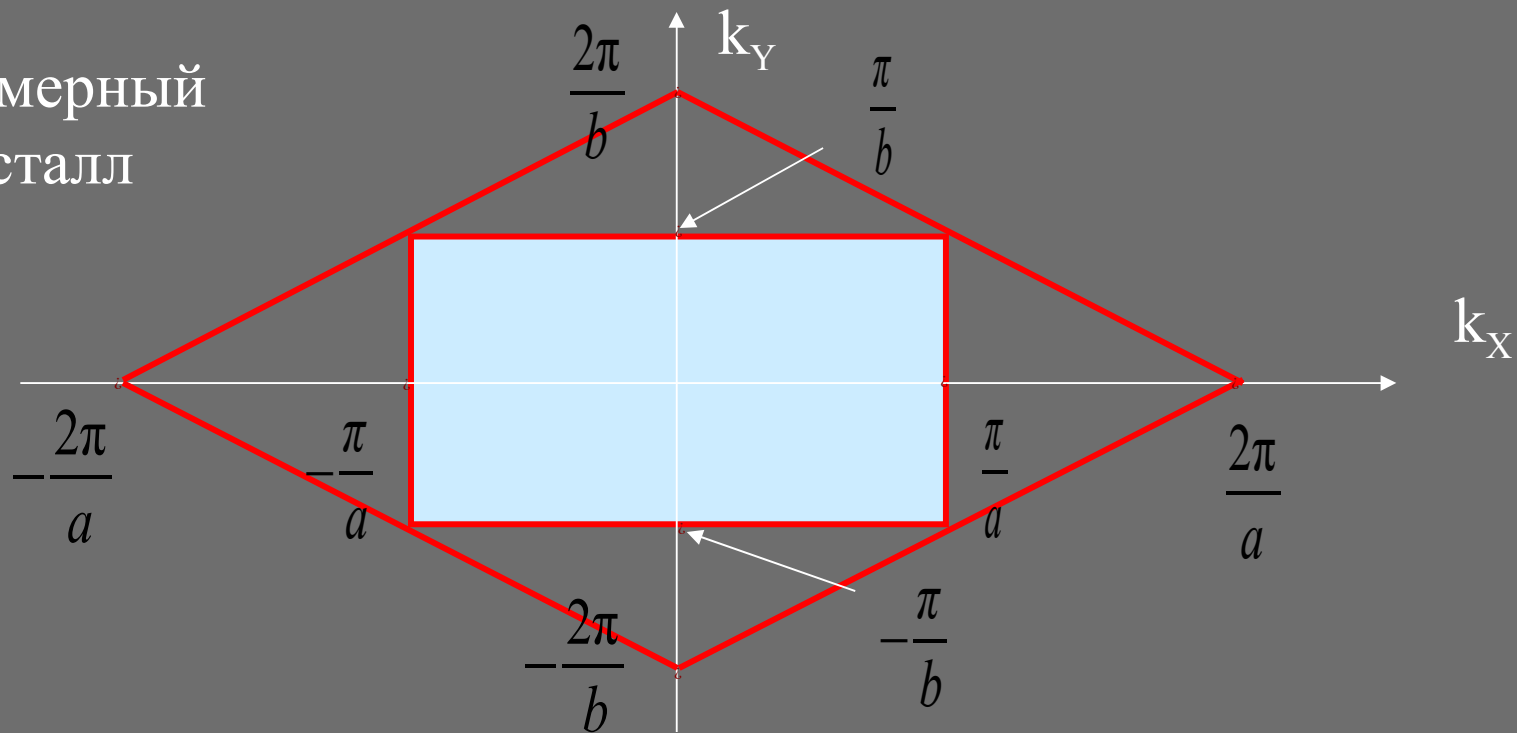
Электроны могут совершать направленное движение, имея допустимые значения волновых чисел, отличающиеся от недопустимых.

*Зонами Бриллюэна называются такие диапазоны волнового числа ( $k$ ), внутри которых разрешенная энергия электрона меняется квазинепрерывно.*

Рассмотрим модель двумерной структуры (кристалла) в которой движется электрон.

Постоянные кристаллической решетки обозначим  $a$  и  $b$ , а оси декартовой системы координат обозначим  $Ox$  и  $Oy$ .

# Двумерный кристалл



Для первой зоны диапазон доступных волновых чисел по оси X

$$-\frac{\pi}{a} < k_X < \frac{\pi}{a}.$$

Для второй зоны диапазон доступных волновых чисел по оси X

$$-\frac{2\pi}{a} < k_X < -\frac{\pi}{a}, \quad \frac{\pi}{a} < k_X < \frac{2\pi}{a}.$$

Для первой зоны диапазон доступных волновых чисел по оси  $Y$

$$-\frac{\pi}{b} < k_Y < \frac{\pi}{b}.$$

Для второй зоны диапазон доступных волновых чисел по оси  $Y$

$$-\frac{2\pi}{b} < k_Y < -\frac{\pi}{b}, \quad \frac{\pi}{b} < k_Y < \frac{2\pi}{b}.$$

На границах зон Бриллюэна энергия испытывает скачок.

В трехмерном случае зоны Бриллюэна имеют вид довольно сложных по форме тел. Исследуя форму этих тел, можно получить ответ на вопрос, как будут двигаться свободные электроны в веществе в разных направлениях и каковы будут электрические свойства данного вещества.

## П.5. Зонная теория проводимости.

ВОПРОС: Как квантовая модель описывает направленное движение электронов вещества?

Чтобы возникло направленное движение свободного электрона его энергия должна возрасти на требуемое значение, равное кинетической энергии направленного движения.

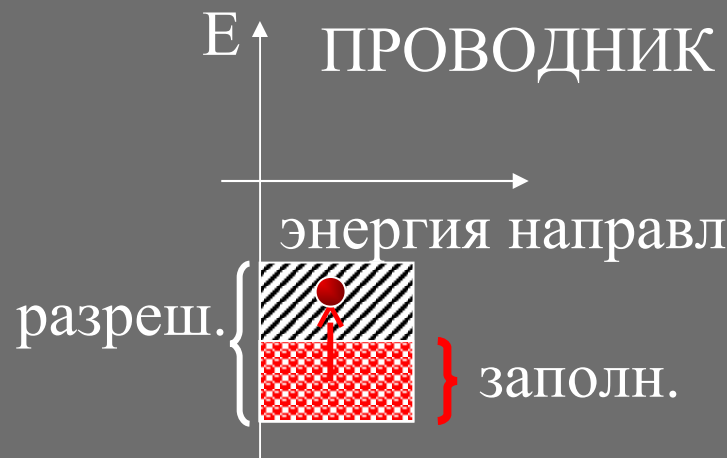
Для этого в данной энергетической системе должны найтись свободные уровни энергии, которые расположены выше энергетического уровня данного электрона.

*Условие проводимости: наличие выше расположенных свободных энергетических уровней.*

ТЕСТ

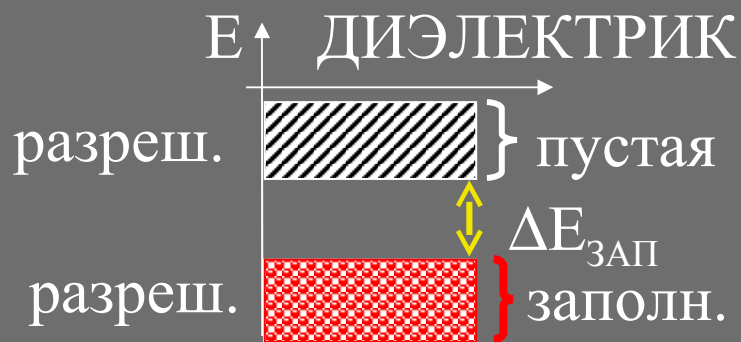


У проводника имеется разрешенная энергетическая зона, только частично заполненная электронами.



Одна штриховка - разрешенность, вторая - заполненность.

*Зонай проводимости будет разрешенная зона, частично заполненная электронами.*



*У диэлектрика разрешенная зона заполнена полностью, а выше расположенная разрешенная зона отделена широкой ( $\Delta E_{\text{ЗАП}} \gg kT$ ) запрещенной зоной и поэтому остается незаполненной.*

ТЕСТ

## ЗАМЕЧАНИЕ:

При некоторых условиях диэлектрик может превратиться в проводник (когда энергия воздействия на электроны сравнима с шириной запрещенной зоны).

Это явление – пробой диэлектрика, который обычно возникает при электрическом воздействии и называется электрическим пробоем.

В результате пробоя возникает искровой разряд и диэлектрик превращается в проводник.