

1.7. ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА И ПОНЯТИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ

Цель лекции: ознакомление с зонами Бриллюэна и понятием эффективной массы.

1.7.1. ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА

Ранее использовалось понятие пространства импульсов, которое определялось путем задания составляющих импульсов в декартовой системе координат. Модуль волнового вектора, или волновое число, $k = 2\pi/\lambda$, а $\lambda = h/p$ — длина волны де Бройля. Тогда $p = \hbar k$; если нет \hbar , то $p = \hbar k/2\pi$, где $\hbar = h/2\pi$.

Следовательно, импульс пропорционален волновому вектору k : $p = \hbar k$; тогда вместо пространства импульсов можно рассматривать k -пространство, задаваемое составляющими k_x, k_y, k_z . Разрешенным энергетическим зонам в твердом теле соответствуют зоны в k -пространстве. Области значений волнового вектора k , в пределах которых энергия электрона $E(k)$, являющаяся периодической функцией k , испытывает полный цикл своего изменения, называют зонами Бриллюэна. На границах зон энергия претерпевает разрыв. Для одномерного

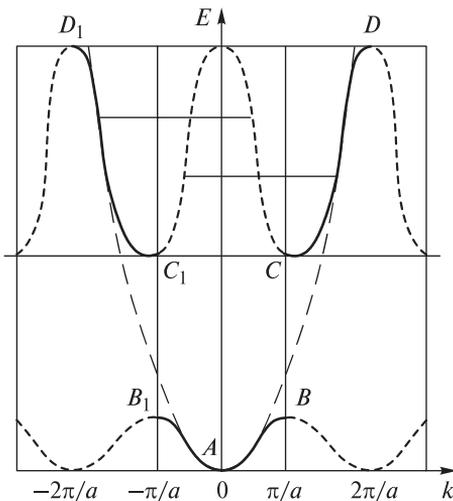


Рис. 1.8. Зависимость энергии электрона от волнового вектора k для разных энергетических зон

кристалла первая зона Бриллюэна простирается от $k = -\pi/a$ до $k = \pi/a$ и имеет протяженность $2\pi/a$ (см. рис. 1.7).

Как отмечалось выше, из решения уравнения Шредингера для электрона, находящегося в периодическом потенциальном поле кристаллической решетки, следует, что собственные значения (разрешенные) энергии электрона должны быть периодическими функциями k :

$$E(k_x) = E(k_x \pm n2\pi/a_x). \quad (1.16)$$

Кривая $E(k_x)$ называется дисперсионной кривой. Как видно на рис. 1.8, для каждой из разрешенных зон справедливо соотношение (1.16), хотя кривые $E(k_x)$ для разрешенных зон отличаются друг от друга. С ростом E ширина разрешенных зон увеличивается.

Если отрезок CD сдвинуть на $2\pi/a_x$ влево, а отрезок C_1D_1 — на $2\pi/a_x$ вправо, то вторую зону Бриллюэна можно привести к первой. Первую зону Бриллюэна, куда перенесены функции $E(k_x)$ для разных энергетических зон, называют приведенной зоной Бриллюэна (рис. 1.9). В дальнейшем будут преимущественно рассматриваться лишь две верхние разрешенные энергетические зоны. Верхняя разрешенная зона называется зоной проводимости, нижняя — валентной зоной.

В реальных кристаллах направления составляющих волнового вектора k выбирают в соответствии с определенными кристаллографическими направлениями. Зависимости $E(k)$ у реальных кристаллов являются достаточно сложными.

В качестве примера рассмотрим зонную структуру кремния для двух направлений в k -пространстве. Минимум зависимости $E(k)$ или дисперсионной кривой называют дном энергетической зоны, максимум — потолком зоны. Как видно на рис. 1.10, дно зоны проводимости у кремния находится не в середине зоны Бриллюэна, а вблизи ее границы в направлении. Вершина валентной зоны расположена в середине зоны Бриллюэна.

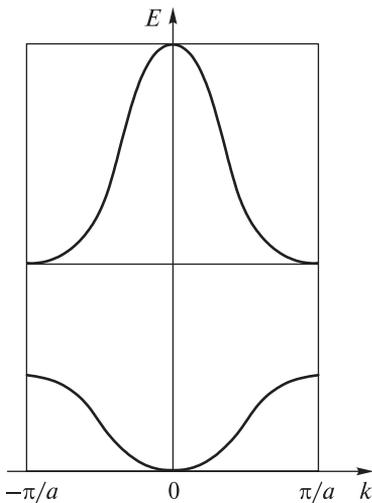


Рис. 1.9. Приведенная зона Бриллюэна

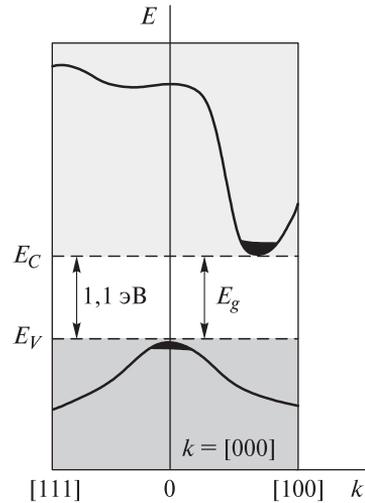


Рис. 1.10. Зонная структура кремния

Минимальный зазор между валентной зоной и зоной проводимости принимается за ширину запрещенной зоны E_g .

При упрощенном рассмотрении энергетической структуры полупроводников вместо истинных дисперсионных кривых $E(k)$, ограничивающих валентную зону и зону проводимости, проводят две параллельные прямые: одну — касательную к дну зоны проводимости E_C , вторую — касательную к вершине валентной зоны E_V .

Первую прямую принимают за нижнюю границу (дно) зоны проводимости, вторую — за верхнюю границу (потолок) валентной зоны.

1.7.2. ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ЭЛЕКТРОНА

Известно: $p = \hbar k = mv$,

$$v = \frac{\hbar}{m} k. \quad (1.17)$$

Кинетическая энергия свободного электрона $E_k = E$ и

$$E_k = \frac{mv^2}{2},$$

подставив в формулу (1.17), получим

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Продифференцируем E_k по k :

$$\frac{dE_k}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} k,$$

откуда

$$k = \frac{m}{\hbar^2} \frac{dE}{dk}. \quad (1.18)$$

После подстановки соотношения (1.18) в формулу (1.17) имеем

$$v = \frac{\hbar}{m} k = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (1.19)$$

Формула (1.19) справедлива не только для свободного электрона, но и для электрона, находящегося в потенциальном поле.

Пусть энергия зонного электрона изменяется под некоторым внешним воздействием:

$$dE = Fv \cdot dt, \quad (1.20)$$

где F — внешняя сила.

Подставим формулу (1.19) в уравнение (1.20):

$$dE = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt,$$

откуда

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar}. \quad (1.21)$$

Продифференцируем формулу (1.19) по времени:

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}. \quad (1.22)$$

Подставив равенство (1.21) в соотношение (1.22), получим

$$\frac{dv}{dt} = \frac{F}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} = a, \quad (1.23)$$

где a — ускорение.

Формула (1.23) связывает ускорение и силу, т. е. выражает второй закон Ньютона $F = ma$; $a = F/m$.

Из формулы (1.23) следует, что под действием внешней силы электрон в периодическом поле кристалла движется так, как двигался бы свободный электрон, обладающий массой

$$m^* = \frac{1}{\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}}. \quad (1.24)$$

Масса m^* называется эффективной массой электрона. Приписывая электрону, находящемуся в периодическом поле кристалла, массу m^* , можно считать этот электрон свободным и описывать его движение во внешнем поле так, как описывается движение свободного электрона. Эффективная масса, отражающая особенности движения электрона в периодическом поле, является своеобразной функцией. Она может быть как положительной, так и отрицательной, а по абсолютному значению как меньше, так и больше массы покоя электрона. Эффективная масса свободного электрона равна его массе покоя.

При движении электрона в периодическом потенциальном поле кристалла работа внешней силы может переходить как в кинетическую, так и потенциальную энергию электрона:

$$A = \Delta E_k + \Delta u.$$

Если часть работы внешней силы $F = -q\mathcal{E}$ переходит в потенциальную энергию, то скорость электрона возрастает медленнее, чем у свободного электрона и, следовательно, его эффективная масса больше его массы покоя. Если вся работа внешней силы переходит в потенциальную энергию, то скорость электрона изменяться не будет, и он будет вести себя, как частица с бесконечно большой массой.

В потенциальную энергию может переходить не только работа внешней силы, но и кинетическая энергия электрона. Скорость электрона будет в этом случае уменьшаться, т. е. он ведет себя как частица с отрицательной массой.

Возможен случай, когда в кинетическую энергию может переходить не только работа внешней силы, но и потенциальная энергия, тогда скорость

электрона будет расти быстрее, чем у свободного электрона, т. е. его эффективная масса будет меньше его массы покоя.

На рис. 1.11 показаны зависимости E , v , m^* от волнового вектора k . Вблизи дна разрешенной зоны энергия электрона положительна, а у потолка зоны — отрицательна.

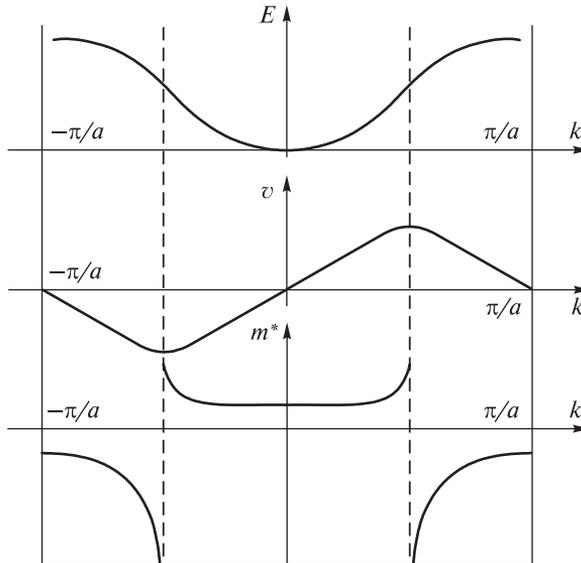


Рис. 1.11. Зависимости энергии, скорости и эффективной массы электрона от волнового вектора k

Точка A — точка перегиба зависимости $E(k)$, в этой точке dE/dk достигает максимума, вторая производная $d^2E/dk^2 = 0$, а $m^* \rightarrow \infty$. Поскольку \vec{k} — вектор, то m^* зависит от направления движения электрона в кристалле.

Тесты к лекции 1.7

1. В каком диапазоне простирается первая зона Бриллюэна для одномерного кристалла?

- а) от $k = -\pi/a$ до $k = \pi/a$;
- б) от $k = -\pi$ до $k = \pi$;
- в) от $k = -2\pi$ до $k = 2\pi$.

2. Как называется верхняя разрешенная зона?

- а) зона проводимости;
- б) валентная зона;
- в) запрещенная зона.

3. Как называется нижняя разрешенная зона?

- а) валентная зона;
- б) запрещенная зона;
- в) зона проводимости.

4. Что такое запрещенная зона?

- а) уровень энергии, которым электроны не могут обладать;
- б) пространство, в котором не могут быть электроны;
- в) пространство, в котором не могут находиться электроны и дырки.

5. Какое значение может принимать эффективная масса электрона?

- а) как больше, так и меньше нуля;
- б) только больше единицы;
- в) только меньше единицы.

6. Как изменится скорость электрона, если вся работа внешней силы переходит в потенциальную энергию?

- а) не будет изменяться;
- б) будет увеличиваться;
- в) будет уменьшаться.