

# Приложения

## 1. Вывод формулы Резерфорда

Задача о рассеянии частицы на силовом центре является главной задачей классической теории рассеяния и имеет строгое решение (так называемая задача Кеплера). В нашем случае отличие одно – потенциальная энергия – положительная величина, так как и центр рассеяния (ядро атома) и рассеиваемая частица ( $\alpha$ -частица) имеют одинаковый по знаку заряд.

Законы сохранения энергии и момента количества движения запишутся (в полярных координатах) так:

$$\frac{M}{2}(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{2Ze^2}{r} = E, \text{ и } Mr^2 \dot{\varphi} = P = MpV,$$

где  $M$  – масса  $\alpha$ -частицы,  $E$  – ее полная энергия.

Эти уравнения движения позволяют составить уравнение траектории:

$$\text{Ctg} \frac{J}{2} = \frac{MV^2 p}{Ze^2}.$$

Эту формулу непосредственно сопоставить экспериментальным данным невозможно, так как неизвестно прицельное расстояние  $p$ . Поэтому применим методы статистики, считая, что  $p$  меняется случайным образом.

Число  $\alpha$ -частиц, имеющих прицельное расстояние в интервале  $p, p+dp$ , пропорционально площади кольца  $2ppdp$ . Из предыдущей формулы находим:

$$\frac{dJ}{4 \sin^2 \frac{J}{2}} = - \left( \frac{MV^2}{Ze^2} \right) dp.$$

Тогда можно составить эффективное сечение рассеяния:

$$dy = n \cdot 2ppdp,$$

где  $n$  – число рассеивающих центров на единице площади металлической фольги.

Все  $dN$  рассеянных  $\alpha$ -частиц отклоняются на угол  $J$  и попадут в угловой интервал  $d\Omega = 2p \sin J dJ$ .

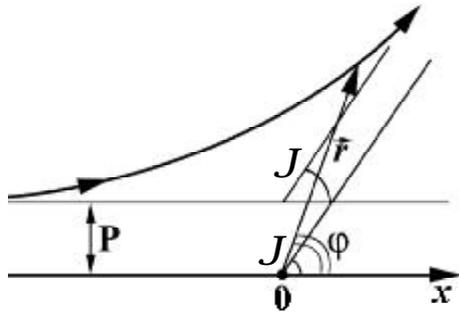


Рис.1.1.

С другой стороны, по определению

$$dS = \frac{dN}{N},$$

где  $N$  – число  $\alpha$ -частиц в падающем потоке.

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{dN}{N} = dy &= n \cdot 2ppdp = -\frac{n2p}{4} \left( \frac{Ze^2}{MV^2} \right) \frac{\text{Ctg} \frac{J}{2}}{\sin^2 \frac{J}{2}} dJ = \\ &= -np \left( \frac{Ze^2}{MV^2} \right) \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{J}{2}}. \end{aligned}$$

Можно сделать постоянными величины  $\left( \frac{Ze^2}{MV^2} \right)^2$ ,  $d\Omega$ ,  $n$ ,  $N$  и предыдущее выражение принимает вид:

$$dN \cdot \sin^4 \frac{J}{2} = \text{const}.$$

Это и есть та формула (Резерфорда), которая хорошо соответствовала эксперименту.

Таким образом, Резерфорд подтвердил свою гипотезу, что в атоме есть ядро, в котором заключена основная масса атома. Кроме того, результат опытов Резерфорда подтвердил гипотезу, что закон Кулона справедлив и на расстояниях порядка  $10^{-13}$  м.

## 2. Доказательство того, что электрон нельзя рассматривать как классический шарик, который вращается вокруг своей оси

Квантовая механика приписывает элементарным частицам (в том числе и электрону) корпускулярно-волновой дуализм. Но обладать, например, волновыми свойствами, не означает, что электрон является волной.

Воспользуемся формулой Н.Бора, которая первоначально рассматривалась как выражение 3-го постулата о квантовании момента количества движения:

$$mVr = nh.$$

Пусть

$$n = 1, m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}, r = 0,5 \cdot 10^{-15} \text{ м}, h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

$$\text{Тогда } V = \frac{h}{mr} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 0,5 \cdot 10^{-15} \text{ м}} \approx 1,46 \cdot 10^{12} \text{ м/с}.$$

Но этот результат противоречит второму постулату специальной теории относительности: в природе невозможно движение вещественных тел со скоростью, большей скорости света в вакууме  $3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$ .

Следовательно, сделанное предположение, что электрон – шарик с радиусом  $\sim 10^{-15} \text{ м}$ , физически абсурдно.

Полученный результат показывает, что *спин* нельзя рассматривать как классический механический момент. Спин – чисто квантовая характеристика, характеризующая внутреннее состояние элементарной частицы, которое не сводимо к классическому движению.

### 3. Эффект Комптона

Этот эффект связан с рассеиванием фотона на свободном электроне. Он имеет чисто релятивистское объяснение, приписывая и электрону, и фотону корпускулярные свойства.

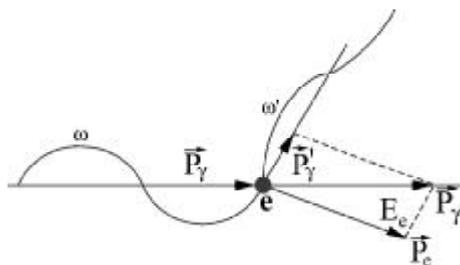


Рис.3.1.

В процессе рассеяния выполняются законы сохранения энергии и импульса:

$$\begin{aligned} E_g + E_{e0} &= E_{g'} + E_e, \\ \frac{\mathbf{r}}{p_g} + 0 &= \frac{\mathbf{r}}{p_{g'}} + \frac{\mathbf{r}}{p_e}, \end{aligned}$$

где  $E_g = \mathbf{h}\omega$  – энергия фотона до рассеяния,

$E_{g'} = \mathbf{h}\omega'$  – энергия фотона после рассеяния,

$E_{e0} = mc^2$  - энергия электрона до столкновения с фотоном,

$$E_e = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} - \text{полная энергия электрона отдачи.}$$

В результате элементарных алгебраических действий (с использованием чертежа), получаем:

$$w' = \frac{w}{1 + \frac{hw}{mc^2}(1 - \cos \Theta)} < w.$$

Это соотношение соответствует эксперименту.

#### 4. Простые и сложные кристаллические решетки

1. Ранее отмечалось, что кристаллическая решетка обладает трансляционной симметрией. Очевидно, что выбор основных векторов,  $\mathbf{a}$ , следовательно, и элементарной ячейки, неоднозначен.

Будем обозначать тройку некопланарных векторов  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$ . Смещение кристалла как целого на любой из этих векторов, приводит его к совпадению с самим собой (предполагается, что кристалл неограничен). Легко показать, что объем элементарной ячейки можно рассчитать с помощью произведения векторов  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$  (см. Прил.5):

$$V_0 = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3]).$$

Причем, величина  $V_0$  не зависит от выбора этих трансляционных векторов. Элементарная ячейка в простейшем случае содержит по одному атому каждого типа, входящего в состав кристалла. Действительно, доля каждого атома (иона), расположенного в вершине ячейки, равна  $1/8$ , находящегося на ребре  $1/4$ , расположенного на грани  $1/2$ . В общем случае элементарная ячейка даже чистого вещества может содержать больше одной структурной частицы. В первом случае элементарная ячейка называется простой, во втором – сложной. Не всегда элементарная ячейка обладает всеми элементами симметрии, что и весь кристалл.

Однако в простой решетке всегда можно выбрать такую ячейку, которая будет обладать всеми элементами симметрии кристалла. Строится эта ячейка так. Из одного из атомов проводится линия к ближайшему соседнему атому. Через середину этого отрезка строится плоскость ему перпендикулярно. Аналогичная операция повторяется со всеми соседями. Совокупность получившихся плоскостей выделит вблизи избранного атома некоторую область пространства. Называется эта область ячейкой Вигнера-Зейтца

Оказывается (это можно показать для плоской решетки), что объем ячейки Вигнера-Зейтца равен объему элементарной ячейки. Ячейка Вигнера-Зейтца в общем случае не будет параллелепипедом, но она обязательно содержит в центре одну структурную частицу. Вместе с тем, эта ячейка обладает всеми элементами симметрии кристалла.

II. В связи с симметрией кристалла как целого введем еще понятие о решетке Браве: это совокупность всех атомов (ионов) в кристалле, которые могут быть совмещены друг с другом путем параллельного переноса на основные векторы элементарной ячейки. Об этом мы уже говорили в Гл.2, §2. В случае простой ячейки решетка Браве совпадает с последней. Если же решетка сложная, то она состоит из нескольких решеток Браве, вставленных друг в друга (в §2 в качестве примера мы приводили сложную решетку поваренной соли).

Классификация решеток Браве производится по отношению к симметрии поворотов и отражений. Различают семь различных типов кристаллических систем (сингоний). Каждая из решеток данной сингонии обладает центром инверсии и определенной совокупностью осей и плоскостей симметрии. Каждой сингонии сопоставляется некоторая геометрическая фигура (см. таблицы 5,12): либо параллелепипед, либо призма. Возможно дополнительное подразделение в зависимости от того, находятся атомы решетки только в вершинах упомянутой фигуры или еще на ее гранях, на основаниях, в центре. Поэтому решетки Браве получают дополнительное название: примитивная решетка данной сингонии (П), базоцентрированная (БЦ), гранецентрированная (ГЦ) и объемноцентрированная (ОЦ) (см. табл.12).

Табл.12

Название сингоний	П	БЦ	ОЦ	ГЦ	Соотношение ребер	Углы между ребрами
1. Триклинная	+	-	-	-	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
2. Моноклинная	+	+	-	-	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta = \gamma = 90^\circ$
3. Ромбическая	+	+	+	+	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
4. Гексагональная	+	-	-	-	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = 120^\circ \quad \beta = \gamma = 90^\circ$
5. Ромбоэдрическая	+	-	-	-	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
6. Тетрагональная	-	-	-	-	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
7. Кубическая	-	-	+	+	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Из табл. 12 видно, что существует 14 типов решеток Браве.

Симметрия кристалла определяет ряд его физических свойств. Возможны следующие элементы макроскопической симметрии:

- 1) центр симметрии (центр инверсии),
- 2) плоскость симметрии (зеркальная плоскость),
- 3) оси симметрии 1-го, 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков,
- 4) инверсионные оси 1-го, 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков.

Возможные комбинации макроскопических элементов симметрии образуют точечные группы. Эти точечные группы позволяют выделить 32 кристаллографических класса.

III. Наряду с элементарной ячейкой кристаллической решетки в теории рассматривается так называемая обратная решетка. Ее векторы трансляции определяются по формулам:

$$\mathbf{r}_1 = \frac{[\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3]}{V_0}; \quad \mathbf{r}_2 = \frac{[\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1]}{V_0}; \quad \mathbf{r}_3 = \frac{[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2]}{V_0},$$

где  $V_0 = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3])$  - объем элементарной ячейки.

Очевидно соотношение

$$\Omega_0 = (\mathbf{r}_1 [\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3]) = \frac{1}{V_0},$$

где  $\Omega_0$  - объем элементарной ячейки обратной решетки.

Можно показать, что простые решетки всех систем решеток Браве имеют обратными также простые решетки тех же систем. Обратная решетка гранецентрированных решеток Браве (ромбической, тетрагональной и кубической) является объемноцентрированной решеткой той же системы и наоборот. Решетке с центрированным базисом соответствует решетка также с центрированным базисом. Аналогом ячейки Вигнера-Зейтца в обратной решетке является зона Бриллюэна.

Введение обратной решетки позволяет математически проще установить свойства физических величин, характеризующих идеальный кристалл. Например, известно, что все эти величины описываются функциями с той же периодичностью, что и сама решетка.

Пусть  $U(\mathbf{r})$  - одна из таких величин. Очевидно, что

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}),$$

где  $\mathbf{R} = \sum_{a=1}^3 n_a \mathbf{a}_a$ ,  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ , -  $n_a$  - целые числа,  $\mathbf{a}_a$  - вектор

трансляции решетки.

Разложим функцию  $U(\mathbf{r})$  в тройной ряд Фурье:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r}}.$$

Значения вектора  $\mathbf{q}$  определяются требованием периодичности:

$$\sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r}} \cdot e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r} \mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r}}.$$

Это соотношение будет выполняться, если

$$e^{2\pi i \mathbf{r} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = 1, \quad \mathbf{r} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} = p; \quad \mathbf{r} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_a = p_a,$$

где  $p$  и  $p_a$  - целые числа.

Последнее условие будет удовлетворено, если положить

$$\mathbf{q} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3.$$

Но это означает, что вектор  $\mathbf{q}$  совпадает с вектором обратной решетки:

$$\mathbf{q} = \mathbf{B} = \sum_{a=1}^3 m_a \mathbf{b}_a,$$

и вектор  $\mathbf{q}$  пробегает все узлы обратной решетки.

Функцию  $U(r)$  можно разложить в ряд Фурье несколько иначе:

$$U(r) = \sum_k \mathbf{j}_k e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}.$$

Очевидно, что между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{q}$  имеется простое соотношение:

$$\mathbf{k} = 2\pi \mathbf{q}.$$

Соответствующее пространство называется  $\mathbf{k}$  - пространством.

## 5. Расчет объема элементарной ячейки

Основные векторы решетки гранецентрированного куба могут быть выбраны следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2} (\mathbf{i} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2} (\mathbf{i} + \mathbf{j}) \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2} (\mathbf{j} + \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (*)$$

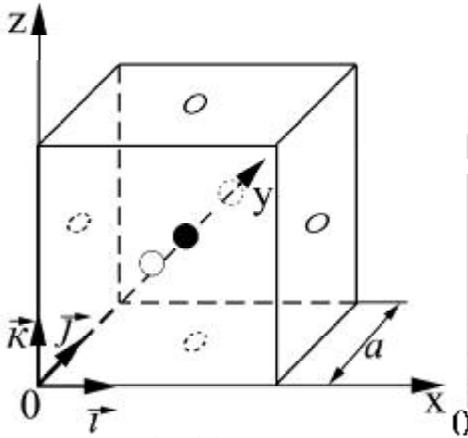


Рис. 5.1.

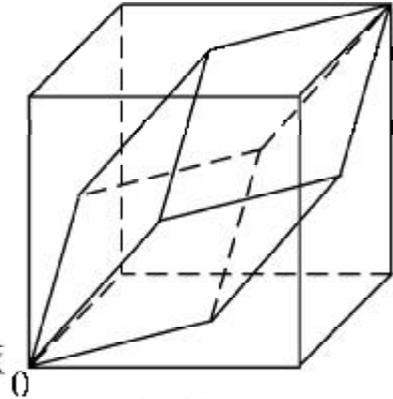


Рис. 5.2.

Векторы  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ , и  $\mathbf{a}_3$  проведены из начала координат  $O$  к ближайшим атомам (рис 5.1).

Из формул (\*) непосредственно следует:

$$[\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3] = \frac{a^2}{4} (\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k})$$

и, следовательно, объем элементарной ячейки

$$V_0 = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3]) = \frac{a^3}{4}, \quad (**)$$

т.е. составляет  $\frac{1}{4}$  объема всего куба.

Построим обратную решетку. Используя (\*) и (\*\*), имеем:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{V_0} [\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3] = \frac{1}{a} [\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}]$$

аналогично 
$$\mathbf{b}_2 = \frac{1}{V_0} [\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1] = \frac{1}{a} [\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}] \quad (***)$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{1}{V_0} [\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2] = \frac{1}{a} [-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}]$$

Таким образом, для гранцентрированной кубической решетки обратной будет объемноцентрированная.

Рассчитаем период решетки  $NaCl$ . Всего в элементарном кубе будет 4 иона натрия и 4 иона хлора, его объем равен  $d^3$ .

На один моль кристалла придется объем

$$V_m = d^3 \frac{N_A}{4},$$

где  $V_m$  - молярный объем,  $N_A$  - число Авогадро. С другой стороны, молярный объем можно найти, если массу моля  $m$  разделить на плотность кристалла  $r$ :

$$V_m = \frac{m}{r},$$

следовательно,

$$d^3 \frac{N_A}{4} = \frac{m}{r}$$

и

$$d = \sqrt[3]{\frac{4m}{N_A r}}.$$

Подставив численные значения

$$m = 58,45 \text{ кг} / \text{кмоль}, \quad r = 2,17 \cdot 10^3 \text{ кг} / \text{м}^3,$$

получим

$$d = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 58,45 \text{ кг} \cdot \text{кмоль}^{-1}}{2,17 \cdot 10^3 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3} \cdot 6,02 \cdot 10^{26} \text{ кмоль}^{-1}}} = 5,64 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 5,64 \text{ \AA}.$$

## 6. Расчет дисперсионных сил

Расчет дисперсионных сил был дан в 1930 г. Поясним особенности этих сил на примере взаимодействия двух осцилляторов, в которых положительные заряды закреплены неподвижно, а отрицательные заряды перемещаются вдоль линии, соединяю-

шей положительные заряды, как около положений равновесия (см. рис.6.1), при этом возникают электрические моменты  $p_1 = ex_1$  и  $p_2 = ex_2$ .

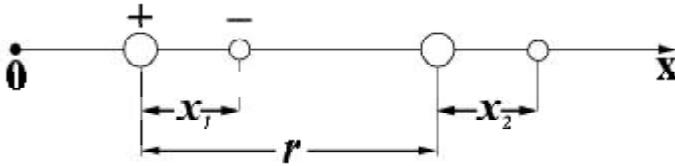


Рис. 6.1.

Уравнение движения электрона под действием квазиупругой силы  $KX$  имеет вид

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx.$$

Решением этого уравнения является функция  $x = x_0 \sin w_0 t$ ,

$$\text{где } w_0 = 2\pi n_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

В любой момент времени осциллятор обладает потенциальной энергией

$$U = \frac{1}{2} kx^2.$$

Рассмотрим движение того же электрона с квантово-механической точки зрения. Для этого необходимо решить составленное для этой цели уравнение Шредингера

$$-i\hbar \frac{dy}{dt} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta y - U(x, y, z, t)y,$$

где  $U(x, y, z, t) = U(x, y, z)$ .

Волновую функцию необходимо взять в виде

$$y(x, y, z, t) = j(x, y, z)f(t).$$

Тогда уравнение Шредингера распадается на два уравнения

$$\frac{d^2 j}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)j = 0 \quad \text{и} \quad \frac{df}{dt} = -\frac{i}{\hbar} Ef.$$

Первое из этих уравнений (координатное уравнение Шредингера) в нашей задаче принимает вид:

$$\frac{d^2 \mathbf{j}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} \kappa x^2 \right) \mathbf{j} = 0.$$

Это уравнение имеет решение только в том случае, если энергия осциллятора принимает дискретные значения:

$$E_n = \hbar n_0 \left( n + \frac{1}{2} \right),$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$

Минимальная энергия осциллятора  $\frac{1}{2} \hbar n_0$  называется нулевой энергией, так

как она не исчезает и при  $T = OK$ . Существование этой энергии является главной особенностью квантово-механического рассмотрения состояния осциллятора.

При сближении осцилляторов изменяется характер их колебания. Движение каждого осциллятора можно представить состоящим из двух гармонических колебаний с частотами:

$$n_1 = n_0 \sqrt{1 - \frac{e^2}{2pe_0 \kappa r^3}} \quad \text{и} \quad n_2 = n_0 \sqrt{1 + \frac{e^2}{2pe_0 \kappa r^3}}.$$

Суммарную нулевую энергию взаимодействующих осцилляторов в этом случае можно рассчитать так:

$$E_0^{e3} = \frac{1}{2} \hbar n_1 + \frac{1}{2} \hbar n_2 = \hbar n_0 \left( 1 - \frac{e^4}{32p^2 e_0^2 \kappa^2 r^6} \right)$$

где использовано разложение в ряд Тейлора и оставлены члены до третьего порядка малости.

Если сравнить это выражение с суммарной энергией невзаимодействующих осцилляторов

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar n_0 + \frac{1}{2} \hbar n_0 = \hbar n_0,$$

то обнаруживаем, что взаимодействие приводит к уменьшению нулевой энергии на величину

$$U_{63} = E_0^{63} - E_0 \approx -\frac{e^4 h n_0}{32 p^2 e_0^2 \kappa^2 r^6}.$$

Это соответствует возникновению сил притяжения между осцилляторами

$$F = -\frac{dU^{63}}{dr} = -\frac{3e^4 h n_0}{16 p^2 e_0^2 \kappa^2} \cdot \frac{1}{r^7}.$$

## 7. Расчет концентрации дефектов по Шоттки

Вычислим равновесную концентрацию дефектов Шоттки.

Поясим чертежом процесс образования этих дефектов (см. рис.7.1). Для описания физических процессов используются разные термодинамические функции.

Каждая из них «удобна» при определенных условиях. В данной задаче воспользуемся так называемой свободной энергией  $F$ , которая определяется так:

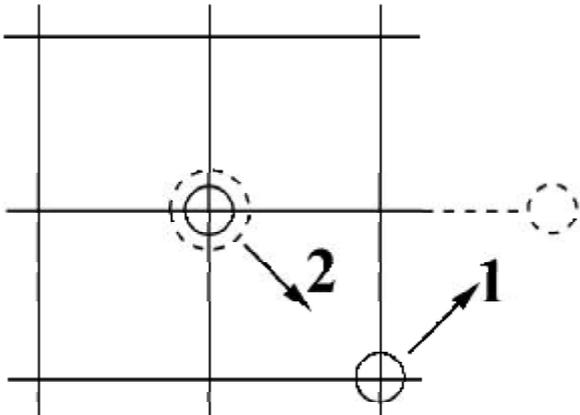


Рис. 7.1.

$$F = E - TS,$$

где  $E = nU$ ,  $U$  - энергия, необходимая для образования одного дефекта Шоттки,  $n$  - число вакантных узлов при данной температуре  $T$ ;  $S$  - энтропия кристалла с  $n$  дефектами. Согласно формуле Больцмана

$$S = k \ln W,$$

где  $k$  - постоянная Больцмана,  $W = \frac{(N+n)!}{n!N!}$  - число перестановок узлов

решетки (свободных  $n$  и занятых  $N$ ), осуществляющих одно и то же состояние кристалла. При  $N \gg n$  можно воспользоваться приближенной формулой Стирлинга

$$\ln x! \cong x \ln x - x.$$

Итак,

$$F = nU - kT \{ (N + n) \ln(N + n) - n \ln n - N \ln N \}.$$

В состоянии равновесия свободная энергия минимальна, т.е. выполняется условие

$$\frac{dF}{dn} = 0.$$

Составим это условие:

$$\frac{dF}{dn} = 0 = U - kT \ln \frac{N + n}{n},$$

откуда (при  $n \ll N$ ):

$$\frac{n}{N} = C \exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$$

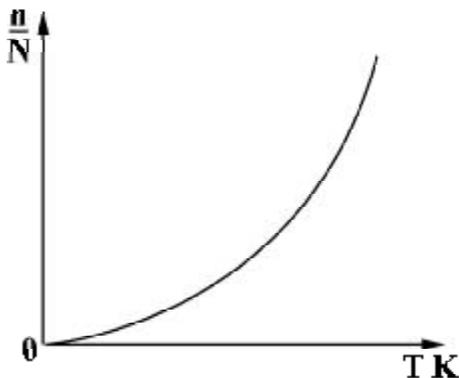


Рис. 7.2.

Концентрация дефектов  $\frac{n}{N}$  растет экспоненциально с ростом температуры  $T$ .

Если решетка состоит из 2-х подрешеток (как, например, в  $NaCl$ ), то в каждой подрешетке возникают свои вакансии. При равенстве зарядов ионов подрешеток, концентрация вакансий в чистых кристаллах в подрешетках одинакова.

В этом случае

$$W = \frac{(N + n)!(N + n)!}{n!N!n!N!}.$$

Расчеты, аналогичные вышеприведенным, дают:

$$n = N \exp\left(-\frac{U}{2kT}\right)$$

где  $n$  - число пар разноименных не взаимодействующих вакансий,  $N$  - число пар узлов решетки,  $U$  - энергия образования не взаимодействующей пары вакансий.

## 8. Расчет концентрации дефектов по Френкелю

Вычислим равновесную концентрацию дефектов Френкеля. Приводимый рисунок схематически иллюстрирует образование дефекта такого типа.

Как и в случае расчета концентрации дефектов Шоттки, воспользуемся свободной энергией кристалла с дефектами:

$$F = E - TS,$$

где  $E = nU$ ,  $U$  - энергия образования одного дефекта Френкеля.

Эти дефекты могут занять  $N'$  междуузельных положений. Если полное число узлов решетки  $N$ , то энтропия образования дефектов Френкеля запишется так:

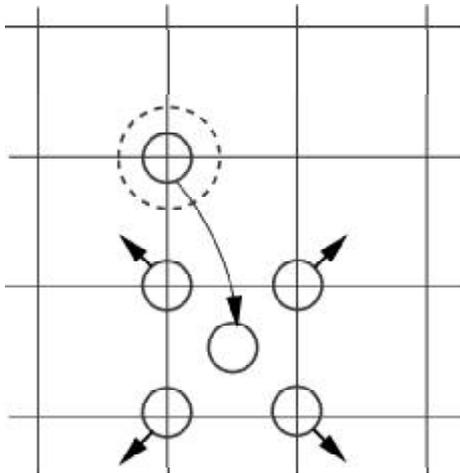


Рис. 8.1.

$$S = k \ln W = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} \cdot \frac{N'!}{n!(N'-n)!},$$

где учтены перестановки как вакантных узлов  $n$ , междуузельных положений  $N'$ , так и узлов кристаллической решетки  $N$ , перестановки которых приводят к одному и тому же состоянию кристалла.

При  $n \ll N$  и  $n \ll N'$  можно воспользоваться формулой Стирлинга

$$\ln x! \cong x \ln x - x.$$

В состоянии термодинамического равновесия свободная энергия минимальна, т.е.

$$\frac{dF}{dn} = 0.$$

Составляя это выражение, получаем:

$$\frac{n^2}{(N - n)(N' - n)} = \exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$$

или при  $n \ll N$  и  $n \ll N'$  формула упрощается:

$$\frac{n^2}{NN'} = \exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$$

В кубических кристаллах  $N \approx N'$ , поэтому

$$n = N \cdot \exp\left(-\frac{U}{2kT}\right)$$

Подойдем к расчету концентрации вакансий по Френкелю с иной точки зрения. Пусть  $t$  - период тепловых колебаний ионов решетки. В каждом

узле решетки  $\frac{1}{t}$  раз в секунду возмо-

жен «отрыв» атома от его ближайших соседей и переход в междуузлие при условии, что имеется локальная флюкту-

ация энергии величины  $j_0$  (см. рис.

8.2), достаточная, чтобы перевести

атом на «вершину потенциального барьера», отделяющего узел от междуузлия. Таким образом, число образующихся в одну секунду в единице объема новых вакансий есть

$$\frac{N}{t} \exp\left(-\frac{j_0}{kT}\right)$$

где  $N$  - число узлов решетки в единице объема, экспоненциальный множитель учитывает вероятностный характер дефектообразования.

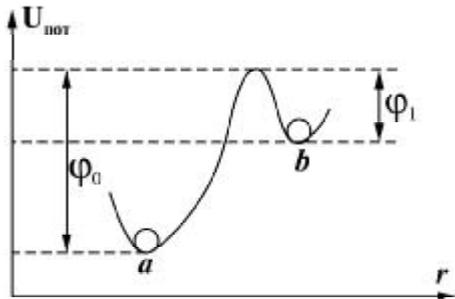


Рис. 8.2.

С другой стороны, каждая из имеющихся вакансий может «исчезнуть», если она расположена по соседству с атомом, находящимся в междуузлии и при наличии флуктуации энергий  $j_1$ , достаточной, чтобы перевести атом из междуузлия на «вершину потенциального барьера», отделяющего позицию в междуузлии от узловой. Следовательно, число исчезающих в одну секунду в единице объема вакансий есть:

$$\frac{N'_0}{t} \cdot \frac{N'_0}{N} \exp\left(-\frac{j_1}{kT}\right)$$

где  $N'_0$  - число имеющихся вакансий (и атомов в междуузлиях).

Суммарное изменение числа вакансий по Френкелю в одну секунду в единице объема равно:

$$\frac{dN'_0}{dt} = \frac{N}{t} \exp\left(-\frac{j_0}{kT}\right) \left[1 - \frac{N'_0{}^2}{N^2} \exp\left(-\frac{j_1 - j_0}{kT}\right)\right].$$

Равновесная концентрация дефектов по Френкелю  $c_0 = \frac{N'_0}{N}$  определится из условия

$$\frac{dN'_0}{dt} = 0, \text{ или } c_0 = \frac{N'_0}{N} = \exp\left(-\frac{j_0 - j_1}{2kT}\right) = \exp\left(-\frac{U}{2kT}\right),$$

где  $U = j_0 - j_1$  есть разность значений потенциальной энергии атома при нахождении его в узле и в междуузлии, т.е. изменение потенциальной энергии при образовании дефекта по Френкелю.

## 9. Контакт двух металлов

Если привести в соприкосновение два разнородных металла, то между ними возникает обмен электронами. Существует, в основном, две причины, обуславливающие этот переход. Поэтому различают внешнюю и внутреннюю контактную разность потенциалов. Рассмотрим их поочередно. Воспользуемся зонной схемой для изображения состояния валентных электронов двух металлов (см. рис.9.1).

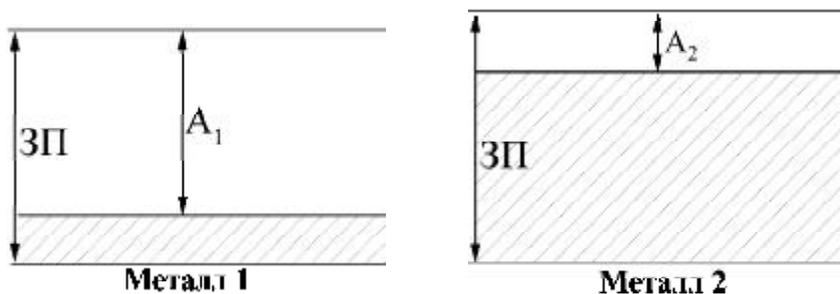


Рис. 9.1.

В заштрихованной части зоны проводимости находятся валентные электроны. Из рисунка видно, что для вырывания электрона из металла 1 (для перевода его за пределы верха зоны проводимости) необходимо совершить работу  $A_1$ , из второго

металла – работу  $A_2$ . Допустим, что  $A_1 > A_2$ , тогда преимущественно электроны из металла 2 начнут переходить в металл 1. Этот процесс будет продолжаться до тех пор, пока возникшая контактная разность потенциалов не установит динамическое равновесие. Процесс установления равновесия будет протекать так. В результате ухода части электронов из металла 2 его электронейтральность в месте контакта нарушится. Можно сказать, что металл 2 будет иметь положительный потенциал по отношению к металлу 1, а последний, приняв дополнительные электроны, будет иметь отрицательный потенциал по отношению к металлу 2. Контактное электрическое поле между свободными поверхностями соприкасающихся металлов будет направлено от металла 2 к металлу 1 (см. рис.9.2).

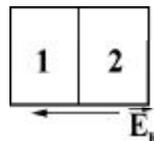


Рис. 9.2.

Именно это поле и будет способствовать установлению динамического равновесия, так как оно направлено против преимущественного направления движения электронов. Максимальная разность потенциалов, которая возникает между металлами,

определится равенством  $\Delta j = \frac{A_1 - A_2}{e}$ , где  $e$  - заряд электрона.

Эта контактная разность потенциалов называется внешней контактной разностью потенциалов. Ее величина зависит не только от разнородности соприкасающихся металлов, но особенно сильно от чистоты и состояния поверхности металлов. Для разных пар металлов внешняя контактная разность потенциалов достигает величины от нескольких десятых долей до единиц вольта. По величине этой разности потенциалов металлы можно расположить в так называемый ряд Вольта:

*Al, Zn, Sn, Cd, Pb, Sb, Bi, Hg, Fe, Cu, Ag, Pt, Pd*. Каждый предыдущий элемент приобретает положительный потенциал с любым последующим. В замкнутой цепи из металлических проводников результирующая контактная разность потенциалов равна нулю.

Внутренняя контактная разность потенциалов возникает из-за того, что энергия электронов, находящихся на верхних уровнях зоны проводимости может оказаться разной в металле 1 и металле 2. Это создаст дополнительный диффузный поток электронов. Возникающее благодаря этому переходу электронов электрическое поле не обязательно будет того же направления, какое имеет поле внешней контактной разности потенциалов. Внутренняя контактная разность потенциалов сильно зависит от температуры контакта, определяя тем самым термоэлектрические явления. Поле внутренней контактной разности потенциалов возникает лишь в тонком пограничном слое двух соприкасающихся металлов. Именно этим (и в силу относительной малости этого поля) можно объяснить тот факт, что внутренняя контактная разность потенциалов практически не влияет на прохождение тока через контакт двух металлов.

## 10. Внутренний фотоэффект

Устройство полупроводникового фотоэлемента схематически изображено на рис.10.1.

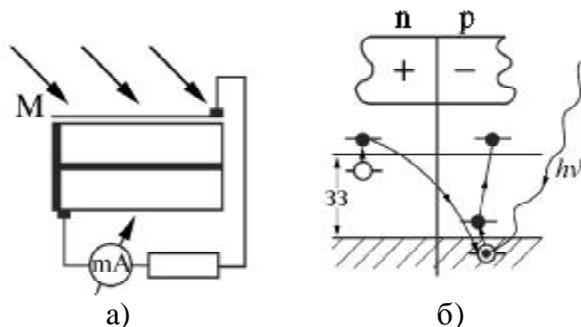


Рис. 10.1.

Основной его частью является  $p-n$  - переход. Когда металлическая пластинка в фотоэлементе не освещена, на границе  $p-n$  - перехода устанавливается динамическое равновесие. Полупроводник  $n$  - типа получает положительный потенциал, полупроводник  $p$  - типа – отрицательный потенциал и дальнейший переход электронов через границу перехода прекращается (см. §8 главы 3).

В отличие от внешнего фотоэффекта, при внутреннем фотоэффекте электроны не покидают освещаемое тело. Поэтому энергия кванта  $h\nu$  должна быть меньше энергии  $W$  ионизации, но вместе с тем достаточной, чтобы возбудить электроны из валентной зоны полупроводника  $p$  - типа в его зону проводимости. Металлическая подложка  $M$  берется очень тонкой, чтобы световые лучи могли проникнуть до полупро-

водника  $P$  - типа. Она наносится при помощи катодного распыления. При освещении энергия квантов передается электронам валентной зоны полупроводника  $P$  - типа, которые, поглощая энергию, возбуждаются, переходя в зону проводимости (см. рис.10.1). Эти электроны из зоны проводимости полупроводника  $P$  - типа могут перейти в металллическую пластинку. В результате динамическое равновесие, возникшее на  $P-n$  - переходе, нарушается. Электроны из полупроводника  $n$  - типа получают возможность опять переходить в полупроводник  $P$  - типа, так как там, в валентной зоне, возникли свободные места (на рис. 10.1 б) сплошные линии).

Разность потенциалов в  $P-n$  - переходе увеличивается благодаря световому воздействию, и, если цепь фотоэлемента замкнута, то в ней возникает фототок. Его величина пропорциональна световому потоку, так как чем больше квантов падает на полупроводник  $P$  - типа, тем больше электронов переходит в зону проводимости. Такие фотоэлементы непосредственно преобразуют световую энергию в электрическую (солнечные батареи); на том же принципе основана работа фотосопротивлений.

## 11. Положение уровня Ферми и концентрация свободных носителей заряда в полупроводнике

Химический потенциал  $\mu$ , вводимый в термодинамике при рассмотрении равновесия фаз, играет большую роль при описании свойств полупроводников. В применении к электронному и дырочному газам в полупроводнике его называют уровнем Ферми.

В металлах уровень Ферми определяет максимальную энергию электронов при абсолютном нуле температуры. Концентрация электронов в металлах сравнима по порядку величины с числом состояний в зоне проводимости, вследствие этого электронный газ в металлах является вырожденным и описывается статистикой Ферми-Дирака. Концентрация электронов в зоне проводимости металлов практически не зависит от температуры.

Иначе обстоит дело в полупроводниках. Будем рассматривать беспримесные полупроводники. В этом случае концентрация электронов в зоне проводимости и концентрация дырок в валентной зоне, очевидно, одинакова. Такие полупроводники называются собственными полупроводниками. В силу относительно малой концентрации электронов в зоне проводимости и, естественно, дырок в валентной зоне в собственных полупроводниках электронный и дырочный газ является невырожденным и распределение по энергетическим состояниям описывается классической статистикой Максвелла-Больцмана. Для таких полупроводников концентрация свободных носителей заряда зависит как от положения уровня Ферми, так и от температуры. Установим эту связь. Будем отсчитывать энергию от дна зоны проводимости.

Воспользуемся формулой, с помощью которой можно рассчитать число электронов, которые могут разместиться в интервале энергии от  $E$  до  $E + dE$ :

$$dn = \frac{4p}{h^3} (2m_n)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{m_\phi}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} E^{\frac{1}{2}} dE. \quad (11.1)$$

Установим, какого знака химический потенциал в невырожденном полупроводнике. Условием невырождения является неравенство:

$$e^{\frac{E-m_\phi}{kT}} \gg 1, \quad (11.2)$$

при выполнении которого распределение Ферми-Дирака переходит в распределение Максвелла-Больцмана (см. Гл.1, §13).

Так как  $E$  - кинетическая энергия электронов, то  $E \geq 0$ , поэтому условие (11.2) должно выполняться и при  $E = 0$ , то есть

$$e^{-\frac{m_\phi}{kT}} \gg 1. \quad (11.3)$$

Но условие (11.3) выполняется только, если  $m < 0$ : энергия Ферми для невырожденного полупроводника является величиной отрицательной. Поэтому уровень Ферми располагается ниже дна зоны проводимости (см. рис.11.1).

Из рисунка видно, что  $m_\phi + m'_\phi = -\Delta E$ , откуда

$m'_\phi = -\Delta E - m_\phi$ . Мы воспользу-

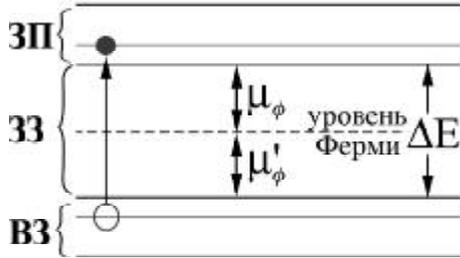


Рис. 11.1.

емся этим значением  $m'_\phi$  при подсчете концентрации дырок. Теперь же, используя формулу (11.1), найдем полное число электронов в зоне проводимости

$$n = 4p \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{m_\phi}{kT}} \int_0^{E_{\text{свх}}} e^{-\frac{E}{kT}} \cdot E^{\frac{1}{2}} dE.$$

Учитывая, что при больших значениях энергии основной вклад вносит экспонента, заменим верхний предел на бесконечность. В этом случае мы имеем аналог интеграла Пуассона. В результате интегрирования получаем для концентрации электронов в зоне проводимости следующее выражение:

$$n = 2 \left( \frac{2m_n p k T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{m_\phi}{kT}}. \quad (11.4)$$

Аналогичный расчет концентрации дырок (при замене  $m_\phi$  на  $(-E - m_\phi)$  и эффективной массы электрона  $m_n$  на эффективную массу дырки  $m_p$ ) в валентной зоне приводит к следующему выражению

$$p = 2 \left( \frac{2p m_p k T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( - \frac{\Delta E + m_\phi}{kT} \right) \quad (11.5)$$

Составим произведение выражений (11.4) и (11.5):

$$p \cdot n = 4 \left( \frac{2p k T}{h^2} \right)^3 (m_n \cdot m_p)^{\frac{3}{2}} \exp \left( - \frac{\Delta E}{kT} \right) \quad (11.6)$$

Отсюда следует, что при данной температуре произведение  $n \cdot p$  является величиной постоянной. Формула (11.6) является выражением так называемого закона действующих масс.

Определим положение уровня Ферми в собственном (чистом) полупроводнике, когда концентрации электронов и дырок равны друг другу:

$$n = p. \quad (11.7)$$

Используя соотношения (11.4), (11.5) и (11.7), получаем для уровня Ферми в чистом полупроводнике следующее значение:

$$m_\phi = - \frac{\Delta E}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_p}{m_n}. \quad (11.8)$$

При  $T = OK$ , а также в случае  $m_n = m_p$  уровень Ферми располагается посреди запретной зоны:

$$m_\phi = - \frac{\Delta E}{2}. \quad (11.9)$$

При повышении температуры уровень Ферми смещается от середины ко дну зоны проводимости, если  $m_p > m_n$ , и к верху валентной зоны, если  $m_p < m_n$ .

Из формул (11.4), (11.5) и (11.8) получаем:

$$n = p = 2 \left( \frac{2p \sqrt{m_n \cdot m_p} \cdot kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( - \frac{\Delta E}{kT} \right) \quad (11.10)$$

Из (11.10) видна зависимость концентраций электронов и дырок в зоне проводимости и в валентной зоне соответственно от ширины запрещенной зоны  $\Delta E$  (чем  $\Delta E$  больше, тем меньше концентрация электронов и дырок, причем изменение происходит по экспоненциальному закону) и от температуры кристалла  $T$  (определяющую роль играет экспонента, концентрация тем больше, чем выше температура кристалла). Например, уменьшение  $\Delta E$  от 1,12 эВ (кремний) до 0,08 эВ (серое олово) приводит при температуре  $T = 300K$  к увеличению концентрации электронов и дырок на 9 порядков. Увеличение температуры от  $100K$  до  $600K$  увеличивает концентрацию электронов и дырок на 17 порядков.

Таким образом, полупроводники высокой степени очистки в области комнатных температур обладают электрической проводимостью, обусловленной наличием в них собственных носителей тока – электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне:

$$S = S_n + S_p = qn_i(u_n + u_p), \quad (11.11)$$

где  $S$  - удельная проводимость полупроводника,

$n_i = n_n = n_p$ ,  $u_n$  и  $u_p$  - соответствующие подвижности, которые не обязательно равны друг другу.

Установим зависимость подвижности от температуры. При высоких температурах рассеяние, а, следовательно, и длина свободного пробега электронов, зависит от концентрации фононов, которая (см. гл.2) пропорциональна температуре

$$l_{эл} \sim \frac{1}{n_{фон}} \sim \frac{1}{T}. \quad (11.12)$$

$$\text{Так как } u \sim \frac{\bar{I}}{\bar{V}}, \text{ то } u \sim \frac{T^{-1}}{T^{1/2}} \sim T^{-\frac{3}{2}}. \quad (11.13)$$

В области низких температур рассеяние в основном происходит на ионизованных примесях. Если воспользоваться классической формулой для столкновений Резерфорда, то из нее следует, что частота столкновений пропорциональна четвертой степе-

ни скорости электрона  $V$ . А так как подвижность  $u \sim \frac{H}{V}$ , то  $u \sim V^3$ . Учитывая,

что  $V \sim T^{\frac{1}{2}}$ , получаем:

$$u \sim T^{\frac{3}{2}}. \quad (11.14)$$

А так как концентрация электронов (см. 11.10)

$$n \sim T^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right)$$

то в области высоких температур

$$S = S_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right) \quad (11.15)$$

В области низких температур

$$S = S_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right) T^3. \quad (11.16)$$

Функция (11.15) позволяет по экспериментальным данным построить график

$\ln S = \ln S_0 - \frac{\Delta E}{2kT}$ , а тангенс угла наклона оп-

ределяет отношение  $\frac{\Delta E}{k}$ , отсюда можно определить

ширину запрещенной зоны  $\Delta E$ . График (см. рис.11.2)

отсекает на оси ординат  $\ln S_0$ .

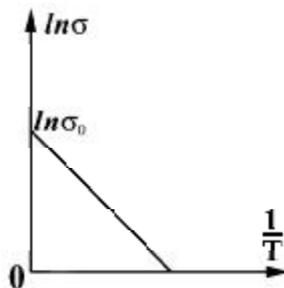


Рис. 11.2.

## 12. Примесная проводимость полупроводников

Наличие примесей сильно влияет на концентрацию носителей зарядов в полупроводнике и, следовательно, на их проводимость. Например, добавление в кремний бора в количестве одного атома на  $10^5$  атомов кремния увеличивает проводимость при комнатной температуре в  $10^3$  раз по сравнению с чистым кремнием. Температурная же зависимость электропроводности невырожденных примесных полупроводников, как и собственная, определяется в основном температурной зависимостью концентраций носителей. Поэтому качественный характер кривой  $S(T)$  должен быть аналогичен кривой зависимости  $n(T)$ . Рассмотрим эту зависимость в области низких температур, когда  $kT \ll \Delta E$ . В этом случае собственных носителей заряда мало, ионизируются в основном примеси: энергия связи примесного электрона ослабляется в  $e$  раз, изменяется также эффективная масса, поэтому оказывается достаточно небольшой энергии, чтобы перевести электрон из связанного состояния в зону проводимости, то есть донорные уровни лежат близко ко дну зоны проводимости. Аналогично, акцепторные уровни лежат чуть выше верха валентной зоны.

Расчет концентрации электронов проводимости в донорном полупроводнике при низких температурах дает следующую температурную зависимость:

$$n = \sqrt{2N_D} \left( \frac{2pm_n kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_D}{2kT}}. \quad (12.1)$$

Аналогичный расчет для акцепторного полупроводника приводит к следующему выражению:

$$p = \sqrt{2N_A} \left( \frac{2pm_p kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_A}{2kT}}. \quad (12.2)$$

где  $N_D$  и  $N_A$  - концентрации доноров и акцепторов,  $E_D$  и  $E_A$  - энергии, соответствующие донорным и акцепторным уровням.

С дальнейшим ростом температуры происходит уменьшение высвобождаемых электронов и дырок, и затем их концентрация перестает зависеть от температуры. И основной вклад в проводимость дают собственные электроны и дырки.

Поскольку обычно в полупроводнике преобладают или доноры, или акцепторы, то в примесных полупроводниках при низких температурах проводимость осуществляется в основном или электронами, или дырками. Говорят о  $n$ - и  $p$ -проводимости, а соответствующие полупроводники называются полупроводниками  $n$ - и  $p$ -типа.

Выясним, выполняется ли в полупроводниках закон Ома, дифференциальная форма которого для участка цепи, несодержащего сторонней силы, запишется так:

$$\overset{\mathbf{I}}{j} = S \overset{\mathbf{I}}{E}. \quad (12.3)$$

Так как по формуле  $S = e(nu_n + pu_p)$ , то закон Ома будет выполняться, если концентрация электронов и дырок, а также их подвижность не будут зависеть от напряженности внешнего поля  $\overset{\mathbf{I}}{E}$ .

Рассмотрим случай слабого поля. Так как подвижность  $u \sim \frac{L}{V}$ , а  $|\overset{\mathbf{I}}{V}| = |\overset{\mathbf{I}}{V}_{0\text{тепл.движ.}} + \overset{\mathbf{I}}{V}_{\text{дрейфа}}| \cong V_0$ , то подвижность  $u$  не будет зависеть от  $\overset{\mathbf{I}}{E}$  (от  $\overset{\mathbf{I}}{E}$  зависит  $\overset{\mathbf{I}}{V}_{\text{дрейфа}}$  - скорость направленного движения под действием электрического поля). Не зависит от  $\overset{\mathbf{I}}{E}$  и концентрация носителей заряда  $n$ . Следовательно, при слабых электрических полях закон Ома выполняется.

В случае сильного электрического поля скорость дрейфа  $\overset{\mathbf{I}}{V}_{\text{дрейфа}}$  может сравниться со скоростью теплового движения  $\overset{\mathbf{I}}{V}_0$ . Отсюда следует, что результирующая скорость  $V$  является функцией напряженности внешнего поля  $\overset{\mathbf{I}}{E}$ , а тогда  $u = u(\overset{\mathbf{I}}{E})$  и  $S = S(\overset{\mathbf{I}}{E})$ . То есть закон Ома в этом случае не выполняется. Расчеты дают, что

$$|\overset{\mathbf{I}}{j}| \cong |\overset{\mathbf{I}}{E}|^{1/2}.$$

Увеличение результирующей скорости носителей заряда под действием внешнего электрического поля эквивалентно повышению температуры электронного газа. Поэтому такой эффект называется разогревом электронного газа, а электроны, имеющие среднюю кинетическую энергию выше средней кинетической энергии атомов решетки, - горячими электронами.

Под действием сильных электрических полей могут произойти новые физические процессы, благодаря которым изменится и концентрация носителей зарядов  $n$ . К этим явлениям можно отнести:

- 1) термоэлектронную эмиссию (переход электронов в зону проводимости через запретную зону за счет работы внешнего поля);
- 2) ударную ионизацию электронами зоны проводимости атомов решетки;
- 3) электростатическую ионизацию благодаря туннелированию электронов валентной зоны в зону проводимости через запретную зону (эффект Зинера).

### 13. Построение зонных схем диода и транзистора с использованием уровня Ферми

Сделанные построения энергетических состояний кристаллического диода и транзистора в §§8 и 11 гл.3 формально правильны, однако лишь качественно. Используя же уровень Ферми, эти схемы можно сделать более точными.

Напомним, что энергия Ферми в термодинамике называется химическим потенциалом и в состоянии термодинамического равновесия двух гомогенных фаз имеет одно и то же числовое значение. Именно это свойство химического потенциала (энергии Ферми) мы используем при рассмотрении равновесного состояния  $n-p$ -перехода.

Напомним, что при наличии донорной примеси уровень Ферми располагается между донорным уровнем и дном зоны проводимости (см. рис.13.1).

В полупроводнике с акцепторной примесью уровень Ферми располагается между акцепторным уровнем и верхом валентной зоны (см. рис.13.2).

Приведем в физический контакт два полупроводника разной проводимости. Начнем рисовать  $n-p$ -переход через изображение уровня Ферми, который должен простирается на одной высоте, проходя через запретные зоны обоих полупроводников, а затем дорисуем остальные уровни Д, А, границ зон (см. рис.13.3).

В результате диффузии электронов из полупроводника  $n$ -типа в полупроводник  $p$ -типа первый полупроводник заряжается положительно, а второй – отрицательно.

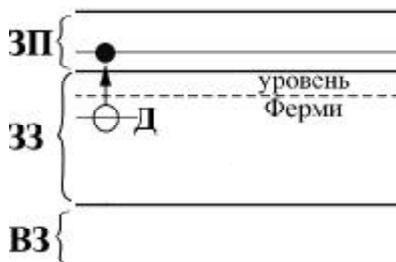


Рис. 13.1.



Рис. 13.2.

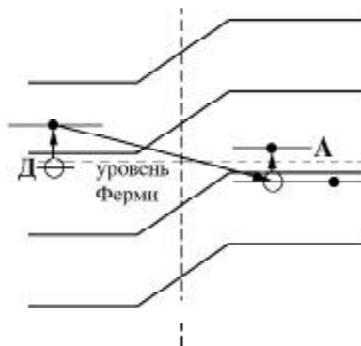


Рис. 13.3.

Возникает контактная разность потенциалов, направленная слева направо. Это поле достигнет определенной величины, так как наступает динамическое равновесие между двумя потоками электронов: слева направо в силу разной концентрации электронов в контактирующих полупроводниках; справа налево под воздействием контактного электрического поля. Последнее не может исчезнуть, так как первый процесс его восстанавливает. Как и полагается по определению, химический потенциал располагается на одной высоте, символизируя наступление динамического равновесия.

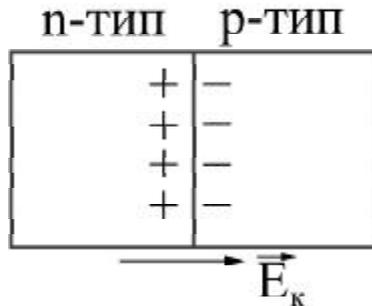


Рис. 13.4.

Рассмотрим запертое состояние

$n-p$ -перехода. Оно возникает, когда к  $n-p$ -переходу приложено внешнее поле того же направления, что и контактное поле (см. рис. 13.5).

Под воздействием добавочного поля динамическое равновесие нарушается, новый поток электронов возникнет справа налево, этим же полем электроны будут отодвинуты от границы  $n-p$ -перехода. Контакт обедняется носителями заряда, что эквивалентно возрастанию омического сопротивления участка  $n-p$ -контакта.

$n-p$ -переход оказывается запертым, ничтожно малый ток обусловлен неосновными носителями заряда. Зонная схема отражает трудность перехода электронов из полупроводника  $n$ -типа в полупроводник  $p$ -типа тем, что уровни в правом полупроводнике оказываются приподнятыми по отношению их положения в состоянии динамического равновесия (см. рис. 13.3), уровень Ферми отражает это неравновесное, запертое состояние тем, что в полупроводнике  $p$ -типа поднимается по отношению к его положению в полупроводнике  $n$ -типа. Возможность отхода электронов в полупроводнике  $n$ -типа от  $n-p$ -контакта обусловлена внешним электрическим полем и осуществляется благодаря тому, что зона проводимости «простирается» через весь кристалл, и электроны в зоне проводимости являются свободными и, обладая одной и той же энергией, способны перемещаться по уровню от контакта влево.

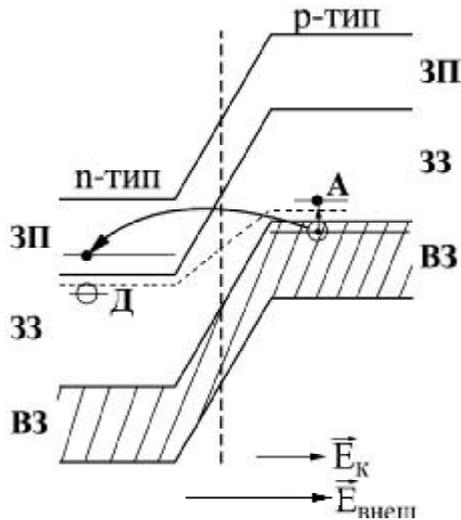


Рис. 13.5.

Если внешнее поле направлено противоположно контактному полю (см. рис.13.6), то оно будет способствовать обогащению  $n - p$ -перехода электронами.

Это эквивалентно уменьшению омического сопротивления контакта и возрастанию тока. На зонной схеме  $n - p$ -перехода это отображено понижением уровней в полупроводнике  $p$ -типа ниже их положения в равновесном состоянии. Соответственно и уровень Ферми понижается при переходе через  $n - p$ -переход (см. рис. 13.6).

Поскольку транзистор рассматривается как система из двух диодов, имеющих общий элемент (базу), то мы изобразим лишь равновесное состояние транзистора (рис. 13.7.), так как состояние его частей легко восстановить, используя предыдущие схемы  $n - p$ -переходов.

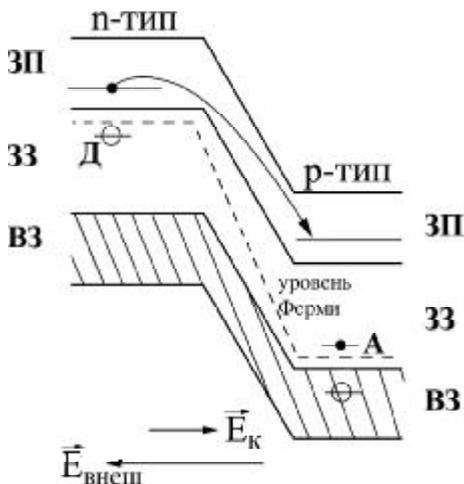


Рис. 13.6.

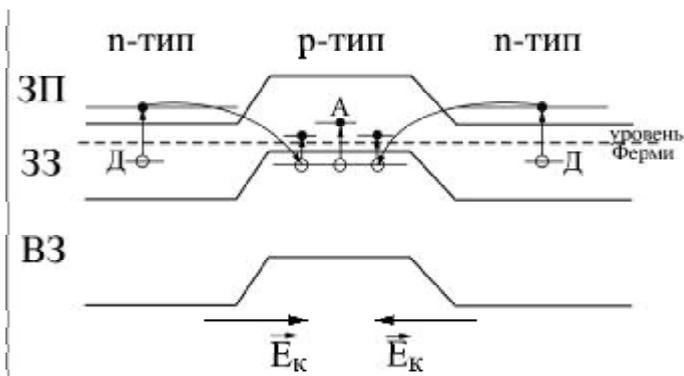


Рис. 13.7.

## 14. Теория скин-эффекта

Если постоянный ток распределен равномерно по поперечному сечению проводника, то в случае переменного тока картина изменяется: из-за электромагнитного взаимодействия элементов тока плотность тока у поверхности проводника увеличивается, а в центре – уменьшается. Это явление называется скин-эффектом («skin» в переводе с английского «кожа»).

Физической причиной скин-эффекта является электромагнитная индукция (см. рис.14.1). Вихревое электрическое поле, порожденное меняющимся магнитным полем, усиливает ток у поверхности проводника и уменьшает его к центру.

Математическое обоснование скин-эффекта следует из решения уравнений Максвелла, записанных для рассматриваемого случая. Отправляя читателя к учебникам по электродинамике, проанализируем решение задачи:

$$E = E_0 e^{-gr} \cos(\omega t - kr),$$

где благодаря экспоненте  $e^{-gr}$  происходит убывание амплитуды поля при удалении от поверхности проводника. Поэтому и плотность тока убывает к оси проводника

$$j = j_0 e^{-gr} \cos(\omega t - kr).$$

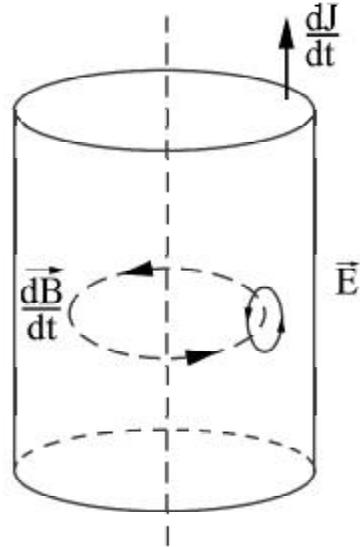


Рис. 14.1.

## 15. Колебания и волны в плазме

В плазме могут возникать коллективные колебания и распространяться волны различной физической природы. Различают электрические, электромагнитные и магнитогидродинамические колебания и волны.

Рассмотрим возникновение электростатических, или плазменных колебаний. Воспользуемся следующими упрощенными рассуждениями, приводящими к правильному результату.

Выделим в объеме плазмы две параллельно расположенные площадки  $S$ , расстояние между которыми  $Z$ . Пусть плазма состоит из однозаряженных частиц  $\pm e$ , концентрация которых  $N_0$ . Предположим, что удалось разделить заряды по их знаку в объеме между «пластинами» и поместить все положительные заряды на одну «плас-

тину», а все отрицательные – на другую. По существу, мы получили заряженный плоский конденсатор, на пластинах которого сосредоточены заряды  $\pm N_0 eSZ$ , его ем-

кость  $C = \frac{e_0 S}{Z}$ . Поделив заряд на емкость, определим разность потенциалов между

пластинами  $\Delta j = \frac{N_0 e Z^2}{e_0}$ . С другой стороны,  $E = \left| \frac{\Delta j}{Z} \right|$ , откуда  $E = \frac{N_0 e Z}{e_0}$ .

Естественно, в реальной плазме никаких «пластин» не существует, но ясно, что взаимное смещение зарядов разных знаков приводит к появлению сил, стремящихся это смещение ликвидировать. Сила, действующая на одну частицу с массой  $m$ , равна

$F = eE = \frac{N_0 e^2 Z}{e_0}$ . Под действием этой силы частица приобретает ускорение

$a = \frac{F}{m} = \frac{N_0 e^2 Z}{e_0 m}$ . Обратим внимание на то, что сила  $F$  и ускорение  $a$  частиц

плазмы пропорциональны их смещению, а направлены они так, чтобы восстановить равновесие в плазме. Мы получили типичные условия возникновения гармонических колебаний с частотой

$$\omega_a^2 = \frac{N_0 e^2}{e_0 m}. \quad (15.1)$$

Частоту (15.1) называют также ленгмюровой частотой. Она является характеристической частотой плазмы. За время порядка периода  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  плазма практически восстанавливает свою нейтральность. Это время также является характеристикой плазмы  $\sim 10^{-9} \div 10^{-13}$  с. Плазменные волны, распространяющиеся с частотой (15.1), получили название плазмоны.

## 16. Математическое обоснование спонтанного намагничивания

В отличие от парамагнетизма, когда нет необходимости учитывать взаимодействие магнитных моментов соседних структурных частиц, в природе ферромагнетизма заложен факт сильного обменного чисто квантового характера взаимодействия магнитных моментов атомов твердого тела. Только квантовая теория объяснила все особенности ферромагнетиков.

Экспериментально (опыт Эйнштейна – де – Гааза) и теоретически установлено, что ферромагнетизм обусловлен не орбитальным, а спиновым моментом электронов. Для возникновения ферромагнитного состояния необходимы следующие условия:

- 1) вещество должно быть в твердом состоянии;
- 2) атомы тела должны содержать недостроенные внутренние электронные оболочки;
- 3) между постоянной решетки и диаметром недостроенной оболочки должно

существовать определенное соотношение  $\frac{a}{d} = 1,5$ ;

- 4) обменный интеграл, составленный для взаимодействующих электронов, должен быть больше нуля.

Именно в этом случае магнитные моменты электронов устанавливаются параллельно, что и обуславливает спонтанное намагничивание в так называемых областях Вейса. В этих областях магнитные моменты электронов оказываются в сильном магнитном поле, создаваемом всеми остальными магнитными моментами. Поэтому помимо внешнего магнитного поля  $B_0$  необходимо учитывать и это внутреннее («молекулярное») поле:

$$B_{эф} = B_0 + II, \quad (16.1)$$

где  $I$  - постоянная Вейса, которая имеет порядок  $10^2 + 10^3$ .

Введение эффективного поля, автоматически учитывающее сильное обменное взаимодействие магнитных моментов электронов, позволяет воспользоваться формулой (5.7.2), подставляя в нее вместо  $m_0 H = B_0$  эффективную индукцию  $B_{эф}$ .

$$I = I_{нас} \operatorname{th} \frac{m_B (B_0 + II)}{kT}. \quad (16.2)$$

В случае слабой намагниченности разлагаем гиперболический тангенс в ряд Тейлора и ограничимся одним членом

$$I = I_{нас} \frac{m_B (B_0 + II)}{kT}, \quad (16.3)$$

откуда

$$I = \frac{I_{нас} m_B}{kT - I_{нас} m_B I} \cdot B_0. \quad (16.4)$$

Введем обозначение

$$\frac{I_{нас} m_B I}{k} = T_{\kappa}. \quad (16.5)$$

и назовем температурой Кюри.

Формула (16.4) запишется так:

$$I = \frac{I_{нас} \cdot m_B}{k(T - T_{\kappa})} \cdot B_0. \quad (16.6)$$

Эта формула удовлетворительно соответствует эксперименту при  $T > T_{\kappa}$ , когда ферромагнетик проявляет парамагнетизм. При температуре  $T = T_{\kappa}$  происходит фазовый переход. Рассмотрим состояние ферромагнетика при  $T < T_{\kappa}$ . Преобразуем формулу (16.2), введя обозначение

$$x = \frac{m_B (B_0 + II)}{kT}. \quad (16.7)$$

Тогда вместо одной формулы (16.2) получаем систему двух связанных уравнений (16.7) и (16.2):

$$I = I_{нас} \operatorname{th} x. \quad (16.8)$$

Уравнение (16.8) называется трансцендентным, его обычно решают графически (см. рис.16.1). Уравнение (16.7) – линейное, его график – прямая.

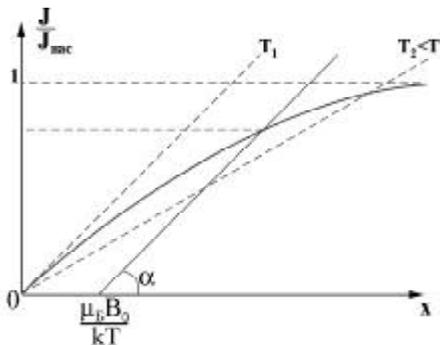


Рис. 16.1.

Для совместного решения этих уравнений необходимо найти точку пересечения обоих графиков (см. рис.16.1). Используя выражение (16.1), представим

$$x = \frac{m_B B_0}{kT} + \frac{m_B I I}{kT} = \frac{m_B B_0}{kT} + \frac{m_B I I_{нас}}{kT} \left( \frac{I}{I_{нас}} \right) \quad (16.9)$$

При  $\frac{I}{I_{нас}} = 0$  величина  $x = \frac{m_B B_0}{kT}$ . Наклон прямой (16.9) определяется

коэффициентом при величине  $\left( \frac{I}{I_{нас}} \right)$ :

$$tg a = \frac{kT}{m_B I I_{нас}}. \quad (16.10)$$

Для любого частного значения  $B_{эф}$  график – прямая, подобная построенной.

Пусть внешнее поле  $B_0$  равно нулю. Тогда формула (16.9) запишется

$$\text{так: } x = \frac{m_B I I_{нас}}{kT} \left( \frac{I}{I_{нас}} \right) \quad (16.11)$$

График уравнения (16.11) – прямая, проходящая через начало координат, а угол наклона к оси  $Ox$  по-прежнему определяется соотношением (16.10). Угол наклона  $a$  пропорционален температуре  $T$ , поэтому возможны два случая, когда график уравнения (16.11) не пересекает график уравнения (16.8), за исключением случая, когда

$\frac{I}{I_{нас}} = 0$  при  $x = 0$ . Это область высоких температур. Вещество не проявляет маг-

нитные свойства (при  $B_0 = 0, I = 0$ ), нет намагничивающего поля, нет и намагниченности. При низких температурах график уравнения (16.11) пересекает график урав-

нения (16.8) не только в точке  $\frac{I}{I_{нас}} = 0$ , но и еще в одной точке, в которой  $\frac{I}{I_{нас}} \leq 1$ .

Представляет интерес лишь второе решение. Оно означает, что при низких температурах магнитное вещество должно намагничиваться спонтанно, в отсутствии внешнего поля  $B_0$ .

Если перемещаться на графике от высоких температур к низким, то постепенно график совместится с касательной. Это произойдет при температуре, которую мы выше назвали температурой Кюри. Ниже этой температуры появляется спонтанная намагниченность. Составим производную от функции (16.8) по  $x$  при  $x = 0$ . Можно определить этим значение  $tg a_{T=T_k}$ . Простой расчет дает:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left( \frac{I}{I_{нас}} \right) \Big|_{x=0} &= \frac{d}{dx} (thx) \Big|_{x=0} = \frac{d}{dx} \left( \frac{shx}{chx} \right) \Big|_{x=0} = \\ &= \frac{ch^2 x - sh^2 x}{ch^2 x} \Big|_{x=0} = 1 - th^2 x \Big|_{x=0} = 1. \end{aligned} \quad (16.12)$$

Условие (16.12) означает, что спонтанное намагничивание наступает при температуре, определяемой критическим значением  $tg a = 1$ . Это очень жесткое условие. В действительности осуществляется более мягкое требование:

$$tg a \leq 1, \text{ или } \frac{\kappa T_{\kappa}}{m_B I I_{нас}} \leq 1, \quad (16.13)$$

откуда находят значение температуры Кюри. Используя (16.13), уравнение (16.9) можно записать так:

$$x = \frac{m_B B_0}{kT} + \frac{T_{\kappa}}{T} \left( \frac{I}{I_{нас}} \right) \quad (16.14)$$

Рассмотрим теперь случай слабых внешних полей, то есть нужно снова рассмотреть графическое решение уравнения (16.8). График этого уравнения остается без изменения, а график уравнения (16.14), в отличие от графика функции (16.11) сместится вправо. При низких температурах точка пересечения рассматриваемых графиков сместится вправо по почти горизонтальной части графика уравнения (16.8).

В проведенных рассуждениях по сути дела рассматривается один домен. Реальный ферромагнетик состоит из множества подобных спонтанно намагниченных областей, магнитные моменты которых расположены, вообще говоря, хаотично. Поэтому в отсутствии внешнего поля  $B$  образец ненамагничен.

## 17. Квантовые ямы, нити, точки

При переходе к микроскопическим полупроводниковым структурам – нанокристаллам (размеры кристаллов порядка нескольких нанометров =  $10^{-9}$  м, отсюда и название – нанокристаллы) принципиально изменяются свойства электронного газа. Электроны проявляют квантовые свойства, проявляется их корпускулярно-волновой дуализм. На использовании квантовых свойств носителей заряда в полупроводниках возникло новое направление в физике твердого тела – наноэлектроника.



Рис. 17.1.

В основе физики наноэлектроники лежат представления о квантовых нитях, ямах, точках (последние имеют и второе название – искусственные атомы). На рис.17.1 представлена схема двух гетеропереходов. Электроны с энергией меньше  $E_1$  оказываются в потенциальной яме – это и есть модель квантовой ямы. Электроны оказываются запертыми в одном направлении. И согласно выводам квантовой механики энергетические состояния их оказываются дискретными. В то же время в двух других направлениях (перпендикулярно чертежу и вверх) движение будет свободным. Именно поэтому электронный газ называется двумерным.

Если на поверхности кристалла при выращивании возникают островки атомов, то в этом “наросте” электроны оказываются уже запертыми в трех измерениях. Такое образование получило название “квантовой точки” или искусственного атома. Однако нужно иметь в виду, что каждая такая “квантовая точка” содержит сотни атомов.

Если в двумерном электронном газе создать дополнительный барьер, то электроны смогут перемещаться лишь в одном направлении. Мы получаем то, что названо “квантовой нитью”.

На рис. 17.1 показано, как “работает” квантовая яма в качестве лазера. В главе 3 §9 был рассмотрен туннельный диод, который стал первым реальным устройством, использующим квантовую яму (Эсаки, 1958 г.). На свойства двумерного электронного газа возникает и квантовый эффект Холла (глава 4, §14).

В нанокристаллическом состоянии принципиально изменяются и свойства вещества. Так у металлов обнаружены полупроводниковые свойства, нанотрубки (протяженные в одном направлении) углерода могут быть одновременно и проводниками и полупроводниками.

Благодаря наноэлектронике создаются сверхминиатюрные сверхбыстродействующие системы обработки информации. В 2000 году Нобелевская премия по физике была присуждена ученым (в том числе академику РАН Ж. Алферову), внесшим фундаментальный вклад в развитие наноэлектроники. Наноэлектроника имеет большое будущее – она будет основой информационных систем XXI века. Показательно, что Организация Объединенных Наций (ООН) включила нанотехнологию в список наиболее перспективных технологий в наступающем веке.

## 18. Основные физические постоянные

Наименование	Обозначение	Численные значения
Абсолютная нулевая температура	К	-273,15 °С
Заряд электрона (элементарный заряд)	e	$1,602 \cdot 10^{-19}$ Кл
Масса атома водорода	м <sub>а</sub>	$1,673 \cdot 10^{-27}$ кг
- нейтрона	м <sub>н</sub>	$1,675 \cdot 10^{-27}$ кг
- протона	м <sub>р</sub>	$1,672 \cdot 10^{-27}$ кг
- мезона	м <sub>м</sub>	$9,109 \cdot 10^{-31}$ кг
- альфа-частицы	м <sub>α</sub>	$6,644 \cdot 10^{-27}$ кг
Объем 1 моля вещества при нормальных условиях	V <sub>м</sub>	$22,4 \text{ м}^3/\text{моль}$
Постоянная газная (универсальная)	R	$8,31 \cdot 10^3$ Дж/моль·К
Постоянная Стефана-Больцмана	σ	$5,67 \cdot 10^{-8}$ Вт/м <sup>2</sup> ·К <sup>4</sup>
Постоянная Больцмана	k <sub>Б</sub>	$1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К
Постоянная Планка	h	$6,625 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Радиус первой орбиты водородного атома	а <sub>0</sub>	$0,529 \cdot 10^{-10}$ м
Скорость света в вакууме	c	$2,997925 \cdot 10^8$ м/с
Постоянная Авогадро	N <sub>А</sub>	$6,024 \cdot 10^{23}$ 1/моль
Постоянная Фарадея	F	96491 Кл/моль
Утегрителевая постоянная вакуума	ε <sub>0</sub>	$8,85430 \cdot 10^{-12}$ Ф/м
Магнитная постоянная вакуума	μ <sub>0</sub>	$1,256637 \cdot 10^{-6}$ Гн/м
Отношение массы нейтрона к массе электрона	$\frac{m_n}{m_e}$	1836,6