

Тема 5. Электроны в кристаллах

- 5.1. Квантовая теория свободных электронов в металлах



Модель кристаллической структуры

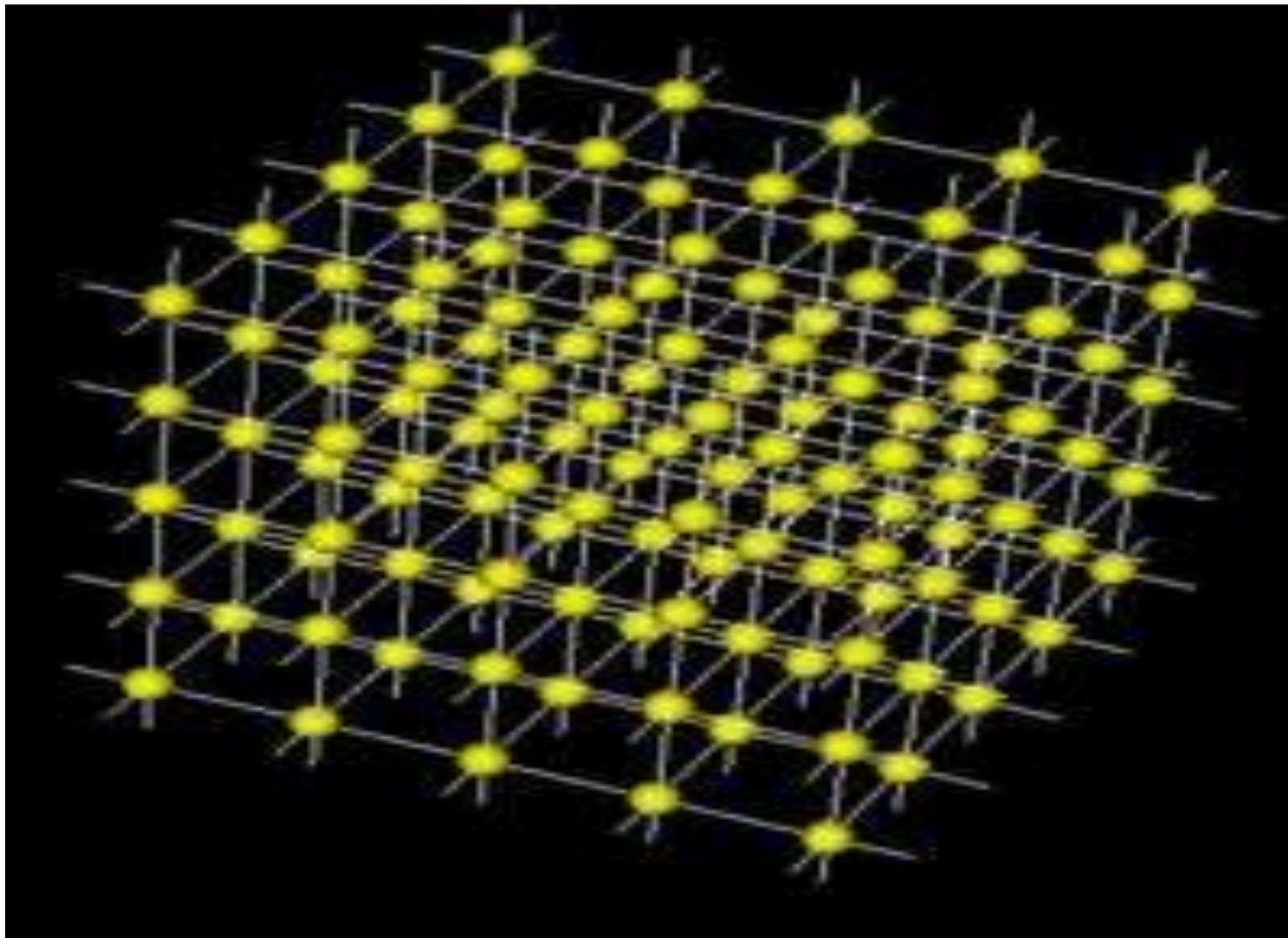
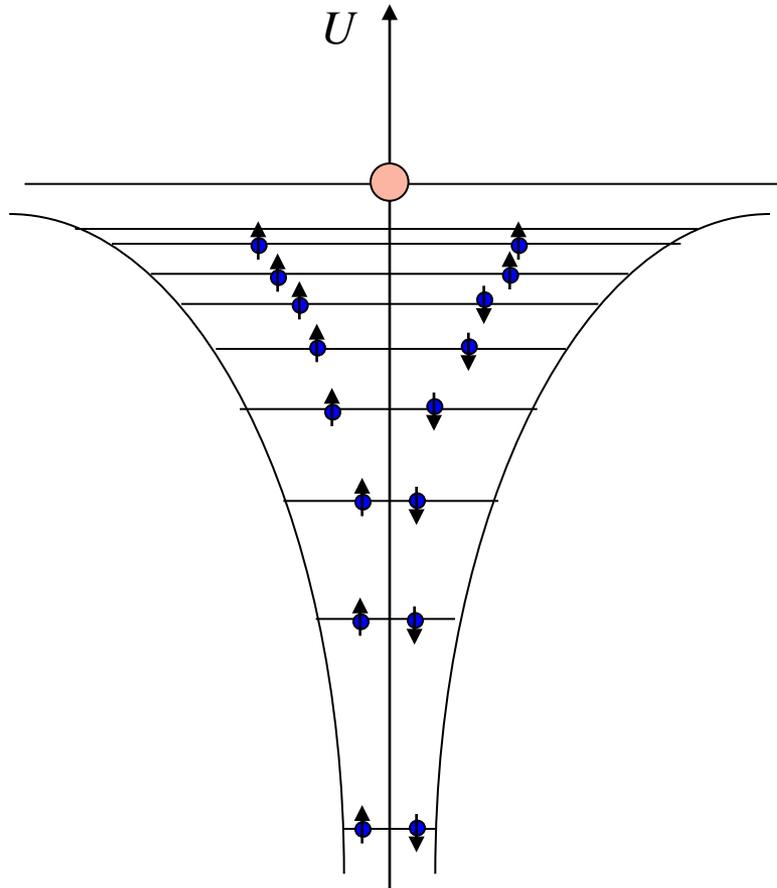
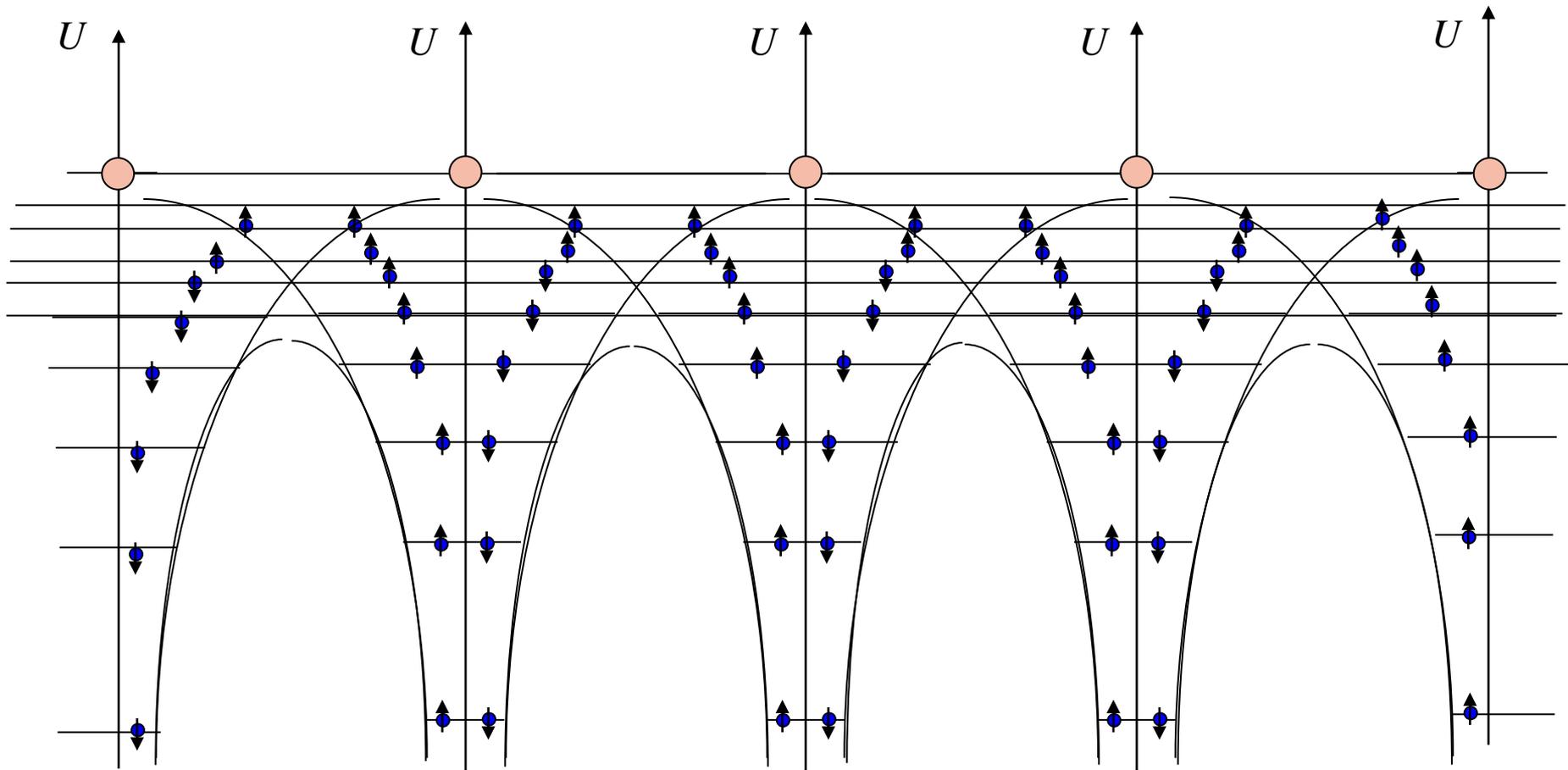


Схема энергетических уровней в атоме

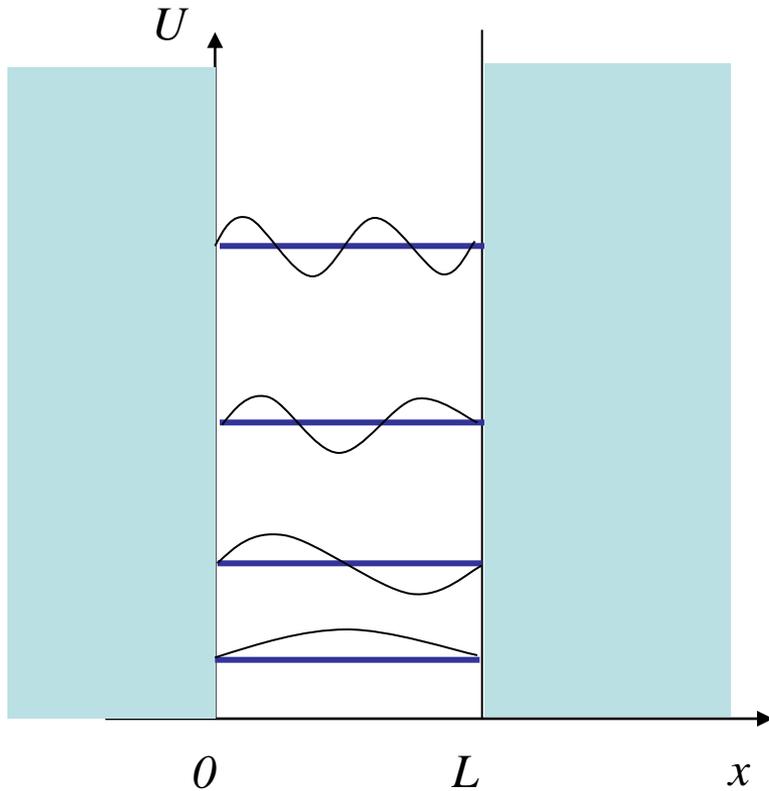


$$E_n = -\frac{k^2 m e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Образование свободных электронов



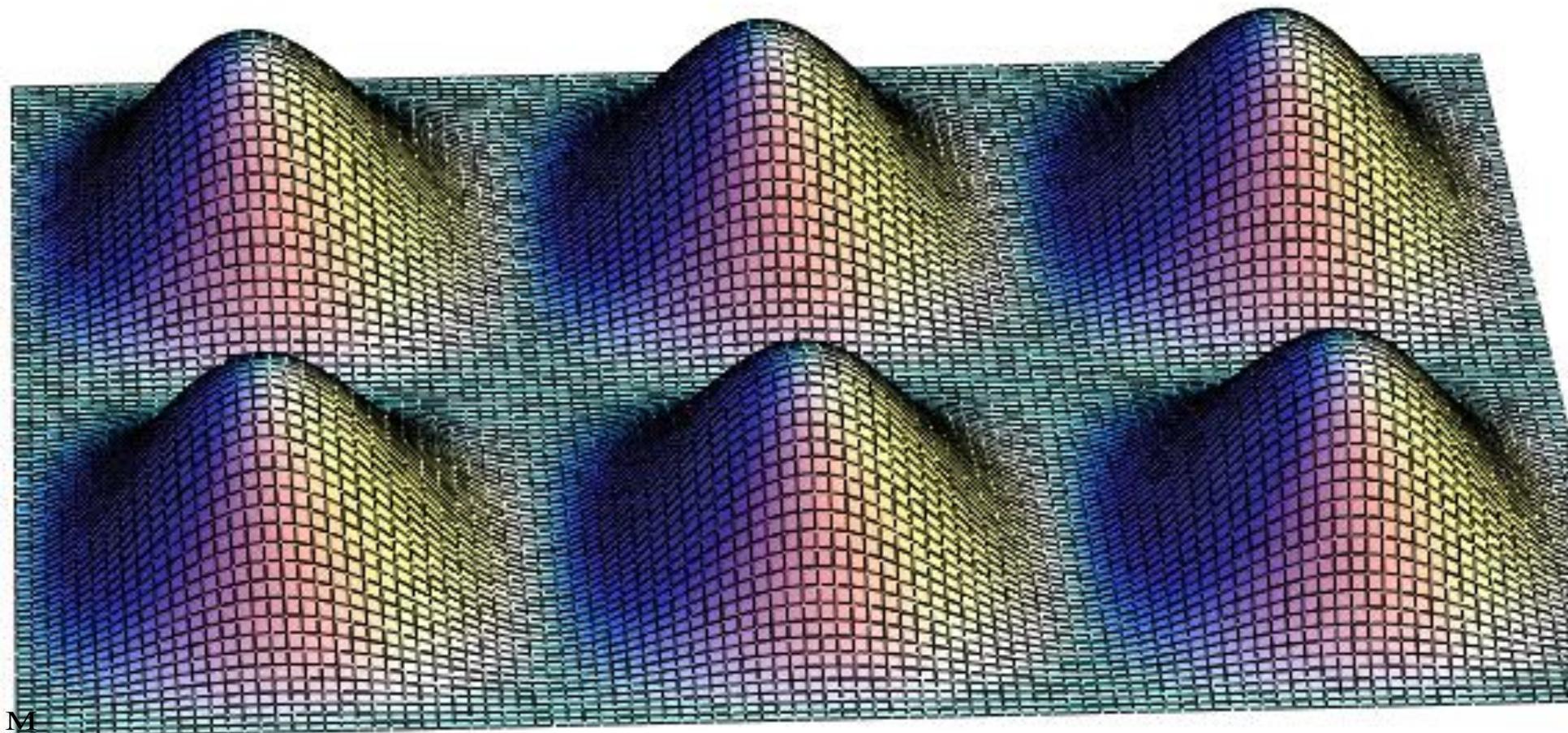
Электрон в усредненном поле

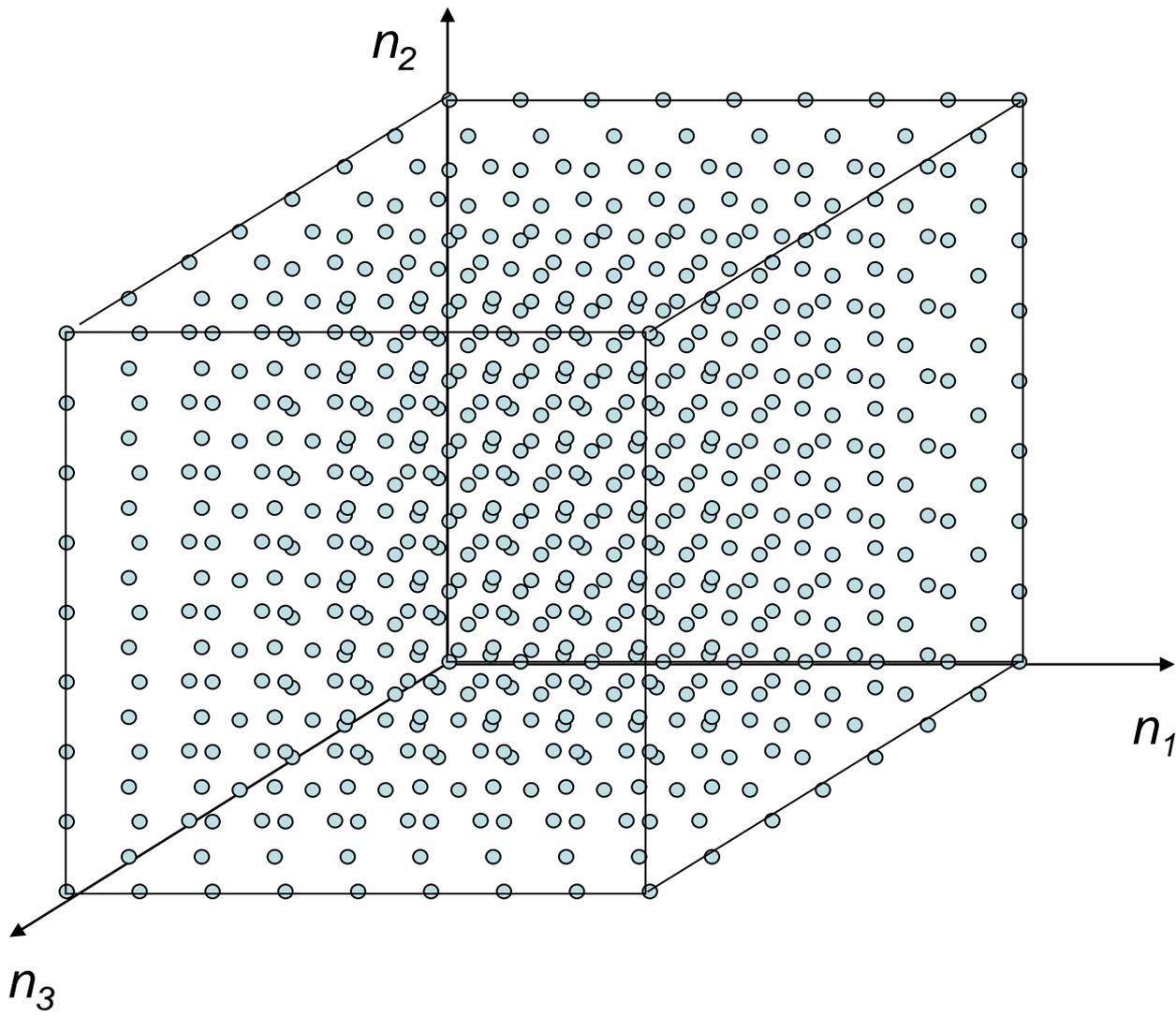


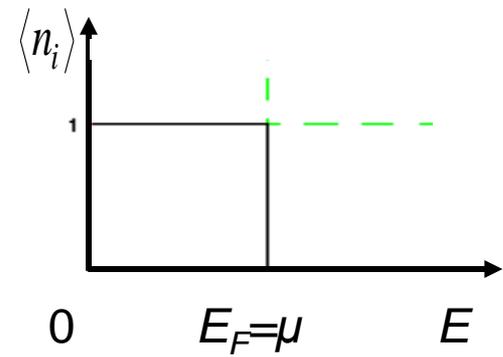
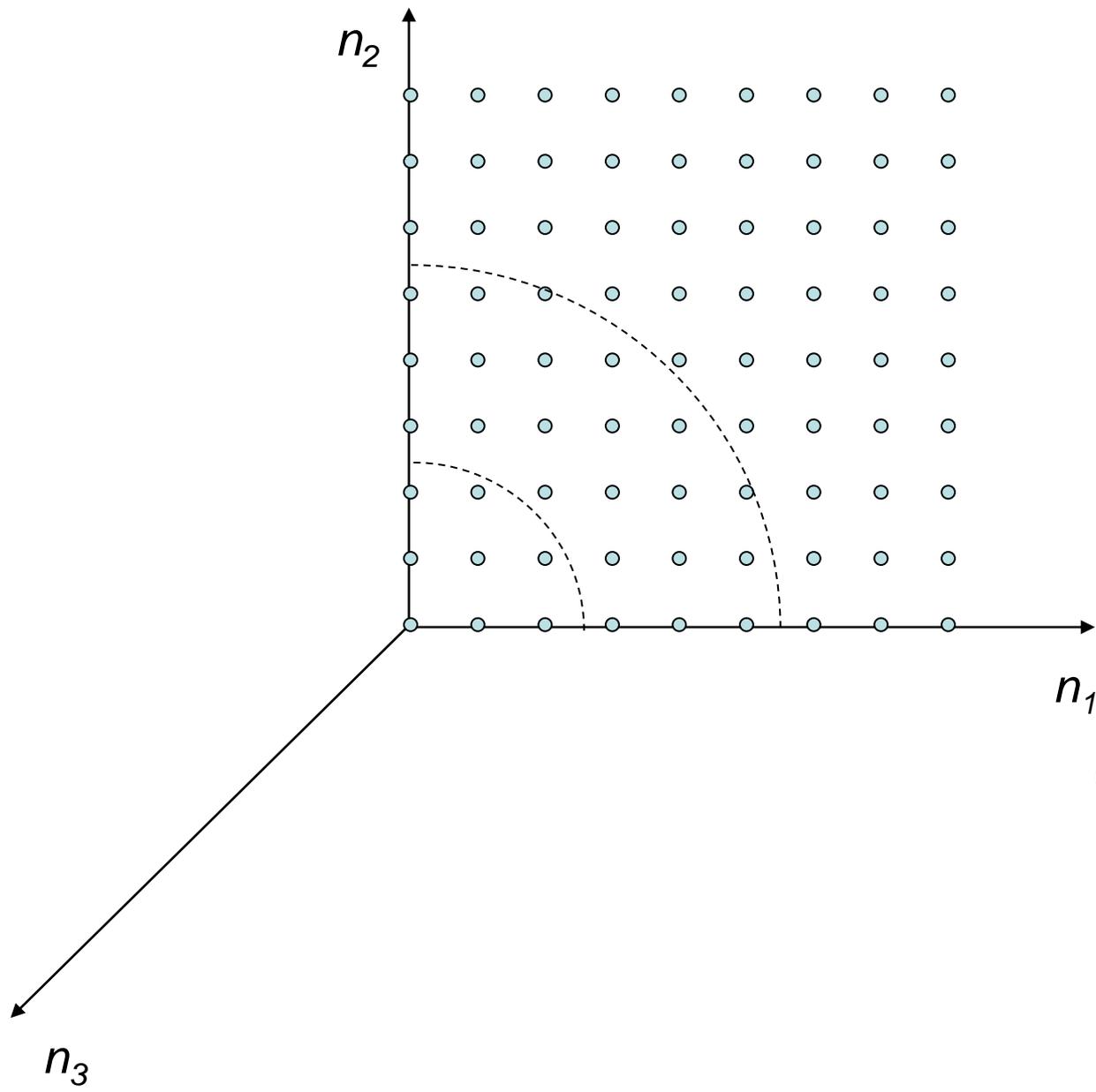
$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

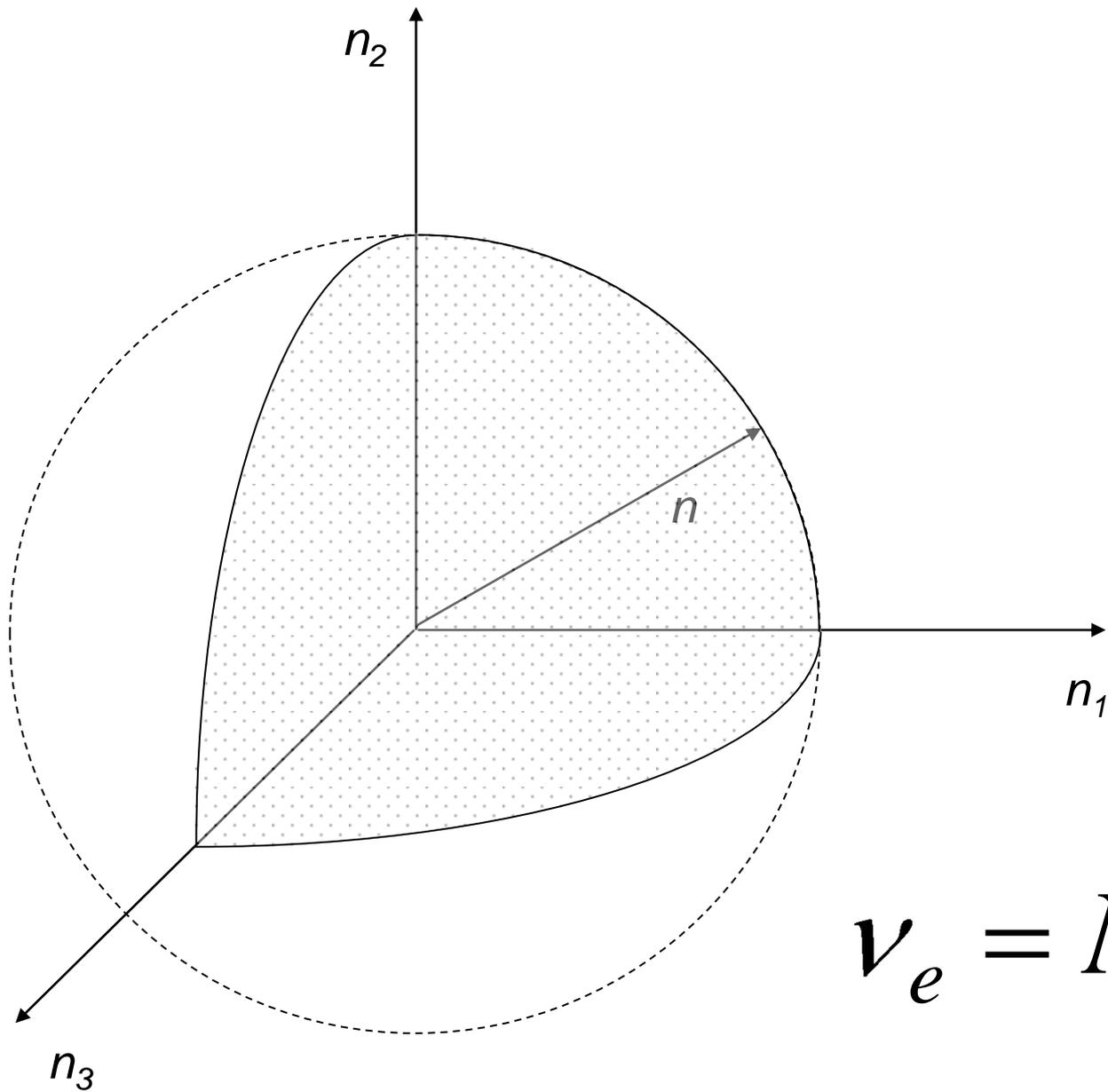
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot n^2$$

Ψ^2 – функция для частицы в
двухмерной яме ($n_1=2, n_2=3$)



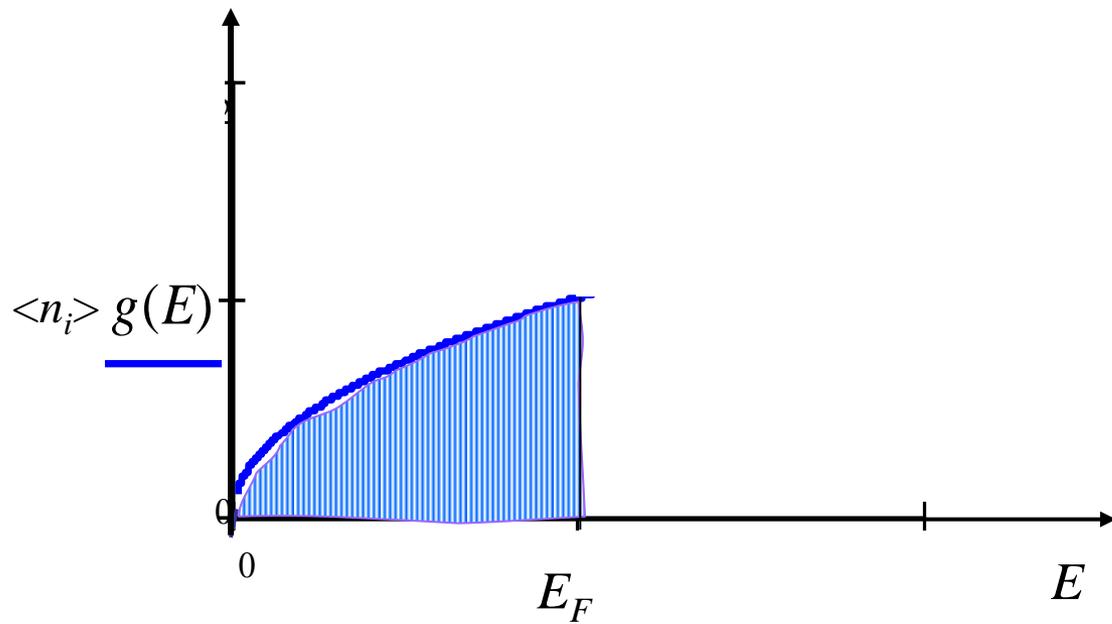
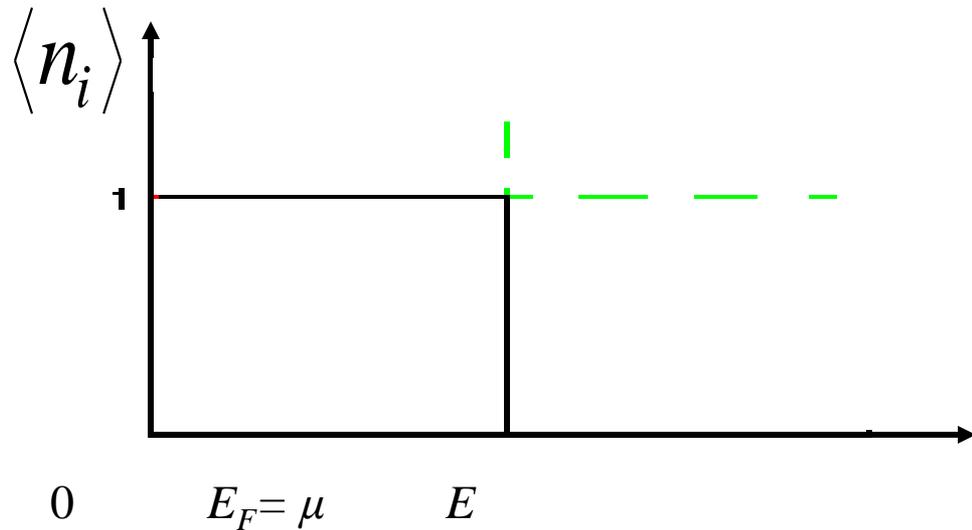




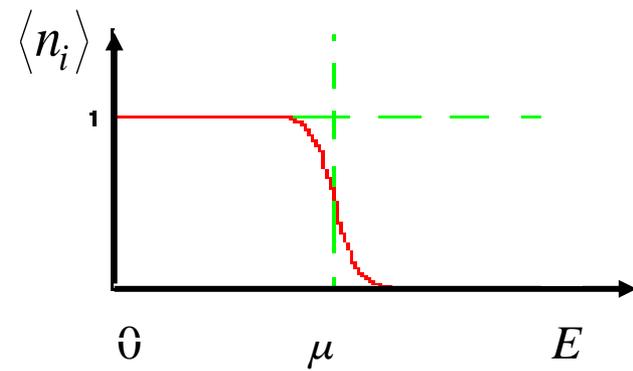
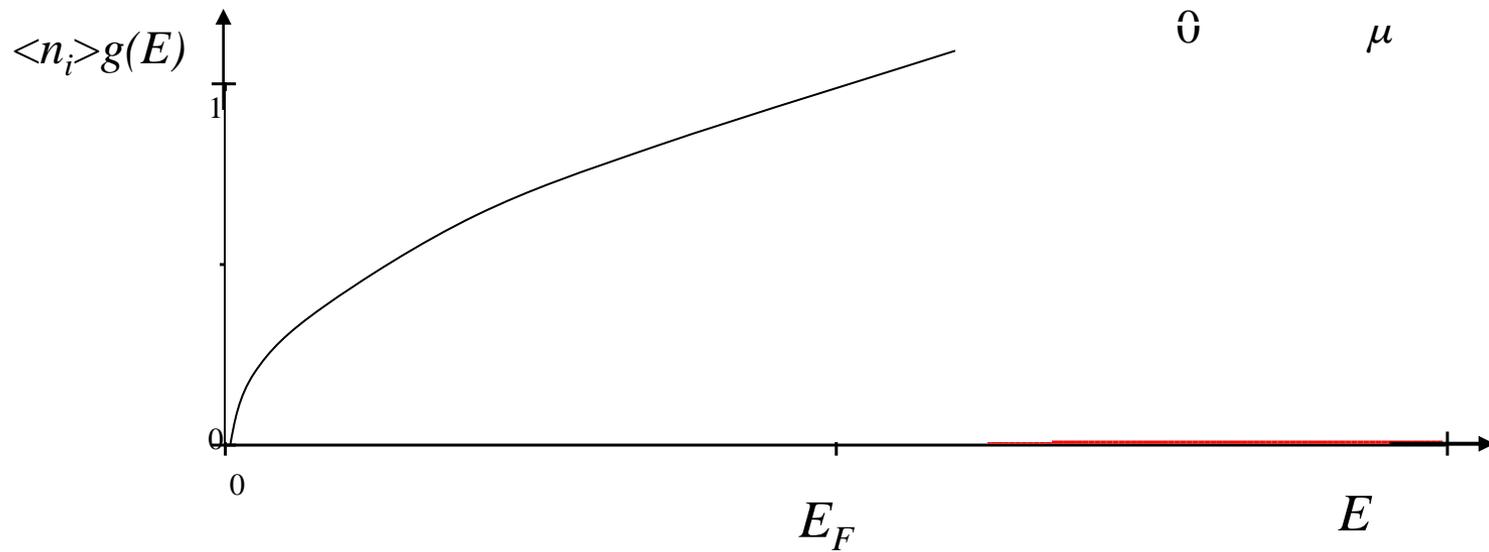


$$V_e = N$$

При $T = 0$



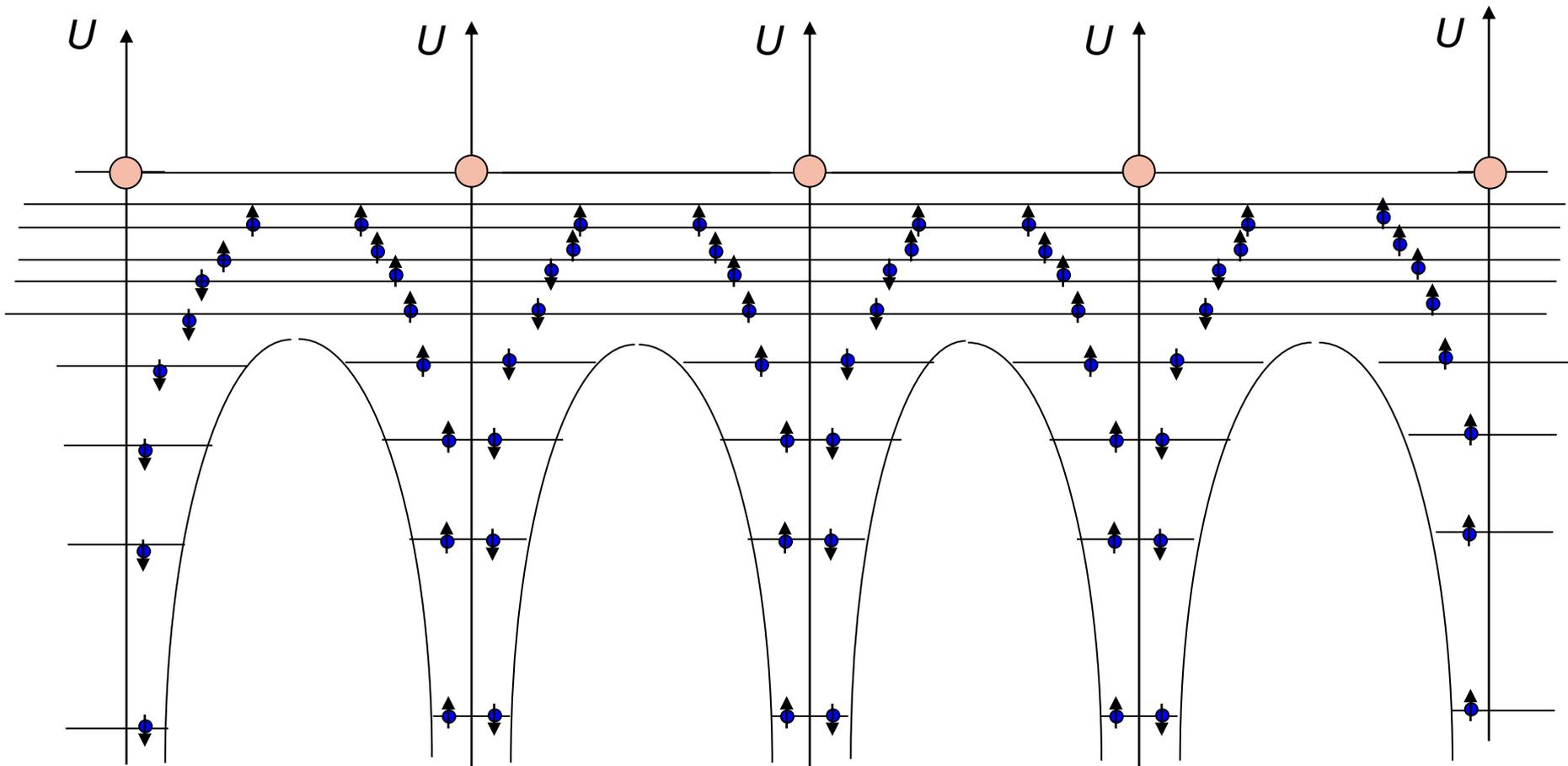
$$T > 0$$



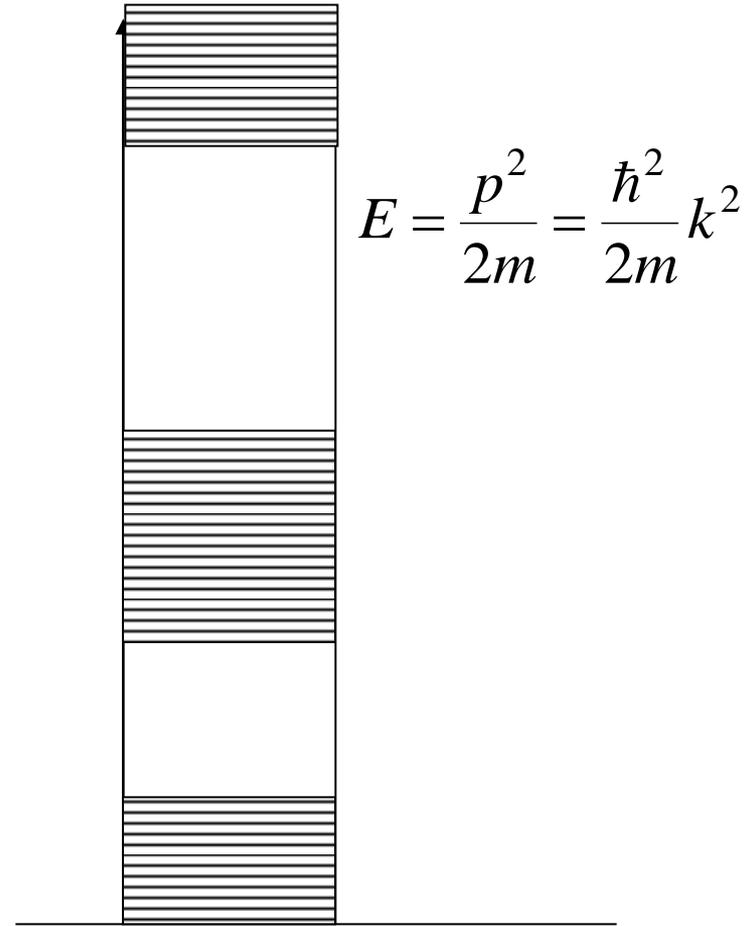
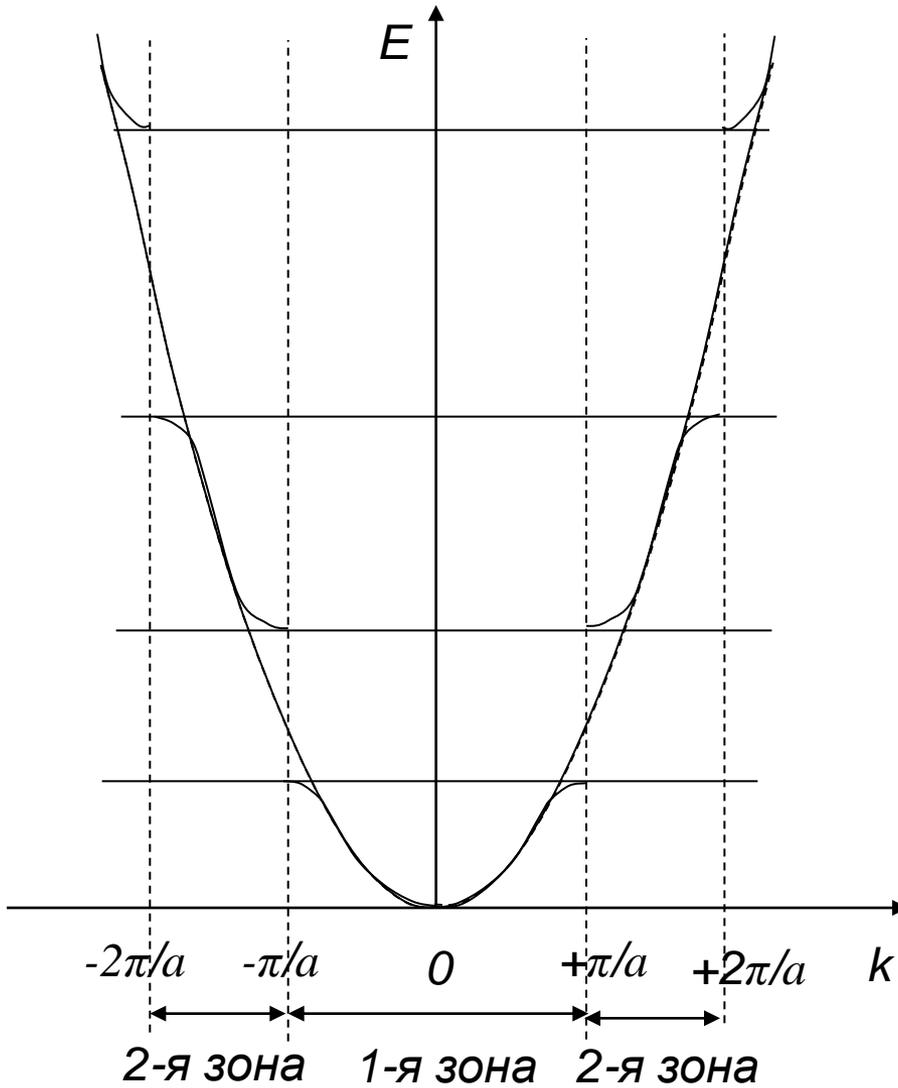
Тема 5. Электроны в кристаллах

- 5.2. Энергетические зоны в кристаллах

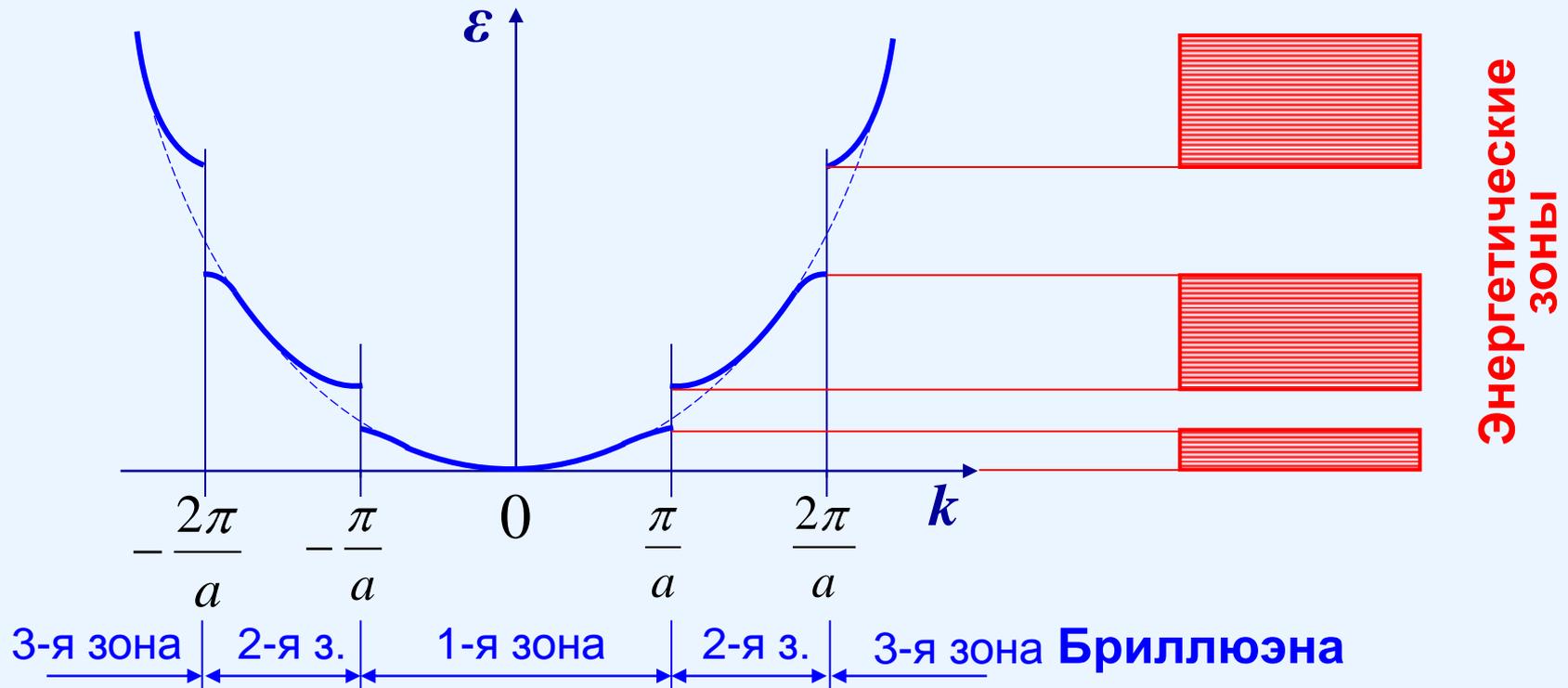
Движение электронов в периодическом поле



Зоны Бриллюэна

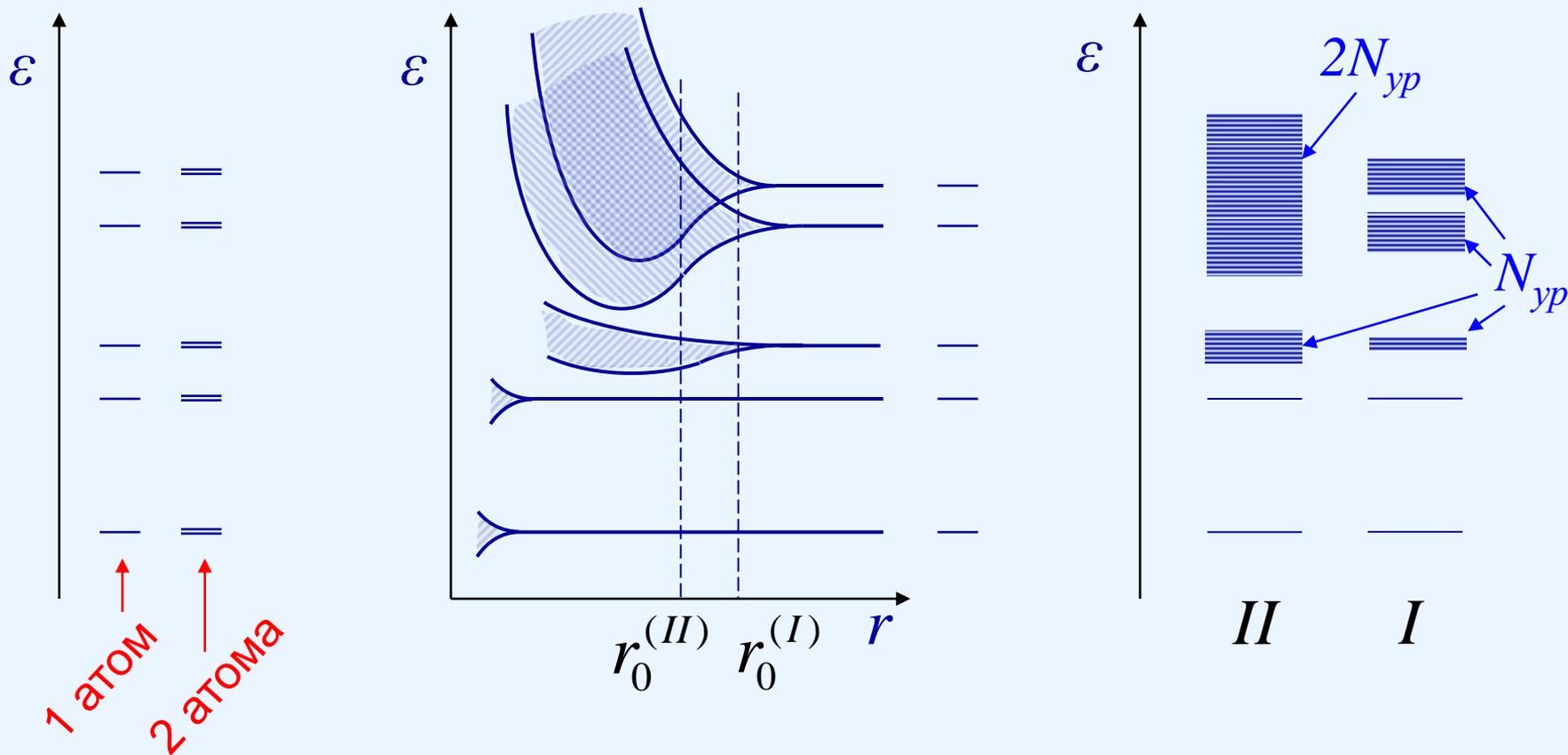


$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$



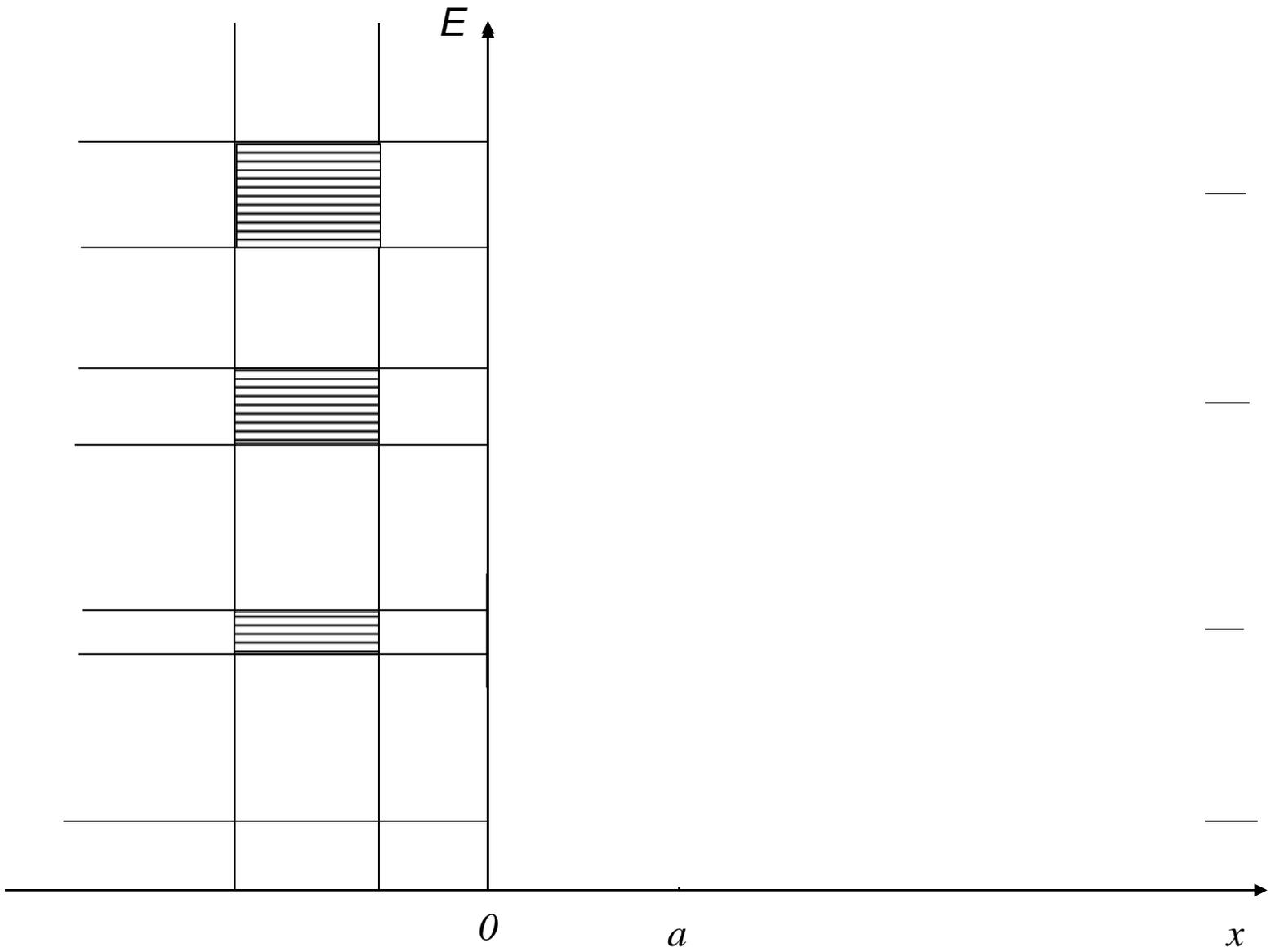
Область k – пространства, внутри которой энергия электрона изменяется квазинепрерывно, называется **зоной Бриллюэна**.

Образование энергетических зон

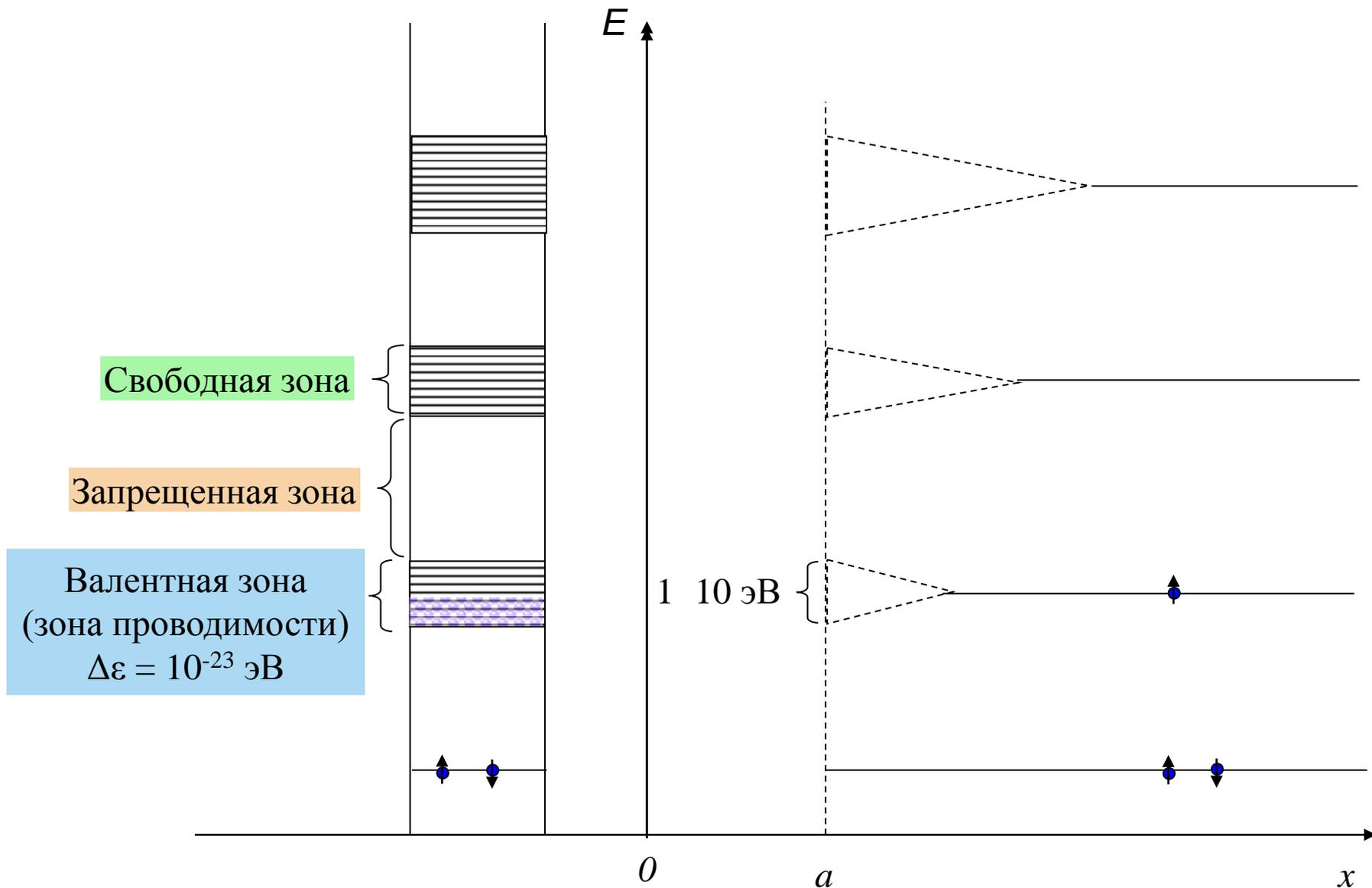


N – число атомов в кристалле

«Расстояние» между уровнями внутри зон $\sim 10^{-23}$ эВ

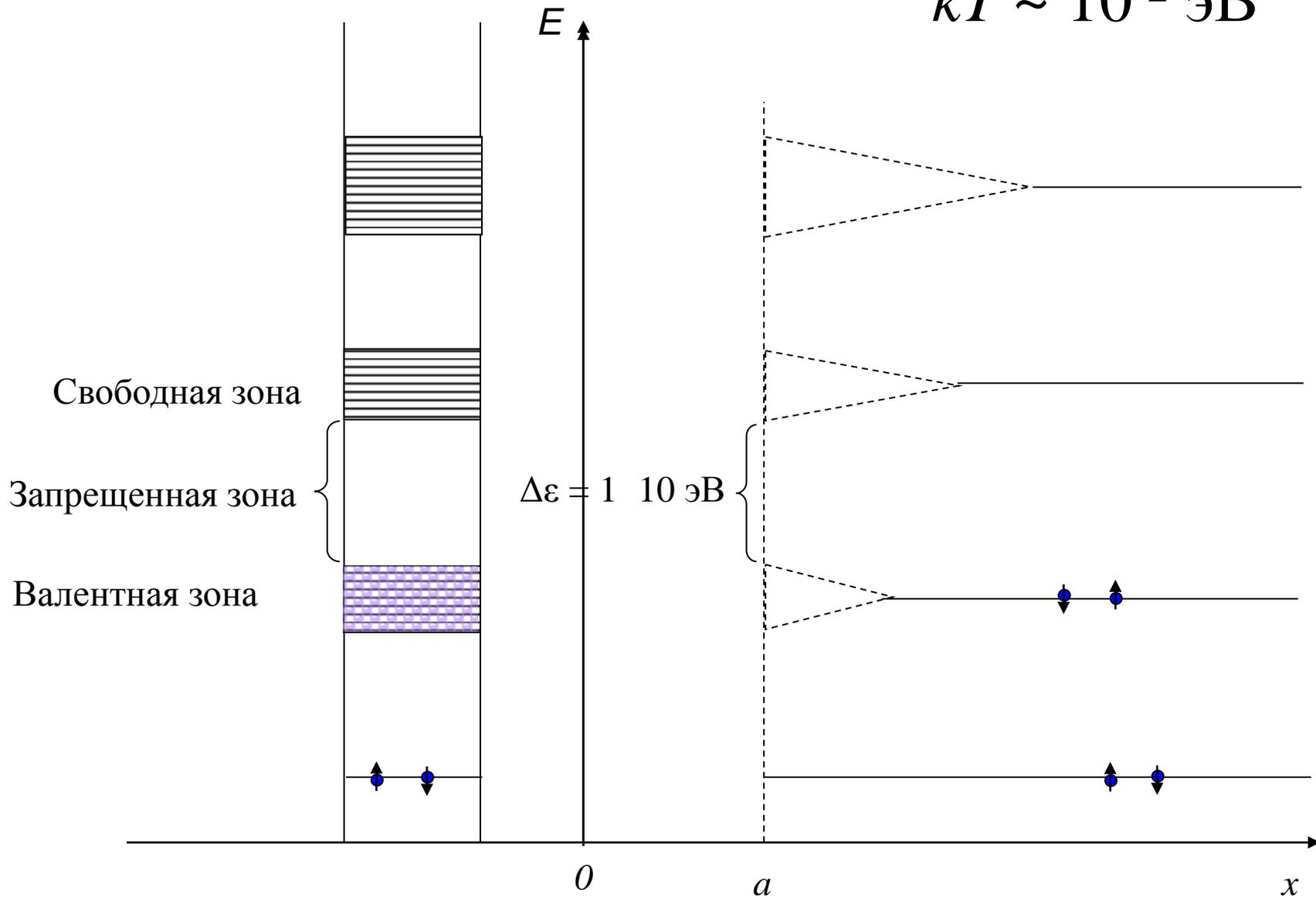


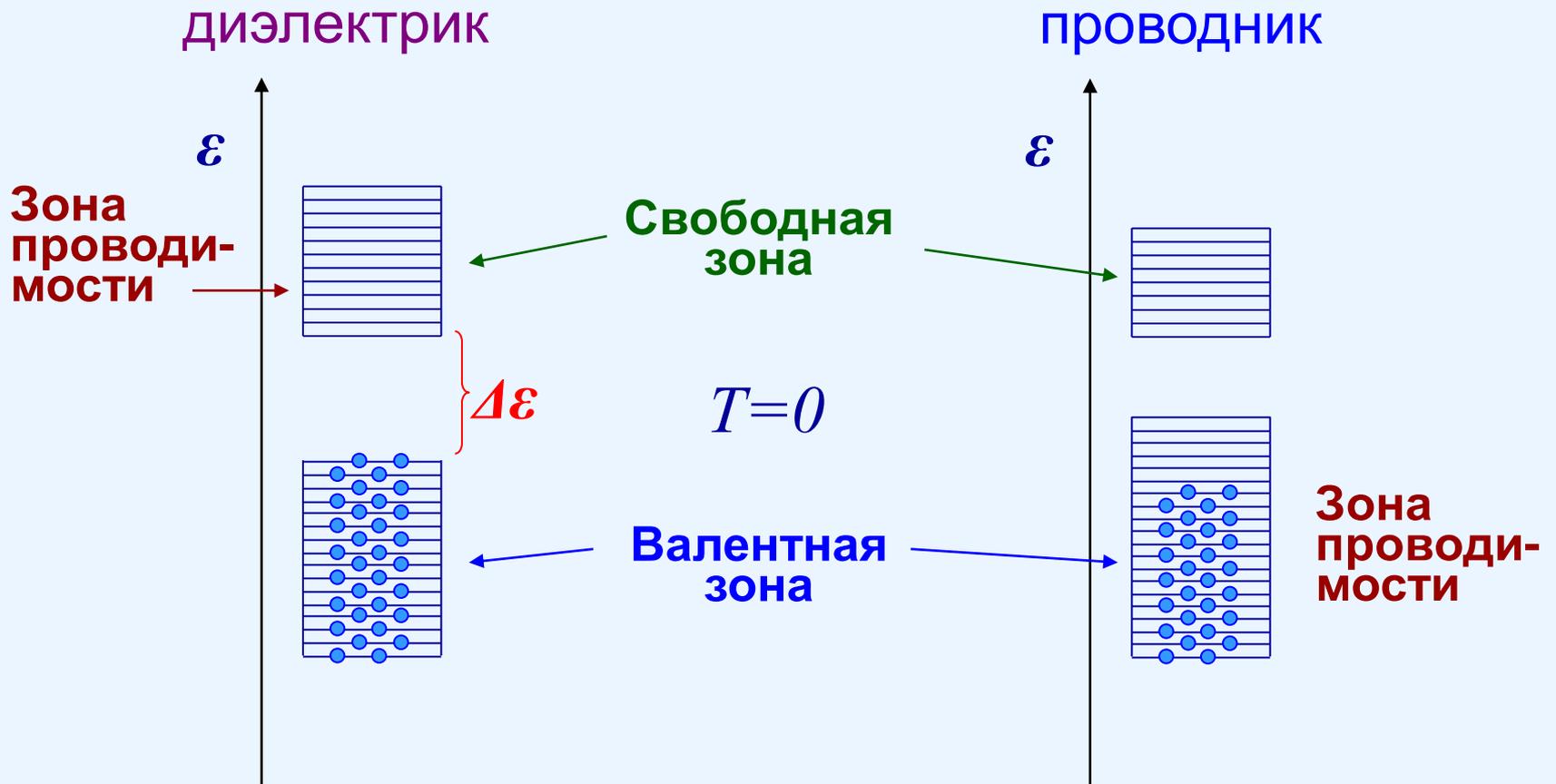
Металлы



Диэлектрики

$$kT \sim 10^{-2} \text{ эВ}$$





$\Delta\varepsilon$ – ширина запрещенной зоны (порядка нескольких электрон-вольт)

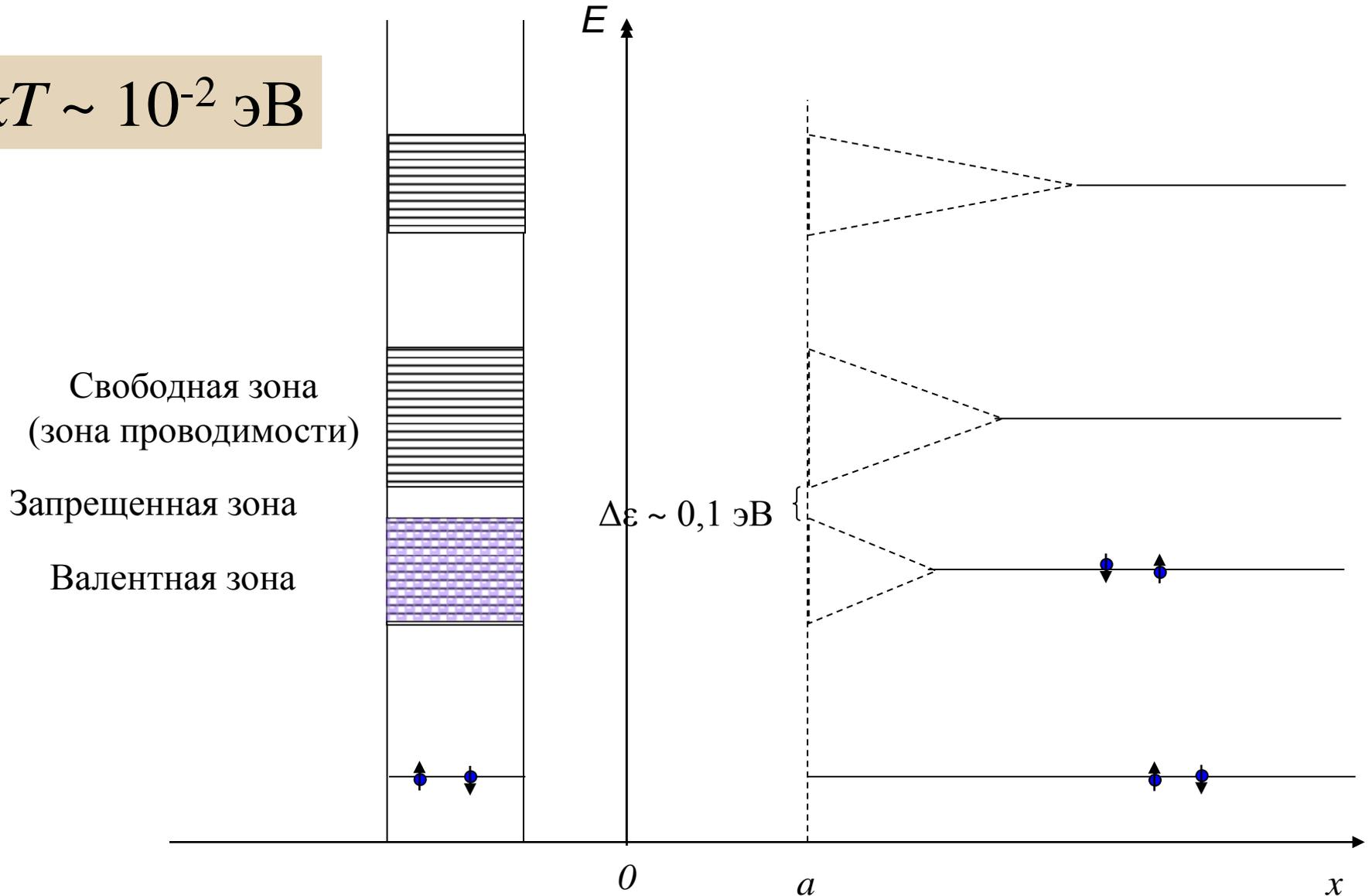
Условие массового термического перехода электронов в зону проводимости диэлектрика: $kT \sim \Delta\varepsilon$.

При $\Delta\varepsilon=5\text{эВ}$ $T \sim 10^5 \text{ K}$

Условие электрического пробоя диэлектрика:
 $E \sim 10^8 \text{ В/м}$

Полупроводники

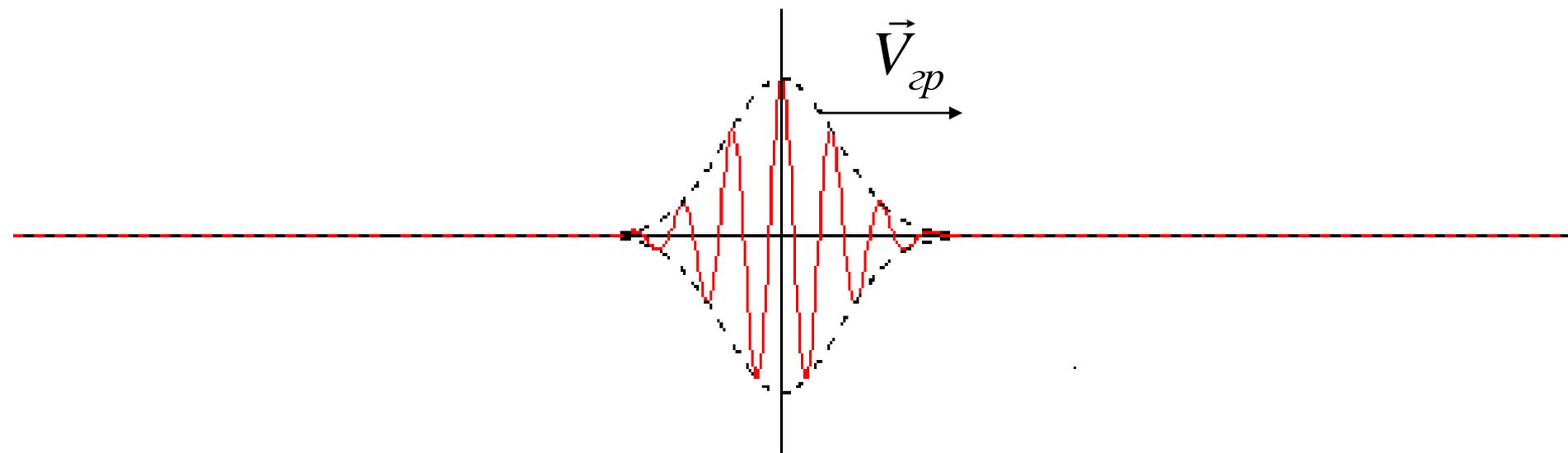
$$kT \sim 10^{-2} \text{ эВ}$$



Тема 5. Электроны в кристаллах

- 5.3. Динамика свободных электронов в кристаллах

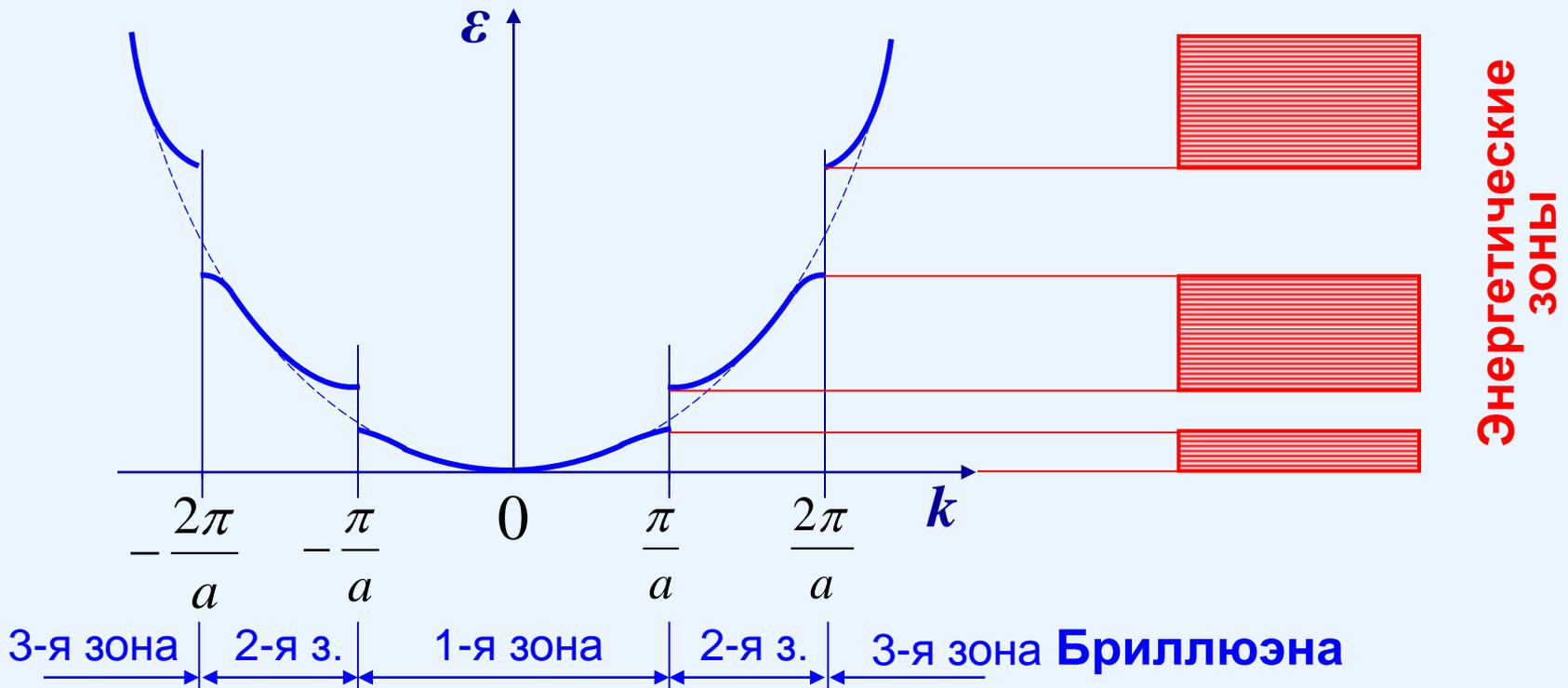
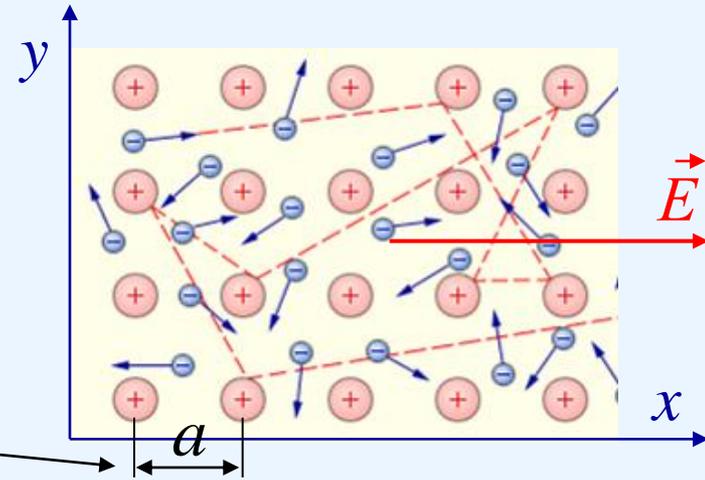
Волна де Бройля



2. Для электронов в кристалле:

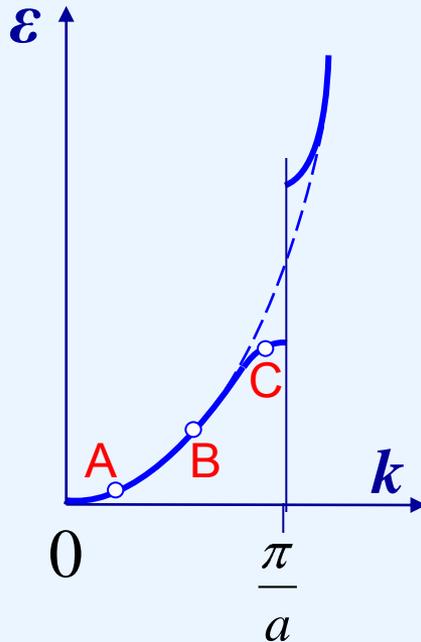
$$U(x) = U(x + a, y, z),$$

a – период решетки



$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2\varepsilon/dk^2}$$

$$m^* \vec{a} = e\vec{E}$$



В точке А: $\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}$

$m^* = m$ - электрон ведет себя как классический свободный

В точке В: $\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} = 0$

$m^* \rightarrow \infty$ - электрон не может быть ускорен

В точке С: $\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} < 0$

$m^* < 0$ - электрон ведет себя в электрическом поле подобно заряду противоположного знака (дырке)

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$$

