

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
Санкт-Петербургский горный университет

Кафедра общей и технической физики

ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ТВЁРДЫХ ТЕЛ

*Методические указания к самостоятельным работам
для студентов магистратуры направления 22.04.01*

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
2021

УДК 531/534 (073)

ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ТВЁРДЫХ ТЕЛ:
Методические указания к самостоятельным работам / Санкт-Петербургский горный университет. Сост. *Н.А. Тупицкая*. СПб, 2021. 30 с.

Методические указания разработаны в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования, типовой рабочей программой дисциплины, рекомендованной УМО вузов.

Предназначены для студентов магистратуры направления 22.04.01 «Материаловедение и технологии материалов» направленности «Материаловедение и технологии наноматериалов и покрытий».

Научный редактор д.ф.-м.н., *А.С. Мустафаев*

Рецензент к.т.н., *Л.С. Вавилова* (ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН)

© Санкт-Петербургский
горный университет, 2021

ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ТВЁРДЫХ ТЕЛ

*Методические указания к самостоятельным работам
для студентов магистратуры направления 22.04.01*

Сост. *Н.А. Тупицкая*

Печатается с оригинал-макета, подготовленного кафедрой
общей и технической физики

Ответственный за выпуск *Н.А. Тупицкая*

Лицензия ИД № 06517 от 09.01.2002

Подписано к печати 08.09.2021 . Формат 60×84/16.
Усл. печ. л. 1,7. Усл.кр.-отт. 1,7. Уч.-изд.л. 1,5. Тираж 50 экз. Заказ 806.

Санкт-Петербургский горный университет
РИЦ Санкт-Петербургского горного университета
Адрес университета и РИЦ: 199106 Санкт-Петербург, 21-я линия, 2

ПРЕДИСЛОВИЕ

Данные методические указания предназначены для студентов магистратуры направления 22.04.01 – «Материаловедение и технологии материалов», профиль подготовки «Материаловедение и технологии наноматериалов и покрытий»

Они могут быть использовано студентами всех специальностей и направлений, изучающих дисциплину «Физика» в объеме четырех семестров. Методические указания будут несомненно полезными студентам бакалавриата направления подготовки 11.03.04 «Электроника и микроэлектроника» при изучении дисциплины «Физика конденсированного состояния»

ВВЕДЕНИЕ

Электрон - элементарная частица. Открытие электрона, изучение его уникальных свойств стимулировали небывалые темпы новых теоретических и экспериментальных исследований. Электрон является одним из важнейших строительных материалов при образовании атома, играет определяющую роль в фундаментальных электромагнитных процессах и в формировании огромного количества свойств твёрдых тел. Из всего многообразия элементарных частиц электрон занимает особое место. Невозможно представить какой-либо физический процесс, протекающий в атоме или твёрдом теле, без его участия.

Поведение любых микроскопических частиц, в частности, электронов, в силу проявления ими волновых свойств, не подчиняется законам классической физики. Для их изучения используется раздел физики, называемый квантовой механикой.

Для описания коллективов (систем) атомов, молекул надо применять статистическую физику, так как они состоят из большого числа частиц. В молекулярной физике мы использовали классической статистикой Максвелла и Больцмана для изучения распределения молекул по скоростям и энергиям. При рассмотрении квантовых систем частиц надо применять квантовую статистику.

Данные методические указания содержат два теоретических раздела, примеры решения задач, условия задач для самостоятель-

ной работы, задание на расчётно-графическую работу, приблизительный список рефератов.

1. ЭЛЕМЕНТЫ квантовой механики

В этом разделе изучаются темы: 1.1 Уравнение Шредингера;

1. Частица в одномерной потенциальной яме; 1.3 Потенциальный барьер; 1.4 Многоэлектронные атомы. После изучения материала темы ответьте на поставленные вопросы. В конце раздела приведены примеры решения задач по рассмотренным темам и условия задач для самостоятельного решения. Подробнее с данной темой можно ознакомиться в пособиях [1-5].

1.1 уравнение шрёдингера

Квантовая механика – механика микромира. В соответствии с принципом корпускулярно-волнового дуализма микрочастицы обладают волновыми свойствами. Поэтому к ним не применимы законы классической физики. В классической механике состояние системы характеризуется координатами (траектория), импульсом, моментом импульса, энергией.

В квантовой механике состояние микрочастиц описывается с помощью волновой функции Ψ , квадрат модуля которой есть плотность вероятности нахождения частицы в данной точке пространства.

$$\frac{dw}{dV} = |\psi|^2 = \psi\psi^*$$

Вероятность нахождения частицы во всем пространстве, естественно, равна 1, тогда

$$\int_V |\psi|^2 dV = \int_V \psi\psi^* dV = 1.$$

Это условие нормировки Ψ -функции.

Для нахождения волновой функции используется уравнение Шрёдингера, основное уравнение квантовой механики. Оно имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (1.1)$$

здесь m – масса частицы, U – функция координат и времени, характеризующая силовое поле, в котором находится частица, Δ – оператор Лапласа:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

В случае стационарных состояний (все физические величины не изменяются с течением времени) уравнение Шредингера (1.1) запишется так:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \cdot \psi = 0, \quad (1.2)$$

здесь E – полная энергия частицы, $U(\vec{r})$ – потенциальная энергия.

Физический смысл имеют лишь те решения уравнения (1.2), которые удовлетворяют стандартным условиям: $\psi(\vec{r})$ должна быть *конечной, однозначной, непрерывной и гладкой*. Такие решения возможны при некоторых значениях энергии E (собственные значения), каждому значению энергии соответствует решение (собственные функции). Так естественным образом возникает квантование энергии, импульса, момента импульса и возможность найти вероятности тех или иных значений этих величин.

1.2 Частица в одномерной потенциальной яме

Проиллюстрируем возможности отыскания волновой функции для частицы, потенциальная энергия $U(\vec{r})$, которой имеет минимум (потенциальная яма).

На рис. 1.1 показаны графики потенциальной энергии а) электрона в металле, б) гармонического осциллятора, в) взаимодействия атомов в молекуле.

Это примеры потенциальной энергии частицы, называемой потенциальной ямой.

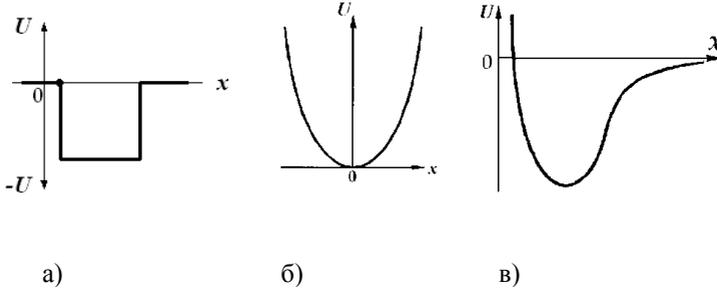


Рис.1.1

Самый простой случай – это одномерная прямоугольная яма $U(x)$ (рис. 1.1, а).

Следует учесть, что потенциальная энергия $U(x) = \infty$ при $x < 0$ и при $x > l$; и $U(x) = 0$ при

$0 < x < l$. Чтобы описать поведение частицы, необходимо найти волновую функцию $\psi(x)$, то есть решить уравнение Шредингера (1.2), полагая в нём $U = 0$ и учитывая, что движение происходит вдоль

оси x и $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, получим:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0. \tag{1.3}$$

Обозначим $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. (1.4)

Тогда уравнение (1.33) будет иметь вид:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0. \tag{1.5}$$

Это уравнение – аналог уравнения гармонических колебаний. Его решение находится в виде:

$$\psi(x) = a \sin(kx + \alpha), \quad (1.6)$$

где a и α – произвольные постоянные.

Волновая функция $\psi(x)$ однозначна, конечна. Она непрерывна при условии $\psi(0) = 0$ и $\psi(l) = 0$.

Из условия $\psi(0) = 0$, $a \sin \alpha = 0$ следует, что $\alpha = 0$. При $\psi(l) = 0$, $a \sin kl = 0$ следует $kl = \pm n\pi$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Подставляя $k = \pm \frac{\pi n}{l}$ в (1.6), получаем

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ml^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.7)$$

Таким образом, энергия частицы принимает **дискретные** значения E_1, E_2, \dots т.е. **квантуется**. Это собственные числа дифференциального уравнения (1.5). Каждому значению E_n соответствует решение уравнения (1.5) – собственная функция ψ_n :

$$\psi_n(x) = a \sin \frac{n\pi}{l} x.$$

Для определения коэффициента, a воспользуемся условием нормировки:

$$a^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x = 1, \quad a = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Таким образом, собственные функции имеют вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.8)$$

На рис. (1.2, б) показаны графики волновых функций ψ_n , а на рис. (1.2, в) графики $|\psi(x)|^2$, т.е. вероятности нахождения частицы в разных точках участка $x \in [0, l]$. Согласно принципу неопределенностей энергия частицы в яме не может быть равна нулю.

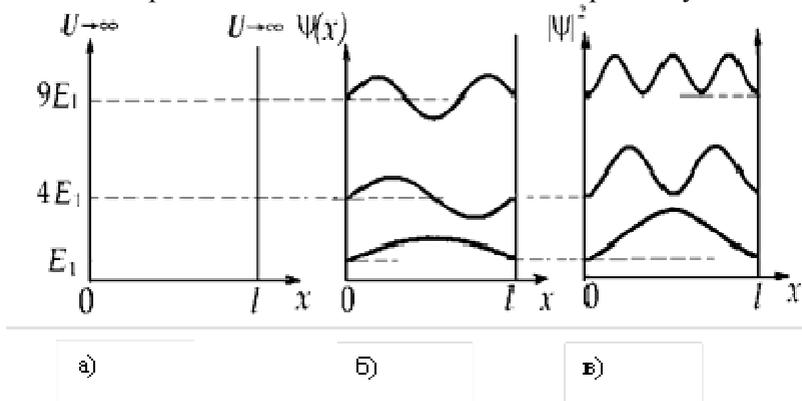


Рис.1.2

Энергетический зазор между двумя соседними уровнями ΔE_n :

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (n+1)^2 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n$$

Вопросы для самопроверки

1. Как описывают состояние микрочастицы?
2. Какому уравнению подчиняется волновая функция?
3. Раскройте смысл величин, обозначенных символами: E , U , входящих в уравнение Шредингера.
4. Запишите волновую функцию для частицы в одномерной потенциальной яме.
5. Каковы особенности энергетического спектра частицы в потенциальной яме?

1.3 Потенциальный барьер

Потенциальный барьер – это зависимость $U(x)$, имеющая максимум. В простейшем случае барьер имеет прямоугольную форму (рис. 1.3, а). На рис. 1.3, б показан график волновой функции. $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $x > l$, $U = U_0$ при $0 \leq x \leq l$.

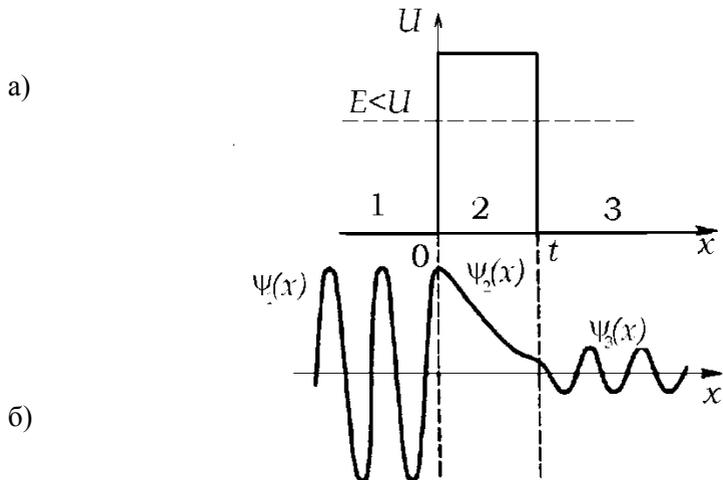


Рис. 1.3

В классической физике частица с энергией $E < U_0$ не может проникнуть из области 1 в область 3.

В квантовой теории наличие волновых свойств у частиц определяет вероятность нахождения частицы в каждой области и, следовательно, вероятность перехода из области 1 в область 3.

Необходимо найти волновые функции для каждой области Ψ_1 , Ψ_2 , Ψ_3 , а затем квадраты их модулей. Задача решается аналогично случаю для потенциальной ямы, поэтому рассмотрим этот случай схематично, т.к. конечный результат используется в различных разделах физики и техники.

Общие решения уравнений Шредингера для областей 1, 2 и 3 имеют вид

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} && \text{(для области 1)} \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} && \text{(для области 2)} \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} && \text{(для области 3)}\end{aligned}\quad (1.9),$$

здесь $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $q = \sqrt{2m(E-U)/\hbar^2}$, A и B – коэффициенты, которые находят из условия нормировки. Слагаемые с коэффициентами B показывают наличие волн, отраженных от стенок барьера, следовательно, $B_3 = 0$.

Квадраты коэффициентов характеризуют вероятности нахождения частицы в соответствующих областях. Таким образом, в квантовой механике рассматриваются системы, в которых прохождение частицы из области 1 в область 3 возможно при $E < U$. Это явление носит название туннельного эффекта. Отношение $\frac{A_1^2}{A_3^2} = D$ – называется коэффициентом прозрачности барьера. Вычисления дают для прямоугольного барьера

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}l\right). \quad (1.10)$$

Для барьера произвольной формы коэффициент прозрачности равен:

$$D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U-E)} dx\right). \quad (1.11)$$

Туннельный эффект – квантовое явление, он применяется для объяснения таких физических явлений как α -распад, спонтанное деление ядер, холодная эмиссия электронов из металлов. На

туннельном эффекте основана работа сканирующего туннельного микроскопа.

Вопросы для самопроверки

1. Что такое потенциальный барьер?
2. От каких факторов зависит коэффициент прозрачности потенциального барьера?

1.4 Многоэлектронные атомы

Для описания атома, в состав которого входит Z электронов необходимо найти волновые функции для каждого электрона с учетом взаимодействия с ядром и с другими электронами. Все электроны имеют одинаковые заряды, массы, спины и другие характеристики. Такие частицы называются **тождественными**. Когда тождественные частицы образуют единую квантовую систему, они приобретают новые качества. Это свойство выражается в квантово-механическом **принципе неразличимости тождественных частиц**.

Неразличимость частиц в квантовой механике

В классической механике частицы одинаковой природы (например, молекулы в газе, движение которых с высокой степенью точности описывается законами классической механике) отличаются координатами и импульсами. Можно фиксировать положение частиц в момент времени t_0 , выбрать определенную группу частиц и следить за их движением по траектории. В квантовой механике понятие траектории неприменимо. Состояние микрочастицы описывается волновой функцией, позволяющей вычислить вероятность нахождения частицы в окрестностях той или иной точки пространства. Поэтому следить за каждой из одинаковых частиц и тем самым различать их невозможно.

Утверждение о неразличимости микрочастиц одной природы называют **принципом неразличимости тождественных частиц**.

Волновая функция системы может быть симметричной, т.е. вообще не меняться при перестановке координат частиц:

$$\Psi(\varepsilon_2, \varepsilon_1) = \Psi(\varepsilon_1, \varepsilon_2).$$

Волновая функция может быть антисимметричной, т.е. при перестановке координат частиц менять знак:

$$\Psi(\varepsilon_2, \varepsilon_1) = -\Psi(\varepsilon_1, \varepsilon_2).$$

Тот факт, что волновая функция системы одинаковых частиц должна быть либо симметричной, либо антисимметричной, **является следствием принципа неразличимости одинаковых частиц, а сама симметричность или антисимметричность волновой функции определяется значением спина частиц, входящих в систему.** Системы частиц, для которых спиновое число S принимает целые значения (целый спин), описываются симметричной функцией. К таким частицам относятся, например, кванты света – фотоны. Системы частиц, для которых спиновое число S принимает полуцелые значения, как для электронов ($S = \frac{1}{2}$), описываются антисимметричной волновой функцией.

Принцип Паули

Принцип неразличимости тождественных частиц относится к фундаментальным принципам квантовой механики. Из него вытекают закономерности распределения частиц по энергетическим состояниям в данной квантовой системе. Именно от него зависят свойства этой системы и её поведение.

В случае системы частиц с целым спином, когда волновая функция системы симметрична, любое количество частиц системы может находиться в одном и том же квантовом состоянии. Естественно, что основным состоянием системы в данном случае является такое, когда все частицы занимают уровень с наименьшим значением энергии. Заметим, что поведение таких частиц подчиняется законам квантовой статистики, разработанной Бозе и Эйнштейном, поэтому частицы с целым спином называют бозонами.

В случае системы частиц с полуцелым спином волновая функция системы антисимметрична. При перестановке координат, определяющих состояние любых двух частиц, она меняет знак, но, с другой стороны, если эти частицы находятся в одном и том же кван-

товом состоянии, когда все координаты совпадают, такая перестановка не должна изменить волновую функцию.

Обобщение опытных данных позволило В. Паули разрешить это противоречие простым утверждением: частицы с полуцелым спином встречаются в природе только в состояниях, описываемых антисимметричными волновыми функциями.

Принцип Паули: в любой системе неразличимых частиц с полуцелым спином не может быть двух частиц в одинаковом состоянии, т.е. с одинаковым набором всех квантовых чисел.

Вопросы для самопроверки

1. В чём суть принципа неразличимости тождественных частиц?
2. Какие частицы описываются антисимметричными волновыми функциями?
3. Сформулируйте принцип Паули.

1.5 ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

Задача

Электрон находится в потенциальной яме на втором энергетическом уровне. Определить вероятность нахождения частицы в первой трети ямы.

$$n = 2$$

$$x_1 = 0$$

$$x_2 = l/3$$

$$P = ?$$

Решение

Вероятность нахождения частицы на каком-либо интервале определяется

формулой:
$$P = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^* \Psi dx.$$

Подставим волновую функцию из (1.11), полагая $n = 2$.

$$P = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^* \Psi dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{2}{l} \sin^2 \frac{2\pi}{l} x dx .$$

В качестве пределов интегрирования берем значения границ указанного в условии задачи интервала

$$\begin{aligned} P &= \frac{2}{l} \int_0^{l/3} \sin^2 \frac{2\pi}{l} x dx = \frac{2}{l} \int_0^{l/3} \frac{1}{2} (1 - \cos \frac{4\pi x}{l}) dx = \\ &= \frac{1}{l} \left(\int_0^{l/3} dx - \int_0^{l/3} \cos \frac{4\pi x}{l} dx \right) = \frac{1}{l} \left[\frac{x}{1} - \frac{1}{4\pi} \left(\sin \frac{4\pi l}{3l} - \sin 0 \right) \right] = \\ &= \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{8\pi} \approx 0,4 \end{aligned}$$

Таким образом, вероятность нахождения электрона в первой трети потенциальной ямы равна 0,4 или 40%.

1.6 ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

Прежде чем приступить к самостоятельному решению задач, будет полезным ознакомиться с методическим указаниями [6].

1. Электрон находится в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками в основном состоянии. Найти вероятность нахождения электрона во второй четверти потенциальной ямы и энергию электрона.

2. Найти вероятность пребывания электрона в последней четверти потенциальной ямы, если электрон находится во втором возбуждённом состоянии.

3. Определите энергетический зазор между второй и третьим энергетическими уровнями электрона в потенциальной яме шириной два нанометра.

4. Электрон находится в потенциальной яме шириной 0,3 нм в возбуждённом состоянии ($n = 3$). Найти среднее значение координаты электрона во второй трети потенциальной ямы.

5. В бесконечно глубокой потенциальной яме находится альфа-частица. Найти ширину потенциальной ямы, если энергия альфа-частицы в основном состоянии равна 5,6 МэВ.

6. Электрон находится в потенциальной яме шириной 0,2 нм. Определить длину волны излучения при переходе электрона третьего энергетического уровня на первый.

7. Протон находится в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной 0,02 пм. Найти длину волны излучения при переходе протона третьего энергетического уровня на второй.

8. Электрон находится в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками в первом возбужденном состоянии. Найти вероятность нахождения электрона во второй трети потенциальной ямы. Чему равна энергия электрона?

9. Протон находится в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной 0,01 пм. Найти энергетический зазор между соседними энергетическими уровнями, соответствующих средней энергии теплового движения протона при 300 К.

10. Электрон находится в потенциальной яме шириной 0,3 нм. Определить длину волны излучения при переходе электрона со второго энергетического уровня на первый.

2. Статистика электронов в кристалле

В этом разделе изучаются темы: 1. Способы описания состояния макроскопической систем. 2. Невырожденные и вырожденные коллективы. 3. Функции распределения частиц по энергетическим состояниям. После изучения материала темы ответьте на поставленные вопросы. В конце раздела приведены примеры решения задач по рассмотренным темам и условия задач для самостоятельного решения. Подробнее с данной темой можно ознакомиться в пособиях [1-5].

Любое твердое тело представляет собой систему или коллектив, состоящий из огромного числа микрочастиц. В таких системах проявляются статистические закономерности. В данном разделе бу-

дут кратко изложены основные элементы физической статистики, необходимой для описания твердых тел.

2.1. Способы описания состояния макроскопической системы

Для описания состояния системы, состоящей из большого числа частиц, существуют два способа — термодинамический и статистический. При термодинамическом подходе макросистему рассматривают, не интересуясь ее микроскопическим строением.

При статистическом подходе учитывается микроскопическое молекулярное строение системы. При этом учитывают состояния не каждой отдельной молекулы, а всей их совокупности. Коллектив как целое, является системой, качественно отличной от отдельных частиц. Коллектив подчиняется другим закономерностям — статистическим. Поведение отдельной частицы носит случайный характер, а поведение коллектива — закономерный. Попадание данной молекулы газа в выделенный элемент объема — случайный процесс. Однако в распределении молекул по объему наблюдается четкая закономерность: в равных элементах объема содержится в среднем одинаковое число молекул.

Основная особенность статистических закономерностей — их **вероятностный** характер. Они позволяют предсказывать лишь вероятность реализации того или иного результата. Однако, чем больше членов коллектива, тем точнее статистические предсказания. Отклонения параметров от среднего значения называются *флуктуациями*.

Вопросы для самопроверки

1. Какие можно описать состояния большого коллектива (системы) микрочастиц?
2. В чем суть статистического описания большого коллектива микрочастиц?

2.2. Фермионы и бозоны. Невырожденные и вырожденные коллективы частиц

По характеру поведения в коллективе все микрочастицы можно разделить на две группы: фермионы и бозоны. Бозоны имеют целый спин ($0, \hbar, 2\hbar \dots$), к ним относятся фотоны и фононы — кванты упругих колебаний решетки. Фермионы обладают полуцелым спином: $\left(\frac{\hbar}{2}, \frac{3}{2}\hbar, \frac{5}{2}\hbar \dots\right)$ Это электроны, протоны, нейтроны и т.п.

Если данное квантовое состояние занято фермионом, то никакой другой фермион данного типа не может согласно принципу Паули находиться в этом состоянии. Бозоны могут неограниченно заселять одно и то же состояние, причем тем «охотнее», чем больше бозонов уже находится в этом состоянии.

Для проявления специфики поведения бозонов и фермионов необходимо, чтобы частицы как можно чаще «встречались» друг с другом. Под «встречей» понимается попадание в одно или близкие состояния. Пусть G — количество состояний, в которых может находиться частица, всего таких частиц в коллективе N . Микрочастицы будут встречаться редко, если $N/G \ll 1$, т.е. число возможных состояний много больше числа частиц и специфики поведения бозонов и фермионов не проявляется. Подобные коллективы называются **невыврожденными**. Если же число состояний G и число частиц N одного порядка, т.е. $N/G \approx 1$, то коллектив называется **вырожденным**. В этом случае специфика поведения проявляется в полной мере, и вопрос о порядке заселения состояний (поодиночке или коллективно) является весьма актуальным. Отметим, что у классических объектов параметры меняются непрерывно и $G = \infty$, таким образом они всегда невырожденные. Вырождение может наступить у квантово-механических объектов, у которых параметры меняются дискретно, и число частиц может быть сравнимо с конечным числом возможных состояний.

Невырожденные коллективы описываются классической статистикой Максвелла — Больцмана, а вырожденные — квантовой статистикой Ферми — Дирака (фермионы) или Бозе — Эйнштейна

(бозоны). Если уменьшать число частиц в коллективе N или увеличивать число состояний G , то вырожденный коллектив превратится в невырожденный, а квантовые статистики перейдут в классическую. По аналогии с классической статистикой для молекул газа коллектив электронов в кристалле называют «электронным газом».

Состояние всего коллектива задается значениями термодинамических параметров, а состояние микрочастиц — значениями их координат и импульсов (или энергии, которая определяется координатами и импульсами). Связь между этими двумя типами величины осуществляется при помощи *статистической функции распределения* $N_{\mu,T}(E)dE$, которая выражает число частиц с энергией от E до $E + dE$ в системе. Состояние системы задано термодинамическими параметрами: μ — химический потенциал и T — температура. Химический потенциал выражает изменение внутренней энергии изолированной системы постоянного объема, вызванное изменением в ней числа частиц на единицу. $\mu = \frac{dE}{dN}$.

Такую функцию называют полной статистической функцией распределения. Ее можно представить в виде:

$$N(E)d(E) = f(E) \cdot g(E)dE \quad (2.1)$$

где $g(E)dE$ — число состояний в интервале от E до $E + dE$; $f(E)$ — вероятность заполнения этих состояний частицами, ее называют *функцией распределения*. Например, пусть на 100 близкорасположенных разрешенных состояний приходится в среднем 10 частиц, тогда $f = 0,1$. Функцию распределения $f(E)$ можно трактовать и как среднее число частиц, находящихся в данном состоянии.

Вопросы для самопроверки

1. Какие микрочастицы относятся к классу фермионов?
2. Чему равен спин фермионов?
3. Какие частицы относятся к бозонам? Чему равен их спин?

2.3. Функции распределения частиц по энергетическим состояниям

Число состояний для микрочастиц

Для определения плотности состояний $g(T)$ для микрочастиц применяется метод фазового пространства [5].

Полученная функция $g(E)$ имеет вид:

$$g(E)d(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} dE, \quad (2.2)$$

где V – объем образца кристалла, m – масса электрона.

Критерий невырожденности газа:

$$n \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \ll 1, \quad (2.3)$$

где $n = \frac{N}{V}$ — концентрация частиц, T - температура.

Функция распределения для невырожденного газа

Функция распределения для невырожденного газа имеет следующий вид:

$$f(E) = e^{\frac{\mu - E}{kT}},$$

где μ — химический потенциал. Расчеты показывают, что в невырожденном газе уровень химического потенциала можно определить по формуле

$$\mu = kT \ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \right]; \quad (2.4)$$

и тогда функция распределения равна:

$$f(E) = \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} e^{-E/kT} \quad (2.5)$$

Эта функция называется функцией распределения Максвелла–Больцмана и она относится к классической статистике.

Полная статистическая функция распределения имеет вид:

$$N(E)dE = f(E)g(E) = \frac{2N}{\sqrt{\pi}(kT)^3} \sqrt{E} \cdot e^{-E/kT} \cdot dE \quad (2.6)$$

Функция распределения для вырожденного газа фермионов

Функция распределения для вырожденного газа фермионов была впервые получена Ферми и Дираком и носит их имя.

Она имеет вид:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}, \quad (2.7)$$

где μ — химический потенциал или, как его чаще называют применительно к фермионам, энергия Ферми (E_F).

Металл для свободных электронов является своеобразной потенциальной ямой (рис. 2.2). Если газ содержит N электронов, то последний занятый уровень — $\frac{N}{2}$. Этот

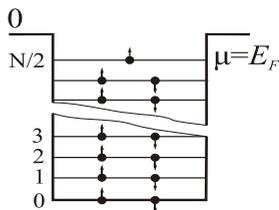


Рис. 2.2

уровень и называется уровнем Ферми.

Вид функции распределения при абсолютном нуле изображен на рис. 2.3. При $T = 0$ все состояния с энергией $E < E_F$ заняты электронами, а все состояния с энергией $E > E_F$ — свободны. Полная статистическая функция распределения Ферми — Дирака равна при $T = 0$ К (т.к. $f(E) = 1$):

Число частиц с энергией от E до $E + dE$ равно:

$$N(E)dE = f(E)g(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} \cdot dE \quad (2.8)$$

Расчет показывает, что средняя энергия электронов при абсолютном нуле равна.

$$\bar{E}_0 = \frac{3}{5} E_F$$

Следовательно, среднеквадратичная скорость

$$v_{кв} = \sqrt{2\bar{E}_0 / m}$$

В этом заключается существенное отличие от не

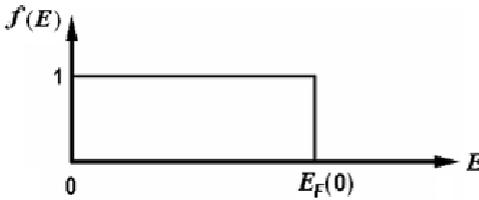
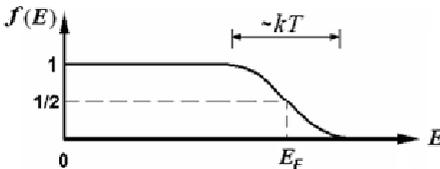


Рис. 2.3

вырожденного газа, у которого при абсолютном нуле $\bar{E}_0 = 0$ и $v_{кв} = 0$.

С повышением температуры электроны подвергаются термическому возбуждению и переходят на более высокие уровни ($E > E_F$). Однако это могут сделать лишь электроны из узкой полосы уровней (шириной порядка kT) около уровня Ферми, остальным электронам некуда переходить, все уровни заняты. При температуре $T > 0$ функции распределения Ферми — Дирака имеют вид, изображенный на рис. 2.4.



Функция распределения для вырожденного газа бозонов

В отличие от фермионов, бозоны могут занимать как свободные, так и уже занятые состояния, причем тем охотнее, чем с боль-

шей плотностью они уже заняты. Бозоны подчиняются распределению Бозе — Эйнштейна, которое имеет вид:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1}. \quad (2.9)$$

В качестве примера рассмотрим распределение фотонов, которые, как вы уже знаете, являются бозонами. Мы будем рассматривать их как фотонный газ в замкнутой полости черного тела при температуре стенок T . По сравнению с другими бозонами фотоны имеют ряд особенностей:

1. Масса покоя фотонов равна нулю $m_0 = 0$.

2. Все фотоны движутся с одной и той же скоростью $v = c$, но энергия E и импульс p у них могут быть разными, они зависят от частоты $E = \hbar\omega$ и $p = \hbar\omega/c$.

3. Фотоны не сталкиваются и равновесие может устанавливаться только вследствие их взаимодействия со стенками полости.

4. Фотоны могут создаваться (при излучении) и уничтожаться (при поглощении) в любых количествах. Поэтому число фотонов в газе не является строго фиксированным. При данном значении термодинамических параметров фотонный газ содержит такое число фотонов, которое обеспечит минимальную энергию, т.е. $dE/dN = 0$. Но, с другой стороны, $dE/dN = \mu$, и, следовательно, химический потенциал равновесного фотонного газа равен 0 ($\mu = 0$). Этот факт говорит о том, что фотонный газ всегда вырожденный, а его распределение описывается формулой Планка:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (2.10)$$

Вопросы для самопроверки

1. Назовите критерии вырожденного и невырожденного коллектива частиц.

2. Что такое функция распределения?
3. Опишите вид функции распределения для вырожденного газа фермионов.
4. Запишите вид функции распределения для вырожденного газа бозонов.

2.4 Примеры решения задач

Задача 1. Определить вероятность заполнения электронами энергетического уровня в металле, расположенного на $4 kT$ выше уровня Ферми при температуре 10 К и 500 К.

Дано:

$$E = \mu + 4kT$$

$$f(E) = ?$$

Решение

Вероятность заполнения электронами энергетических уровней в металле – это функция распределения Ферми – Дирака, равная

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$$

Подставим значение энергии, данное в условии задачи:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{\mu+4kT-\mu}{kT}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{4kT}{kT}} + 1} = \frac{1}{e^4 + 1} = \frac{1}{54,56 + 1} = 0,018.$$

Задача 2. Определить температуру, при которой вероятность нахождения электрона с энергией $E = 0,5$ эВ выше уровня Ферми в металле равна 1 %.

Дано:

$$P = 1\% = 0,01$$

$$E = (\mu + 0,5) \text{ эВ}$$

T - ?

Решение

Вероятность нахождения электрона в состоянии с энергией E равна функции распределения Ферми – Дирака. По условию задачи:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} = 0,01. \quad f(E) = \frac{1}{e^{\frac{\mu+E-\mu}{kT}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} + 1}$$

Выразим энергию в единицах СИ: $E = 0,5 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} = 8 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}$.

Найдем отношение $E/k = \frac{8 \cdot 10^{-18}}{1,38 \cdot 10^{-23}} = 5,8 \cdot 10^3$ и подставим в функцию распределения. Получим:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{5,8 \cdot 10^3}{T}} + 1} = 0,01, \text{ сделаем}$$

преобразования. В результате получим: $e^{\frac{5,8 \cdot 10^3}{T}} + 1 = 100$, откуда $\frac{5,8 \cdot 10^3}{T} = \ln 99$. Искомая температура равна:

$$T = \frac{5,8 \cdot 10^3}{\ln 99} = \frac{5,8 \cdot 10^3}{4,6} = 1,26 \cdot 10^3 \text{ К}.$$

2.5 ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

Прежде чем приступить к самостоятельному решению задач, будет полезным ознакомиться с методическими указаниями [6].

1. Найти среднюю кинетическую энергию электронов в металле, если энергия Ферми для электронов равна 5 эВ.

2. Энергия Ферми равна 7 эВ. Определить максимальную скорость электронов в металле при температуре 0 К.

3. Определить, как и во сколько раз изменится вероятность заполнения электронами в металле энергетического уровня, расположенного на 0,2 эВ выше уровня Ферми, если температуру металла повысить от 400 до 900 К.

4. При какой температуре вероятность нахождения электрона с энергией $E = 0,45$ эВ выше уровня Ферми в металле равна 2 %.

5. Определить минимальную длину волны де Бройля для свободных электронов в серебряном медном проводнике, если энергия Ферми составляет 5,5 эВ.

6. Энергия Ферми в медной пластине составляет 7 эВ. Найти максимальную и среднюю скорости электронов проводимости при $T \approx 0$ К. При расчете принять эффективную массу электронов равной массе свободного электрона.

7. Определить вероятность заполнения электронами энергетического уровня в металле, расположенного на $10 kT$ выше уровня Ферми.

3. Расчетно-графическое задание

3.1. Общие методические указания

Цель расчетно-графической работы – ознакомление с квантово-механическими методами решения задач о состоянии электрона в потенциальной яме.

Расчётно-графическая работа оформляется на компьютере. Оформление титульного листа производится по правилам, которые применяются на кафедре общей и технической физики при выполнении и оформлении результатов лабораторных работ. Необходимо указать наименование дисциплины, название работы и номер варианта, фамилию и инициалы студента с указанием курса и группы, фамилию, инициалы и должность преподавателя, проверяющего РГР, дату выполнения работы. Перед выполнением работы следует привести краткое теоретическое обоснование выполняемой работы: указать используемые физические законы и области их применения, записать необходимые формулы с пояснением всех входящих в формулу физических величин. Необходимо полностью переписать задачу своего варианта. При получении расчётной формулы приведите её полный вывод. Проверить единицы измерения полученных величин по расчетной формуле и тем самым подтвердить ее пра-

вильность. Произвести вычисления (в единицах СИ) с точностью не более 2-3 значащих цифр.

При подстановке в расчетную формулу, а также при записи ответа числовые значения величин следует записывать как произведение десятичной дроби с одной значащей цифрой перед запятой на соответствующую степень десяти. Например, вместо 6340 надо записать $6,34 \cdot 10^3$.

Полученные функциональные зависимости следует изобразить графически. Выбрать удобный масштаб и указать его на осях координат, а так же физические величины и единицы их измерения. На координатной плоскости обязательно должны быть нанесены экспериментальные точки.

В выводах надо отразить выполнение поставленной задачи, дать анализ полученных результатов.

3.2 Задание на расчетно-графическую работу

Электрон находится в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками в состоянии, характеризуемом главным квантовым числом n . Ширина ямы равна l . Определить вероятность нахождения частицы в указанном интервале.

Определите энергетический зазор между n -м и $(n+1)$ -м энергетическими уровнями. По полученным данным рассчитать волновую функцию Ψ , квадрат её модуля $\Psi\Psi^*$. Найти собственные значения волновой функции – значения энергии E_n для указанных квантовых чисел. Построить диаграммы значений волновой функции, квадрата её модуля во всем диапазоне значений координаты x ($0 < x < l$) для нескольких значений n ($n=1,2,3$). Построить график зависимости величины энергетического зазора ΔE от квантового числа n ($1 < n < \infty$).

Таблица 1

№ варианта	1	2	3	4	5
<i>n</i>	4	2	3	1	2
<i>l, нм</i>	1	1,5	2	2,5	1,1
<i>интервал</i>	0 – 1/3	0–1/4	1/3– 2/3	1/4– 1/2	1/4– 3/4
№ варианта	6	7	8	9	10
<i>n</i>	5	4	2	3	2
<i>l, нм</i>	0,8	1,4	0,5	0,2	0,4
<i>интервал</i>	1/4l – 3/4l	3/4l – l	1/4 – 1/2	1/3 – 2/3	1/4 – 1/2

4. Примерный список тем рефератов

1. Полупроводниковые солнечные элементы. Физические принципы преобразования энергии электромагнитного излучения в электрическую.
2. Фотоэлектрические преобразователи – как источник альтернативной энергии.
3. Перспективы применения солнечных преобразователей.
4. Сверхпроводимость как квантово-механический эффект.
5. Применение сверхпроводников в науке и технике.
6. Эффект Мёссбауэра и его применение.
7. Эффект Холла – гальвано-магнитное явление.
8. Применение эффекта Холла в науке, технике и в бытовых устройствах.

Библиографический список

Основной:

1. Трофимова Т.И. Курс физики / Т.И. Трофимова. — М.: Высшая школа, 2006. – 560 с.
2. Епифанов, Г.И. Физические основы микроэлектроники: учеб. пособие / Г.И. Епифанов – М.: книга по требованию, 2012. – 190 с.
3. Пцелко Н.С. Физические основы полупроводниковой электроники, учеб. пособие / Н. С. Пцелко, А. С. Мустафаев, К. Л.

Левин — [Электронный ресурс], контрольный номер RU/IS/BASE/463508393 — СПб: Нац. минер.-сырьевой ун-т «Горный», 2013. – 254 с.

4. Физика конденсированного состояния: учебно-методический комплекс. Санкт-Петербургский горный университет/ сост.: Ю.И. Кузьмин, Н.А. Тупицкая, А.Ю. Егорова.– СПб, 2017. — 158с.

5. *Чуркин, Ю.В.* Физика твердого тела: учеб. пособие/ Ю.В. Чуркин, С.В. Субботин. – СПб.: Изд-во СЗТУ, 2008.

5. Шерстюк, А. И. Физика твердого тела: письм. лекции/ А. И. Шерстюк. – СПб.: Изд-во СЗТУ, 2003. 144 с.

6. Физика конденсированного состояния. Методические указания к практическим занятиям. Санкт-Петербургский горный университет / сост.: Ю.И. Кузьмин, Н.А. Тупицкая, СПб, 2015. — 58 с.

Дополнительный:

7. *Верещагин, Н.К.* Физика твердого тела: учеб. пособие для втузов/ Н. К. Верещагин [и др.] – М.: Высшая школа, 2001. –237 с.

8. *Гуревич, А.Г.* Физика твердого тела: учеб. пособие для вузов/ А. Г. Гуревич. – СПб: Невский диалект. БХВ-Петербург, 2004.

9. Физика. Физика твердого тела: Методические указания к расчетно-графическим работам и варианты заданий/ Национальный минерально-сырьевой университет «Горный». Сост.: Ю.И. Кузьмин, Н.С. Пшелко. – СПб, 2015, с. 32.

ПРИЛОЖЕНИЯ
1. НЕКОТОРЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ
(ОКРУГЛЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ)

Таблица 2

Физическая постоянная	Обозначение	Значение
Постоянная Авогадро	N_A	$6,02 \cdot 10^{23}$ моль ⁻¹
Универсальная газовая постоянная	R	$8,31$ Дж/моль · К
Постоянная Больцмана	k	$1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К
Элементарный заряд	e	$1,6 \cdot 10^{19}$ Кл
Скорость света в вакууме	c	$3,0 \cdot 10^8$ м/с
Электрическая постоянная	ϵ_0	$8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м
Магнитная постоянная	μ_0	$4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м
Постоянная Планка	$\left\{ \begin{array}{l} h \\ \hbar \end{array} \right.$	$6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж
		$1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с
Масса электрона	m	$9,1 \cdot 10^{-31}$ кг

2. ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕКОТО-
РЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ
(температура комнатная)

Таблица 3

Тип полупроводника	Ширина запрещенной зоны E_g	Удельное сопротивление	Подвижность	
			Электроны	Дырки
	эВ	Ом · м	м ² /В · с	
Собственный германий	0,66	0,5	0,39	0,19
Собственный кремний	1,1	$6,2 \cdot 10^2$	0,15	0,05
Арсенид галлия	1,43		0,85	0,042

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие.....	3
Введение.....	3
1. Элементы квантовой механики.....	4
1.1 уравнение шрёдингера.....	4
1.2 Частица в одномерной потенциальной яме.....	5
1.3 Потенциальный барьер.....	9
1.4 Многоэлектронные атомы.....	11
1.5 Примеры решения задач.....	13
1.6 Задачи для самостоятельного решения.....	14
2. Статистика электронов в кристалле.....	15
2.1. Способы описания состояния.....	16
макроскопической системы.....	16
2.2. Фермионы и бозоны. Невырожденные и вырожденные коллективы частиц.....	17
2.3. Функции распределения частиц по энергетическим состояниям.....	19
2.4 Примеры решения задач.....	23
2.5 Задачи для самостоятельного решения.....	24
3. Расчетно-графическое задание.....	25
3.1. Общие методические указания.....	25
3.2 Задание на расчетно-графическую работу.....	26
Библиографический список.....	27
ПРИЛОЖЕНИЯ.....	29
1. Некоторые физические постоянные (ОКРУГЛЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ).....	29
2. Электрофизические характеристики некоторых полупроводников.....	29