

УДК 371.315:539.2

Вадець Д. І., к.ф.-м.н., доцент, Дубчак В. А., к.ф.-м.н., доцент, Мороз М. В., к.ф.-м.н., доцент, Соляк Л. В., асистент (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне)

ЕЛЕМЕНТИ ЗОННОЇ ТЕОРІЇ ТВЕРДИХ ТІЛ

Стаття носить методичний характер подачі теоретичного матеріалу на лекціях студентам технічних ВНЗ нефізичного профілю.

Ключові слова: зонна теорія, методика викладання, напівпровідники.

У технічних ВНЗ нефізичного профілю на вивчення елементів фізики твердого тіла відводиться досить мало аудиторних занять. Тому постає питання, як у доступній формі подати цей матеріал, особливо у частині зонної теорії твердих тіл.

У існуючих загальноприйнятих посібниках і підручниках [1-5] зонна теорія подається або досить детально, або навпаки – не пояснюються причини виникнення енергетичних зон, не відзначено вклад окремих вчених у вивчення цієї теми. Це обумовлює **актуальність** обраної теми дослідження.

Об'єктом дослідження є зонна теорія твердих тіл.

Предмет дослідження: методика викладання матеріалу зазначеної теми курсу фізики.

Пропонується наступна методика подачі даного матеріалу. Відомо, що в ізольованому атомі енергетичний спектр електрона являє собою систему дискретних енергетичних рівнів, які в багатоелектронному атомі об'єднані в оболонки і шари, котрі заповнюються електронами на основі принципу Паулі. Це уявлення виникло на основі розв'язання рівняння Шредінгера для електрона в атомі.

Енергетичний спектр електрона в кристалі повинен визначитися на основі розв'язання рівняння Шредінгера для кристалу. Однак такий підхід є надзвичайно громіздким, оскільки число взаємодіючих атомів є надзвичайно великим ($N \sim 10^{23}$). Тому розглядають одноелектронне рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + u(\vec{r})\psi = E\psi, \quad (1)$$

де $u(\vec{r})$ – потенціальна енергія електрона в полі ядер ґратки і решти електронів. Вона має властивість періодичності: $u(\vec{r} + \vec{d}) = u(\vec{r})$, де

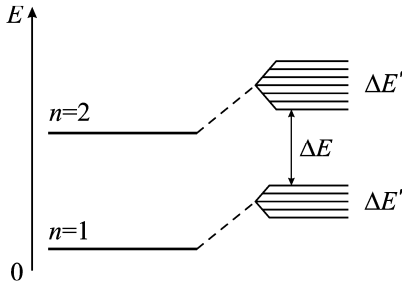


Рис. 1. Енергетичні рівні ізолюваного атома (ліворуч) та кристалу (праворуч)

розширеними проміжками ΔE (рис. 1). Залежність енергії електрона, який рухається в періодичному потенціальному полі ґратки, від хвильового вектора k ($E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$) ілюструє рис. 2, де суцільні ділянки графіка – дозволені зони енергії; розриви – заборонені зони. Виникнення

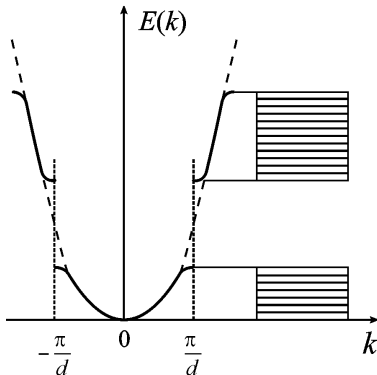


Рис. 2. Закон дисперсії $E(k)$ для електрона в періодичному потенціальному полі

цих зон пояснюється так: при зближенні N атомів до відстаней $\sim 10^{-10}$ м і утворенні кристалу кожний електронний рівень атома на основі тунельного ефекту зазнає N -кратного виродження (електрони колективізуються). Взаємодія між атомами (перекриття хвильових функцій) знімає це виродження, тому рівень зміщується і розщеплюється на N підрівнів. Так виникають зони дозволених рівнів енергій величиною $\Delta E' \sim (1-10)$ еВ, ширина яких зростає зі збільшенням номера зони; відстань між рівнями в зоні $\sim 10^{-22}$ еВ. Заборонені зони виникають тому, що при певних енергіях настає вульф-бреггівське відбивання електронних хвиль від кристаліграфічних площин і електрони з такими енергіями не можуть

\vec{d} – вектор трансляції ґратки. Навіть розв’язання цього одноелектронного рівняння є громіздкою задачею квантової теорії твердих тіл. Результат розв’язку (Блох, Пайерс, Бріллоен, 1928-1930 рр.) можна інтерпретувати наочно: дискретні електронні рівні атома в кристалі зміщуються і розщеплюються на зони дозволених рівнів енергій $\Delta E'$, розділених забороненими проміжками ΔE (рис. 1).

Виникнення цих зон пояснюється так: при зближенні N атомів до відстаней $\sim 10^{-10}$ м і утворенні кристалу кожний електронний рівень атома на основі тунельного ефекту зазнає N -кратного виродження (електрони колективізуються). Взаємодія між атомами (перекриття хвильових функцій) знімає це виродження, тому рівень зміщується і розщеплюється на N підрівнів. Так виникають зони дозволених рівнів енергій величиною $\Delta E' \sim (1-10)$ еВ, ширина яких зростає зі збільшенням номера зони; відстань між рівнями в

поширюватися в кристалі. З ростом номера енергетичного рівня шири-
на заборонених зон ΔE зменшується.

Розв'язуючи одноелектронне рівняння Шредінгера для кристалу
Блох (1928 р.) показав, що воно має наступні розв'язки:

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot u_k(\vec{r}), \quad (2)$$

де $u_k(\vec{r} + \vec{d}) = u_k(\vec{r})$, тобто, хвильова функція вільного електрона $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ в
кристалі модулюється в такт з періодичністю ґратки. Це веде до зміни
динамічних характеристик електрона в кристалі. Можна показати, що
швидкість електрона в кристалі у випадку ізотропного закону диспер-
сії:

$$v_{zp} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}. \quad (3)$$

Тоді при дії на електрон зовнішньої сили F він буде рухатись з прис-
коренням

$$a = \frac{dv_{zp}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE(k)}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \left(\frac{dE(k)}{dt} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \left(\frac{Fv_{zp} dt}{dt} \right) = \frac{F}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}. \quad (4)$$

На основі (4) з врахуванням другого закону Ньютона $a = F/m^*$, отри-

маємо: $m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E(k)/dk^2}$. Величину m^* називають *ефективною ма-*

сою електрона. Вона відображає той факт, що дія періодичного поля
ґратки на електрон міняє його інерційні властивості. Зокрема, біля сте-
лі зони $m^* < 0$. Тобто, частинка з від'ємним зарядом і від'ємною масою
веде себе як частинка з додатнім зарядом і додатньою масою: її назва-
ли "діркою". Ефективні маси електронів і дірок не співпадають з ма-
сою вільного електрона.

Зонна теорія дозволила дати аргументовану **класифікацію твер-**
дих тіл на метали, діелектрики і напівпровідники, різниця між якими
обумовлена структурою зон і характером заповнення зон електронами
(Вільсон, 1931 р.).

В енергетичному спектрі кристалів виділяють:

валентну зону (v-зону) – найвищу повністю заповнену електронами
зону, в утворенні якої беруть участь електрони з внутрішніх оболонок
вільних атомів;

зону провідності (c-зону) – найнижчу повністю або частково вільну
зону, в утворенні якої беруть участь зовнішні (валентні) електрони
атомів.

Якщо найвищий енергетичний рівень валентної зони позначити E_v ,

а найнижчий рівень зони провідності E_c , то ширина забороненої зони буде рівна: $\Delta E = E_c - E_v$.

Властивості електронів у повністю та частково заповнених зонах суттєво різняться. А саме, електрони повністю заповнених зон не можуть брати участі у перенесенні електричного струму. Навпаки, для електронів, що знаходяться в частково заповненій зоні існує можливість перейти на один з найближчих вільних енергетичних рівнів. У такому випадку зовнішнє електричне поле зумовлюватиме їх упорядкований рух, тобто появу електричного струму. До *металів* належать речовини, в яких зона провідності заповнена частково, або валентна зона і зона провідності перекриваються (рис. 3, а). В *напівпровідниках* ширина забороненої зони ΔE не перевищує кілька електрон-вольт (рис. 3, б). Якщо $T=0$ К і не діють ніякі випромінювання, такі речовини є ізоляторами. З підвищенням температури відбувається перехід електронів із v - у c -зону. Ймовірність переходу тим більша, чим вища температура і чим менша ширина забороненої зони. У випадку, якщо ширина забороненої зони перевищує кілька електрон-вольт, то теплової енергії електронів, що становить $\sim kT$, недостатньо для подолання такого значного енергетичного бар'єру (рис. 3, в). Такі речовини є *діелектриками*.

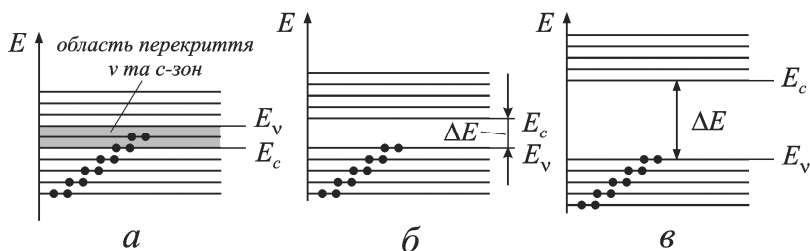


Рис. 3. Енергетичні діаграми металу (а), напівпровідника (б) та діелектрика (в)

Згідно уявлень зонної теорії метали проводять струм не тому, що в них є вільні електрони, а тому, що в них є електрони провідності, які можуть прискорюватися електричним полем. Діелектрики не проводять електричного струму, бо в них відсутні електрони провідності. В напівпровідниках провідність виникає лише під дією зовнішніх чинників (теплових, світлових тощо).

Введення домішок у кристал напівпровідника міняє його зонну діаграму енергетичних рівнів. Розрізняють донорні і акцепторні домішки. Атоми-донори постачають електрони в c -зону, тому донорні рівні (D) виникають у забороненій зоні поблизу дна зони провідності (рис. 4, а).

Атоми-акцептори захоплюють електрони з ν -зони і генерують в ній дірки (рис. 4, б), тому їх рівні (A) розміщені в забороненій зоні поблизу стелі валентної зони.

На основі зонної теорії виникає уявлення, що електрони провідності в ідеальному кристалі рухаються безперешкодно, тому провідність такого кристалу мала б бути безмежною. Ґратки реальних кристалів недосконалі, вони мають дефекти періодичності: статичні (домішки, вакансії тощо) і динамічні (теплові коливання ґратки). Зіткнення носіїв струму з цими дефектами зумовлюють появу опору і скінченної провідності. Згідно закону Ома

$$j = \sigma \varepsilon, \quad (5)$$

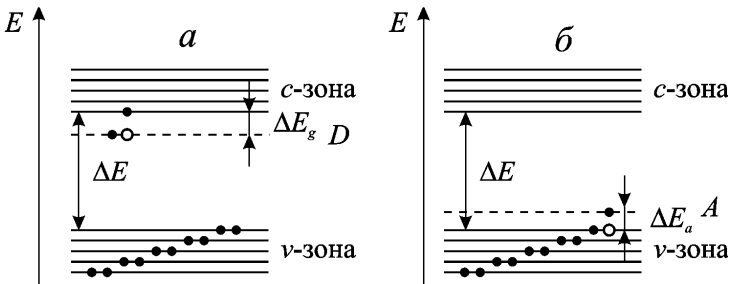


Рис. 4. Енергетичні діаграми донорного (а) та акцепторного (б) напівпровідника

де j – густина струму; σ – питома електропровідність; ε – напруженість зовнішнього електричного поля. У випадку уніполярної провідності (як у металах чи домішкових напівпровідниках):

$$\sigma = n e \mu, \quad (6)$$

а у випадку біполярної провідності (власні напівпровідники):

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = n_i e (\mu_n + \mu_p), \quad (7)$$

тут n – концентрація носіїв одного знаку; n_i – власна концентрація носіїв заряду; $\mu = v/\varepsilon$ – рухливість, зокрема μ_n – рухливість електронів; μ_p – рухливість дірок. Таким чином електропровідність металів і напівпровідників визначається величинами n та μ .

Можна показати, що у власному напівпровіднику концентрація носіїв

$n_i = A_i e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$, а в домішкових $n_n = B_n e^{-\frac{g}{2kT}}$ (для напівпровідників

n -типу) та $n_p = B_p e^{-\frac{g}{2kT}}$ (для p -типу); де A_i , B_n , B_p – множники, що слабо залежать від температури; ΔE – ширина забороненої зони; ΔE_g –

енергія активації донорів; ΔE_a – енергія активації акцепторів (рис. 4).

Квантово-механічний розрахунок рухливості носіїв струму в кристалах показує, що

$$\mu = \frac{e\langle\tau\rangle}{m^*}, \quad (8)$$

де $\langle\tau\rangle$ – середній проміжок часу між двома послідовними зіткненнями носіїв струму. Тому для уніполярної електропровідності

$$\sigma = \frac{ne^2\langle\tau\rangle}{m^*}. \quad (9)$$

У металах концентрація електронів n від температури не залежить, тому σ визначається величиною $\langle\tau\rangle$. При високих температурах ($T > \theta_d$, де θ_d – температура Дебая) інтенсивність зіткнень залежить від числа фононів (квантів теплових коливань ґратки). Враховуючи, що

$\langle\tau\rangle \sim 1/n_{\phi}$, а $n_{\phi} = \frac{c\tau}{h\nu_{\max}} \sim T$ (c – теплоємність кристалу), отримаємо

$\sigma \sim 1/T$ або питомий опір $\rho = 1/\sigma \sim T$, що і підтверджується на досліді.

Закономірність $\mu = \frac{e\langle\tau\rangle}{m^*}$ справедлива і для напівпровідників; у

випадку власного напівпровідника $\mu \sim T^{-\frac{3}{2}}$, у випадку домішкового $\mu \sim T^{\frac{3}{2}}$. Якщо врахувати експоненційну залежність концентрації носіїв від температури, одержимо:

$$\sigma = c \cdot e^{-\frac{\Delta E_0}{kT}}, \quad (10)$$

де c – коефіцієнт, що слабо залежить від температури; ΔE_0 – енергія активації провідності. У власному напівпровіднику $\Delta E_0 = \Delta E/2$, а в домішкових $\Delta E_0 = \Delta E_g/2$ або $\Delta E_0 = \Delta E_a/2$.

Зазвичай домішкова провідність напівпровідників помітно проявляється при низьких температурах; при високих температурах вона перекривається власною провідністю.

Електрони провідності в металі можна розглядати як ідеальний газ, який описується статистикою Фермі – Дірака:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}, \quad (11)$$

де E – енергія квантового стану, E_F – енергія Фермі. Поведінка цієї функції різна при різних температурах. Зокрема, при $T=0$ вона має вигляд “сходинок” (рис. 5, суцільна лінія). Таким чином, енергія Фермі $E_F(0)$

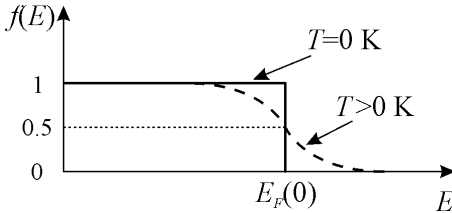


Рис. 5. Функція розподілу Фермі-Дірака для металу

– це максимальна енергія станів, які заповнені електронами при $T=0$. При $T > 0$ тепловий рух переводить частину електронів на незайняті енергетичні рівні з більшою енергією. Перейти на вільний енергетичний рівень можуть лише електрони, енергія яких

близька до рівня Фермі. Різка межа між заповненими та вільними енергетичними рівнями металу перетворюється в перехідну смугу шириною кілька kT (пунктирна лінія рис. 5).

При $E - E_F \gg kT$ функція розподілу Фермі – Дірака переходить у функцію розподілу Больцмана:

$$f(E) = e^{-\frac{E-E_F}{kT}} = A(T) \cdot e^{-\frac{E}{kT}}. \quad (12)$$

Ймовірність заповнення рівнів у зоні провідності для напівпровідників визначається саме цією статистикою.

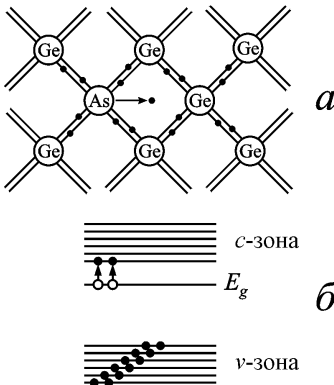


Рис. 6. Двовимірна модель ґратки (а) та енергетична діаграма (б) при легуванні германію миш'яком

Типовими прикладами власних напівпровідників є чисті Ge і Si. Кожний такий атом оточений чотирма сусідами, зв'язок між якими забезпечується двома валентними електронами з протилежними спінами. При $T=0$ К всі валентні електрони є зв'язаними, тому v -зона повністю заповнена, а c -зона вільна. При $T > 0$ К відбувається руйнування хімічних зв'язків між атомами. Як наслідок – електрон може брати участь у провідності. Вакансія, що виникла, заповнюється електроном сусіднього зв'язку, тобто теж бере участь у провідності. На зонній діаграмі це зображається появою електронів у зоні провідності і дірок у валентній

зоні.

Якщо в ґратку чистого Ge ввести домішкові атоми As, то кожний атом миш'яку, що має п'ять валентних електронів, утворює ковалентні зв'язки лише з чотирма атомами германію. П'ятий валентний електрон As є зайвим для зв'язків з атомами Ge. Під впливом незначних теплових збуджень він втрачає зв'язок зі своїм атомом і приймає участь у провідності *n*-типу (рис. 6, а, б).

Якщо в ґратку з чистого Ge потрапляють атоми 3-валентного In, то один неупорядкований зв'язок з атомом Ge формується за рахунок теплового збудження електрона з сусіднього зв'язку. При цьому виникає дірка, яка обумовлює провідність *p*-типу.

Висновки. Користуючись мультимедійними технологіями або унаочненнями (прозірки рисунків, схеми, плакати), а також описаною вище методикою подачі матеріалу, можна суттєво зекономити час на висвітлення зазначеної теми курсу фізики.

1. Епифанов Г. И. Физика твердого тела / Г. И. Епифанов.– М. : Высшая школа, 1965. – 276 с. 2. Бушманов Б. Н. Физика твердого тела / Бушманов Б. Н., Храмов Ю. А. – М. : Высшая школа, 1971. – 224 с. 3. Савельев И. В. Курс общей физики / И. В. Савельев.– М. : Наука, 1979. – Т.3.–304 с. 4. Трофимова Т. И. Курс физики / Т. И. Трофимова. – М. : Высшая школа, 1985. – 432 с. 5. Детлаф А. А. Курс физики / Детлаф А. А., Яворский Б. М. – М. : Высшая школа, 1989. – 608 с.

Рецензент: д.т.н., професор Древецький В. В. (НУВГП)

Vadets D. I., Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Dubchak V. A., Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Moroz M. V., Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Soliak L. V., Assistant (National University of Water Management and Nature Resources Use, Rivne)

ELEMENTS OF BAND THEORY OF SOLIDS

The methodical character of presenting theoretical lecture material for the students of higher educational technical nonphysical establishments are considered in this article.

Keywords: the band theory, teaching methodology, semiconductors.

Вадець Д. И., к.ф.-м.н., доцент, Дубчак В. А., к.ф.-м.н., доцент, Мороз М. В., к.ф.-м.н., доцент, Соляк Л. В., ассистент
(Национальный университет водного хозяйства и природопользования, г. Ровно)

ЭЛЕМЕНТЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Статья носит методический характер подачи теоретического материала на лекциях студентам технических ВУЗов нефизического профиля.

Ключевые слова: зонная теория, методика обучения, полупроводники.
