

Кафедра физики

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3к.5

**ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ
НА ПРОВОДИМОСТЬ
МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ.**

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Минск 2021

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3к.5

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ПРОВОДИМОСТЬ МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ.

Цель работы:

1. Изучить квантовую теорию электропроводности твердых тел.
2. Исследовать температурную зависимость электропроводности металла и полупроводника.
3. Рассчитать энергию активации полупроводника.

Квантовая теория свободных электронов в кристалле

Волновые функции свободных электронов для стационарных состояний имеют вид пространственной части плоской волны $\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ с амплитудой A и волновым вектором \vec{k} . Тогда векторная величина $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ называется *импульсом*

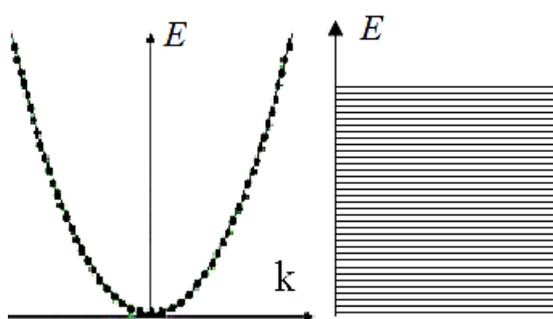
электрона, а его энергия равна: $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$.

В приближении *свободных* электронов роль кристаллической решетки без ионов сводится к удержанию электронов внутри кристалла, который можно представить в виде куба с ребром $L = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3|$. Решая стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0,$$

при условии *периодичности* волновой функции, получаем, что как модуль волнового вектора принимает *дискретные* значения $k^2 = n^2 \frac{\pi^2}{L^2}$, где $n = 1, 2, 3, \dots$, так и величина энергии электрона принимает дискретный ряд значений:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2}{L^2}\right)n^2,$$



где $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, $k_x = n_1 \frac{\pi}{L}$ – проекция вектора \vec{k} на ось Ox , аналогично и для других проекций; $n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$, n_1, n_2, n_3 – целые числа, принимающие независимо друг от друга значения $0, \pm 1, \pm 2, \dots$. График зависимости разрешенных значений энергии от волнового числа $E(k)$ для свободных электронов имеет вид множества дискретных точек, лежащих на параболе. Схематически графику можно поставить в соответствие систему энергетических уровней, которые изменяются квази-непрерывно, образуя своей совокупностью *зону* разрешенных энергий (разность энергий соседних уровней составляет 10^{-22} эВ). Отличительной особенностью электронов является их распределение по состояниям в соответствии с *принципом Паули*: в квантовой системе не может быть более одной частицы в каждом квантовом состоянии, которое характеризуется одной совокупностью квантовых чисел.

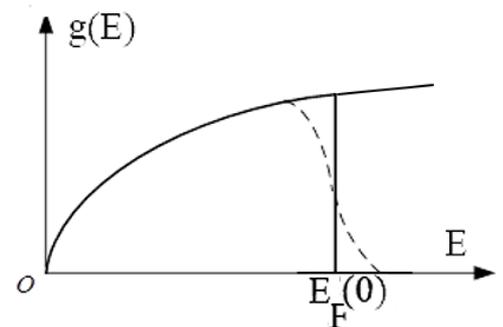
Волновая функция электрона и, соответственно, его состояние определяется значениями тройки чисел n_1, n_2, n_3 , а также спиновым квантовым числом, которое может принимать одно из двух значений $m_s = \pm 1/2$.

Одному и тому же значению суммы $n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ соответствует несколько возможных комбинаций чисел n_1, n_2, n_3 . Следовательно, определенному значению энергии электрона соответствует, несколько возможных состояний. Иначе говоря, уровни энергии свободного электрона являются *вырожденными*. Например, если $n_1 = n_2 = n_3 = 0$, электрон может находиться в одном из двух возможных состояний, соответствующих двум значениям $m_s = \pm 1/2$. В таком случае принято говорить, что кратность вырождения энергетического уровня равна двум. Если же каждое из чисел независимо принимает значения $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1$, то число возможных комбинаций этих чисел по 3 будет равно 6. Далее, число 6 надо также умножить на 2 спиновых состояния, тогда уровню с $n = 1$ будет соответствовать уже 12 различных состояний. Для взаимодействующих электронов вырождение по энергии снимается, и мы увидим большее число уровней, в этом случае говорят о расщеплении энергетических уровней во внешнем поле.

Функции распределения электронов

Функции распределения играют в статистической физике очень важную роль. Так, например, если известна функция плотности состояний $g(E)$, то можно найти среднее значение любой физической величины $f(E)$, на указанном интервале энергий. *Плотностью состояний* называется количество разрешенных состояний в единице объема кристалла, приходящихся на единичный энергетический интервал. Пусть dv_E – число электронных состояний в интервале энергий от E до $E + dE$, то *функцией плотности состояний* называется следующая величина $g(E) = \frac{dv_E}{dE}$, определяющая число состояний, приходящееся на единичный интервал энергии. Можно показать, что для единичного объема $g(E) \sim \sqrt{E}$. Ниже приведен график функции $g(E)$ при $T = 0$ К. Площадь под графиком функции плотности состояний численно равна количеству состояний электронов. Нагревание кристаллической решетки сопровождается переходом электронов с уровней, примыкающих к уровню $E_F(0)$, на вышележащие уровни. В результате этого, в форме графика вертикальная линия заменится пунктирной, при этом, площадь под кривой не изменится. Область «размытия» в районе величины $E_F(0)$ занимает узкий энергетический промежуток шириной порядка kT (k – постоянная Больцмана). С помощью функции плотности состояний можно определить максимальную энергию электронов в кристалле при $T = 0$ К:

$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_0)^{\frac{2}{3}}$, где $n_0 = \frac{N_e}{L^3}$ – концентрация электронов. Для меди – $E_F(0) = 7$ эВ, а для золота и серебра – $E_F(0) = 5$ эВ.



В случае многоэлектронной системы можно ввести понятие распределения электронов по одночастичным состояниям. Это распределение производится в соответствии с квантовой статистикой Ферми – Дирака, в основе которой лежат *принцип тождественности (неразличимости)* одинаковых частиц (например, электронов) и *принцип Паули*. Необходимо учесть, что количество электронов на каждом из энергетических уровней разрешенных зон не может быть больше кратности вырождения уровня. В частности, при вырождении уровней только по спиновому квантовому числу $m_s = \pm 1/2$, количество электронов на каждом уровне не превышает двух.

Закон распределения электронов, находящихся в некотором объеме V при температуре T по одночастичным состояниям (*закон распределения Ферми – Дирака*) имеет следующий вид: $dN_E = \frac{dv_E}{\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)+1}$. Здесь dN_E – число электронов, dv_E –

число электронных состояний с энергией в интервале от E до $E + dE$, k – постоянная Больцмана, E_F – параметр распределения, имеющий размерность энергии. Этот параметр называется *энергией Ферми (или уровнем Ферми)* и определяется из условия нормировки. Функция $f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)+1}$, входящая в закон называется, функ-

цией распределения *Ферми – Дирака, которая показывает, какую часть от общего числа свободных электронов составляют электроны с заданной энергией E* . Другими словами, данная функция определяет *вероятность* того, что электрон находится на выделенном энергетическом уровне.

Уровень Ферми – энергетический уровень, вероятность заполнения которого равна 0,5 при температурах, отличных от температуры абсолютного нуля. В предельном случае, при $T=0K$, уровень с численным значением энергии $E_F(0)$, будет последним («верхним») заполненным электронами, а все остальные электроны будут находиться на низших энергетических уровнях.

Для большого числа частиц занятые состояния займут места внутри некоторой сферы (*ферми-сферы*) в k -пространстве. Поверхность этой сферы называется *поверхностью Ферми*. Радиус этой сферы (называемый *радиусом Ферми*) определяется числом частиц, соответственно, энергия частиц с фермиевским импульсом $p_F = \hbar k_F$ есть энергия Ферми. Скорость электронов на уровне Ферми называют скоростью Ферми $v_F = \frac{p_F}{m} = \sqrt{\frac{2E_F}{m}}$.

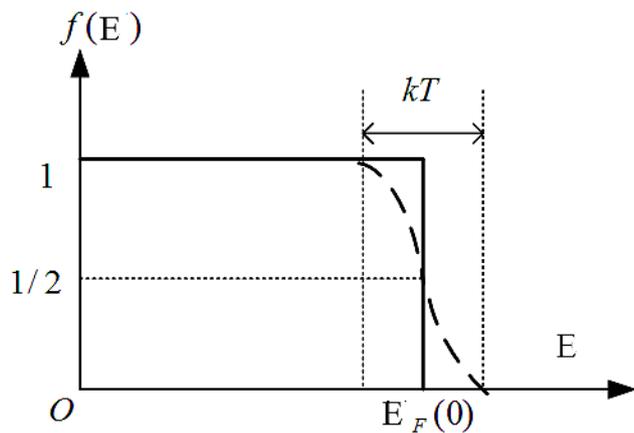
Максимальная энергия электронов в кристалле при $T = 0K$ равна:

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_0)^{\frac{2}{3}}, \text{ где } n_0 = \frac{N}{L^3} \text{ – концентрация электронов.}$$

Для меди – $E_F(0) = 7$ эВ, а для золота и серебра – $E_F(0) = 5$ эВ.

При $T \neq 0$ распределение электронов по состояниям практически не изменяется, т.к. лишь незначительная часть электронов, заполняющая энергетические состояния в узкой энергетической полосе шириной kT (k – постоянная Больцмана) вблизи уровня Ферми, может увеличить свою кинетическую энергию. Основное количество электронов остается в прежнем энергетическом состоянии.

График функции распределения электронов $f(E)$ для $T = 0K$ изображен на рисунке сплошной линией.



При $T > 0\text{K}$ верхний из заполненных уровней будет расположен выше уровня Ферми: график функции в этом случае изображен пунктирной линией. Поскольку энергия Ферми имеет значение примерно равное 5 эВ, что значительно больше средней энергии теплового движения при обычных температурах ($kT \approx 0,03$ эВ), пунктирный «хвост» графика занимает узкий энергетический промежуток шириной порядка kT . По-

этому лишь очень небольшая часть электронов, с величиной энергии в «хвосте» графика, может переходить на другие уровни, то есть воспринимать тепловую энергию.

Зонная теория кристаллов

Теория свободных электронов не объясняет деления твердых тел на металлы, полупроводники и диэлектрики, у которых при одинаковых по порядку величины межатомных расстояниях и энергиях взаимодействия электропроводность отличается на 25 порядков: от $10^4 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$ для металлов до $10^{-21} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$ у диэлектриков.

Поэтому следующей задачей будет являться учет движения электрона в потенциальном поле кристаллической решетки.

При исследовании особенностей движения электронов в кристаллах будем основываться на ряде упрощающих предположений:

1) ионы, ввиду их большой массы, рассматриваются как неподвижные источники поля, действующего на электроны;

2) расположение ионов в пространстве считается точно периодическим: они размещаются в узлах идеальной решетки данного кристалла. Задав три независимых вектора $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, можно представить кристаллическую решетку как последовательное повторение построенного на них параллелепипеда, называемого *элементарной ячейкой* данного кристалла;

3) система электронов, взаимодействующих с атомными ядрами и друг с другом по закону Кулона, заменяется системой N независимых электронов, движущихся в потенциальном поле, которое складывается из поля атомных ядер и эффективного поля, приближенно описывающего взаимодействие между электронами.

Рассмотрим случай применения квантового подхода к изучению состояния электронов в кристалле в *приближении слабой связи*. В модели слабой связи электроны рассматриваются как почти свободные – слабое взаимодействие с периодическим потенциалом кристалла слабо искажает их энергетический спектр. Структура энергетического спектра следует из решения стационарного уравнения Шредингера для квази-свободных электронов, движущихся в силовом поле кристаллической решетки $U(\vec{r}) = -e\varphi(\vec{r})$, где $\varphi(\vec{r})$ – потенциальная функция электрона в кристалле:

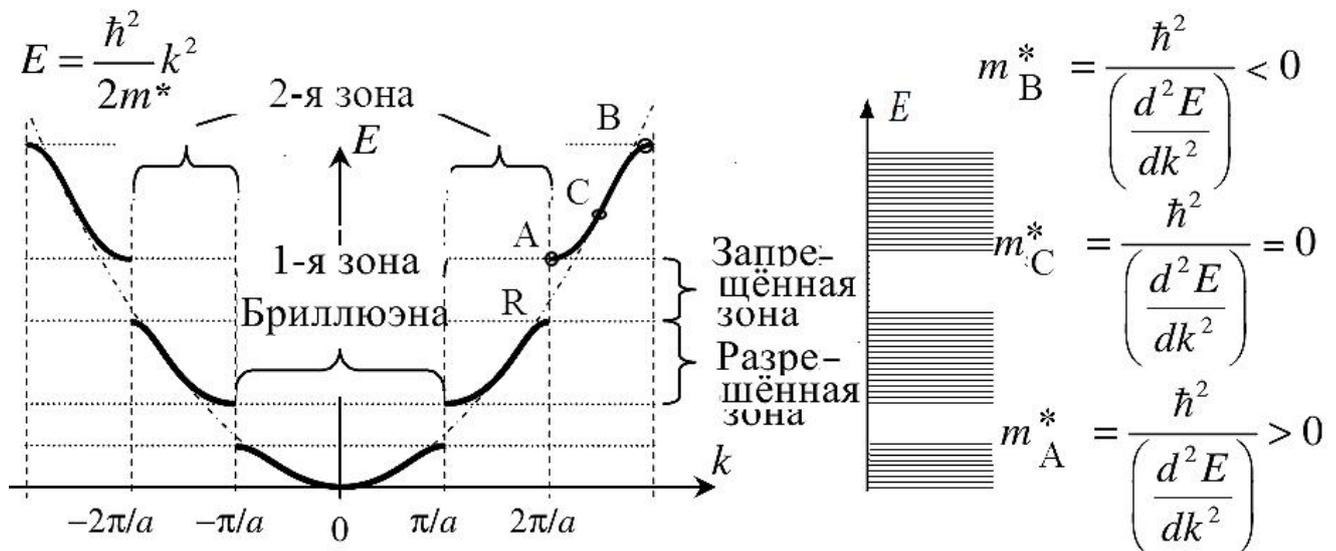
$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \text{ где } m_e \text{ – масса электрона.}$$

Определив из уравнения волновую функцию $\psi(\vec{r})$, можно найти по известным правилам квантовой механики средние значения всех величин, характеризующих поведение электрона в кристалле. Потенциальная функция поля, в котором находится электрон, обладает свойством периодичности при сдвиге аргумента \vec{r} на вектор решетки $\vec{a}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$: $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{a}_n)$. Если соответствующему собственному значению энергии E принадлежит только одна собственная функция (т. е. энергетический уровень не вырожден), то функции $\psi(\vec{r})$ и $\psi(\vec{r} + \vec{a}_n)$ могут отличаться только постоянным множителем: $\psi(\vec{r} + \vec{a}_n) = c_n \psi(\vec{r})$.

Можно показать, что $c_n = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_n}$, где \vec{k} – произвольный вещественный вектор ($\vec{k} \cdot \vec{a}_n$ – скалярное произведение векторов). В итоге волновая функция электрона в поле кристаллической решетки имеет следующий вид: $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_n} u_{\vec{k}}(\vec{r})$ – функция Блоха, где $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}_n)$ – некоторая периодическая функция.

Для простоты, рассмотрим одномерный случай потенциальной функции поля: $U(x) = U(x + na)$. Решение стационарного уравнения Шредингера для этого случая дает волновую функцию следующего вида: $\psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$. В приближении свободных электронов их энергия имеет вид: $E = \frac{p^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, где m^* – эффективная масса электрона.

Расчет показывает, что для электронов, движущихся в периодическом поле кристалла, функция энергии претерпевает *разрывы* в точках $k_x = n \frac{\pi}{a}$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$).



Первая разрешенная энергетическая зона соответствует интервалу значений $-\frac{\pi}{a} < k_x < \frac{\pi}{a}$ и называется *первая зона* Бриллюэна. *Вторая зона* Бриллюэна задается

интервалами: $(-\frac{2\pi}{a} < k_x < -\frac{\pi}{a})$, $(\frac{\pi}{a} < k_x < \frac{2\pi}{a})$. В связи с периодичностью функции

$E(k)$ (точки R и B описывают одинаковые электронные состояния), нет необходимости изображать все зоны Бриллюэна. Разрывы в спектре энергии происходят на границах зон. Таким образом, зоны Бриллюэна имеют ширину $2\pi/a$, зависящую только от постоянной решетки, а шаг квантования зависит только от размеров кристалла.

В случае одномерного элемента кристалла с линейным размером $L = Na$ имеется ровно N разрешенных значений k_x . Так как существует еще спиновое квантовое число $m_s = \pm 1/2$, то в каждой зоне, с учетом принципа Паули, может находиться $2N$ электронов.

Эффективная масса электрона m^* – знакопеременная величина, что связано с кривизной линии графика $E(k)$: ее величина положительна в нижней части зоны вблизи дна (точка A), и отрицательна в верхней, вблизи потолка зоны (точка B). Отсюда следует, что электроны, находящиеся у потолка зоны, ускоряются внешним полем в направлении, противоположенном приложенной силе. Для устранения этого противоречия такому "электрону" приписали положительный заряд. Это особое электронное состояние вблизи потолка зоны называют "дыркой". Её эффективная масса отличается от эффективной массы электрона в зоне проводимости. Концепция эффективной массы позволяет использовать классические выражения для ускорения, энергии и импульса при описании движения электронов в кристалле.

Металлы, диэлектрики и полупроводники.

В зависимости от характера заполнения электронами верхней зоны все твёрдые тела делятся на три группы: металлы, диэлектрики и полупроводники. У некоторых твёрдых тел самая верхняя зона, содержащая электроны может быть заполнена частично, т.е. у неё имеется часть свободных уровней. Приложим к такому кристаллу внешнее электрическое поле. Известно, что в конце длины свободного пробега под действием внешнего электрического поля электроны приобретают энергию от 10^{-8} до 10^{-4} эВ. Эта энергия значительно больше, чем расстояние между соседними уровнями зоны (10^{-22} эВ). В результате электроны верхней зоны переходят на свободные уровни с более высокой энергией. Если смещающиеся электроны непрерывно отводить от тела, что возможно в электрической замкнутой цепи, то квантовые переходы электронов будут происходить непрерывно долго, пока в цепи будет источник внешнего поля. Таким образом, твёрдые тела с указанным характером заполнения верхней зоны будут хорошо проводить электрический ток, такие тела являются *металлами*.

При комнатной температуре проводимость металлов находится в пределах: $\sigma = 10^7 - 10^8 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$. С точки зрения зонной теории увеличения валентности металла не приводит к увеличению его электропроводности σ , так как она зависит не от числа валентных электронов, а от отношения числа электронов проводимости к общему числу энергетических уровней. Например, у 3-валентного алюминия σ почти вдвое меньше, чем у 1-валентной меди.

Так как электрические, магнитные, оптические свойства металлов обусловлены процессами лишь в одной частично заполненной зоне в окрестности уровня Ферми, то для металлов может быть использована квантовая теория свободных электронов.

У многих твёрдых тел самая верхняя зона, содержащая электроны, может быть заполнена электронами полностью, а следующая за ней зона полностью пустая и отделена от предыдущей зоны большим промежутком запрещённых энергий ($\Delta E > 2$ эВ). Такие твёрдые тела получили название *диэлектриков*. В этом случае верхняя полностью заполненная зона называется *валентной (V-зона)*, а следующая за ней пустая зона разрешенных энергий называется *зоной проводимости (С-зона)*. Промежуток запрещённых энергий, который разделяет валентную зону и зону проводимости называется *запрещённой зоной*. Ширина этого промежутка: $\Delta E_g = E_c - E_v$, где E_c – дно зоны проводимости, E_v – потолок валентной зоны. При $T = 0$ К диэлектрик не проводит электрический ток. При повышении температуры диэлектрика, электроны валентной зоны начинают взаимодействовать с колебаниями кристаллической решётки и получают значительно большую энергию. Процесс передачи энергии электронам – статистический. Тем не менее, число электронов, которые получают от решётки энергию $\geq \Delta E_g$ ничтожно мало, поэтому будет мало число электронов, которые способны перейти за счёт тепловых переходов из валентной зоны в зону проводимости. Таким образом, твёрдые тела с большой шириной запрещённой зоны плохо проводят электрический ток, их проводимость $\sigma < 10^{-10} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$.



Если у твердого тела при $T = 0$ К самая верхняя зона полностью заполнена, а следующая за ней зона проводимости пустая и отделена от предыдущей зоны нешироким промежутком запрещенных энергий ($\Delta E < 2$ эВ), то твердое тело называется *полупроводником*. Как видно, принципиальной разницы между полупроводником и диэлектриком нет. При достаточно высоких температурах у полупроводников могут иметь место тепловые переходы из валентной зоны в зону проводимости за счет взаимодействия валентных электронов с ионами кристаллической решетки. Электроны, перешедшие из валентной зоны в зону проводимости, могут участвовать в переносе электрического тока. Появившиеся свободные уровни в валентной зоне (вакансии) будут также участвовать в переносе электрического тока. Носителями тока в валентной зоне являются дырки. Таким образом, проводимость полупроводника является активированной. При $T = 0$ К полупроводники, как и диэлектрики не проводят электрический ток. Чем меньше ΔE_g , тем выше при прочих равных условиях электропроводность полупроводника. Электропроводность полупроводника лежит в широком диапазоне значений: $\sigma_{nn} = 10^{-10} - 10^2 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$.

Электропроводность металлов

В классической электронной теории электроны проводимости в металлах рассматриваются как классический идеальный газ, частицы которого распределяются по состояниям в соответствии с классической статистикой Максвелла-Больцмана. Следует иметь в виду, что в классической теории внешнее электрическое поле приводит в упорядоченное движение *все свободные* электроны металла, в то время как в квантовой теории ток проводимости создается только теми электронами, энергия которых *близка к уровню Ферми*. В рамках квантово-механической теории движение электронов в металле можно рассматривать как распространение их дебройлевских волн. Чем ниже температура и совершеннее кристалл, тем меньше рассеяние волн, тем ниже его электрическое сопротивление. Расчеты показывают, что коэффициент рассеяния α (величина, определяющая долю рассеянных электронов), приблизительно, равен $1/\langle\lambda\rangle$, где $\langle\lambda\rangle$ – средняя длина свободного пробега электрона. Численные оценки с учетом физических характеристик кристалла показывают, что если постоянная решетки составляет $a \approx 0,3$ нм, то при комнатной температуре средняя длина волны электрона равна $2\pi/k \approx 22$ нм, что *много больше* постоянной решетки. Этот результат подтверждает предположение о том, что электроны тока проводимости рассеиваются не на атомах металла, а на нарушениях периодичности их расположения. Нарушение строгой периодичности расположения атомов связано с различного рода дефектами – неконтролируемыми примесями других химических элементов, вакансиями, дислокациями, а также тепловыми колебаниями атомов. *Электропроводность* – способность тела пропускать электрический ток под действием электрического поля. Количественной мерой этого явления служит удельная электропроводность σ . Величина удельной электропроводности входит в локальный закон Ома $\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}$, \vec{E} – вектор напряженности электрического поля; обратная величина $\rho = \sigma^{-1}$ – удельное сопротивление металла.

Расчет, основанный на квантовой статистике Ферми-Дирака, приводит к выражению: $\sigma_{кв} = \frac{ne^2 \langle\lambda_F\rangle}{m^* \langle v_F \rangle}$, вид которого совпадает с классическим, однако по-другому определяются величины $\langle\lambda\rangle$, $\langle v \rangle$, m . Здесь m^* – эффективная масса электрона, $\langle v_F \rangle$ – скорость теплового движения электрона с энергией Ферми, слабо зависящая от температуры, n – концентрация электронов с энергиями вблизи уровня Ферми.

В квантовой теории применяется средняя длина свободного пробега электрона на уровне Ферми – $\langle\lambda_F\rangle$, которая вычисляется по формуле: $\langle\lambda_F\rangle = \frac{aE}{\pi kT}$, где k – постоянная Больцмана, a – период решетки. В итоге получаем: $\sigma_{кв} \sim \frac{1}{T}$ и $\rho_{кв} \sim T$.

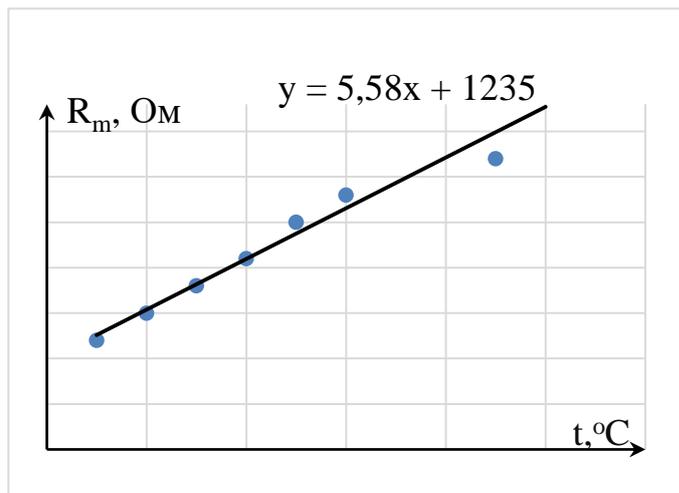
Для многих металлов зависимость сопротивления от температуры имеет линейный характер в широком интервале температур: $\rho = \rho_0(1 + \alpha \cdot t)$ или $R = R_0(1 + \alpha \cdot t)$, где ρ_0, R_0 – удельное сопротивление и сопротивление, соответственно, при $t_0 = 0^\circ C$, α – температурный коэффициент сопротивления.

При очень низких температурах $\langle \lambda_f \rangle \sim T^{-5}$, и следовательно $\sigma \sim T^{-5}$, что также согласуется с экспериментом. Таким образом, в рамках квантовой теории получено теоретическое обоснование экспериментальной зависимости электрической проводимости металлов от температуры.

Рассмотрим метод определения температурного коэффициент сопротивления металла с помощью *MS Excel*. По экспериментальным данным t и R_m , построим точечную диаграмму в виде множества маркеров, добавим линию тренда «линейная» и укажем «показать ее уравнение». Получим, например, $y = 5,58x + 1235$. Сравним с формой $R_m = R_0 \cdot \alpha \cdot t + R_0$, тогда

$$R_0 \alpha = 5,58 \text{ Ом} \cdot \text{C}^{-1}; R_0 = 1235 \text{ Ом} ,$$

откуда $\alpha = \frac{5,58}{1235} = 4,5 \cdot 10^{-3} \text{ C}^{-1}$.



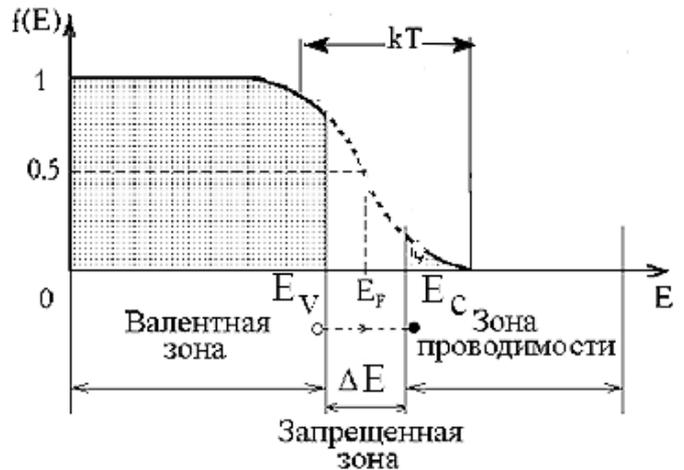
Электропроводность полупроводников

Электрические свойства полупроводников зависят от ширины запрещенной зоны, разделяющей валентную зону и зону проводимости, а также от локальных уровней энергии, возникающих в запрещенной зоне при легировании полупроводников. У типичного полупроводника – кремния ширина запрещенной зоны при комнатной температуре составляет 1,12 эВ, а при $T = 0$ К составляет 1,21 эВ, для германия ширина запрещенной зоны при комнатной температуре составляет 0,67 эВ. У полупроводников только часть электронов из валентной зоны способна при комнатной температуре преодолеть запрещенную энергетическую зону, т.е. перейти в зону проводимости. С повышением температуры T полупроводника растет концентрация электронов с энергиями, равными энергиям зоны проводимости, так как электроны, вследствие теплового возбуждения переходят туда, из валентной зоны. Вследствие появления вакантных состояний на уровнях, соответствующих энергетическим уровням валентной зоны электроны этой зоны также придут в движение под воздействием внешнего поля. При наличии вакантных мест коллективное поведение электронов валентной зоны можно представить как поведение такого же числа положительно заряженных *квазичастиц*, получивших название *дырок*, то есть частиц с положительным зарядом e , имеющих скорость отсутствующего электрона.

При комнатной температуре ($T = 300$ К) тепловая энергия $kT \approx 0,026$ эВ, поэтому при ширине запрещенной зоны 0,1 – 1,5 эВ можно считать, что для электронов в зоне проводимости выполняется сильное неравенство $(E - E_F) \gg kT$. В таком предельном случае функция распределения Ферми-Дирака $f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)+1}$ для вероятности нахождения электрона в зоне проводимости, а дырки в валентной зоне, переходит в распределение Больцмана вида $\exp\left(-\frac{E-E_F}{kT}\right)$.

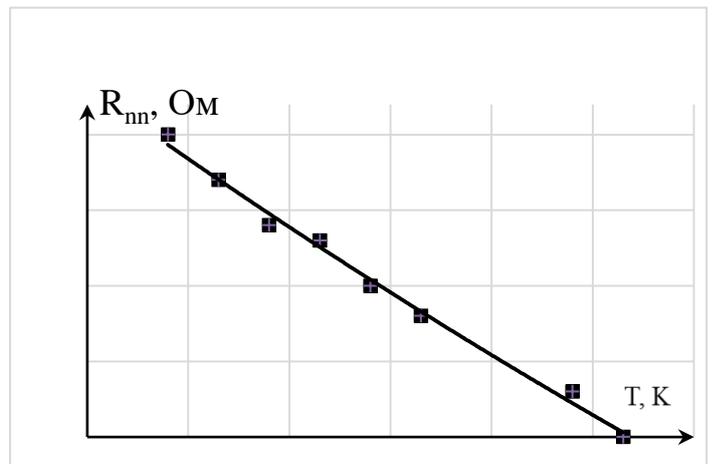
Отметим, что величина *вероятности* нахождения электрона в зоне проводимости (и дырки в валентной зоне) пропорциональна *концентрации носителей* с соответствующими энергиями.

Энергия активации или ширина запрещённой зоны равна $\Delta E = E_c - E_v$, где E_c – дно зоны проводимости, E_v – потолок валентной зоны. Тогда, в соответствии с распределением Больцмана концентрация электронов вблизи дна зоны *проводимости* задаётся выражением $n_e(E_c) = n_0 \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$. Концентрация же дырок вблизи верхнего края *валентной* зоны определится как $n_h(E_v) = n_0 \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{kT}\right)$, где n_0 –



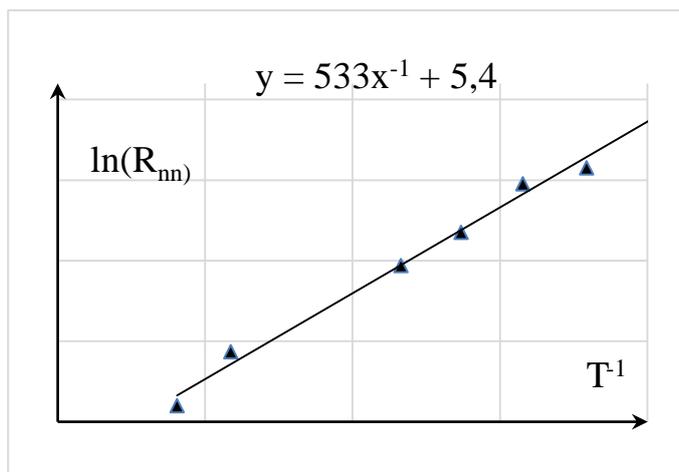
концентрация электронов и дырок на уровне «потолка» валентной зоны. В собственных (беспримесных) полупроводниках в равновесном состоянии концентрация электронов в зоне *проводимости* и дырок в *валентной* зоне равны $n_e(E_c) = n_h(E_v)$, поэтому можно приближенно считать, что уровень Ферми не зависит от температуры и лежит посередине запрещенной зоны: $E_c - E_F = E_F - E_v$, $E_F = \frac{E_c + E_v}{2}$. Окончательно для концентрации электронов вблизи дна зоны *проводимости* получаем: $n_e(E_c) = n_0 \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) = n_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right)$.

Описанный тип проводимости полупроводников называют *собственной проводимостью*. В этом случае величина удельной электропроводности имеет вид: $\sigma = \sigma_e + \sigma_h = e(n_e \cdot \mu_e + n_h \cdot \mu_h)$, где μ_e , μ_h – подвижности электронов и дырок, соответственно. В полупроводниках зависимостью $\mu(T)$ можно пренебречь по сравнению с более сильной зависимостью от температуры концентрации электронов и дырок $n_e(T)$, то есть, можно считать, что в полупроводниках $\mu \approx const$. Таким образом, на температурную зависимость электропроводности в полупроводниках влияет, в основном, изменение концентрации носителей тока: $\sigma(T) \approx const \cdot n_e(T) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right)$. Определяя обратную величину $\rho = \sigma^{-1}$ как удельное сопротивление, получаем для температурной зависимости со-



противления собственного полупроводника следующее выражение: $R_{mn} = R_0 e^{\frac{\Delta E}{2kT}}$.

Рассмотрим *первый метод* определения энергии активации для собственного полупроводника с помощью *MS Excel*. По экспериментальным данным T и R_{mn} , построим точечную диаграмму в виде множества маркеров, добавим линию тренда



«экспоненциальная», тем самым мы убедимся, что экспериментальный график может описываться функцией вида $R_{mn} = R_0 e^{\frac{\Delta E}{2kT}}$. Далее логарифмируем R_{mn} и получаем $\ln R_{mn} = \ln R_0 + \frac{\Delta E}{2kT}$. Построив с помощью *MS Excel* точечную диаграмму $\ln R_{mn}$ от T^{-1} по экспериментальным данным, добавим линию тренда «линейная» и укажем «показать ее уравнение». Получим, например, $y =$

$533 x^{-1} + 5,4$ и сравним ее с формой $\ln R_{mn} = \frac{\Delta E}{2k} \cdot T^{-1} + \ln R_0$, тогда

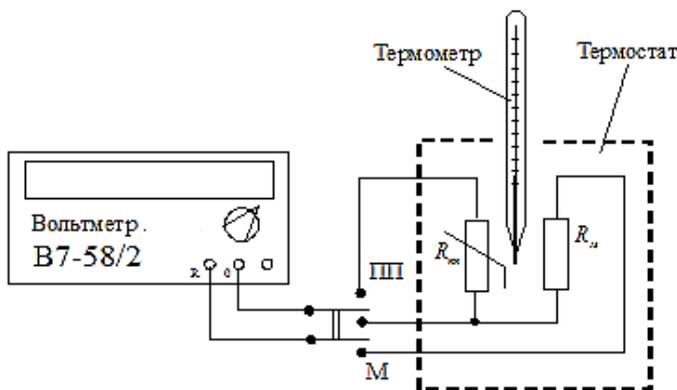
$$\frac{\Delta E}{2k} = 533 \text{ K} ; \ln R_0 = 5,4, \text{ откуда } \Delta E = \frac{533 \cdot 2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,092 \text{ эВ}.$$

Второй метод: для любых двух точек на этой прямой рассчитать постоянную величину $\frac{\Delta E}{2k}$, которая равна $\text{tg}\varphi$ – тангенс угла наклона графика к оси T^{-1} . Тогда

$\Delta E = \frac{2k}{e} \cdot \text{tg}\varphi$ где $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{K}^{-1}$ – постоянная Больцмана, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$ – элементарный заряд.

ОПИСАНИЕ ЛАБОРАТОРНОЙ УСТАНОВКИ

Установка состоит из нагревательной камеры (термостата), куда на одном уровне с термометром помещают металлический и полупроводниковый образцы, в качестве которых используются проволока из сплава меди и термосопротивление. Для установления температурной зависимости сопротивления, металл М и полупроводник ПП с помощью ключа поочередно подключают к клеммам измерительного прибора (вольтметра).



Порядок измерений

1. Изучить назначение основных элементов лабораторной установки.
2. Подключить термостат и вольтметр В7-58/2 к электросети. На вольтметре нажать переключатель $k\Omega$ и предел измерений – 2 кОм; на термостате тумблер СЕТЬ установить в верхнее положение.
3. Исследовать зависимость сопротивления металла (М) и полупроводника (ПП) от температуры через каждые 10°C (9 -10 точек). Подключения (М) или (ПП) к измерителю производить тумблером в положение (М) - (ПП).
4. Результаты измерений и вычислений занести в таблицу.

№	t, °C	T, K	1/T, K ⁻¹	R _М , Ом	α , K ⁻¹	R _{ПП} , Ом	$\ln R_{pp}$	ΔE , эВ
1								
2								
3								

5. Построить график функции $R_m(t)$, по графику вычислить α – температурный коэффициент сопротивления металла.
6. Построить график функции $\ln R_{pp}(T^{-1})$, по графику вычислить ΔE – энергию активации для собственного полупроводника.
7. Выключить термостат и вольтметр, для чего тумблер сеть установить в нижнее положение и вынуть вилки из розеток электросети.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие предположения сделаны при исследовании особенностей движения электронов в кристаллах.
2. Какие волновые функции описывают свободные электроны?
3. Какие значения принимает модуль волнового вектора свободного электрона и почему?
4. Сформулируйте принцип Паули.
5. Объясните, почему уровни энергии свободного электрона являются вырожденными.
6. Дайте определение функции плотности состояний. Постройте ее график.
7. Дайте определение закону распределения Ферми – Дирака. Что такое уровень Ферми.
8. Дайте объяснение графику функции Ферми – Дирака.
9. Каким свойством обладает потенциальная энергия электрона в кристалле?
10. Запишите выражение для стационарного уравнения Шредингера в периодической решетке и для волновой функции электрона.
11. Какую особенность имеет график энергии электрона в кристалле?
12. Дайте определение зоны Бриллюэна.
13. Что такое эффективная масса электрона в кристалле, какие она принимает значения?

14. Дайте классификацию энергетических зон в кристалле.
15. Как описывается квантомеханический процесс движения и рассеяния электронов в металле?
16. Запишите и объясните квантовое выражение для удельной электропроводности в металлах.
17. Какие электроны участвуют в обеспечении электропроводности в собственном полупроводнике?
18. С какой статистической характеристикой связана величина концентрации носителей в полупроводнике?
19. Запишите выражение для величины концентрации электронов вблизи дна зоны проводимости. Объясните его происхождение.
20. Какие основные предположения сделаны для получения формулы для температурной зависимости сопротивления собственного полупроводника $R_m = R_0 e^{\frac{\Delta E}{2kT}}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы: Учебное пособие для физич. спец. вузов. – 3-е изд. стер. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. – 256 с.
2. Савельев И.В. Курс общей физики в 4-х томах. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – М.: КноРус, 2012. – Т.3. – 368 с.
3. Трофимова Т.И. Курс физики. – 20-е изд., стер. – М.: Изд-во «Академия», 2014. – 560 с.
4. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Курс физики. – 9-е изд., стер. – М.: Изд-во «Академия», 2014. – 720 с.