

## ГЛАВА 1

# СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ, ЗОННАЯ МОДЕЛЬ МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Для решения задач этой главы необходимы элементарные сведения из квантовой механики и квантовой статистики.

В классической механике для описания в какой-то момент времени системы материальных точек достаточно задать значения координат и компонент импульса каждой из материальных точек.

В квантовой механике даже для одной частицы одновременное определение координаты и соответствующей ей компоненты импульса принципиально невозможно из-за соотношения неопределенностей Гейзенберга. Наиболее полное описание системы в квантовой механике дается всего **одной** комплексной функцией, независимо от того, состоит система из множества частиц или из одной частицы.

Эта функция называется по-разному — и функцией состояния системы, и амплитудой вероятности, и волновой функцией. Последнее название, бывшее исторически первым, сейчас выходит из употребления. Функция состояния зависит от времени и от координат всех частиц системы и является решением одного, хотя довольно сложного, волнового уравнения Шредингера.

Функция состояния системы задана в абстрактном  $3N$ -мерном пространстве (где  $N$  — число частиц в системе) и не является непосредственно измеряемой физической величиной. С помощью функции состояния можно вычислить конкретные значения других измеряемых физических величин, например, координаты. Однако обнаружение в эксперименте этих конкретных значений имеет лишь вероятностный, статистический характер.

Даже параметры этой функции состояния системы, названные координатами частиц системы, понимать надо иначе, чем в классической физике. Это не то место в пространстве, где находится частица, а место, где она с некоторой вероятностью может быть обнаружена.

Физический смысл функции состояния системы (амплитуды вероятности системы) легче представить в простейшем случае, когда речь идет о движении вдоль оси  $X$  всего двух частиц с различными массами  $m$  и  $M$ . Функция состояния системы в этом случае будет иметь вид

$$\Psi(x_m, x_M, t). \quad (1.1)$$

Вероятность в момент времени  $t_0$  обнаружить первую частицу вблизи точки  $x_{m0}$  в промежутке  $x_{m0} \text{ ч } x_{m0} + dx_{m0}$ , а вторую частицу вблизи точки  $x_{M0}$  в промежутке  $x_{M0} \text{ ч } x_{M0} + dx_{M0}$  пропорциональна произведению интервала  $dx_m$ , интервала  $dx_M$  и квадрата модуля значения комплексной функции состояния системы  $\Psi(x_m, x_M, t)$  ( $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ , где  $\Psi^*$  — функция, комплексно-сопряженная с  $\Psi$ ):

$$dP(x_{m0}, x_{M0}, t_0) = \Psi(x_{m0}, x_{M0}, t_0) \Psi^*(x_{m0}, x_{M0}, t_0) dx_m dx_M. \quad (1.2)$$

Уравнение Шредингера для этой системы частиц имеет вид

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_m^2} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_M^2} - U(x_m, x_M, t) \Psi. \quad (1.3)$$

Здесь  $U(x_m, x_M, t)$  — потенциальная энергия, учитывающая все взаимодействия, в которых участвуют частицы, а

$$\hbar = h / 2\pi, \quad (1.4)$$

где  $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с — постоянная Планка.

Уравнение легко обобщается на большее количество координат и любое число частиц. При этом в сумме справа добавляются новые члены, содержащие частные производные по остальным координатам и аналогичные слагаемые, соответствующие новым частицам системы.

В кубическом сантиметре твердого тела находится до  $10^{23}$  атомов. Число электронов может быть больше на один-два порядка. Ясно, что без упрощающих предположений ни записать, ни решить уравнение Шредингера с таким количеством переменных невозможно.

Суть некоторых упрощений можно показать на примере системы из двух частиц. Оказывается, если потенциальная энергия  $U(x_m, x_M)$  зависит только от координат частиц  $x_m, x_M$  и не зависит от времени, то решение уравнения Шредингера может быть найдено в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от времени, другая — только от координат частиц:

$$\Psi(x_m, x_M, t) = \varphi(x_m, x_M) f(t). \quad (1.5)$$

Если подставить  $\Psi(x_m, x_M, t)$  в уравнение (1.3), а затем поделить обе части уравнения (1.3) на  $\Psi(x_m, x_M, t)$ , то становится очевидным, что правая часть уравнения Шредингера зависит только от координат частиц, а левая часть — только от времени. Поскольку уравнение (1.3) справедливо для любых  $t, x_m$  и  $x_M$ , то обе части равны одной и той же константе  $E$ , имеющей размерность энергии. Эту константу называют полной энергией системы.

В результате получаем два дифференциальных уравнения:

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E, \quad (1.6)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_m^2} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_M^2} + U(x_m, x_M) \varphi = E \varphi. \quad (1.7)$$

Непосредственно интегрируя уравнение (1.6), получим

$$f(t) = \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) = \exp(-i\omega t). \quad (1.8)$$

Комплексная функция  $f(t)$  гармонически с частотой  $\omega$  зависит от времени. Модуль функции  $f(t)$  равен единице. Квадрат модуля функции состояния системы  $|\Psi(t, x_m, x_M)|^2$  пропорционален вероятности обнаружить частицу в какой-либо области пространства и не зависит от времени.

Координатное уравнение Шредингера (1.7) содержит в качестве параметра полную энергию системы  $E$ . Значения энергии  $E$ , при которых это уравнение имеет решения, называют собственными значениями уравнения Шредингера. Решения должны удовлетворять граничным условиям и физическому смыслу. Соответствующие им волновые функции называются собственными функциями, или квантовыми состояниями. Такие состояния, имеющие определенную энергию, называются стационарными. Именно они будут рассматриваться в дальнейшем.

В одних случаях решения уравнения (1.7) существуют лишь для дискретных значений энергии системы  $E_n$ . При этом говорят о дискретном наборе разрешенных квантовых состояний. В других случаях решения уравнения (1.7) существуют для любых значений энергии  $E$ . Тогда говорят о непрерывном спектре квантовых состояний.

Несколько квантовых состояний, имеющих одно и то же значение энергии, называются энергетическим уровнем. Эти

состояния различаются набором квантовых чисел — параметров, которые появляются в ходе решения координатного уравнения Шредингера. Например, стационарное квантовое состояние электрона в атоме водорода определяется всеми четырьмя квантовыми числами, но энергия  $E$  связана лишь с главным квантовым числом.

Если частицы в системе не взаимодействуют между собой, то входящая в уравнение Шредингера потенциальная энергия может быть представлена в виде суммы потенциальных энергий частиц во внешнем поле:

$$U(x_m, x_M) = U_m(x_m) + U_M(x_M). \quad (1.9)$$

В этом случае координатная функция состояния системы  $\varphi(x_m, x_M)$  оказывается произведением координатных функций состояния отдельных частиц:

$$\varphi(x_m, x_M) = \varphi_m(x_m) \varphi_M(x_M), \quad (1.10)$$

каждая из которых является решением соответствующего одночастичного уравнения Шредингера со своей потенциальной энергией.

Волновая функция системы двух не взаимодействующих частиц оказывается **не суммой** волновых функций отдельных частиц («отдельных волн»), а **их произведением**. Такой результат покажется менее неожиданным, если вспомним, что вероятность одновременного наступления двух статистически независимых событий дается **произведением** вероятностей наступления каждого события в отдельности. А ведь квадрат модуля функции состояния определяет вероятность обнаружить частицу в определенном объеме пространства. Этот пример можно обобщить на случай большего числа не взаимодействующих частиц.

Решение уравнения Шредингера, описывающего поведение сразу всех электронов и атомных ядер в твердом теле, невозможно без ряда упрощающих предположений. Обычно решают задачу о движении одного электрона в «усредненном» поле

атомных ядер и всех остальных электронов. Решения такого упрощенного уравнения определяют набор квантовых состояний электрона. Каждое из них характеризуется значением энергии и некоторыми другими квантовыми параметрами, которые определяются условиями задачи, в частности, ее симметрией. Важно отметить, что квантовые параметры в твердом теле не связаны с квантовыми числами в атоме водорода. Последние характерны исключительно для сферически симметричной задачи.

Для простейших задач о движении электрона приведем лишь решения координатного (стационарного) уравнения Шредингера. Масса электрона будет обозначаться  $m$ ,  $e$  — абсолютная величина его заряда.

Рассмотрим движение электрона, движущегося вдоль оси  $x$  в области, где потенциальная энергия постоянна:  $U(x) = U$ . Уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + U\varphi = E\varphi. \quad (1.11)$$

Общее (с учетом зависимости от времени) решение уравнения Шредингера (1.3) имеет вид

$$\Psi = B \exp[i(kx - \omega t)] + C \exp[i(-kx - \omega t)], \quad (1.12)$$

где  $k = \sqrt{2m(E - U)} / \hbar$ , а постоянные  $B$  и  $C$  определяются из условий задачи.

Если  $E > U$ , то решение является суммой двух волн, распространяющихся вдоль оси  $x$  в противоположных направлениях. Частоты волн одинаковы. Длина волны  $\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/p$  — та же, что была предсказана де Бройлем для частицы с импульсом  $p$ . Если  $E < U$ , то корень в параметре  $k$  становится мнимой величиной. Вместо него удобно использовать параметр  $\kappa = ik$ . В этом случае координатная зависимость решения уравнения Шредингера будет иметь вид

$$\varphi = F \exp[\kappa x] + G \exp[-\kappa x] \quad (1.13)$$

то есть зависимость от координаты  $x$  становится суммой экспоненциально возрастающей и убывающей функций. Постоянные  $F$  и  $G$  определяются из условий задачи.

Пользуясь формулами (1.12) и (1.13), можно решать задачи об отражении частицы, падающей на прямоугольный потенциальный барьер. Для этого частные решения, справедливые лишь для своей отдельной области, нужно правильно «сшить» на границе областей с разной потенциальной энергией, т.е. подобрать «правильные» параметры  $B$ ,  $C$ ,  $F$ ,  $G$  в общих решениях. При «сшивке» требуется обеспечить непрерывность как функции состояния, так и ее производной по координате.

При рассмотрении движения частицы в прямоугольной потенциальной яме приходится «сшивать» вышеприведенные решения уже на двух границах. Из четырех уравнений, связанных с непрерывностью функции состояния и ее производной, находятся разрешенные состояния энергии частицы в прямоугольной яме и вид самой функции состояния.

Если яму считать бесконечно глубокой, то вне ямы и на ее краях волновая функция равна нулю. На ширине ямы  $L$  укладывается целое число половинок соответствующей длины волны де Бройля, так что

$$\varphi_n = B \sin\left(n \frac{\pi x}{L}\right), \quad (1.14)$$

здесь подразумевается местонахождение ямы  $0 \leq x \leq L$ .

Для целых чисел  $n = 1, 2, 3, \dots$  получается дискретный набор собственных значений энергии

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (1.15)$$

Энергия уже не может принимать любое значение. Разрешены только вполне определенные дискретные состояния. Дискретные энергетические уровни появляются всякий раз, когда движение электрона ограничено какой-то областью пространства.

При рассмотрении падения частицы на прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины квантовая механика предсказывает неизвестный в классической физике эффект — прохождение частицы сквозь потенциальный барьер, даже если полная энергия частицы меньше высоты этого барьера.

Расчет прозрачности потенциального барьера, то есть вероятности обнаружить падающую на барьер частицу за барьером, делается по той же схеме — «сшиваются» на двух границах барьера известные общие решения уравнения Шредингера для трех областей пространства — предбарьерной, внутрибарьерной и забарьерной. Из четырех уравнений на двух границах находятся коэффициент отражения частицы от барьера и коэффициент прозрачности барьера  $D$ .

В качестве коэффициента прозрачности барьера  $D$  естественно взять отношение — во сколько раз вероятность обнаружить частицу за барьером меньше вероятности обнаружить ее перед барьером в падающей на барьер волне. Это отношение будет просто равно квадрату модуля волновой функции, оказавшейся за барьером, если амплитуду волны, падающей на барьер, принять за единицу. Простой расчет показывает, как коэффициент прозрачности барьера зависит от энергии падающей частицы  $E$ , высоты барьера  $U$  и его ширины  $L$ :

$$D(E) = \left[ 1 + \frac{\text{sh}^2 \left( \frac{L}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} \right)}{4 \left( \frac{E}{U} \right) \left( 1 - \frac{E}{U} \right)} \right]^{-1}. \quad (1.16)$$

Прозрачность барьера  $D$  экспоненциально убывает с ростом ширины барьера  $L$  (в случае малого коэффициента прозрачности). Такая зависимость справедлива и для барьеров более сложной формы.

При рассмотрении поведения системы электронов в твердом теле приходится использовать различные упрощающие

приближения. В простейшем случае все твердое тело представляется как имеющая те же размеры трехмерная потенциальная яма с гладким дном (так называемая модель Зоммерфельда). Энергия электрона, покоящегося на дне такой ямы, меньше, чем энергия вакуума — энергия электрона, покоящегося у поверхности тела снаружи. Глубина потенциальной ямы  $U$  определяется усредненным полем положительных ионов решетки и всех электронов.

Так как все электроны считаются невзаимодействующими, то решение уравнения Шредингера для системы электронов сведется к решению уравнения Шредингера для одного электрона, движущегося в этом усредненном поле. Но найденные решения, «разрешенные квантовой механикой» стационарные состояния электрона, относятся ко всей системе электронов. И если одно квантовое состояние занято электроном, то в другом квантовом состоянии может находиться другой электрон и т.д.

В каждом состоянии не может находиться более одного электрона. Этот запрет — принцип Паули — в квантовой механике действует для всех частиц с полуцелым спином (называемых фермионами) и не действует для частиц с нулевым или целым спином (называемых бозонами). Важно отметить, что здесь состояния с одной и той же энергией, но отличающиеся лишь ориентацией спина, считаются разными состояниями.

Квантовая теория твердого тела показывает, что функции состояния электрона, находящегося в ограниченном пространстве объема твердого тела, похожи на функции состояния свободного электрона, но имеют лишь дискретный набор разрешенных значений компонент волнового вектора и компонент импульса.

Если обозначить размеры твердого тела как  $L_x, L_y, L_z$ , то квантовые состояния электрона, находящегося в этом объеме, таковы, что разрешены только волновые вектора  $k$  с компонентами

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z}, \quad (1.17)$$

где  $n_x, n_y, n_z$  — целые положительные и отрицательные числа.

Из взаимосвязи между компонентой волнового вектора  $k_x$  и соответствующей компонентой импульса  $p_x = \hbar k_x$  следует, что произведение неопределенности в координате по оси  $x$  электрона (где-то внутри интервала длиной  $L_x$ ) на различие в импульсе у двух ближайших к друг другу квантовых состояний электрона в твердом теле ( $\Delta p_x = 2\pi\hbar/L_x$ ) совпадает с известным соотношением неопределенностей Гейзенберга  $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$ , а именно:  $L_x (2\pi\hbar/L_x) = 2\pi\hbar = h$ .

Если электрон локализован в объеме  $V = L_x L_y L_z$ , то в пространстве импульсов  $[p_x, p_y, p_z]$  ячейке импульсного пространства объемом  $h^3/(L_x L_y L_z)$  будут соответствовать два квантовых состояния, отличающиеся тем, что спины электрона в них противоположно ориентированы. Пространство импульсов электрона оказывается равномерно разбито на эти элементарные ячейки, определяющие разрешенные квантовые состояния. Так как энергия электрона по-прежнему связана с импульсом соотношением  $E = p^2/2m$ , то можно понять, что распределение количества квантовых состояний по шкале энергии будет не равномерным, а возрастающим. Легко показать, что количество разрешенных квантовых состояний, чья энергия лежит в интервале  $(E; E + dE)$ , определяется выражением

$$dS = V 4\pi \left( \frac{\sqrt{2m}}{h} \right)^3 \sqrt{E} dE = 6,81 \cdot 10^{21} V \sqrt{E} dE, \quad (1.18)$$

где  $V$  — объем кристалла в  $\text{см}^3$ , а  $E$  — энергия в эВ. Внесистемная единица энергии  $1 \text{ эВ} = 1,60219 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$  — энергия, которую приобретает электрон, пройдя ускоряющую разность потенциалов 1 вольт.

Функция  $s(E) = 4\pi(\sqrt{2m}/h)^3 \sqrt{E}$  называется энергетической плотностью числа состояний. С ее помощью можно вычислять распределение электронов по шкале энергии при разных температурах.

При температуре, стремящейся к абсолютному нулю, все электроны в системе занимают самые нижние энергетические состояния, которые можно заполнить не нарушая принципа Паули. В пространстве импульсов эти состояния будут лежать внутри сферы. Центр сферы расположен в точке с нулевым значением импульса. Но с повышением температуры распределение электронов по энергетическим уровням (группам квантовых состояний с одной и той же энергией) меняется. Закономерности распределения электронов по квантовым состояниям с различными значениями энергии устанавливает статистическая физика.

Квантовая статистическая физика доказывает, что в системе, находящейся в термодинамическом равновесии с температурой  $T$ , все квантовые состояния с одним и тем же значением энергии  $E$  заполнены электронами одинаково. Среднее число электронов в одном квантовом состоянии зависит от энергии квантового состояния, температуры и параметров системы, например, сколько в системе электронов и как расположены по шкале энергии квантовые состояния. Соответствующая формула называется распределением Ферми–Дирака:

$$n(E) = \left[ \exp\left( \frac{E - \mu}{kT} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (1.19)$$

Здесь  $T$  — абсолютная температура;  $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К} = (11600)^{-1} \text{ эВ/К}$  — постоянная Больцмана;  $\mu$  — некий нормировочный параметр, имеющий размерность энергии и называемый химическим потенциалом (электрохимическим потенциалом, уровнем Ферми, энергией Ферми).

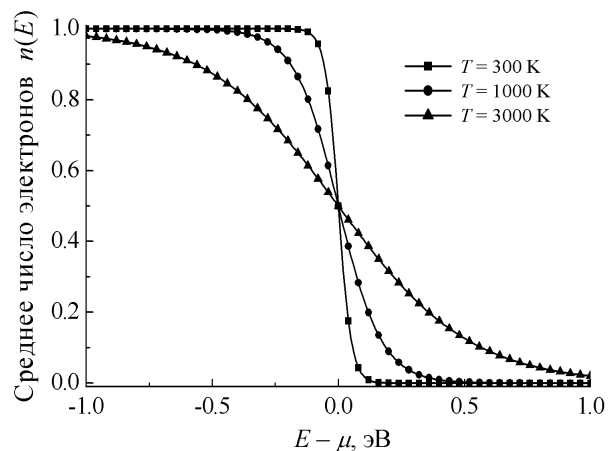


Рис. 1.1. Функция распределения Ферми–Дирака при различных температурах

Уровень Ферми сам зависит от температуры и от параметров системы, в частности, от количества электронов в ней. Он может быть найден из условия, что сумма по всем квантовым состояниям значений среднего числа электронов, находящихся в каждом из них, должно равняться полному числу электронов в системе. Как видно из формулы распределения Ферми–Дирака, среднее число электронов в любом квантовом состоянии не превышает единицы.

В металле при температуре, стремящейся к абсолютному нулю, электроны заполняют все квантовые состояния с энергией вплоть до уровня  $\mu_0$ , называемого нулевым уровнем Ферми. Все квантовые состояния с энергией выше уровня  $\mu_0$  свободны от электронов. Распределение Ферми–Дирака приобретает вид ступеньки. Отсюда вытекает, что нулевой уровень Ферми совпадает с энергетическим состоянием, которое заполнено лишь частично. Если такого состояния нет, то нулевой уровень Ферми лежит строго посередине между последним заполненным энергетическим уровнем и первым пустым уровнем.

В статистической физике доказывается, что уровень Ферми обладает важным свойством. Если система находится в тепловом равновесии и состоит из нескольких подсистем, то все уровни Ферми, вычисленные для каждой подсистемы, должны совпадать.

Если же система состоит из электронов, обладающих отрицательным зарядом  $-e$ , и при этом между двумя подсистемами (телами) приложено внешнее напряжение  $V$ , то уровень Ферми тела, связанного с плюсом источника напряжения, понижается, а другого тела — повышается. При этом уровни Ферми первого и второго тела отличаются на величину  $eV$ .

Зная количество электронов в единице объема тела и энергетическую плотность числа квантовых состояний, можно получить значение энергии Ферми  $\mu_0$  в металлах при  $T \rightarrow 0$ :

$$\mu_0 = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} = 0,360 \cdot 10^{-14} n^{\frac{2}{3}}, \quad (1.20)$$

здесь  $m$  — масса электрона,  $m = 9,11 \cdot 10^{-28}$  г,  $n$  — концентрация свободных электронов в  $\text{см}^{-3}$ :

$$n = z \frac{N_A \rho}{M}, \quad (1.21)$$

где  $z$  — число свободных электронов на атом;  $N_A$  — число Авогадро,  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$  моль $^{-1}$ ;  $\rho$  — плотность металла,  $M$  — масса грамм-атома металла.

$$\mu_0 = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3}{8\pi} z \frac{N_A \rho}{M} \right)^{\frac{2}{3}} = 26 \left( \frac{\rho}{M} \right)^{\frac{2}{3}} \text{ эВ}, \quad (1.22)$$

если  $\rho / M$  выражено в  $\text{см}^{-3}$ , а  $z$  считать равным единице.

В потенциальном ящике с гладким дном зависимость разрешенных значений энергии от разрешенных значений компонент волнового вектора  $E_n(k_n)$  оказывается точками на параболической зависимости энергии от компонент волнового векто-

ра  $E = p^2 / 2m = (\hbar k)^2 / 2m$  для свободного электрона в пустом пространстве.

Модель Зоммерфельда можно уточнить, принимая во внимание периодичность в кристалле поля атомных ядер. В результате на графике квазинепрерывных разрешенных значений энергии  $E_n(k_n)$  появятся разрывы для тех значений компонент волнового вектора, которые были кратны  $\pi/a$ , где  $a$  — период кристаллической решетки. В энергетическом спектре квантовых состояний появились зоны разрешенных значений энергий и запрещенные зоны, в которых нет разрешенных квантовых состояний.

В зонах разрешенных значений энергии вблизи края зоны зависимость приращения значения энергии от приращения волнового числа описывается формулой, похожей на  $E = p^2 / 2m = (\hbar k)^2 / 2m$ , но вместо массы электрона  $m$  в ней стоит другой параметр — эффективная масса.

В зависимости от того, как заполнены зоны при температуре, близкой к абсолютному нулю, твердые тела делятся на металлы, полупроводники и диэлектрики. Если при абсолютном нуле температуры имеется зона, заполненная электронами лишь частично, то она называется зоной проводимости, а такое твердое тело является металлом. Если последняя (в порядке возрастания энергии) зона заполнена полностью, то она называется валентной, а следующая пустая — зоной проводимости. Такие материалы являются полупроводниками и диэлектриками. Различие между ними довольно условно. Полупроводниками считаются материалы, у которых ширина запрещенной зоны не превышает 2 эВ.

Для понимания дальнейших разделов пособия следует учесть, что высота потенциального барьера на границе твердое тело–вакуум зависит от приложенной напряженности электрического поля.

Из электростатики известно, что электрон, находящийся вблизи металлической поверхности с нулевым потенциалом, притягивается к этой поверхности. Соответствующая работа

этих сил по переносу электрона из бесконечности равна  $U = e^2/4x$  (СГСЭ), где  $x$  — расстояние между электроном и поверхностью тела. Так как потенциальный барьер образуется за счет работы сил электростатического изображения, то потенциальный барьер принимает закругленную форму (рис. 1.2а).

Приложенное к поверхности тянущее электрическое поле напряженностью  $\varepsilon$  «наклоняет» горизонтальную ступеньку потенциального барьера; потенциальная энергия свободного электрона в вакуумном промежутке становится равной  $U = -e \varepsilon x$  (рис. 1.2б).

Одновременный учет этих эффектов приводит к тому, что потенциальный барьер на границе понижается на величину  $\Delta\varphi = e \sqrt{\varepsilon\varepsilon}$  (СГСЭ). Это понижение называется эффектом Шоттки и наиболее заметно в явлениях термоэмиссии и автоэмиссии электронов. Если напряженность поля  $\varepsilon$  выразить в В/см, а понижение потенциального барьера в эВ, то

$$\Delta\varphi = 3,8 \cdot 10^{-4} \sqrt{\varepsilon}. \quad (1.23)$$

Решение приведенных ниже задач основано на следующих рабочих формулах. Значение энергии Ферми  $\mu_T$  в металле при температуре  $T$ , отличной от нуля, приближенно связано со значением уровня Ферми для нулевой температуры следующим образом:

$$\mu_T \approx \mu_0 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right]. \quad (1.24)$$

Иногда удобно ввести новый параметр — температуру вырождения

$$T_0 = \frac{\mu}{k} \approx \frac{\mu_0}{k}. \quad (1.25)$$



## ЗАДАЧИ

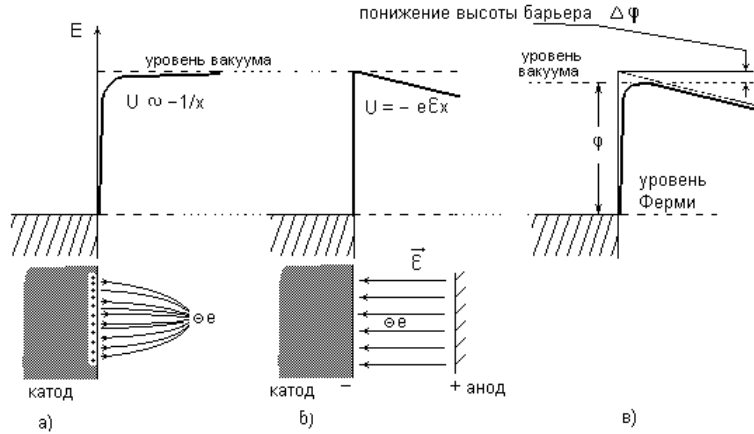


Рис. 1.2

- а) изменение формы потенциального барьера (закругление), вызванное силами электростатического изображения;
- б) изменение формы потенциального барьера (наклон ступеньки), вызванное внешним электрическим полем;
- в) понижение высоты потенциального барьера при одновременном действии сил электростатического изображения и внешнего электрического поля (эффект Шоттки)

Средняя энергия электрона проводимости в металле составляет

$$\bar{E} = \frac{3}{5} \mu_0. \quad (1.26)$$

Концентрация носителей заряда (электронов и дырок) в невырожденном полупроводнике в случае равенства эффективных масс электронов и дырок массе свободного электрона в вакууме выражается формулой

$$n = 2 \left( \frac{\sqrt{2\pi m k T}}{h} \right)^3 \exp\left(-\frac{E_0}{2kT}\right), \quad (1.27)$$

где  $m$  — эффективная масса,  $E_0$  — ширина запрещенной зоны в полупроводнике.

### Задача 1.1.

На прямоугольную потенциальную ступеньку бесконечной протяженности и высотой, равной 2 эВ, налетает электрон с энергией 3 эВ. Чему равен коэффициент надбарьерного отражения?

*Решение задачи 1.1.*

Так как энергия частицы больше высоты барьера, то в обеих частях решение уравнения Шредингера представляется в виде бегущих волн. Амплитуду падающей волны можно принять равной единице. Над барьером волна бежит только вправо.

$$\Psi_1 = \exp[i(k_1 x - \omega t)] + C \exp[i(-k_1 x - \omega t)],$$

$$\Psi_2 = D \exp[i(k_2 x - \omega t)].$$

Из условия непрерывности функции состояния и ее производной получим

$$1 + C = D,$$

$$k_1(1 - C) = k_2 D,$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar},$$

$$C = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{\sqrt{3} - 1}{\sqrt{3} + 1}.$$

Ответ: коэффициент отражения  $R = C^2 = \left( \frac{\sqrt{3} - 1}{\sqrt{3} + 1} \right)^2$ .

### Задача 1.2.

На потенциальную яму бесконечной протяженности с прямоугольным краем глубиной, равной 2 эВ, налетает электрон с энергией 3 эВ. Чему равен коэффициент надбарьерного отражения?

*Решение задачи 1.2.*

В обеих частях решение уравнения Шредингера представляется в виде бегущих волн. Амплитуду падающей волны можно принять равной единице. Над ямой волна бежит только вправо.

$$\Psi_1 = \exp[i(k_1x - \omega t)] + C \exp[i(-k_1x - \omega t)],$$

$$\Psi_2 = D \exp[i(k_2x - \omega t)].$$

Условия непрерывности функции состояния и ее производной:

$$1 + C = D,$$

$$k_1(1 - C) = k_2D,$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E+U)}}{\hbar},$$

$$C = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{\sqrt{3} - \sqrt{5}}{\sqrt{3} + \sqrt{5}}.$$

Ответ: коэффициент отражения  $R = C^2 = \left(\frac{\sqrt{3} - \sqrt{5}}{\sqrt{3} + \sqrt{5}}\right)^2$ .

**Задача 1.3.**

В некоторой системе при температуре  $T = 2520$  К в состоянии с энергией 5 эВ среднее число электронов  $n = 0,0909$ . Найти энергию Ферми.

*Решение задачи 1.3.*

$$n(E) = \left[ \exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1 \right]^{-1} = \left[ \exp\left(\frac{11600(5 - \mu)}{2520}\right) + 1 \right]^{-1} = 0,0909,$$

$$5 - \mu = 2, \quad \mu = 3 \text{ эВ.}$$

Ответ:  $\mu = 3$  эВ.

**Задача 1.4.**

Известно, что в системе при температуре  $T$  в состоянии с энергией 6,35852 эВ среднее число электронов  $n = 0,2$ , а в состоянии с энергией 5,64148 эВ среднее число электронов  $n = 0,8$ . Найти температуру  $T$  и уровень Ферми.

*Решение задачи 1.4.*

$$n(6,35852) = \left[ \exp\left(\frac{11600(6,35852 - \mu)}{T}\right) + 1 \right]^{-1} = 0,2,$$

$$n(5,64148) = \left[ \exp\left(\frac{11600(5,64148 - \mu)}{T}\right) + 1 \right]^{-1} = 0,8,$$

$$\frac{6,35852 - \mu}{T} = \frac{1,3863}{11600}, \quad \frac{5,64148 - \mu}{T} = -\frac{1,3863}{11600},$$

$$\frac{6,35852 - \mu}{5,64148 - \mu} = -1, \quad 12 - 2\mu = 0,$$

$$\mu = 6 \text{ эВ}, \quad T = 3000 \text{ К}$$

Ответ:  $\mu = 6$  эВ,  $T = 3000$  К.

**Задача 1.5.**

В двухуровневой системе находится  $N$  электронов при температуре  $T$ . Энергия нижнего уровня  $E_1$ , энергия верхнего уровня  $E_2$ . Количество состояний на нижнем уровне  $N$ , на верхнем уровне  $Ng$ . Сколько электронов находится на нижнем и сколько на верхнем уровне при температуре, стремящейся к нулю, и при температуре, стремящейся к бесконечности? Вычислить ненулевую температуру, при которой уровень Ферми совпадет с одним из уровней  $E_1$  или  $E_2$ . Рассчитать и нарисовать зависимость уровня Ферми от температуры. Найти пределы, к которым стремится уровень Ферми при  $T$ , стремящейся к нулю, и при  $T$ , стремящейся к бесконечности.

Решение задачи 1.5.

При температуре, стремящейся к абсолютному нулю, все электроны расположены на нижнем уровне. При температуре, стремящейся к бесконечности, каждое состояние заполнено электроном в одинаковой степени, а именно:

$$\frac{N}{N + Ng} = \frac{1}{1 + g}.$$

Поэтому на нижнем уровне будет  $\frac{N}{1 + g}$  электронов; на верхнем —  $\frac{Ng}{1 + g}$ .

$$\frac{N}{1 + \exp\left(\frac{E_1 - \mu}{kT}\right)} + \frac{Ng}{1 + \exp\left(\frac{E_2 - \mu}{kT}\right)} = N,$$

$$a = \exp\left(\frac{E_1}{kT}\right), \quad b = \exp\left(\frac{E_2}{kT}\right), \quad c = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right),$$

$$\frac{c}{c + a} + \frac{cg}{c + b} = 1,$$

$$-gc^2 + (1 - g)ac + ab = 0,$$

$$c(g, T) = \frac{(1 - g)a + \sqrt{(1 - g)^2 a^2 + 4abg}}{2g},$$

$$\mu(g, T) = kT \ln [c(g, T)].$$

Для нахождения ненулевой температуры  $T_2$ , при которой уровень Ферми совпадает с одним из уровней  $E_1$  или  $E_2$ , требуется решить одно из двух уравнений:

$$\frac{1}{2} + \frac{g}{1 + \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT_2}\right)} = 1 \quad \text{или} \quad \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_1 - E_2}{kT_2}\right)} + \frac{g}{2} = 1.$$

Ответ: анализ решения показывает, что при  $T \rightarrow 0$  уровень

Ферми расположен посередине между уровнями  $E_1$  и  $E_2$ . При  $T \rightarrow \infty$  и при  $g \neq 1$  уровень Ферми линейно зависит от температуры:  $\mu \approx -kT \ln(g)$ .

Задача 1.6.

В двухуровневой системе находится  $N$  электронов при температуре  $T$ . Энергия нижнего уровня  $E_1$ , энергия верхнего уровня  $E_2$ . Количество состояний на нижнем уровне  $Ng$ , на верхнем уровне  $N$ . Сколько электронов находится на нижнем и сколько на верхнем уровне при температуре, стремящейся к нулю, и при температуре, стремящейся к бесконечности? Вычислить ненулевую температуру, при которой уровень Ферми совпадает с одним из уровней  $E_1$  или  $E_2$ . Рассчитать и нарисовать зависимость уровня Ферми от температуры. Найти пределы, к которым стремится уровень Ферми при  $T$ , стремящейся к нулю и бесконечности.

Решение задачи 1.6.

При температуре, стремящейся к абсолютному нулю, все электроны расположены на нижнем уровне, если  $g > 1$ . Если  $g < 1$ , то все состояния на нижнем уровне полностью заполнены, а на верхнем уровне будут расположены остальные  $N(1 - g)$  электронов. При температуре, стремящейся к бесконечности, каждое состояние заполнено электроном в одинаковой степени, а именно:

$$\frac{N}{N + Ng} = \frac{1}{1 + g}.$$

Поэтому на нижнем уровне будет  $Ng/(1 + g)$  электронов; на верхнем —  $N/(1 + g)$ .

$$\frac{N}{1 + \exp\left(\frac{E_1 - \mu}{kT}\right)} + \frac{Ng}{1 + \exp\left(\frac{E_2 - \mu}{kT}\right)} = N,$$

$$a = \exp\left(\frac{E_1}{kT}\right), \quad b = \exp\left(\frac{E_2}{kT}\right), \quad c = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right),$$

$$\frac{cg}{c+a} + \frac{c}{c+b} = 1,$$

$$gc(b+c) + c(a+c) = (a+c)(b+c),$$

$$-gc^2 + (1-g)bc + ab = 0,$$

$$d = (1-g)a,$$

$$c(g, T) = \frac{d + \sqrt{d^2 + 4abg}}{2g},$$

$$\mu(g, T) = kT \ln [c(g, T)].$$

Для нахождения ненулевой температуры  $T_2$ , при которой уровень Ферми совпадает с одним из уровней  $E_1$  или  $E_2$ , требуется решить одно из двух уравнений:

$$\frac{g}{2} + \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT_2}\right)} = 1 \quad \text{или}$$

$$\frac{g}{1 + \exp\left(\frac{E_1 - E_2}{kT_2}\right)} + \frac{1}{2} = 1.$$

Ответ: анализ решения показывает, что, если  $T \rightarrow 0$ , то при  $g > 1$ , уровень Ферми совпадает с нижним уровнем  $E_1$ , а при  $g < 1$  уровень Ферми совпадает с верхним уровнем  $E_2$ . При  $T \rightarrow \infty$  и  $g \neq 1$  уровень Ферми линейно зависит от температуры:  $\mu \approx -kT \ln(g)$ .

### Задача 1.7.

В двухуровневой системе находится  $N(1 + 2\delta)$  электронов при температуре  $T$ . Энергия нижнего уровня  $E_1$ , энергия верхнего уровня  $E_2$ . Количество состояний на нижнем уровне  $N$ , на верхнем уровне  $N$ . Сколько электронов находится на нижнем уровне и сколько на верхнем при температуре, стремящейся к нулю, и при температуре, стремящейся к бесконечности? Вычислить ненулевую температуру, при которой уровень Ферми совпадает с одним из уровней  $E_1$  или  $E_2$ . Рассчитать и нарисовать зависимость уровня Ферми от температуры. Найти пределы, к которым стремится уровень Ферми при  $T \rightarrow 0$  и  $T \rightarrow \infty$ .

*Решение задачи 1.7.*

Если  $\delta < 0$ , то при температуре, стремящейся к абсолютному нулю, все электроны расположены на нижнем уровне. Если  $\delta > 0$ , то на нижнем уровне будут заняты электронами все  $N$  состояний, а на верхнем уровне будут расположены остальные  $N \cdot 2\delta$  электронов.

При температуре, стремящейся к бесконечности, каждое состояние заполнено электроном в одинаковой степени:

$$\frac{N(1+2\delta)}{2N} = \frac{1+2\delta}{2}.$$

Поэтому и на нижнем уровне, и на верхнем будет  $\frac{N(1+2\delta)}{2}$  электронов.

$$\frac{N}{1 + \exp\left(\frac{E_1 - \mu}{kT}\right)} + \frac{N}{1 + \exp\left(\frac{E_2 - \mu}{kT}\right)} = N(1 + 2\delta),$$

$$a = \exp\left(\frac{E_1}{kT}\right), \quad b = \exp\left(\frac{E_2}{kT}\right), \quad c = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right),$$

$$\frac{c}{c+a} + \frac{c}{c+b} = 1 + 2\delta,$$

$$c(b+c) + c(a+c) = (a+c)(b+c) (1+2\delta)$$

$$(1-2\delta)c^2 - 2\delta(a+b)c - (1+2\delta)ab = 0,$$

$$c(\delta, T) = \frac{\delta(a+b) + \sqrt{\delta^2(a+b)^2 + (1-4\delta^2)ab}}{(1-2\delta)},$$

$$\mu(\delta, T) = kT \ln [c(\delta, T)].$$

Для нахождения ненулевой температуры  $T_2$ , при которой уровень Ферми совпадает с одним из уровней  $E_1$  или  $E_2$ , требуется решить одно из двух уравнений:

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT_2}\right)} = 1 + 2\delta \quad \text{или}$$

$$\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_1 - E_2}{kT_2}\right)} + \frac{1}{2} = 1 + 2\delta.$$

Ответ: анализ решения показывает, что если  $T \rightarrow 0$ , то при  $\delta < 0$  уровень Ферми совпадает с нижним уровнем  $E_1$ ; а при  $\delta > 0$  уровень Ферми совпадает с верхним уровнем  $E_2$ . При  $T \rightarrow \infty$  и  $\delta \neq 0$  уровень Ферми линейно зависит от температуры:  

$$\mu \approx kT \ln \left( \frac{1+2\delta}{1-2\delta} \right).$$

### Задача 1.8.

Оцените значение энергии Ферми  $\mu_T$  для электронов проводимости в кристалле молибдена при  $T = 2\,000$  К, если известно, что плотность кристалла  $\rho = 10,2$  г/см<sup>3</sup>, атомный вес  $M = 96$ , число свободных электронов на атом  $z = 1$ , эффективная масса электрона проводимости равна массе свободного электрона в вакууме  $9,1 \cdot 10^{-28}$  г.

Решение задачи 1.8.

$$\mu_T = \mu_0 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right],$$

$$\mu_0 = 26,07 \left( \frac{\rho}{M} \right)^{\frac{2}{3}} = 26,07 \left( \frac{10,2}{96} \right)^{\frac{2}{3}} = 26,07 \cdot 0,2243 \approx 5,85 \text{ эВ},$$

$$\mu_T = 5,85 \left[ 1 - \frac{(3,14)^2}{12} \left( \frac{20}{5,85 \cdot 116} \right)^2 \right] \approx 5,846 \text{ эВ}.$$

Ответ:  $\mu_T = 5,846$  эВ.

### Задача 1.9.

Оцените  $n(E)$  — среднее число электронов в состоянии с энергией  $E = 7,0$  эВ при  $T = 3\,000$  К в зоне проводимости кристалла вольфрама, если известно, что плотность кристалла  $\rho = 19,3$  г/см<sup>3</sup>, атомный вес  $M = 184$ , число свободных электронов на атом  $z = 1$ ,  $m/m_0 = 1$ , где  $m$  — эффективная масса электрона проводимости, а  $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-28}$  г — масса свободного электрона в вакууме.

Решение задачи 1.9.

$$n(E) = \left[ \exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1 \right]^{-1},$$

$$\mu_0 = 26,07 \left( \frac{\rho}{M} \right)^{\frac{2}{3}} = 26,07 \left( \frac{19,3}{184} \right)^{\frac{2}{3}} = 26,07 (0,105)^{\frac{2}{3}} = 5,8 \text{ эВ},$$

$$n(E) \cong \left[ \exp\left(\frac{116(7,00 - 5,8)}{30}\right) + 1 \right]^{-1} \cong (104,54)^{-1} = 9,66 \cdot 10^{-3},$$

$$n(E) = 9,66 \cdot 10^{-3}.$$

Ответ:  $9,66 \cdot 10^{-3}$ .

**Задача 1.10.**

Определить максимальное значение кинетической энергии, которой может обладать электрон, движущийся в металле при  $T \rightarrow 0$  К, если концентрация электронов проводимости в рассматриваемом металле  $10^{23}$  см<sup>-3</sup>.

Решение задачи 1.10.

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{(6,626 \cdot 10^{-27})^2}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-28} \cdot 1,602 \cdot 10^{-12}} \left( \frac{3 \cdot 10^{23}}{8 \cdot 3,142} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{43,9 \cdot 10^{-54} \cdot 5,22 \cdot 10^{14}}{29,19 \cdot 10^{-40}} = 7,85 \text{ эВ.}$$

Ответ: 7,85 эВ.

**Задача 1.11.**

Определить концентрацию «свободных» электронов в металле, если известно, что при плотности тока проводимости  $\rho = 5$  А/см<sup>2</sup> средняя скорость направленного движения электронов составляет 0,05 см/с.

Решение задачи 1.11.

$$j = neV_{cp},$$

$$n = \frac{j}{eV_{cp}} = \frac{5}{1,602 \cdot 10^{-19} \cdot 0,05} = 6,24 \cdot 10^{20}.$$

Ответ:  $n = 6,24 \cdot 10^{20}$  см<sup>-3</sup>.

**Задача 1.12.**

Оцените число электронов в зоне проводимости в кристалле вольфрама, объем которого равен 100 см<sup>3</sup>, при  $T \rightarrow 0$  К, если известно, что значение энергии Ферми  $\mu = 5,81$  эВ.

Решение задачи 1.12.

$$n = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{\mu}{\hbar^2} 2m \right)^{1,5},$$

$$N = 100 \frac{8 \cdot 3,14}{3} \left[ \frac{5,81 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-28}}{(6,62 \cdot 10^{-27})^2} \right]^{1,5} = 6,35 \cdot 10^{24}.$$

Ответ:  $6,35 \cdot 10^{24}$ .

**Задача 1.13.**

Оцените значение температуры вырождения электронов проводимости в кристаллах вольфрама и цезия, если известно, что при  $T \rightarrow 0$  К концентрация электронов проводимости в кристалле вольфрама  $n_W = 6,35 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup>, а в кристалле цезия  $n_{Cs} = 9,0 \cdot 10^{21}$  см<sup>-3</sup>.

Решение задачи 1.13.

$$T_0 = \frac{\mu}{k} \approx \frac{\mu_0}{k} = \frac{\hbar^2}{2mk} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}},$$

$$T_{0W} = \frac{(6,62 \cdot 10^{-27})^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-28} \cdot 1,38 \cdot 10^{-16}} \left( \frac{3 \cdot 6,33 \cdot 10^{22}}{8 \cdot 3,14} \right)^{\frac{2}{3}} = 6,7 \cdot 10^4 \text{ К,}$$

$$T_{0Cs} = \frac{(6,62 \cdot 10^{-27})^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-28} \cdot 1,38 \cdot 10^{-16}} \left( \frac{3 \cdot 9 \cdot 10^{21}}{8 \cdot 3,14} \right)^{\frac{2}{3}} = 1,88 \cdot 10^4 \text{ К,}$$

$$T_{0W} = 6,7 \cdot 10^4 \text{ К, } T_{0Cs} = 1,9 \cdot 10^4 \text{ К.}$$

Ответ:  $T_{0W} = 6,7 \cdot 10^4$  К,  $T_{0Cs} = 1,9 \cdot 10^4$  К.

**Задача 1.14.**

Вычислите значение средней энергии электронов проводимости в кристалле хрома при  $T = 0$  К, если известно, что плотность хрома  $\rho = 7,19$  г/см<sup>3</sup>, атомный вес  $M = 52$ , число свободных электронов на каждый атом  $z = 1$ ,  $m/m_0 = 1$ , где  $m$  — эффективная масса электрона проводимости,  $m_0 = 9,11 \cdot 10^{-28}$  г — масса свободного электрона в вакууме.

Решение задачи 1.14.

$$\bar{E} = \frac{3}{5} \mu_0,$$

$$\mu_0 = 26,07 \left( \frac{\rho}{M} \right)^{\frac{2}{3}} = 26,07 \left( \frac{7,19}{52} \right)^{\frac{2}{3}} = 26,07 \cdot 0,2674 = 6,97 \text{ эВ},$$

$$\bar{E} = 0,6 \cdot 6,97 = 4,182 \text{ эВ}.$$

Ответ: 4,182 эВ.

**Задача 1.15.**

Оценить значения энергии Ферми и концентрации электронов в зоне проводимости при температурах 300 К и 1000 К в собственных полупроводниках (кристаллах германия, кремния, алмаза), ширина запрещенной зоны которых равна 0,74 эВ; 1,17 эВ; 5,4 эВ соответственно. Эффективную массу электронов и дырок считать равными массе свободного электрона.

Решение задачи 1.15.

$$n = 2 \left( \frac{\sqrt{2\pi mkT}}{h} \right)^3 \exp\left(-\frac{E_0}{2kT}\right) = 4,82 \cdot 10^{15} T^{1,5} \exp\left(-\frac{5800 \cdot E_0}{T}\right).$$

Ответ: уровень Ферми находится посередине запрещенной зоны. Концентрация электронов (и дырок) представлена в таблице:

Элементы	$T = 300 \text{ К}$	$T = 1000 \text{ К}$
Германий	$1,53 \cdot 10^{13}$	$2,09 \cdot 10^{18}$
Кремний	$3,76 \cdot 10^9$	$1,72 \cdot 10^{17}$
Алмаз	$1,14 \cdot 10^{-26}$	$3,81 \cdot 10^6$