

1.5. ВОЛНОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Цель лекции: ознакомление с волновыми процессами в твердом теле и низкоразмерными объектами.

1.5.1. ФАЗОВАЯ И ГРУППОВАЯ СКОРОСТИ, ФОНОНЫ

Атомы, находящиеся в узлах кристаллической решетки, при температуре, отличной от абсолютного нуля, совершают колебания вблизи положения равновесия. Носители заряда, движущиеся среди колеблющихся атомов, обмениваются с ними энергией, благодаря чему устанавливается термодинамическое равновесие между решеткой и электронным газом.

Вследствие сильного межатомного взаимодействия колебание каждого атома передается соседним, и в кристалле возбуждаются «коллективные» колебания атомов, распространяющиеся во всевозможных направлениях. Если на атом действует сила, пропорциональная его смещению из положения равновесия, то возникают гармонические колебания. Следовательно, колеблющийся атом можно считать гармоническим осциллятором. Колебания каждого гармонического осциллятора можно разложить на составляющие по трем направлениям. Атомы кристалла упруго связаны между собой, и колебания любого из них передаются соседям, такие колебания называются нормальными. В кристалле, содержащем N атомов, распространяются упругие волны от $3N$ -осцилляторов, т. е. возможно $3N$ нормальных колебаний.

Волновой процесс характеризуется также фазовой и групповой скоростями распространения волны. Фазовая скорость представляет собой скорость перемещения в пространстве точки с заданной фазой:

$$v_{\text{ф}} = \frac{\omega}{k} = \frac{2}{k} \sqrt{\frac{\beta}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|,$$

где β — жесткость связи; M — масса атома.

Скорость распространения волнового пакета (скорость переноса энергии в среде) определяется групповой скоростью:

$$v_{\text{гр}} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = a \sqrt{\frac{\beta}{M}} \left| \cos \frac{ka}{2} \right|.$$

Если длина цепочки атомов L , то наиболее длинноволновые колебания, которые могут распространяться в такой цепочке, имеют длину волны

$\lambda_{\max} = 2L$, а наиболее коротковолновые — $\lambda_{\min} = 2a$. В последнем случае может быть найдена максимально возможная частота колебаний

$$\omega_{\max} = \frac{2\pi\nu}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi\nu}{a} = k\nu,$$

где ν — средняя скорость распространения нормальных колебаний.

Отсюда следует, что максимальная частота колебаний является постоянной для каждого конкретного материала. Например, для меди ($a \approx 3,6 \cdot 10^{-10}$ м, $\nu \approx 3,6 \cdot 10^3$ м/с) $\omega_{\max} \approx 3 \cdot 10^{13}$, для оксида цинка ($a \approx 4,7 \cdot 10^{-10}$ м, $\nu \approx 2,7 \cdot 10^3$ м/с) $\omega_{\max} \approx 1,8 \cdot 10^{13}$.

Из соотношений для фазовой $\nu_{\text{ф}}$ и групповой $\nu_{\text{гр}}$ скоростей следует, что для длинных волн ($k \rightarrow 0$) $\nu_{\text{ф}} = \nu_{\text{гр}} = \nu_{\text{зв}}$, где $\nu_{\text{зв}}$ — средняя скорость распространения звука в кристалле. Для коротких волн ($k \rightarrow \pi/a$) $\nu_{\text{гр}} \rightarrow 0$, $\nu_{\text{ф}} \rightarrow (2a/\pi)\sqrt{\beta/M}$.

Рассмотрим тепловые колебания решетки с квантовой точки зрения. Энергия каждого из $3N$ колебаний квантована. Разрешенные значения энергии

$$E_{\omega} = (n + 1/2)\hbar\omega,$$

где $h = 0, 1, 2, \dots$. Отсюда минимально возможное изменение тепловой энергии равно $\hbar\omega$. Эта минимальная порция, или квант энергии колебания, называется фононом. Если представить решетку в виде фононного газа, то увеличение энергии $E_{\omega} = E_{\omega 0} + \Delta E$ означает увеличение концентрации фононов, уменьшение же энергии $E_{\omega} = E_{\omega 0} - \Delta E$ — уменьшение концентрации фононов. При этом акустическим колебаниям решетки соответствуют акустические фононы, оптическим — оптические фононы.

1.5.2. НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ ОБЪЕКТЫ: КВАНТОВАЯ ЯМА, КВАНТОВАЯ НИТЬ, КВАНТОВАЯ ТОЧКА

При переходе вещества в наносостояние его свойства начинают значительно зависеть от размера составляющих его нанобъектов. *Размерный эффект* — зависимость свойств тела от его размера.

Размерные эффекты возникают, когда размер объекта соизмерим с каким-либо параметром вещества, оказывающим существенное влияние на физические процессы в веществе и его свойства. Такими параметрами могут быть длина свободного пробега носителей в веществе, диффузионная длина, диаметр траекторий скольжения дислокаций и т. п. Для квантовых размерных эффектов данным параметром является длина волны де Бройля.

Длина волны де Бройля для электрона, движущегося в кристаллической структуре,

$$\lambda = \frac{h}{m^* v} = \frac{h}{\sqrt{2m^* E}},$$

где h — постоянная Планка; m^* — эффективная масса электрона; E — кинетическая энергия; v — скорость электрона.

Поскольку длина волны де Бройля для свободных электронов в полупроводниках значительно больше, чем в металлах, то квантово-размерные эффекты технологически легче осуществить на полупроводниках. Поэтому исследование этих эффектов и формирование наноструктур для применения в электронике проводится преимущественно на полупроводниках.

Следует отметить, что квантово-размерные эффекты можно наблюдать при условии, что средняя длина свободного пробега электронов превышает размер рассматриваемой области, ее границы имеют высокую степень совершенства, а отражения волны де Бройля от границ можно считать зеркальными.

В 3D-объектах электроны могут свободно перемещаться во всех трех направлениях:

$$\lambda \ll L_x, L_y, L_z.$$

Примером такого объекта является неограниченный кристалл полупроводника.

Двумерный 2D-объект. Это тонкий слой кристалла, толщина которого d соизмерима с длиной волны де Бройля ($d \sim \lambda$):

$$\lambda > L_z \text{ и одновременно } \lambda \ll L_x, L_y.$$

В этом случае электроны могут свободно перемещаться только в плоскости слоя, а в направлении, перпендикулярном плоскости слоя, их движение будет ограничено потенциальным барьером. Двигаясь в этом направлении, электрон не способен покинуть слой, так как его работа выхода (1...6 эВ) намного больше энергии теплового движения ($\sim 0,026$ эВ при комнатной температуре). Электроны оказываются в глубокой потенциальной яме, и их энергия в этом направлении будет квантоваться в сочетании с непрерывными спектрами электронов в направлениях, находящихся в плоскости слоя. 2D-объект называют квантовой ямой (*quantumwell*).

Примерами 2D-объектов могут служить проводящие каналы в транзисторах из металла—диэлектрика—полупроводника (МДП) и узкозонные слои в гетероструктурах из соединений A_3B_5 для инжекционных лазеров. Системы близко расположенных параллельных квантовых ям, между которыми возможно туннелирование электронов, составляют сверхрешетки.

Если накладывается квантовое ограничение на движение электронов еще в одном направлении, то получим 1D-объект, который называют квантовой проволокой (*quantumwire*):

$$\lambda > L_y, L_z \text{ и одновременно } \lambda \ll L_x.$$

Потенциальная яма для свободных электронов в нити двумерна.

Если размеры объекта в трех измерениях будут близки к длине волны

де Бройля, то получим 0D-объект, называемый квантовой точкой:

$$\lambda \gg L_x, L_y, L_z.$$

Потенциальная яма для квантовой точки трехмерна. Электроны в квантовых точках могут иметь только дискретный набор энергетических состояний. Примером квантовых точек являются самоорганизующиеся структуры, возникающие при осаждении атомов или молекул полупроводникового материала на поверхность другого материала с более широкой запрещенной зоной.

Тесты к лекции 1.5

1. Что такое фазовая скорость?

- а) скорость перемещения в пространстве точки с заданной фазой;
- б) скорость изменения фаз колебательного процесса;
- в) скорость перераспределения фаз.

2. Что такое групповая скорость?

- а) скорость распространения волнового пакета (скорость переноса энергии в среде);
- б) скорость распространения частиц в противофазе;
- в) скорость затухания энергии в среде.

3. Максимальная частота акустических колебаний для каждого конкретного материала является постоянной величиной, линейной функцией или сложной функцией?

- а) постоянной;
- б) линейной функцией;
- в) сложной функцией.

4. Что называется фононом?

- а) минимальная порция, или квант энергии колебания;
- б) квант световой энергии;
- в) квант радиоактивного излучения.

5. Что такое размерный эффект?

- а) зависимость свойств тела от его размера;
- б) зависимость размера тела от его свойств;
- в) возможность получения ошибочного результата при неправильном использовании размерности.