

**Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Амурский государственный университет»**

Кафедра Физики

**УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ  
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

Основной образовательной программы по специальности 010701.65 - Физика

Благовещенск 2012

УМКД разработан канд. физ.-мат. наук, доцентом Верхотуровой Ириной Владимировной

Рассмотрен и рекомендован на заседании кафедры

Протокол заседания кафедры от «21» 09 2012 г. № 1

Зав.кафедрой  И.А. Голубева

**УТВЕРЖДЕН**

Протокол заседания УМСС 010701.65 - Физика

от «10» 09 2012 г. № 1

Председатель УМСС  Е.А. Ванина

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Рабочая программа учебной дисциплины	4
2. Краткое изложение программного материала	11
3 Методические указания (рекомендации)	62
3.1 Методические указания для преподавателя	62
3.2 Методические указания для студентов	63
4. Контроль знаний	65
4.1 Текущий контроль	65
4.2 Итоговый контроль знаний	65
5. Интерактивные технологии и инновационные методы, используемые в образовательном процессе.	66

## 1. Рабочая программа учебной дисциплины.

### 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Целью освоения дисциплины** «Физика конденсированного состояния» является приобретение знаний и умений, необходимых для формирования у студентов (при подготовки их к профессиональной деятельности) фундаментальных и профессиональных знаний в области физики конденсированного состояния.

**Задачи дисциплины:**

1. Изучение основных принципов построения и свойств конденсированных сред;
2. Овладение фундаментальными понятиями, законами и теориями физики конденсированных сред, а также методов их исследования;
3. Умения исследовать и прогнозировать свойства конденсированных сред при выполнении научно-исследовательской работы.

### 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВПО:

Дисциплина «Физика конденсированного состояния» ОПД.Ф.01.6 входит в **Теоретическую физику** цикла «Общих профессиональных дисциплин». Другие дисциплины, такие как «НИРС», «Физика полупроводников и диэлектриков» и др. изучаются на основе знаний данной дисциплины.

Для освоения дисциплины необходимо знать:

- 1) курс Общей физики;
- 2) элементы дисциплины «Математика»;
- 3) Квантовую физику;
- 4) Физику атома и атомных явлений.

**Содержательная часть дисциплины по ГОС ВПО:**

Адиабатический принцип Борна-Эренфеста. Состояния электронов в кристаллической решетке. Зоны Бриллюэна, энергетические зоны. Примеси и примесные уровни. Дефекты. Статистика носителей заряда. Неравновесные электроны и дырки. Рассеяния носителей заряда, проводимость, и кинетические свойства диэлектриков, металлов и полупроводников. Квазичастицы. Акустические и оптические фононы, плазмоны, экситоны Френкеля и Ванье. Конденсация бозонов. Сверхтекучесть. Электрон-фононные взаимодействия. Полярон Фрелиха. Взаимодействие света с кристаллической решеткой, поляритоны. Оптические свойства диэлектриков, металлов и полупроводников. Поверхностные состояния электронов. Состояния электронов в структурах с пониженной размерностью.

По завершению изучения дисциплины студент должен:

- **Знать** теоретические и экспериментальные проблемы физики конденсированного состояния и возможные пути их решения;
- **Уметь** использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач.
- **Владеть** теоретическими знаниями и математическим аппаратом для решения простейших задач физики конденсированного состояния вещества.

### 3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Физика конденсированного состояния»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 56 час.

№ п/п	Модуль дисциплины	Виды учебной работы				Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра)  Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
		Лекции (час.)	Практические занятия (час.)	Лабораторные раб. (час.)	СРС (час.)	
1	Модуль 1 «Состояния электронов в	8			2	Контроль посещений

	кристаллической решетке»					аудиторных занятий. Проверка конспектов. Выполнение контролирующего теста по модулю
2	Модуль 2 «Кинетические свойства твердых тел»	4			2	Контроль посещений аудиторных занятий. Выполнение контролирующего теста по модулю
3	Модуль 3 «Квазичастицы и механизмы их возникновения в твердых телах»	8			2	Контроль посещений аудиторных занятий. Проверка конспектов. Выполнение контролирующего теста по модулю
4	Модуль 4 «Конденсация бозонов. Сверхтекучесть»	4			1	Контроль посещений аудиторных занятий. Проверка конспектов. Выполнение контролирующего теста по модулю
5	Модуль 5 «Оптические свойства твердых тел»	4			1	Контроль посещений аудиторных занятий. Проверка конспектов Выполнение контролирующего теста по модулю
6	Модуль 6 «Поверхностные состояния электронов. Состояния электронов в структурах с пониженной размерностью»	8			2	Контроль посещений аудиторных занятий. Проверка конспектов Выполнение контролирующего теста по модулю
7	Подготовка к зачету				10	Зачет
8	Итого	36			20	

## 4. СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ И ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

### 4.1 ЛЕКЦИИ

#### ***Модуль 1 «Состояния электронов в кристаллической решетке»:***

Адиабатическое приближение Борна-Эренфеста. Пространственная решетка кристаллов. Обратная решетка кристаллов. Собственные значения и собственные функции оператора трансляции. Общие свойства стационарных состояний кристалла, базирующиеся на его симметрии. Зоны Бриллюэна, энергетические зоны. Примеси и примесные уровни. Дефекты.

Электрон в периодическом поле. Приближенные методы вычисления одноэлектронных состояний. Вторичное квантование систем электронов. Классификация твердых тел на основе энергетического спектра их электронных состояний. Изоэнергетические поверхности. Плотность электронных состояний в шкале энергий.

Статистика носителей заряда. Неравновесные электроны и дырки.

Собственные векторы и собственные значения заряженных частиц в магнитном поле. Эффективная циклотронная масса электрона проводимости. Квантование движения электрона в зоне проводимости при наличии магнитного поля.

#### ***Модуль 2 «Кинетические свойства твердых тел»:***

Подвижность носителей заряда.

Рассеяния носителей заряда. Упругое (на статических дефектах - примесные атомы, дислокации, границы кристаллических зёрен и т. п.) и неупругое рассеяние (на акустических и оптических фононах).

Проводимость диэлектриков, металлов и полупроводников.

#### ***Модуль 3 «Квазичастицы и механизмы их возникновения в твердых телах»:***

Акустические и оптические фононы в ковалентных, молекулярных и ионных кристаллах. Элементарная теория взаимодействия света с фононами.

Плазменные и спиновые волны в твердых телах. Плазмоны и магноны.

Электрон-фононное взаимодействие в кристаллах. Полярон Фрелиха.

Экситоны Френкеля и Ванье-Мотта. Экситон-фононное взаимодействие в кристаллах. Поляритоны.

#### ***Модуль 4 «Конденсация бозонов. Сверхтекучесть»***

Бозе-Эйнштейна конденсация. Квантовая жидкость и сверхтекучесть. Энергетический спектр квантовой жидкости. Элементарные возбуждения и их взаимодействия. Кинетические явления в сверхтекучей жидкости.

#### ***Модуль 5 «Оптические свойства твердых тел»***

Оптическое поглощение в полупроводниках. Прохождение света через кристаллы. Рассеяние света и люминесценция кристаллов.

***Модуль 6 «Поверхностные состояния электронов. Состояния электронов в структурах с пониженной размерностью»:*** Основные определения. Природа поверхностных состояний. Статистика заполнения поверхностных состояний. Размерное квантование и квантово-размерные структуры. Статистика электронов. Свободные и связанные электроны. Оптика квантово-размерных структур. Кинетические эффекты в двумерных системах. Применение квантово-размерных структур в приборах микро- и нанoeлектроники.

## 5. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ

№ п/п	№ раздела (темы) дисциплины	Форма (вид) самостоятельной работы	Трудоемкость в часах
1	Модуль 1 «Состояния электронов в кристаллической решетке»	Подготовка конспектов Подготовка к контролируемому тесту по модулю	2
2	Модуль 2 «Кинетические свойства твердых тел»	Подготовка к контролируемому тесту по модулю	2
3	Модуль 3 «Квазичастицы и механизмы их возникновения в твердых телах»	Подготовка конспектов Подготовка к контролируемому тесту по модулю	2
4	Модуль 4 «Конденсация бозонов. Сверхтекучесть»	Подготовка конспектов Подготовка к контролируемому тесту по модулю	1
5	Модуль 5 «Оптические свойства твердых тел»	Подготовка конспектов Подготовка к контролируемому тесту по модулю	1
6	Модуль 6 «Поверхностные состояния электронов. Состояния электронов в структурах с пониженной размерностью»	Подготовка конспектов Подготовка к контролируемому тесту по модулю	2
7	Подготовка к зачету		10

## 6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При чтении лекций по данной дисциплине используется такой неимитационный метод активного обучения, как «Проблемная лекция». Перед изучением модуля обозначается проблема, на решение которой будет направлен весь последующий материал модуля. При чтении лекции используются мультимедийные презентации.

## 7. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

### 7.1 Подготовка конспектов по темам на самостоятельное изучение

#### *Модуль 1 «Состояния электронов в кристаллической решетке»*

Классификация твердых тел на основе энергетического спектра их электронных состояний. Изознергетические поверхности. Квантование движения электрона в зоне проводимости при наличии магнитного поля. Примеси и примесные уровни. Дефекты. Плотность электронных состояний в шкале энергий.

#### *Модуль 3 «Квазичастицы и механизмы их возникновения в твердых телах»*

Акустические и оптические фононы в молекулярных и ионных кристаллах. Элементарная теория взаимодействия света с фононами.

**Модуль 4 «Конденсация бозонов. Сверхтекучесть»**

Элементарная теория взаимодействия света с фононами. Кинетические явления в сверхтекучей жидкости.

**Модуль 5 «Оптические свойства твердых тел»**

Рассеяние света и люминесценция кристаллов. Прохождение света через кристаллы.

**Модуль 6 «Поверхностные состояния электронов. Состояния электронов в структурах с пониженной размерностью»**

Оптика квантово-размерных структур. Кинетические эффекты в двумерных системах. Применение квантово-размерных структур в приборах микро- и нанoeлектроники. Свободные и связанные электроны.

**7.2 Примерные зачетные вопросы**

1. Адиабатическое приближение Борна-Эренфеста.
2. Пространственная решетка кристаллов. Обратная решетка кристаллов.
3. Собственные значения и собственные функции оператора трансляции.
4. Общие свойства стационарных состояний кристалла, базирующиеся на его симметрии.
5. Зоны Бриллюэна, энергетические зоны.
6. Примеси и примесные уровни. Дефекты.
7. Электрон в периодическом поле. Приближенные методы вычисления одноэлектронных состояний.
8. Вторичное квантование систем электронов.
9. Классификация твердых тел на основе энергетического спектра их электронных состояний.
10. Изоэнергетические поверхности.
11. Плотность электронных состояний в шкале энергий.
12. Статистика электронов в твердых телах. Неравновесные электроны и дырки.
13. Собственные векторы и собственные значения заряженных частиц в магнитном поле.
14. Эффективная циклотронная масса электрона проводимости.
15. Квантование движения электрона в зоне проводимости при наличии магнитного поля.
16. Подвижность носителей заряда. Рассеяния носителей заряда.
17. Упругое (на статических дефектах - примесные атомы, дислокации, границы кристаллических зёрен и т. п.).
18. Неупругое рассеяние (на акустических и оптических фононах).
19. Проводимость диэлектриков, металлов и полупроводников.
20. Фононы в одномерном кристалле с одним атомом в элементарной ячейке.
21. Фононы в одномерном кристалле с двумя атомами в элементарной ячейке.
22. Фононы в трехмерном кристалле.
23. Взаимодействия между фононами.
24. Макроскопическая теория оптических ветвей колебаний.
25. Макроскопическая теория поляритонов.
26. Элементарная теория взаимодействия света с фононами.
27. Плазменные волны в твердых телах. Плазмоны.
28. Спиновые волны в ферромагнетиках. Магноны.
29. Электрон-фононное взаимодействие в кристаллах. Полярон Фрелиха.
30. Экситоны Френкеля и Ванье-Мотта. Экситон-фононное взаимодействие в



кристаллах. Поляритоны.

31. Бозе-Эйнштейна конденсация.
32. Квантовая жидкость и сверхтекучесть.
33. Энергетический спектр квантовой жидкости. Элементарные возбуждения и их взаимодействия.
34. Кинетические явления в сверхтекучей жидкости.
35. Оптическое поглощение в полупроводниках.
36. Прохождение света через кристаллы. Рассеяние света и люминесценция кристаллов.
37. Основные определения, природа поверхностных состояний.
38. Статистика заполнения поверхностных состояний.
39. Размерное квантование и квантово-размерные структуры.
40. Статистика электронов. Свободные и связанные электроны.
41. Оптика квантово-размерных структур.
42. Кинетические эффекты в двумерных системах.
43. Применение квантово-размерных структур в приборах микро- и наноэлектроники.

### 7.3 Критерии оценки при сдаче зачета

1. К сдаче зачета допускаются студенты:  
- посетившие все лекционные занятия данного курса.

При наличии пропусков темы пропущенных занятий должны быть отработаны.  
Программные вопросы к зачету доводятся до сведения студентов за месяц до зачета.

2. Критерии оценки:

Итоговая оценка знаний студентов должна устанавливать активность и текущую успеваемость студентов в течение семестра по данному предмету.

Оценка «зачтено» - ставится при 65 % правильных ответов на зачете.

## 8.УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Физика конденсированного состояния»

- а) **основная литература:**

1. Гольдаде, В.А. Физика конденсированного состояния/ В.А. Гольдаде, Л.С. Пинчукред; под ред. Н.К. Мышкина.- Мн.: Беларуская наука, 2009.-658 с.
2. Гуртов, В.А. Физика твердого тела для инженеров: учеб. пособие: рек. УМО/ В.А. Гуртов, Р.Н. Осауленко; ред. Л.А. Алешина.- М.: Техносфера, 2007.- 520 с.

- б) **дополнительная литература:**

1. Миронова, Г.А. Конденсированное состояние вещества: от структурных единиц до живой материи: [в 2 т.]: учеб. пособие: рек. УМО/ Г.А. Миронова Т.1.-2004.-532 с, Т.2.-2006.- 840 с.
2. Физика конденсированного состояния вещества: учеб.-метод. комплекс для спец. 010701 «Физика»/ сост. И.В. Верхотурова.- Благовещенск: Изд-во Амур. гос. ун-та, 2007.- 166 с.

- в) **программное обеспечение и Интернет-ресурсы:**

№	Наименование ресурса	Краткая характеристика
1	<a href="http://www.iqlib.ru">http://www.iqlib.ru</a>	Интернет-библиотека образовательных изданий, в который собраны электронные учебники, справочные и учебные пособия.
2	<a href="http://rucont.ru/">http://rucont.ru/</a>	Электронная библиотечная система, в которой собраны электронные учебники, справочные и учебные пособия.

г) **периодические издания:**

1. Известия вузов. Физика.
2. Известия РАН. Серия физическая.
3. Доклады Академии наук.
4. Журнал экспериментальной и теоретической физики.
5. Успехи физических наук.
6. Оптика и спектроскопия.
7. Оптический журнал.
8. Реферативный журнал «Физика»

**9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

№ п/п	Наименование лабораторий, ауд.	Основное оборудование
1.	112	<b>Комплект ТСО</b> Мультимедийный проектор-03г Ноутбук Пентиум 100-03г.

## 2. Краткое изложение программного материала

### ЛЕКЦИОННЫЙ МАТЕРИАЛ

#### Модуль 1 «Состояния электронов в кристаллической решетке»:

##### *Адиабатическое приближение Борна-Эренфеста.*

Взаимодействие квазичастицы с решёточным потенциалом изменяет первоначальный квадратичный закон дисперсии: в результате этого взаимодействия формируется сложный многозонный энергетический спектр. При этом оказывается возможным проследить, как исходный квадратичный закон дисперсии квазичастицы преобразуется в спектр частицы в кристаллической решётке.

В результате большой величины энергии Ферми скорость электронов, расположенных на поверхности Ферми, весьма велика и составляет около  $10^6$  м/с. Эта скорость значительно превышает скорость движения ионов в решётке. Большое различие в скоростях движения электронов и ионов позволяет использовать, при рассмотрении взаимодействия электронов с решёткой, так называемое *адиабатическое приближение*. Смысл адиабатического приближения заключается в предположении, что движение электронов определяется мгновенным расположением ионов, тогда как на движение последних влияет лишь пространственное распределение электронного заряда, усреднённое за период времени, превосходящий характерные для электронов временные интервалы. Распределение электронного заряда перестраивается в соответствии с медленным движением ионов, адиабатически следуя за ним. Поэтому в первом приближении можно рассматривать ионы как неподвижные. При этом взаимодействие электронов с решёткой складывается из рассеяния электронов на периодическом потенциале неподвижных ионов  $V(\mathbf{r})$ , поляризации решётки движущимися электронами и рассеянии электронов на фононах.

Базовое приближение теории конденсированного состояния, использующее существенное различие в значениях  $m$  и  $M$  - масс электрона и атомного ядра соответственно

$$\mu \equiv \left( \frac{m}{M} \right)^{1/4}.$$

Введем безразмерный параметр

$$m = 9.1 \cdot 10^{-28} \text{ г},$$

$$m_p = 1.7 \cdot 10^{-24} \text{ г} \text{ — масса протона,}$$

$$M \sim (10 \div 10^2) m_p.$$

Отсюда  $\frac{m}{M} \sim 10^{-4} \div 10^{-5}$  и  $\mu \lesssim 0.1$ .

Гамильтониан системы из  $N_a$  атомов (нерелятивистское приближение):

$$H = T_e + T_N + V_{ee} + V_{NN} + V_{eN},$$

операторы кинетической энергии	{	<p><u>электронов</u> <math>T_e = \sum_i T_e^{(i)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{\mathbf{r}_i}^2</math></p> <p><u>ядер</u> <math>T_N = \sum_j T_N^{(j)} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{1}{M_j} \nabla_{\mathbf{R}_j}^2</math></p>
операторы кулоновского взаимодействия	{	<p><u>электронов</u> <math>V_{ee} = \sum_{\substack{i,i' \\ i' \neq i}} V_e^{(ii')} = \frac{e^2}{2} \sum_{\substack{i,i' \\ i' \neq i}} \frac{1}{ \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'} }</math></p> <p><u>ядер</u> <math>V_{NN} = \sum_{\substack{j,j' \\ j' \neq j}} V_{NN}^{(jj')} = \frac{e^2}{2} \sum_{\substack{j,j' \\ j' \neq j}} \frac{Z_j Z_{j'}}{ \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'} }</math></p> <p><u>электронов с ядрами</u> <math>V_{eN} = \sum_{i,j} V_{eN}^{(ij)} = -e^2 \sum_{i,j} \frac{Z_j}{ \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j }</math></p>

Запишем  $H$  в виде:

$$H = H_e + T_N.$$

Электронный гамильтониан  $H_e$  не содержит производных по координатам ядер и зависит от  $\mathbf{R}$  как от параметра. Пусть  $\varphi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  и  $U_n(\mathbf{R})$  - соответственно собственные функции и собственные значения оператора  $H_e$

$$H_e \varphi_n = U_n \varphi_n.$$

Функции  $\varphi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  образуют ортонормированный базис относительно  $\mathbf{r}$  при любом  $\mathbf{R}$ :

$$\int \varphi_n^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \varphi_{n'}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d\mathbf{r} = \delta_{nn'}.$$

Решение исходного стационарного уравнения Шредингера

$$H\psi = E\psi$$

ищем в виде разложения по  $\varphi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})$

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_n \Phi_n(\mathbf{R}) \varphi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

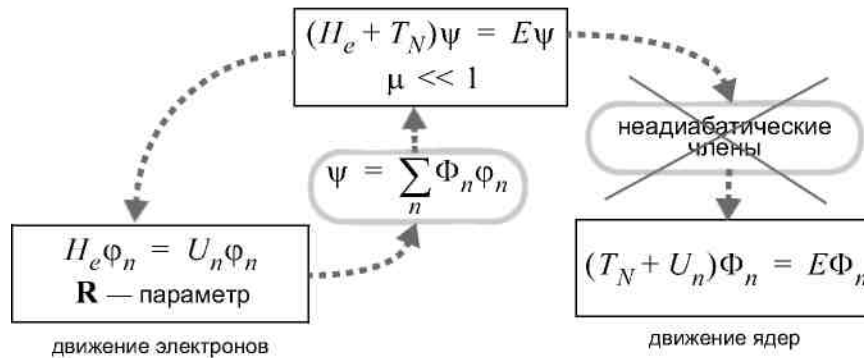
получим систему уравнений относительно неизвестных коэффициентов  $\Phi_n(\mathbf{R})$ :

$$(T_N + U_n)\Phi_n + \sum_{j, n'} A_{nn'}^{(j)} \nabla_{\mathbf{R}_j} \Phi_{n'} + \sum_{j, n'} B_{nn'}^{(j)} \Phi_{n'} = E\Phi_n,$$

где

$$A_{nn'}^{(j)} = -\frac{\hbar^2}{M_j} \int \varphi_n^* \nabla_{\mathbf{R}_j} \varphi_{n'} d\mathbf{r}, \quad B_{nn'}^{(j)} = -\frac{\hbar^2}{2M_j} \int \varphi_n^* \nabla_{\mathbf{R}_j}^2 \varphi_{n'} d\mathbf{r}.$$

Адиабатическое приближение состоит в пренебрежении членами с  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  в силу их малости по сравнению со слагаемыми с  $T$  и  $U$ .



### Пространственная решетка кристаллов. Обратная решетка кристаллов.

При теоретическом изучении объемных свойств кристаллов исследуют монокристаллы бесконечных размеров, чтобы исключить влияние поверхности. Наиболее

важным свойством таких монокристаллов является их периодическая структура или *трансляционная симметрия*.

Наименьшая часть кристалла, пространственным повторением которой образуется весь кристалл, называется *элементарной ячейкой*. Элементарная ячейка электрически нейтральна. Она может содержать одну или несколько молекул, атомов или ионов.

Вследствие трансляционной симметрии, каждой точке одной элементарной ячейки можно сопоставить эквивалентную точку другой элементарной ячейки. Положения таких эквивалентных точек в кристалле характеризуются *векторами решетки*.

Совокупность всех векторов решетки образует *пространственную решетку* или *решетку Браве*. Концы векторов решетки определяют положение узловых точек в решетке. Параллелепипед, построенный на векторах, называют *примитивной ячейкой кристалла*. Одной и той же пространственной решетке можно сопоставить разные векторы основных трансляций.

Можно построить элементарную ячейку кристалла, обладающую симметрией решетки Браве. Эта элементарная ячейка называется *симметричной* или *элементарной ячейкой Вигнера — Зейтца*. Она представляет собой объем кристалла, ограниченный плоскостями, которые делят пополам и перпендикулярны, линиям, соединяющим один узел решетки со всеми близлежащими.

Кроме понятия пространственной решетки в обычном пространстве, широко используется понятие *обратной решетки* в трехмерном абстрактном пространстве волновых векторов. Это пространство ниже мы будем называть *k-пространством*. Волновые векторы имеют размерность обратной длины. Обратная решетка кристалла в *k*-пространстве представляет собой бесконечную совокупность точек, определяемых вектором

$$\mathbf{g} = \sum_{i=1}^3 g_i \mathbf{b}_i,$$

### ***Собственные значения и собственные функции оператора трансляции.***

Строгую трансляционную симметрию имеет только идеальный кристалл бесконечных размеров. Все реальные кристаллы конечны. Наличие граничных поверхностей нарушает трансляционную симметрию. Если линейные размеры кристалла достаточно велики по сравнению со средней длиной векторов основных трансляций, то при исследовании объемных свойств можно не учитывать влияние поверхности. Тогда удобно ввести специальные граничные условия на поверхности кристалла, при которых сохраняется трансляционная инвариантность.

В качестве таких граничных условий принимают *циклические граничные условия*, которые обычно называют *условиями Борна — Кармана*.

Математически условия Борна — Кармана сводятся к утверждению, что операторы трансляций на векторы  $N_i \mathbf{a}_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) тождественны оператору трансляции на нулевой вектор, т. е.

$$T_{N_1 \mathbf{a}_1} = T_{N_2 \mathbf{a}_2} = T_{N_3 \mathbf{a}_3} = T_0.$$

Для определения собственных функций  $\psi(\mathbf{r})$  и собственных значений  $t_n$  оператора трансляции  $T_n$  надо решить уравнение

$$T_n \psi(\mathbf{r}) = t_n \psi(\mathbf{r}).$$

### ***Общие свойства стационарных состояний кристалла, базирующиеся на его симметрии. Зоны Бриллюэна, энергетические зоны.***

Для определения области изменения  $k$  рассмотрим векторы  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{g}$ , где  $\mathbf{g}$  — произвольный вектор обратной решетки кристалла.

Таким образом, векторы  $\mathbf{k}'$  и  $\mathbf{k}$  эквивалентны по отношению к собственному значению  $\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})$  оператора трансляции. Неэквивалентные векторы  $\mathbf{k}$  могут находиться только в одной из основных ячеек обратной решетки. Итак, собственные значения и собственные функции оператора трансляции

классифицируются значениями волнового вектора  $k$ , лежащими в первой зоне Бриллюэна  $k$ -пространства. Такие волновые векторы называются «*приведенными*».

Собственные значения операторов трансляций должны удовлетворять равенствам

$$\exp(-ik a_1 N_1) = \exp(-ik a_2 N_2) = \exp(-ik a_3 N_3) = 1$$

Если эти равенства удовлетворены условием, чтобы все значения  $k$  лежали внутри первой зоны Бриллюэна, или равновеликого примитивного параллелепипеда, т. е. при условиях

$$-\pi < k a_i < \pi, \quad i = 1, 2, 3.$$

При выполнении этих условий выражение  $k = \sum_{i=1}^3 b_{iN_i} / N_i$  определяет  $N$  различных значений приведенных волновых векторов  $k$ .

Стационарные состояния кристалла имеют определенную энергию и описываются собственными функциями оператора Гамильтона  $H$ . Вследствие трансляционной симметрии оператор  $H$  коммутирует с оператором трансляции  $T_n$ , т. е.

$$[H, T_n] = 0.$$

Таким образом, собственные функции оператора  $H$  должны быть одновременно собственными функциями оператора трансляции. Следовательно, эти функции классифицируются по неприводимым представлениям группы трансляций, т. е. зависят от приведенного волнового вектора  $k$  и удовлетворяют уравнениям

$$T_n \psi_{k\alpha} = \exp(-ikn) \psi_{k\alpha}, \quad H \psi_{k\alpha} = E_\alpha(k) \psi_{k\alpha}$$

где буквой  $\alpha$  отмечается все остальные квантовые числа, от которых может зависеть энергия стационарного состояния.

Состояния с определенным значением  $k$  в пространстве неоднородны. Любое пространственно-неоднородное состояние в идеальном кристалле описывается суперпозицией состояний с различными  $k$  и, следовательно, не является стационарным.

При фиксированном  $\alpha$  энергия  $E_\alpha$  принимает  $N$  квазинепрерывных значений, совокупность которых называют *энергетической полосой* или *энергетической зоной*. При стремлении  $N$  к бесконечности функция  $E_\alpha(k)$  принимает непрерывные значения. Совокупность энергетических зон  $E(k)$  для разных значений  $\alpha$  называют *зонной структурой кристалла*. Следствием эквивалентности векторов  $k$  и  $k + g$  отличающихся друг от друга на вектор обратной решетки, является равенство

$$E_\alpha(k) = E_\alpha(k + g).$$

### **Электрон в периодическом поле. Приближенные методы вычисления одноэлектронных состояний. Вторичное квантование систем электронов.**

В кристалле с закрепленными ионами в узлах решетки взаимодействие электронов между собой и с положительно заряженными ионами можно представить в виде суммы некоторого среднего поля  $W(r)$ , зависящего только от координат этого электрона и обладающего свойством периодичности

$$W(r) = W(r + n)$$

и некоторого остаточного взаимодействия  $W_r$ , которое зависит от координат всех электронов. В ряде случаев остаточное взаимодействие мало, и в нулевом приближении можно рассматривать движение отдельного электрона только в поле  $W(r)$ . Стационарные состояния электрона массы  $m$  в таком поле называются *одноэлектронными*. Они определяются уравнением Шредингера

$$\left[ \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + W(r) - E_\alpha(k) \right] \psi_{k\alpha}(r) = 0, \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla.$$

В действительности одноэлектронные состояния, являются только квазистационарными. Остаточное взаимодействие  $W_r$ , взаимодействие с другими степенями свободы кристалла (движение ионов) и дефектами кристаллической структуры приведут к процессам релаксации. В очень чистых кристаллах при очень низких температурах время жизни, обусловленное

процессами релаксации, сравнительно велико, поэтому в первом приближении их можно не принимать во внимание.

Собственные функции уравнения Шредингера являются одновременно собственными функциями оператора трансляции, поэтому одним из квантовых чисел, определяющих состояния, является волновой вектор  $k$ , все остальные квантовые числа обозначены буквой  $\alpha$ .

В кристалле с  $N$  элементарными ячейками при фиксированном  $\alpha$  энергия  $E_\alpha(k)$  принимает  $N$  квазинепрерывных значений, образующих энергетическую зону одноэлектронных состояний. Если кристалл не находится во внешнем магнитном поле, то вследствие инвариантности уравнения Шредингера относительно обращения времени без учета спинового состояния должно выполняться равенство

$$E_\alpha(k) = E_\alpha(-k).$$

Классификация одноэлектронных состояний с помощью энергетических зон  $\alpha$ , каждая из которых имеет  $N$  подуровней, различающихся значениями приведенных волновых векторов  $k$  из первой зоны Бриллюэна, не единственно возможная. В некоторых случаях более удобно определять состояния указанием значений волновых векторов  $k$  во всем пространстве — *расширенном  $k$ -пространстве*. При этом переходу из одной энергетической зоны  $E_\alpha(k)$  в другую  $E(k)$  в первой зоне Бриллюэна в расширенном  $k$ -пространстве соответствует переход из одной в другую зоны Бриллюэна.

Предположим, что энергия при фиксированном  $\alpha$  имеет экстремальное значение при  $k = k_0$ . Если  $k_0 \neq 0$ , то такие же экстремальные значения энергии будут иметь и в других точках зоны Бриллюэна с волновыми векторами  $k_{0i}$ , образующими с  $k_0$  звезду  $k$ -представления. Вводя вектор  $q = k - k_0$  можно при малых  $q$  заменить гребниженным выражением

$$E_\alpha(k_0 + q) = E_\alpha(k_0) + \sum_{\mu, \nu} \frac{\hbar^2}{2m_{\nu\mu}^*} q_\mu q_\nu,$$

где

$$\frac{m}{m_{\nu\mu}^*} = \frac{m}{\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 E_\alpha(k)}{\partial q_\nu \partial q_\mu} \right)_0 \approx \delta_{\nu\mu} + \frac{1}{2} \sum_g \left[ \left( g_\nu \frac{\partial}{\partial q_\mu} + g_\mu \frac{\partial}{\partial q_\nu} \right) | A_{k\alpha}(g) |^2 \right]_0.$$

Величина  $1/m^*$  называется *тензором обратной эффективной массы* электрона в соответствующей энергетической полосе. Второе слагаемое в учитывает эффективное изменение массы свободного электрона вследствие действия периодического потенциала.

Теоретическое вычисление закона дисперсии  $E_\alpha(k)$  и волновых функций одноэлектронных состояний в твердых телах связано с большими математическими трудностями даже в том случае, когда известна функциональная зависимость среднего поля  $W(r)$  от радиуса-вектора. Преодолеть эти трудности удастся только в простейших случаях при использовании приближенных методов. Наиболее часто применяемых метода: метод приближения почти свободных и сильно связанных электронов и метод вычисления тензора обратной эффективной массы электрона вблизи экстремумов функции  $E_\alpha(k)$ .

### ***Статистика носителей заряда. Неравновесные электроны и дырки.***

Согласно результатам зонной теории твердых тел электроны в кристаллах удобно рассматривать как свободные частицы, эффективная масса которых отличается от массы свободного электрона. В полупроводниках, кроме электронов, носителями заряда являются и положительно заряженные частицы — дырки. Таким образом, в явлениях, в которых основную роль играют эти частицы (электропроводность, теплопроводность, взаимодействие со светом и т.д.) твердое тело можно рассматривать как газ электронов и дырок.

Системы, состоящие из большого количества тождественных частиц, являются предметом изучения статистической физики. Основной особенностью статистических закономерностей является их вероятностный характер. Основная задача статистики состоит в определении числа частиц, энергия которых лежит в заданном интервале. Результатом

решения этой статистической задачи является нахождение *функции распределения частиц по энергиям*, которую обозначают обычно  $f(E)$ .

В отличие от классической статистики Максвелла-Больцмана квантовая статистика стоит на точке зрения *принципиальной неразличимости тождественных частиц*. Поэтому перестановка местами двух квантовых частиц не приводит к новому микросостоянию. Для электронов и всех частиц с полуцелым спином необходимо учитывать также *принцип Паули*. Согласно этому принципу в одном квантовом состоянии может находиться только одна частица. Такие частицы называются *фермионами* и подчиняются *квантовой статистике Ферми-Дирака*. Иной квантовой статистикой описываются частицы с нулевым и целым спином. Эти частицы не подчиняются принципу Паули и в одном состоянии их может быть сколько угодно. Такие частицы называются *бозонами*, квантовая статистика, которая описывает их распределение по энергиям, - *статистикой Бозе-Эйнштейна*.

Статистике Бозе-Эйнштейна подчиняются фотоны и фононы, играющие важную роль в физических свойствах твердых тел. Функция распределения Бозе-Эйнштейна имеет вид

$$f_{Б-Э}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_B}{kT}\right) - 1}$$

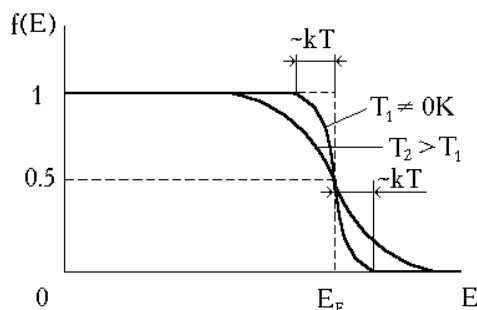
Здесь  $E_B$  - химический потенциал системы бозонов.

Функция распределения Ферми-Дирака, описывающая распределение фермионов по состояниям, имеет следующий вид:

$$f_{Ф-Д}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

здесь  $E_F$  - химический потенциал системы фермионов, т.е. работа, которую необходимо затратить, чтобы изменить число частиц в системе на одну. В случае электронов величина  $E_F$  называется *энергией Ферми*.

Рассмотрим вид функции Ферми-Дирака при температуре, стремящейся к абсолютному нулю. Для любой энергии частицы, большей энергии Ферми, экспонента в знаменателе стремится к бесконечности при  $T \rightarrow 0K$ , следовательно  $f(E)$  стремится к нулю. Это значит, что все энергетические состояния с  $E > E_F$  совершенно свободны при абсолютном нуле. Если  $E < E_F$  при  $T \rightarrow 0K$ ,  $f(E)$  стремится к единице.



Это значит, что все квантовые состояния с энергией, меньше энергии Ферми, полностью заняты электронами. Отсюда понятен физический смысл энергии Ферми как параметра распределения электронов по состояниям: *энергия Ферми есть максимально*



возможная энергия электронов в металле при температуре абсолютного нуля. Энергетический уровень, соответствующий энергии Ферми, называется *уровнем Ферми*.

Для определения числа частиц, имеющих энергию в заданном интервале, необходимо, кроме функции распределения  $f(E)$ , знать функцию плотности состояний  $g(E)$ . Эта функция описывает распределение уровней в соответствующих зонах и определяет число уровней, приходящихся на единичный интервал энергии. По определению

Выражение для плотности квантовых состояний электронов у дна зоны проводимости:

$$g(E) = \frac{V(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}.$$

Энергию дырок у потолка валентной зоны можно записать также в виде параболического закона:

$$E = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*},$$

где  $E_v$  - энергия потолка валентной зоны,  $m_p^*$  - эффективная масса дырки. Вычисления, аналогичные тем, которые были проведены выше для электронов, приводят к следующему выражению для функции плотности состояний дырок вблизи потолка валентной зоны:

$$g(E) = \frac{V(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} (E_v - E)^{\frac{1}{2}}.$$

Следует подчеркнуть, что данные формулы справедливы только для состояний вблизи экстремумов энергии, т.е. у дна или потолка энергетической зоны. В средней же части зоны точный вид функции  $g(E)$  неизвестен.

Положение уровня Ферми в собственных и примесных полупроводниках связано с концентрацией носителей заряда, установившейся при данной температуре в состоянии термодинамического равновесия. Переброс электронов в зону проводимости за счет температурного возбуждения и возникновение в результате этого процесса дырок в валентной зоне называется *термической генерацией свободных носителей заряда*. Одновременно происходит и обратный процесс: электроны возвращаются в валентную зону, в результате чего исчезают электрон и дырка. Этот процесс называется *рекомбинацией носителей заряда*. Для количественного описания процессов генерации и рекомбинации носителей заряда в полупроводниках используют понятия *скорости генерации*, *скорости рекомбинации* и *времени жизни* носителей заряда.

*Скорость генерации носителей* - это число носителей, возбуждаемых в единичном объеме полупроводника за единицу времени.

*Скорость рекомбинации носителей* - это число носителей, рекомбинирующих в единице объема полупроводника за единицу времени.

*Время жизни носителей*  $t$  - это среднее время от генерации носителя до его рекомбинации.

Из приведенных выше определений непосредственно следуют следующие соотношения между скоростями рекомбинации электронов  $R_n$  и дырок  $R_p$  и их временами жизни  $t_n$  и  $t_p$  соответственно:

$$R_n = \frac{n}{\tau_n}, \quad R_p = \frac{p}{\tau_p}.$$

Здесь учтено, что  $1/\tau$  - вероятность рекомбинации носителя за единицу времени.

При фиксированной температуре устанавливается термодинамическое равновесие, при котором процессы генерации и рекомбинации взаимно уравниваются. Такие носители, находящиеся в тепловом равновесии с кристаллической решеткой, называются *равновесными*.

Электропроводность полупроводника может быть возбуждена и другими способами, например, облучением светом, действием ионизирующих частиц, электрическим полем, инжекцией носителей через контакт и др. Во всех этих случаях дополнительно к равновесным носителям в полупроводнике возникают носители заряда, которые не будут находиться в состоянии теплового равновесия с кристаллом. Такие носители называются *неравновесными*.

Общую концентрацию электронов в зоне проводимости  $n$  в случае равновесных и неравновесных носителей можно представить в виде

$$n = n_0 + \Delta n,$$

где  $n_0$  - концентрация равновесных электронов;  $\Delta n$  - концентрация неравновесных электронов.

Общая концентрация дырок

$$p = p_0 + \Delta p,$$

где  $p_0$  и  $\Delta p$  - равновесная и неравновесная концентрации дырок соответственно.

Поскольку распределение Ферми-Дирака справедливо только для состояния термодинамического равновесия, то понятно, что статистика неравновесных носителей должна быть иной. В отсутствие термодинамического равновесия принято вводить два новых параметра распределения  $E_{Fn}$  для электронов и  $E_{Fp}$  для дырок. Величины  $E_{Fn}$  и  $E_{Fp}$  называют *квазиуровнями Ферми* электронов и дырок соответственно. Таким образом, в невырожденных полупроводниках справедливы уравнения

$$n = n_0 + \Delta n = N_c \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_c}{kT}\right),$$

$$p = p_0 + \Delta p = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_{Fp}}{kT}\right).$$

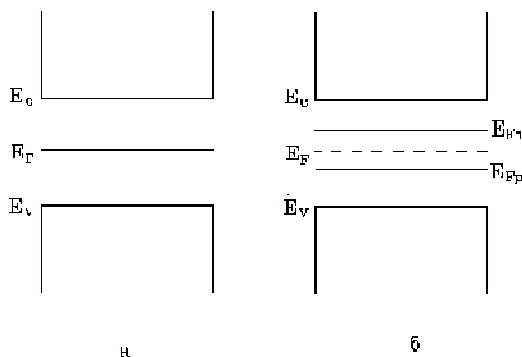


Рис. 3.7. Распределение уровня Ферми на два квазиуровня - для электронов  $E_{Fn}$  и для дырок  $E_{Fp}$ :  
а - равновесное состояние, б - неравновесное состояние

Поскольку при наличии избыточных носителей заряда закон действующих масс не

выполняется ( $np \neq n_i^2$ ), т.к. нет никакой зависимости между  $Dn$  и  $Dp$ , квазиуровни Ферми для электронов и дырок разные и не совпадают с равновесным уровнем Ферми (рис.3.7).

В состоянии термодинамического равновесия квазиуровни Ферми совпадают с равновесным уровнем Ферми  $E_F$ . Чем выше концентрация неравновесных носителей заряда, тем дальше отстоят квазиуровни Ферми от уровня Ферми.

$$\frac{np}{n_0 p_0} = \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{kT}\right)$$

Это соотношение выражает связь между концентрациями электронов и дырок в неравновесном состоянии. Разность энергий  $E_{Fn} - E_{Fp}$  характеризует отклонение от состояния термодинамического равновесия. Если  $np > n_0 \cdot p_0$ , то  $E_{Fn} > E_F > E_{Fp}$ . Это условие соответствует *инжекции* (вбрасыванию) избыточных носителей. Если  $np < n_0 p_0$ , то говорят об *экстракции* (обеднении) носителей.

Неравновесные носители играют важную роль в работе полупроводниковых приборов.

***Собственные векторы и собственные значения заряженных частиц в магнитном поле. Эффективная циклотронная масса электрона проводимости.***

На электрон, движущийся в свободном пространстве со скоростью  $v$  в магнитном поле с напряженностью  $B$ , действует сила Лоренца. Сила  $F$  перпендикулярна скорости электрона и, следовательно, не меняет его энергию. Электрон движется по спирали с постоянной составляющей скорости вдоль поля. Проекция его траектории на плоскость, перпендикулярную полю, является окружностью с *ларморовским радиусом*. Период

$$\omega_B = \frac{2\pi}{T} = \frac{e|B|}{mc}$$

обращения электрона вокруг поля и круговая частота *ларморовской* или *циклотронной частотой*.

Квантовая теория движения электрона в магнитном поле впервые была развита Ландау. Если магнитное поле  $B$  описывается векторным потенциалом,  $B = \text{rot } A$ , и направлено вдоль оси  $z$ , то векторный потенциал можно записать в виде

$$A = \left(-\frac{1}{2}yB, \frac{1}{2}xB, 0\right), \quad B = |B|.$$

Гамильтониан электрона в магнитном поле выражается через оператор импульса электрона и векторный потенциал  $A$

Поскольку движение электрона вдоль поля остается свободным (не квантуется), то достаточно рассмотреть двумерную задачу о движении электрона в плоскости  $xu$ , перпендикулярной полю. Если выразить абсолютную величину поля  $B$  через циклотронную частоту, то гамильтониан, определяющий движение электрона в плоскости  $xu$

$$H_{\perp} = \hbar\omega_B \left(\pi' \pi + \frac{1}{2}\right)$$

с собственными значениями

$$E_{\perp} = \hbar\omega_B (v + 1/2),$$

зависящими от квантового числа  $v=0, 1, 2, \dots$

С гамильтонианом коммутирует оператор проекции углового момента электрона на ось  $z$ :

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$$

Квантовое описание движения электрона в зоне проводимости необходимо при исследовании взаимодействия кристалла с коротковолновым электромагнитным полем. Если же внешнее магнитное поле плавно меняется в пространстве и времени, или постоянно и однородно в кристалле, а его величина мала по сравнению с внутри- и межатомными полями и размеры траектории электронов значительно превышают межатомные расстояния, то для описания их движения во многих случаях достаточно использовать квазиклассическое описание. В этом

случае электрон в кристалле рассматривается как квазичастица, характеризующаяся определенным законом дисперсии.

Рассмотрим движение электрона в кристалле, находящемся в постоянном внешнем однородном магнитном поле. Гамильтониан электрона в кристалле имеет вид

$$H = \sum_{\nu=1}^3 \frac{1}{2m_{\nu}} \left( \hat{p}_{\nu} + \frac{e}{c} A_{\nu} \right)^2.$$

В большинстве физических явлений в металлах главную роль играют электроны с энергией, близкой к фермиевской. Электрон с фермиевской энергией движется в  $k$ -пространстве по орбите, которая образуется при сечении поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной магнитному полю. Для электрона в окрестности экстремума энергии в зоне проводимости эта траектория обычно представляет замкнутую кривую, по которой электрон совершает периодическое движение. Для незамкнутых поверхностей при некоторых направлениях магнитного поля движение электрона будет аperiодическим.

В кристалле циклотронная частота определяется формулой

$$\omega_B = \frac{e}{m_B^* c} B_z,$$

— некоторая эффективная масса, зависящая от геометрии поверхности Ферми.

Массу

$$m_B^* = \frac{m}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial E}$$

называют *эффективной циклотронной массой*. Она зависит от формы изоэнергетической поверхности, соответствующей данной энергии, и от значения  $k_x$ , определяющего положение плоскости, в которой происходит движение электрона. Использование эффективной циклотронной массы  $m_B^*$  при исследовании движения электрона в магнитном поле более удобно, чем использование тензора обратных эффективных масс, который в общем случае зависит от всех компонент  $k$ .

Эффективная циклотронная масса имеет знак производной  $\partial S / \partial E$ , который зависит от того, будет ли энергия внутри изоэнергетической поверхности  $E(k) = E_0$  меньше или больше  $E_0$ . В первом случае производная  $\partial S / \partial E$  и эффективная масса  $m_B^*$  положительна, во втором — отрицательна.

Если  $m_B^* > 0$ , то квазичастица-электрон движется как свободный электрон, иначе положительно заряженная частица.

### **Квантование движения электрона в зоне проводимости при наличии магнитного поля.**

Энергия свободного движения электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, квантуется подобно энергии гармонического осциллятора с ларморовой частотой. При некоторых условиях такое квантование должно наблюдаться и для электронов проводимости, имеющих энергию, близкую к энергии Ферми, в кристалле, находящемся в сильном однородном постоянном магнитном поле.

Для проявления квантового характера движения электронов в кристаллах необходимо, чтобы траектории, образованные пересечением поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной полю, были замкнутыми, время обращения электронов по этим траекториям было значительно больше времени релаксации и, наконец, дискретность квантовых уровней должна превышать энергию  $kT$  теплового движения. Последние два условия выполняются, в очень чистых монокристаллах при низких температурах в сильных магнитных полях.

Следовательно, энергия движения электрона в плоскости  $k_x, k_y$  определяется циклической частотой  $\omega_B$  и квантовым числом  $\nu$ , пробегающим целочисленные значения

$$E_{\nu} = \hbar \omega_B (\nu + 1/2), \quad \nu = 0, 1, \dots$$

по форме. Уровни энергии не являются эквидистантными.

Движение вдоль открытых траекторий не квантуется в квазиклассическом приближении. Зильберман показал, что при более строгом рассмотрении в случае, когда траектория движения

электрона в к-пространстве в плоскости, перпендикулярной магнитному полю  $B$ , является открытой и периодической (например, в металлах с поверхностью Ферми типа гофрированного цилиндра), в сплошном энергетическом спектре появляются эквидистантные или квази-эквидистантные разрывы с шириной порядка  $e^4$ , где  $e = a/\sqrt{\hbar c e B}$ ,  $a$  — постоянная решетки. При  $B \approx 10^4$  э течение  $e \approx 10^{-2}$ .

Каждому уровню  $E_v$  соответствует осцилляторная волновая функция

$$\varphi_{v, k_y}(x - x_{k_y}),$$

зависящая также от квантового Числа  $k_y$  (вырождение). Кратность вырождения определяется числом возможных значений  $k_x$ , при которых равновесное положение  $x_{k_y}$  находится внутри металла. Кратность вырождения уровня

$$N(v, k_y) = \frac{L_x L_y m^* \omega_c}{2\pi \hbar} = \frac{L_x L_y e B}{2\pi \hbar c}.$$

Вырождение является следствием предположения об однородности металла и магнитного поля, согласно которому эквивалентны все точки, вокруг которых вращается электрон. В неоднородном кристалле — такое вырождение частично или полностью снимается. Частично оно снимается даже периодической структурой кристалла. Это проявляется в небольшом размытии уровней.

Итак, стационарные состояния электрона проводимости в постоянном магнитном поле напряженности  $B$  определяются энергией

$$E_{v, k_x} = \hbar \omega_c (v + 1/2) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*},$$

которой соответствуют волновые функции

$$\Psi_{v, k_x, k_y}(x, y, z) = \varphi_v(x - x_{k_y}) e^{ik_x z} e^{ik_y y}.$$

## Модуль 2 «Кинетические свойства твердых тел»:

### Подвижность носителей заряда.

Подвижность носителей заряда — коэффициент пропорциональности между дрейфовой скоростью носителей и приложенным внешним электрическим полем. Определяет способность электронов и дырок в металлах и полупроводниках реагировать на внешнее воздействие.

Фактически подвижность численно равна скорости носителей заряда при напряженности электрического поля в 1 В/м.

В анизотропной среде подвижность связывает компоненты дрейфовой скорости с компонентами электрического поля  $E_\beta$

$$v_d^\alpha = \mu_{\alpha\beta} E_\beta.$$

В простейшем случае изотропной и однородной среды можно записать

$$\mu = \frac{|v_d|}{|E|}.$$

В модели Друде дрейфовая скорость с концентрацией определяют ток в системе

$$j_\alpha = en\mu E_\alpha = \sigma E_\alpha.$$

И подвижность оказывается связанной с проводимостью системы

$$\sigma = en\mu.$$

Для подвижности известно также следующее выражение, получаемое из кинетического уравнения в приближении времени релаксации  $\tau$ :

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*},$$

где  $m^*$  — эффективная масса носителей.

Поверхностной подвижностью называется подвижность носителей, движущихся параллельно поверхности в приповерхностной области твердого тела, связанная со специфическими механизмами рассеяния, вызванными наличием поверхности раздела двух фаз.

**Рассеяния носителей заряда. Упругое (на статических дефектах - примесные атомы, дислокации, границы кристаллических зёрен и т. п.) и неупругое рассеяние (на акустических и оптических фононах).**

В кристаллических твёрдых телах - процесс взаимодействия электрона проводимости (дырки) с нарушениями идеальной периодичности кристалла, сопровождающийся переходом электрона из состояния с импульсом  $p$  в состояние с импульсом  $p'$ . Рассеяние наз. упругим, если энергии электрона в начальном и конечном состояниях равны,  $\mathcal{E}(p) = \mathcal{E}(p')$ , или неупругим, если  $\mathcal{E}(p) \neq \mathcal{E}(p')$ . Источником упругого рассеяния являются статические дефекты - примесные атомы, дислокации, границы кристаллических зёрен и т. п. Основным источником неупругого рассеяния являются колебания кристаллической решётки.

Рассеяние электрона на колебаниях решётки описывается в терминах испускания и поглощения *фононов* движущимся электроном. В некоторых случаях существенно неупругое рассеяние на др. *квазичастицах*- магнонах, плазмонах. Особое положение занимает *межэлектронное рассеяние*, которое является причиной того, что любое неравновесное по энергии или импульсу распределение электронов, созданное внешним возмущением (электрическое поле, свет), с течением времени релаксирует к равновесному фермиевскому распределению  $f_T(\mathcal{E})$ , соответствующему температуре кристалла  $T$ . В процессе релаксации упругое рассеяние "размешивает" распределение равномерно в пределах каждой изоэнергетической поверхности  $\mathcal{E}(p) = \text{const}$ , а неупругое - устанавливает равновесное распределение  $f_T(\mathcal{E})$  между изоэнергетическими поверхностями с разными  $\mathcal{E}$ . Время, необходимое для достижения равномерного распределения на изоэнергетической поверхности, называется временем релаксации импульса  $\tau_p(\mathcal{E})$  или транспортным временем релаксации. Время, необходимое для установления равновесного распределения в области энергий порядка  $\mathcal{E}$ , называется временем релаксации энергии  $\tau_{\mathcal{E}}(\mathcal{E})$ . Если,  $\tau_{\mathcal{E}} \gg \tau_p$  рассеяние называется квазиупругим. В этом случае установление равновесия идёт в 2 этапа: сначала быстро (за время  $\tau_p$ ) неравновесное распределение выравнивается на каждой изоэнергетической поверхности и превращается в неравновесное распределение по энергиям, которое затем медленно (за время  $\tau_{\mathcal{E}}$ ) релаксирует к равновесному распределению  $f_T(\mathcal{E})$ .

Возмущением, ответственным за межэлектронное рассеяние является разность между истинным потенциалом  $V(r, t)$ , действующим на электрон в реальном кристалле, и периодичность потенциалом  $V_0(r, t)$ , действующим в идеальном кристалле с неподвижными атомами ( $r$ - пространственная координата электрона). Возмущение  $dV = V - V_0$  определяет вероятность рассеяния  $W_{p \rightarrow p'}$ . В *вырожденных полупроводниках* и *металлах* следует учитывать принцип Паули, так что фактическая вероятность перехода равна  $W_{p \rightarrow p'} [1 - f(p')]$ . Кроме того, при большой плотности носителей рассеяние ослабляется экранированием возмущения из-за перераспределения носителей в пространстве.

Рассеяние на фононах. Вероятность рассеяния электрона при испускании или поглощении фонона с импульсом  $q$  и энергией  $\hbar\omega_q$  (без учёта принципа Паули) определяется выражением

$$W_{p \rightarrow p'}^{\pm q} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| M_{p \rightarrow p'}^{\pm q} \right|^2 \delta(\mathcal{E}_p - \mathcal{E}_{p'} \mp \hbar\omega_q) \left( N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right). \quad (1)$$

Здесь верхний и нижний знаки соответствуют испусканию и поглощению фонона; числа фононов с импульсом  $q$  определяются распределением Планка  $N_q = [\exp(\hbar\omega_q/kT) - 1]^{-1}$ . (2)

Матричный элемент  $M$  перехода  $p : p'$  содержит закон сохранения квазиимпульса:  $p - p' \mp q = b$  ( $b$ - произвольный вектор обратной решётки). Переходы, для которых  $b = 0$ , называются нормальными; если  $b \neq 0$ , говорят о переходах с перебросом. Дельта-функция  $\delta$  отражает закон сохранения энергии. Вероятность рассеяния с испусканием фонона  $W^{+q}$  пропорциональна  $N_q + 1$ . Два слагаемых, соответствующие  $N_q$  и 1, дают вероятности индуцированного и спонтанного рассеяний. Вероятность рассеяния с поглощением фонона  $W^{-q}$  пропорц.  $N_q$ , поэтому поглощение фонона всегда является индуцированным.

Рассеяние электрона на фононах в большой степени определяется законами сохранения энергии и импульса (кинематические факторы), а также принципом Паули. Поэтому картина рассеяния различна для акустических и оптических фононов, имеющих разные законы дисперсии  $\mathcal{E}(p)$ , и зависит от степени вырождения электронного газа.

Кинематика позволяет установить, какие фононы дают основной вклад в рассеяние, какова степень упругости рассеяния, а также является ли оно индуцированным или спонтанным.

Рассеяние на акустических фононах в полупроводниках. Т. к. скорость электрона  $v$  имеет порядок скорости звука  $s$  только при очень малой его энергии, то в реальных условиях  $v \gg s$ . Это означает, что возмущение, создаваемое акустическим фононом, почти статично, а рассеяние электронов всегда квазиупруго. Из кинематики следует, что основной вклад в рассеяние вносят фононы с импульсом  $q \approx p$ ; поэтому направленный импульс электрона теряется всего за несколько столкновений. Энергия фонона с таким импульсом  $\hbar\omega_q = \hbar sq \approx \hbar sp \approx (ms^2\mathcal{E})^{1/2} \ll \mathcal{E}$ , так что для релаксации энергии требуется много столкновений, т. е. действительно  $\tau_{\mathcal{E}} \gg \tau_p$ .

Является ли рассеяние индуцированным или спонтанным, зависит от соотношения между энергией фонона и тепловой энергией. Эти величины сравниваются, когда энергия электрона равна  $\bar{\mathcal{E}} = T^2/ms^2$ . Если  $\mathcal{E} \gg \bar{\mathcal{E}}$ , то характерны  $N_q \ll 1$ ; доминирует спонтанное испускание фононов (динамическое трение), и "движение" электрона по оси энергии  $\mathcal{E}$  есть систематический дрейф вниз. При  $\mathcal{E} \ll \bar{\mathcal{E}}$  доминируют индуцированные переходы, т. к.  $N_q \gg 1$ . При этом испускание происходит не намного чаще, чем поглощение, и "движение" электрона по оси энергий превращается в диффузию.

Рассеяние на акустических фононах в металлах и вырожденных полупроводниках. Вследствие закона сохранения импульса наиболее вероятно взаимодействие с фононами, импульс которых  $q \approx p_F$ , где  $p_F$ - импульс Ферми. Но испусканию таких фононов (с энергией  $\hbar\omega_q \approx \hbar sp_F$ ) может препятствовать принцип Паули, если превышение энергии электрона  $\mathcal{E}$  над энергией Ферми  $\mathcal{E}_F$  много меньше  $\hbar sp_F$ , а поглощение может ослабляться из-за малого числа таких фононов, если  $T \ll \hbar sp_F$ . Поэтому характер рассеяния сильно зависит от  $T$  и превышения энергии электрона над энергией Ферми. При  $T \gg \hbar sp_F$  почти для всех электронов  $\mathcal{E} - \mathcal{E}_F \gg \hbar sp_F$  (указанные ограничения несущественны) и рассеяние (с испусканием и поглощением) идёт на фононах с  $q \approx p_F$  и энергией  $\hbar\omega_q \approx \hbar sp_F$ . Для релаксации импульса требуется несколько столкновений, а для

релаксации энергии - много (квазиупругое рассеяние). При  $T \ll \hbar s p_F$  поглощение фононов с энергией  $\hbar \omega_q \approx \hbar s p_F$  маловероятно, но если  $\mathcal{E} - \mathcal{E}_F \gg \hbar s p_F$ , то принцип Паули не запрещает испускание таких фононов (в основном спонтанное). Рассеяние, как и при высоких температурах, квазиупруго. Если же  $\mathcal{E} - \mathcal{E}_F \ll \hbar s p_F$ , то принцип Паули разрешает только испускание фононов с  $q \ll p_F$ . Такое рассеяние является малоугловым, и выравнивание распределения электронов на поверхности Ферми происходит диффузионно. Для полной релаксации импульса требуется много столкновений, релаксация же энергии происходит за несколько столкновений (неупругое рассеяние).

Рассеяние на оптических фононах. При рассеянии в металлах существенны оптические фононы во всей зоне Бриллюэна, в осн. коротковолновые с  $q \simeq b_0$ , где  $b_0$  - размер Бриллюэна зоны. В полупроводниках в рассеянии участвуют только оптич. ДВ-фононы с  $q \ll b_0$ . Частоту этих фононов  $\omega_0$  можно считать не зависящей от  $q$ . Рассеяние на оптич. фононах квазиупруго только при  $\mathcal{E} \gg \hbar \omega_0$ ! 400 К, т. е. только при очень высоких энергиях электронов (см. *Горячие электроны*). В области энергий  $\mathcal{E} \leq \hbar \omega_0$  проявляются неупругий и пороговый характеры рассеяния. Это существенно при низких темп-рах  $T \ll \hbar \omega_0$ , когда ниже порога ( $\mathcal{E} < \hbar \omega_0$ ) рассеяние слабое и возможно только за счёт маловероятного поглощения фонона, пропорционального  $N_0 = \exp(-\hbar \omega/T) \ll 1$ , а выше порога ( $\mathcal{E} > \hbar \omega_0$ ) рассеяние сильное - оно происходит при спонтанном испускании фонона.

Деформационное и поляризационное рассеяния. В выражение (1) входит матричный элемент  $M$  возмущения  $dV$  на блоховских ф-циях  $u$ , обычно  $dV$  и  $u$  неизвестны, поэтому  $M$  можно найти только численными расчётами. Однако если рассеяние происходит на ДВ-фононах, эту трудность можно обойти. Для этого следует усреднить  $dV$  по объёму с размерами, большими постоянной решётки  $a_0$  и меньшими длины волны фонона  $l = 2\pi/q$ . В результате усреднения появляется электр. макрополе  $e\phi$ . Для  $dV$ , созданного акустич. фононом,  $f(r, t)$  ( $r$  - координата точки, в окрестности к-рой произведено усреднение) представляет собой электр. поле, сопровождающее волну деформации (пьезополе). В случае оптич. фонона  $f(r, t)$  - поле, возникающее из-за относит. смещения разноимённо заряженных подрешёток. Рассеяние, обусловленное электр. макрополем, наз. поляризационным. Матричные элементы  $\bar{M}$  для рассеяния, обусловленного макрополем, можно вычислять, представляя волновые ф-ции электрона в виде плоских волн.

Др. источником рассеяния является микрополе  $\delta\tilde{V} = \delta V - e\phi$ , выпавшее при усреднении. В области усреднения, где  $e\phi$  почти постоянно,  $dV$  - почти периодич. ф-ция  $r$ . В этой области электрон движется в периодич. поле  $V_0 + \delta\tilde{V}$  и его закон дисперсии  $\mathcal{E}'(\mathbf{p})$  отличается от закона дисперсии  $\mathcal{E}(\mathbf{p})$  в идеальной решётке. В др. области усреднения будут другие  $\delta\tilde{V}'$  и другие  $\mathcal{E}'(\mathbf{p})$ . Т. к. частоты фононов меньше электронных, то закон дисперсии  $\mathcal{E}(\mathbf{p})$  "следит" за колебаниями решётки, т. о., в кристалле, в к-ром возбуждены ДВ-фононы, закон дисперсии медленно меняется в пространстве и времени; он описывается ф-цией  $\mathcal{E}(\mathbf{p}; r, t)$ , характерные масштабы изменения к-рой такие же, как у  $f(r, t)$ . Двигаясь в среде с перем. законом дисперсии, электрон рассеивается (как свет в мутной среде), даже если макрополе отсутствует. Такое рассеяние наз. деформационным.

Матричные элементы  $\tilde{M}$  деформационного рассеяния тоже можно вычислять, заменяя блоховские ф-ции на плоские волны, если в качестве возмущения брать не  $\delta\tilde{V}$ , а т. н. деформационный потенциал  $w(r, t)$ . В полупроводнике с невырожденной зоной  $w(r, t)$  имеет смысл сдвига дна или потолка зоны в точке  $r$  в момент  $t$ , т. е.  $w(r, t) = \mathcal{E}(\mathbf{p}; r, t) - \mathcal{E}(\mathbf{p}_0)$ , где  $\mathbf{p}_0$  соответствует экстремуму зоны (или центру долины; в многодолинном полупроводнике



деформац. потенциал различен для электронов разных долин). В металле  $w(r, t)$ - сдвиг поверхности Ферми, так что  $w$  зависит дополнительно от положения  $p$  на поверхности Ферми.

Матричные элементы в случае поляризационного  $\bar{M}$  и деформационного  $\tilde{M}$  рассеяний, вычисленные через  $e\mathbf{f}$  и  $w$ , всегда сдвинуты по фазе на  $\pi/2$ . Это означает, что поляризац. и деформац. рассеяния, обусловленные одной и той же фононной модой, не интерferируют. Поэтому говорят о четырёх механизмах рассеяния:  $DA, DO, PA, PO$ , где первая буква указывает на характер рассеяния (деформационный или поляризационный), вторая - на ветвь фононов (акустическая или оптическая).

Для вычисления  $\bar{M}$  и  $\tilde{M}$  необходимо выразить  $e\mathbf{f}$  и  $w$  через смещения атомов решётки. Связь  $\mathbf{f}$  со смещениями атомов находят из Пуассона уравнения  $\nabla^2 \Phi = 4\pi \text{div} P$ , где  $P$  - дипольный момент единицы объёма, возникший при однородной статич. деформации решётки из-за смещений ядер и связанного с этим смещения электронов. Для деформации, созданной акустич. фононами  $P_j = \beta_{jkl} u_{kl}$ , где  $u_{kl}$  - тензор деформации, а  $\beta_{jkl}$  выражаются через пьезомодули. При деформации, созданной оптич. фононами  $P_j = \gamma_{jk} \xi_k$ , где  $\xi_k$  - вектор относит. смещения подрешёток, а  $\gamma_{jk}$  выражаются через статич. и динамич. диэлектрич. проницаемости (см. ниже).

Число независимых констант  $\beta$  и  $\gamma$  определяется симметрией кристалла. Так, в кубич. кристаллах с центром инверсии  $\beta_{jkl} = \gamma_{jk} = 0$ , так что поляризац. рассеяние невозможно. В кубич. кристалле с двумя атомами в элементарной ячейке (большинство полупроводников) возможно поляризац. рассеяние для акустич. и оптич. фононов.

Деформац. потенциал  $w(r, t)$  определяется смещениями атомов в точке  $r$  в момент  $t$ . Для акустич. фононов  $w = \Xi_{ij} u_{ij}$ , для оптич. фононов -  $w = \Upsilon_i \xi_i$ . Здесь  $\Xi, \Upsilon$  - т. н. константы деформац. потенциала. Их число, кроме симметрии кристалла, зависит ещё от положения  $p$  в полупроводниках или на поверхности Ферми в металлах. В кубич. полупроводнике с  $p_0 = 0$  из симметрии следует, что  $\Xi_{ij} = \Xi \delta_{ij}$  и  $\Upsilon_i = 0$ . Это значит, что  $w = \Xi u$ , где  $u = u_{11} + u_{22} + u_{33}$  - относит. изменение объёма при деформации. Т. к. для поперечных акустич. фононов  $u = 0$ , то  $DA$ -рассеяние разрешено только для продольных фононов,  $DO$ -рассеяние запрещено для обеих ветвей. Если  $p_0$  лежит не в центре зоны Бриллюэна, то возможны  $DA$ - и  $DO$ -рассеяния на поперечных акустич. фононах.

Времена релаксации  $\tau_p$  и  $\tau_\mathcal{E}$  можно найти, если вычислить, с какой скоростью электрон с импульсом  $p$  теряет энергию и направленный импульс при рассеянии, переходя во все др. состояния с импульсами  $p'$  (скорость релаксации). В изотропном случае

$$\frac{dp}{dt} = \frac{p}{\tau_p}, \quad \frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}^*}{\tau_\mathcal{E}},$$

где величина  $\mathcal{E}^*$  имеет порядок тепловой энергии  $T$ , если электронный газ невырожден, и равно ферми-энергии  $\mathcal{E}_F$ , если газ сильно вырожден (здесь и ниже  $k = 1$ ). Для акустич. фононов в полупроводниках при индуциров. рассеянии ( $\mathcal{E} \ll \bar{\mathcal{E}}$ ) скорость релаксации импульса пропорц.  $T$ :

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{\bar{\tau}} \frac{T}{\hbar\omega} \left( \frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega} \right)^{\pm 1/2}. \quad (3)$$

Здесь  $T$  и  $\mathcal{E}$  выражены в долях энергии фонона; верх. знак относится к  $DA$ -рассеянию, нижний - к  $PA$ -рассеянию;  $\bar{\tau}$  - характерное время, определяемое соотношениями

$$\bar{\tau}_{DA} = 2\pi\hbar\rho s^2 / \Xi^2 p_0^3; \quad \bar{\tau}_{PA} = 2\pi\hbar\rho s^2 / (e\beta)^2 p_0,$$

где  $\rho$  - плотность кристалла,  $p_0$  - импульс электрона с энергией  $\hbar\omega$ . Типичные значения  $\bar{\tau}_A \approx 1-10$  пс. При  $\mathcal{E} \gg \bar{\mathcal{E}}$  (спонтанное рассеяние) скорость релаксации импульса, т. е.  $\tau_p$ , от  $T$  не зависит:

$$\left(\frac{1}{\tau_p}\right)_{DA} = \frac{1}{\tau_{DA}} \frac{4}{s} \delta_0^{1/2} \frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega}; \quad \left(\frac{1}{\tau_p}\right)_{PA} = \frac{1}{\tau_{PA}} \frac{2}{3} \delta_0^{1/2}. \quad (4)$$

Здесь  $\delta_0 = 2ms^2/\hbar\omega$  ( $\sim 10^{-4}-10^{-2}$ ) - степень упругости рассеяния,  $m$  - эфф. масса электрона.

Время релаксации энергии  $\tau_{\mathcal{E}}$  зависит от соотношения между  $\mathcal{E}$  и  $\bar{\mathcal{E}}$ :

$$\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}^*}{\tau_{\mathcal{E}}} = \frac{1}{\tau} \delta_0 \left(\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}^*}{\hbar\omega_0}\right)^{\pm 1/2}; \quad \mathcal{E}_{DA}^* = 2T; \quad \mathcal{E}_{PA}^* = T. \quad (4a)$$

Для акустич. фононов в металлах и вырожденных полупроводниках при высоких темп-рах ( $T > \hbar sp_F$ )  $\tau_p$  определяется ф-лой

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{\tau_F} \frac{T}{\hbar sp_F}; \quad \bar{\tau}_F = \frac{\pi\hbar}{mp_F^2 \Xi^2} \approx 0,01 \text{ пс}. \quad (5)$$

Скорость релаксации энергии

$$\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{\tau_{\mathcal{E}}} = \frac{\hbar sp_F}{\bar{\tau}_F} \text{th} \frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{T}. \quad (6)$$

При  $\gg \hbar sp_F$ : низких темп-рах ( $T \ll \hbar sp_F$ ) и  $\mathcal{E} - \mathcal{E}_F \gg$

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{4}{5} \frac{1}{\bar{\tau}_F}; \quad \frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{\tau_{\mathcal{E}}} = \frac{\hbar sp_F}{\bar{\tau}_F}, \quad (7)$$

а для  $\mathcal{E} - \mathcal{E}_F \ll \hbar sp_F$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_p} &= \frac{4}{5} \frac{1}{\bar{\tau}_F} \left(\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{2\hbar sp_F}\right)^3; \quad \frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{\tau_{\mathcal{E}}} = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{\bar{\tau}_F} \left(\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{2\hbar sp_F}\right)^3. \end{aligned} \quad (8)$$

При рассеянии на оптич. фононах в полупроводниках в области квазиупругого рассеяния ( $\mathcal{E} \gg \hbar\omega$ ):

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{\tau} (2N_0+1) \left(\frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega}\right)^{\pm 1/2}; \quad N_0 = [\exp(\hbar\omega/T) - 1]^{-1}. \quad (9)$$

Здесь верх. знак относится к  $DO$  -рассеянию, нижний - к  $PO$  -рассеянию:

$\bar{\tau}(DO) = \pi\hbar\bar{\rho}p_0/m^2\Gamma^2$ ,  $\bar{\tau}(PO) =$   
 $= (1/2)\alpha\omega$  (типичные значения  $\bar{\tau}=0,1-1$  пс); здесь  $\bar{\rho}$  - плотность приведённой массы  
 разноимённо заряженных подрешёток,  $\alpha = e^2/\hbar v_0$  - фрёлиховская константа связи,  
 $v_0 = \hbar p_0/m$ ,  $\tau^{-1} = \epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_0^{-1}$ , где  $\epsilon_{\infty}$  и  $\epsilon_0$  - высокочастотная и статическая  
 диэлектрические проницаемости решётки. Время релаксации энергии

$$\frac{1}{\tau_{\mathcal{E}}} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega}\right)^{\sigma}; \quad \sigma(DO) = 1/2; \quad \sigma(PO) = 3/2. \quad (10)$$

Рассеяние на примесных атомах. При рассеянии на примесных атомах возмущение  $dV$  обусловлено элект-рич. полем (если примесь заряжена) и деформацией решётки в окрестности примеси. Иногда нужно учитывать обменные силы и магн. момент примеси. В случае заряд. примесей (примесных ионов) в полупроводниках вклад в  $dV$  от деформации решётки несуществен. Т. к. в полупроводнике  $p \ll b_0$ , то изменение импульса электрона при

упругом рассеянии мало, а это значит, что рассеяние на больших расстояниях ( $r \gg a_0$ ) определяется сглаженным потенциалом  $dV(r)$ . Такой потенциал не зависит от микроструктуры примеси и имеет кулоновский вид:

$$\delta V = Ze^2/\epsilon r, \quad (11)$$

где  $Ze$  - заряд иона. Поэтому время релаксации импульса  $\tau_p$  можно вычислить, пользуясь Резерфорда формулой для сечения рассеяния заряж. частиц. Согласно этой ф-ле, дифференц. сечение рассеяния электрона под углом  $\theta$  в телесном угле  $d\Omega$ :

$$d\sigma(\theta)d\Omega = \frac{1}{4} R^2 \operatorname{cosec}^4(\theta/2)d\Omega; \quad R = Ze^2/4\pi\epsilon mv^2, \quad (12)$$

где  $v$  - скорость электрона. Для вычисления  $\tau_p$  необходимо усреднить  $\sigma$  по всем  $\theta$ . При интегрировании (12) по  $\theta$  получают расходящийся интеграл, т. е. бесконечно большое сечение рассеяния. В действительности сечение рассеяния на примесном ионе конечно, т. к. кулоновский характер поля  $dV$  на больших расстояниях от примеси искажается полем др. примесных ионов и экранирующим полем электронов. Если учитывать первый фактор и "обрезать" кулоновский потенциал на  $1/2$  расстояния между примесными центрами, равного  $N^{-1/3}$  ( $N$  - концентрация примесей), то это приводит к ф-ле

$$\frac{1}{\tau_p} = 4\pi\Phi Z^2(\mathcal{E}_B/h)N\rho^{-3}. \quad (13)$$

Здесь  $\mathcal{E}_B = me^4/2h\epsilon$  - боровская энергия,  $F = \ln \mathcal{E}/Ze^2N^{1/3}$ . Ф-ла (13) носит назв. *Конуэлл- Вайскопфа формулы*.

Если учитывать также экранирование кулоновского поля примесного иона свободными носителями заряда, то обрезание потенциала осуществляется его умножением на  $\exp(-r/l)$ , где  $l$  - длина экранирования. При этом в ф-ле (13)  $F = \ln(1-x) - x^2/(1+x^2)$ , где  $x = 2\rho/l$  (*Брукса- Херринга формула*).

Рассеяние на нейтральных примесях в полупроводниках обусловлено кулоновскими и обменными силами, действующими между рассеивающимся электроном и атомом примеси. Используя аналогию с рассеянием на атоме водорода, обычно пользуются т. н. ф-лой Эргинсоа:

$$\frac{1}{\tau_p} = C(\mathcal{E}_B/h)Na_B^3, \quad \mathcal{E} \leq \mathcal{E}_B, \quad (14)$$

где  $a_B = h^2\epsilon/me^2$  - боровский радиус,  $C = 20$ .

В металлах возмущение  $dV$  сильно зависит от сочетания атомов примеси и матрицы, поэтому к.-л. общие ф-лы для  $\tau_p$  получить не удаётся. Обычно сечение рассеяния  $\sigma \approx a_B^2 n$ , однако оно сильно возрастает при резонансном рассеянии электронов на примесных атомах с незаполненными  $d$ - и  $f$ -оболочками, когда на примеси существуют виртуальные уровни энергии.

Экспериментальные методы. Сказанное выше относилось к рассеянию носителей внутри одной зоны (долины) с энергетич. спектром носителей, вырожденным только по ориентации спина. В более сложных ситуациях (вырожденные зоны, [многодолинные полупроводники](#)) трудно определить теоретически, какой механизм рассеяния доминирует в той или иной области темп-р и энергий носителей. Поэтому осн. источником сведений о механизме Р. н. з. является эксперимент. Механизм рассеяния импульса обычно определяют по измерению подвижности носителей зарядов  $\mu = (e/m) \tau_p$  и по ширине линии циклотронного резонанса  $Dw_c = 1/\tau_p$ . Входящее сюда  $\tau_p$  усреднено по энергии. Для невырожденного полупроводника усреднение сводится к замене  $\mathcal{E}$  на  $T$ . Поэтому, изучая температурные зависимости  $\mu$  или  $Dw_c$ , можно отличить рассеяние на примесях, когда  $\mu \propto T^{3/2}$ , от рассеяния на акустич. фононах, когда  $\mu \propto T^{1/2}$  для деформационного или  $\mu \propto T^{1/2}$  для поляризационного рассеяний.

Механизм релаксации энергии раскрывается в экспериментах с горячими электронами по зависимости  $\mu$  или  $Dw_c$  от сильного электрич. поля или по спектрам горячей люминесценции.

### Модуль 3 «Квазичастицы и механизмы их возникновения в твердых телах»

#### Акустические и оптические фононы в ковалентных, молекулярных и ионных кристаллах. Элементарная теория взаимодействия света с фононами.

Рассмотрим вначале для простоты одномерный кристалл, состоящий из одинаковых атомов массы  $m$ , равновесные положения которых определяются вектором решетки

$$\mathbf{r}_n = n\mathbf{a}, \quad n = 1, 2, \dots, N.$$

Предположим, что поперечные и продольные смещения атомов независимы. Пусть  $\xi_n$  — одно из таких смещений для атома, занимающего узел  $n$ . От смещений отдельных атомов  $\xi_n$  удобно перейти к новым обобщенным координатам  $A_k$ , которые характеризуют коллективные движения атомов, соответствующие определенным значениям  $k$ . Для этого введем преобразование

$$\xi_n = N^{-1/2} \sum_k A_k \exp(ikn).$$

Новые переменные должны удовлетворять условию  $A_k = A_k^*$ , чтобы  $\xi_n$  оставалось вещественным.

Обратное преобразование

$$A_k = N^{-1/2} \sum_n \xi_n \exp(-ikn).$$

Потенциальная и кинетическая энергии кристалла выражаются через новые коллективные координаты и их временные производные

$$U = \frac{1}{2} m \sum_k \Omega^2(k) A_k A_{-k}, \quad K = \frac{1}{2} m \sum_k \dot{A}_k \dot{A}_{-k}.$$

Обобщенные импульсы, соответствующие обобщенным координатам, равны

$$P_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_k} = m \dot{A}_{-k}.$$

Классическая энергия  $E$  как функция обобщенных координат и импульсов

$$E = K + U = \frac{1}{2} \sum_k \left[ \frac{1}{m} P_k P_{-k} + m \Omega^2(k) A_k A_{-k} \right].$$

Данная формула преобразуется в оператор энергии

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \frac{1}{m} \hat{P}_k \hat{P}_{-k} + m \Omega^2(k) \hat{A}_k \hat{A}_{-k} \right\}.$$

От операторов импульса и координат можно перейти к новым операторам.

Новые операторы должны удовлетворять перестановочным соотношениям

$$[b_k, b_k^*] = \delta_{k, k'}, \quad [b_k, b_{k'}] = 0.$$

Операторы, удовлетворяющие данным соотношениям, называются *операторами Бозе*.

Оператор энергии через новые операторы

$$H = \frac{\hbar}{2} \sum_k \Omega(k) [b_k^* b_k + b_k b_k^*].$$

Оператор смещения  $n$ -го атома из положения равновесия

$$\xi_n = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\Omega(k)}} \exp(ikn) (b_k + b_{-k}^*).$$

$$\hat{A}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega(k)}} (b_k + b_{-k}^*), \quad \hat{P}_k = i \sqrt{\frac{m\hbar\Omega(k)}{2}} (b_k^* - b_{-k}).$$

Новые операторы должны удовлетворять перестановочным соотношениям

$$[b_k, b_{k'}] = \delta_{k, k'}, \quad [b_k, b_{k'}^\dagger] = 0,$$

Операторы, удовлетворяющие данным соотношениям, называются *операторами Бозе*.

Оператор энергии через новые операторы

$$H = \frac{\hbar}{2} \sum_k \Omega(k) [b_k^\dagger b_k + b_k b_k^\dagger].$$

Оператор смещения n-го атома из положения равновесия

$$\hat{\xi}_n = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\Omega(k)}} \exp(ikn) (b_k + b_k^\dagger).$$

Эти операторы действуют в пространстве функций  $|\dots, v_k, \dots\rangle$ , зависящих от чисел заполнения состояний, характеризуемых волновыми векторами. Пусть  $|\nu_k\rangle$  функции нормированные условием  $\langle \nu_k | \nu_{k'} \rangle = \delta_{k, k'}$ . следует, что оператор  $b_k^\dagger$  увеличивает, а оператор  $b_k$  уменьшает число  $\nu_k$  на единицу.

Числа  $\nu_k$  в функциях  $|\nu_k\rangle$  указывают, сколько фононов имеется в данном состоянии. Функция  $|\nu_k\rangle$  состояния с  $\nu_k$  фононами получена путем последовательного применения оператора  $b_k^\dagger$  к функции нулевого состояния  $|0\rangle$ :

$$|\nu_k\rangle = (\nu_k!)^{-1/2} (b_k^\dagger)^{\nu_k} |0\rangle.$$

Кинетическая и потенциальная энергии в новых переменных принимают вид

$$K = \frac{1}{2} m \sum_l \dot{A}_l^2, \quad U = \frac{1}{2} \sum_l \Omega^2(l) A_l^2,$$

$$\Omega^2(l) = \frac{4\gamma}{m} \sin^2 \frac{al}{2}.$$

Обобщенной координате соответствует обобщенный импульс, следовательно, классическая функция Гамильтона равна

$$E = \frac{1}{2} \sum_l \left[ \frac{1}{m} p_l^2 + m \Omega^2(l) A_l^2 \right],$$

Переход к квантовому оператору Гамильтона осуществляется преобразованием

$$A_l \rightarrow \hat{A}_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega(l)}} (b_l + b_l^\dagger),$$

$$p_l \rightarrow \hat{p}_l = -i \sqrt{\frac{1}{2} \hbar m \Omega(l)} (b_l - b_l^\dagger),$$

в которое входят операторы рождения и уничтожения фононов.

Оператор смещения атомов из положений равновесия

$$\hat{\xi}_n = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_l \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega(l)}} (b_l + b_l^\dagger) \sin(nl)$$

и оператор энергии

$$H = \sum_l \hbar \Omega(l) [b_l^\dagger b_l + 1/2].$$

В конных кристаллах наряду с упругими силами пропорциональными смещениям, играют существенную роль электрические дальнедействующие взаимодействия между ионами. Смещения ионов из равновесных положений создают электрическую поляризацию, последняя вызывает появление поля, которое в свою очередь взаимодействует с ионами. Удельная поляризация обусловлена как смещением ионов, так и внутренней поляризацией ионов (смещение электронов относительно ядер) под влиянием электрического поля. Поэтому в общем виде можно написать

$$P = \gamma_{12} \xi + \gamma_{22} E,$$

Плотность полной потенциальной энергии

$$U = \frac{1}{2} (\Omega^2 \xi^2 - 2\gamma_{12} E \xi - \gamma_{22} E^2).$$

уравнения движения

$$\ddot{\xi} = -\Omega^2 \xi + \gamma_{12} E.$$

Часть удельной поляризации, обусловленная только внутренней поляризуемостью ионов, равна

$$P_{\text{вн}} = \gamma_{22} E.$$

С другой стороны, эту же величину можно определить формулой

$$P_{\text{вн}} = \frac{\epsilon_{\infty} - 1}{4\pi} E$$

через диэлектрическую поляризуемость кристалла при частотах, меньших частот собственных колебаний электронов в ионах, но больших частот колебаний ионов.

$$\gamma_{22} = \frac{\epsilon_{\infty} - 1}{4\pi}.$$

Для определения второго, параметра примем во внимание, что в статическом поле  $E$  ионы смещаются. При этом возникает удельная поляризация

$$P_0 = (\gamma_{12}^2 / \Omega^2 + \gamma_{22}) E_0.$$

Сравнивая это значение с удельной поляризацией, выраженной через диэлектрическую поляризуемость во в статическом поле

$$P_0 = \frac{\epsilon_0 - 1}{4\pi} E_0.$$

Получаем:

$$\gamma_{12} = \Omega \sqrt{(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}) / 4\pi}.$$

Фононы бывают двух типов – акустические и оптические. Прямое превращение фотона в акустический фонон в идеальном кристалле невозможно Дело в том, что скорость света ( $c$ ) много больше скорости звука ( $v$ ), и одновременно удовлетворить законы сохранения энергии ( $\hbar\omega_l = \hbar\omega_s$ ) и импульса  $k_l = \frac{\omega_l}{c} = k_s = \frac{\omega_s}{v}$  не удастся. Поэтому в поглощении света на акустических колебаниях играть роль могут лишь многофононные процессы. А вот оптические фононы вполне могут участвовать в поглощении. Как видно из рисунка прямой процесс преобразования фотона в оптический фонон не противоречит обоим законам сохранения. Более того, в полярных кристаллах не возникает проблем и с конкретным механизмом возбуждения оптических фононов. Таким колебаниям соответствуют колебания плотности дипольного момента которые прекрасно взаимодействуют с электрическим полем световой волны.

Если волновой вектор и энергия поперечного фотона и фонона совпадают, то за счет этого взаимодействия оказывается возможным превращение фотона в фонон – поглощение фотонов. Однако на самом деле все обстоит не так просто. Фотон может взаимодействовать только с фононом с тем же самым волновым вектором. Если по каким-то причинам время жизни такого фонона мало так что за это время вероятность превращения фотона в фонон много меньше единицы, мы можем использовать теорию возмущения и говорить о поглощении фотонов. Если же упругие и неупругие каналы релаксации фононов практически отсутствуют, то есть взаимодействие между фотоном и фононом может происходить достаточно долго, наряду с процессом превращения фотона в фонон следует рассматривать и обратный процесс, когда фонон превращается в фотон. Или иными словами приходится говорить о том, что часть времени возбуждение живет в кристалле как фотон, а часть времени – как фонон. Каковы же будут стационарные состояния такого элементарного

возбуждения. В подобной ситуации принято говорить о возникновении смешанной фотонно-фононной моды, называемой поляритонном.

Начнем с уравнения для классического движения разноименных ионов друг относительно друга в длинноволновой оптической ветви кристалла, содержащего два противоположно заряженных атома в одной элементарной ячейке.

$$\frac{d^2 \vec{w}}{dt^2} = -\omega_0^2 \vec{w} + \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi}} \vec{E}$$

где  $\vec{w} = \sqrt{N_0 m_r} \vec{s}$  - «нормальное» смещение ионов,  $\vec{s}$  - смещение положительного иона относительно отрицательного,  $N_0$  - число ячеек в единице объема кристалла,  $m_r$  -

приведенная масса ионов,  $\omega_0^2 = \frac{\kappa}{m_r} - \frac{4\pi N_0 e^* (\varepsilon_\infty + 2)}{9m_r}$  - частота механических колебаний

ионов,  $\kappa$  - коэффициент квазиупругой силы взаимодействия ионов,  $e^*$  - эффективный заряд ионов,  $\varepsilon_0$  и  $\varepsilon_\infty$  статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости,  $\vec{E}$  - среднее электрическое поле в кристалле.

При этом вектор поляризации среды

$$\vec{P} = \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi}} \vec{w} + \frac{\varepsilon_\infty - 1}{4\pi} \vec{E}$$

Если волновой вектор фонона устремит к нулю, то продольные и поперечные оптические фононы имеют разную частоту

$$\omega_l = \omega_0, \quad \omega_t = \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty}}$$

Но если волновой вектор равен нулю, то отличить продольный фонон от поперечного невозможно.

Теперь что система незамкнута. В ней три неизвестных величины на два уравнения. И теперь из уравнений максвелла хорошо бы найти недостающую связь

$$\text{div} \vec{D} = \text{div} (\vec{E} + 4\pi \vec{P}) = 0$$

$$\text{div} \vec{H} = 0$$

$$\text{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{H}}$$

$$\text{rot} \vec{H} = \frac{1}{c} \dot{\vec{D}} = \frac{1}{c} (\dot{\vec{E}} + 4\pi \dot{\vec{P}})$$

или считая что мы имеем дело с плоской волной  $\exp\{i[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t]\}$  находим

$$-\omega^2 \vec{w} = -\omega_0^2 \vec{w} + \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi}} \vec{E} \quad a$$

$$(\vec{k}(\vec{E} + 4\pi \vec{P})) = 0 \quad b$$

$$(\vec{k}\vec{H}) = 0 \quad c$$

$$[\vec{k} \times \vec{E}] = \frac{\omega}{c} \vec{H} \quad d$$

$$[\vec{k} \times \vec{H}] = -\frac{\omega}{c} (\vec{E} + 4\pi \vec{P}) \quad e$$

Тогда

$$\vec{W} = \frac{\omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi}} \vec{E} \quad ($$

$$\vec{P} = \left\{ \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi} + \frac{\varepsilon_\infty - 1}{4\pi} \right\} \vec{E}$$

$$(\vec{k}\vec{E}) \left( \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi} + \varepsilon_\infty \right) = 0$$

Одно решение очевидно

$$\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi} + \varepsilon_\infty = 0$$

и

$$\omega^2 = \left( \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} \right) \omega_0^2 = \omega_l^2$$

Это продольные фононы.

Ну а для поперечных волн  $kE = \frac{\omega}{c} H$  получаем

$$\frac{c^2 k^2}{\omega^2} = \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) + \varepsilon_\infty$$

Откуда

$$\omega^2 = \frac{\varepsilon_0 \omega_0^2 + c^2 k^2 \pm \sqrt{(\varepsilon_0 \omega_0^2 + c^2 k^2)^2 - 4\varepsilon_\infty \omega_0^2 c^2 k^2}}{2\varepsilon_\infty}$$

И так возникло два решения. Нетрудно увидеть, что при малых значениях волнового вектора частота одной из ветвей стремится к частоте продольного фонона.

$$\omega_1 \approx \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} + (kc)^2 \left(1 - \frac{2}{\varepsilon_0}\right)}$$

А вторая частота – к частоте фотона с данным волновым вектором в среде.  $\omega_2 \approx \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon_0}}$ .

Совпадение частот продольного и поперечного фононов при  $k=0$  радует, так как в этом месте их решительно нельзя различить. При больших значениях волнового вектора мы опять имеем

фотон с другой скоростью света  $\omega_\infty \approx \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon_\infty}}$  и поперечный фонон, но уже с частотой  $\omega_l \equiv \omega_0$ .

Ну а в промежуточной области эти ветви перемешиваются. Фотонная ветвь переходит в фононную, а фононная в фотонную. Такую ситуацию в физике называют антипересечением.

В спектре появилась полоса частот, лежащая между частотой поперечных  $\omega_0$  и продольных  $\omega_L = \omega_0 (\varepsilon_0 / \varepsilon_\infty)^{1/2}$  оптических фононов: в которой вообще не могут распространяться электромагнитные волны. Как мы уже не раз говорили в этой области диэлектрическая проницаемость, рассчитанная с учетом фононной особенности отрицательна.

Идея – образование новой квазичастицы в результате взаимодействия колебаний среды и электромагнитных волн. Такие квазичастицы образуют не только оптические фононы, но и экситоны.

Рассмотрим ситуацию, когда в среде распространяются некоторые волновые колебания, с которыми не связано возникновение плотности дипольного момента и, соответственно, не вносит вклада в диэлектрическую проницаемость. Тогда уравнение для



изменения во времени вектора смещения, соответствующего материальным колебаниям имеет вид

$$m \frac{d^2 \vec{s}(t)}{dt^2} = -\hat{\kappa}(\vec{k}) \vec{s}(t) \Rightarrow -m \omega^2 \vec{s} = -\hat{\kappa}(\vec{k}) \vec{s}$$

а для электромагнитного поля, как мы знаем, имеется два уравнения. Условие продольности электромагнитных волн

$$(\vec{k} \cdot (\varepsilon_\infty \vec{E} + 4\pi \vec{P})) = 0$$

и волновое уравнение

$$\left[ \vec{k} \times \left[ \vec{k} \times \vec{E} \right] \right] = \frac{1}{c^2} \frac{d^2 \vec{D}}{dt^2} = -\left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \varepsilon_\infty \vec{E}$$

Здесь матрица  $\hat{\kappa}(\vec{k})$  описывает жесткость системы (в результате ее действия на вектор смещения мы получаем упругую силу, стремящуюся вернуть систему в несмещенное состояние. При  $k=0$  в кубическом кристалле этот тензор вырождается в скаляр и разница между продольными и поперечными колебаниями отсутствует. Из общих соображений можно было бы предположить, что она будет возникать по мере приближения длины волны к размеру элементарной ячейки кристалла. Так бы и было, если бы не взаимодействие между колебаниями электромагнитного поля и среды.

Теперь учтем это взаимодействие. Для этого заметим, что поляризация связана со смещением  $\vec{P} = d\vec{s}$ , где  $d$  – некоторая константа. Тогда

$$\begin{aligned} -m \omega^2 \vec{s} &= -\hat{\kappa}(\vec{k}) \vec{s} + d \vec{E} \\ -k^2 \vec{E}_\perp &= -\left( \frac{\omega}{c} \right)^2 (\varepsilon_\infty \vec{E}_\perp + 4\pi \vec{P}_\perp) = \\ &= -\left( \frac{\omega}{c} \right)^2 (\varepsilon_\infty \vec{E}_\perp + 4\pi d \vec{s}_\perp) \\ \vec{E}_{||} &= -4\pi \vec{P}_{||} = -4\pi d \vec{s}_{||} \end{aligned}$$

Отсюда для продольных колебаний с малыми волновыми векторами

$$\begin{aligned} -m \omega^2 \vec{s} &= -(\hat{\kappa}(0) + 4\pi d^2) \vec{s} \\ \omega^2 \vec{s} &= \frac{\hat{\kappa}(0) + 4\pi d^2}{m} \end{aligned}$$

а для поперечных колебаний

$$\begin{aligned} -k^2 E_\perp &= -\left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \left( \varepsilon_\infty + \frac{4\pi d^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) E_\perp = \\ &= -\left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \left( \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) \omega_0^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) E_\perp \end{aligned}$$

Мы, похоже, пришли к тем же самым формулам да еще по дороге из условия

$$\left( \varepsilon_\infty + \frac{4\pi d^2}{m(\omega_0^2)} \right) = \varepsilon_0 \text{ нашли выражение для параметра } d = \omega_0 \sqrt{\frac{m(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)}{4\pi}}$$

До сих пор мы анализировали поляритоны в бесконечной среде, которой никогда не бывает. Обычно свет из воздуха или вакуума попадает в кристалл, в котором его движение описывается поляритонными уравнениями, а потом выходит из кристалла и опять становится чистым фотоном. Как же в таком эксперименте проявится наличие поляритонов.

Если рассеяние и иные каналы релаксации поляритонов отсутствуют, то сумма интенсивностей прошедшего через пластину и отраженного от нее излучений равна интенсивности падающего света. Появление щели в спектре частот электромагнитных волн проявится в 100%-отражении электромагнитных волн.

Как легко увидеть в поляритонной области скорость распространения электромагнитной волны сильно уменьшается. Соответственно, в законе преломления возникает появляется очень большой коэффициент преломления. Но закон преломления выводится исключительно из кинематических соображений. Компонета волнового вектора в плоскости раздела сред в виду трансляционной симметрии сохраняется. Тогда перпендикулярная к этой плоскости составляющая преломленного луча однозначно вычисляется из частоты падающего света.

А вот для расчета коэффициента отражения и интенсивности прошедшего света надо знать граничные условия. И здесь мы подходим к проблеме дополнительных граничных условий (ДГУ). Поскольку к условиям на электрическое и магнитное поле надо дописывать условия на колебания среды. Эти условия уже зависят от типа поляритонов, и в каждом отдельном случае их вывод требует анализа поведения этих самых колебаний среды. Например, граница кристалла представляется бесконечно высокой стенкой для экситонов. Поэтому волновая функция экситона на границе должна обращаться в ноль.

В квантоворазмерных структурах условия образования поляритонов существенно упрощаются. Локализация экситонов или фононов в одном или нескольких измерениях упрощает согласование колебаний среды и электромагнитного поля. Например, в трехмерной задаче точному резонансу соответствует строго определенное значение частоты и волнового вектора, когда волновые векторы и частоты фотона и колебания среды совпадают. Ну а в двумерном случае, экситон в квантовой яме образует поляритонные состояния при самых разных значениях двумерного волнового вектора.

При нормальном падении света на такую тонкую пленку в ней будет возбуждаться экситоны с нулевым значением двумерного волнового вектора. По мере увеличения угла падения у экситона возникнет малый волновой вектор в плоскости квантовой ямы. События будут развиваться вплоть до ситуации касательно падения света на образцом (нормальная составляющая волнового вектора равна нулю), Затем в обычной электродинамике пленка превращается в волновод. Т.е. распространяющийся в ней свет падает на границу раздела с вакуумом под углом, превосходящим угол полного внутреннего отражения. В случае поляритонов внутри пленки энергия запасена в поляризации среды в экситонах, а снаружи – в экспоненциально спадающей по мере удаления от пленки электромагнитной волне.

Таким путем экситоны могут просачиваться из одной квантовой ямы в другую, отделенную высоким и достаточно широким барьером, таким, что вероятность тунелирования через него пренебрежимо мала. Переход будет осуществляться через электромагнитное поле. Тут возникает куча разных названий одного и того же. Например, этот же эффект называют обменным взаимодействием между экситонами в соседних ямах.

#### ***Электрон-фононное взаимодействие в кристаллах. Полярон Фрелиха.***

Электрон-фононное взаимодействие - взаимодействие между двумя подсистемами квазичастиц в твердых телах, а именно, носителями заряда (блоховскими электронами в металлах, полупроводниках и диэлектриках или дырками в этих веществах) и тепловыми колебаниями кристаллической решетки твердых тел - фононами. Конкретный вид гамильтониана зависит от структуры кристалла, числа носителей заряда, характера зонного спектра и особенностей колебаний кристаллической решетки.

При темп-рах, отличных от нуля, возникают хаотич. тепловые колебания ионов узлов решетки. Рост темп-ры приводит в металлах к росту числа фононов и увеличению сопротивления току, что хорошо наблюдается в чистых металлах в нормальном состоянии. В полупроводниках рост темп-ры также приводит к росту числа носителей заряда. Э-ф. оказывает существенное влияние на явления переноса в этих веществах, а также приводит к междолинным механизмам рассеяния электронов, ослаблению ультразвука, фононному увлечению и др. Кроме того, в кристаллических решетках имеются отклонения от идеальности, такие, как дислокации, межузельные атомы той же природы, что и осн. решетка, вакантные узлы, примесные атомы внедрения в междоузлиях и замещение атомов в узлах решетки посторонними атомами.

С помощью фононов рассеяние носителей заряда на тепловых колебаниях решётки можно описать на основе корпускулярных представлений. Обычно рассматривается подсистема, состоящая из свободных квазичастиц - носителей заряда, сталкивающаяся с подсистемой свободных фононов, что порождает квантовые переходы в системе. Строго говоря, следует учесть также кулоновское взаимодействие в подсистеме зарядов и ангармонич. взаимодействие в подсистеме фононов и др. факторы, влияющие на времена жизни квазичастиц и ограничивающие применимость простой концепции газов квазичастиц, сталкивающихся между собой.

Энергия Э--ф. в. простейшего вида линейно зависит от деформации, возникающей при акустич. и оптич. колебаниях решётки. Ниже приводятся выражения для этой энергии, основанные на разл. физ. представлениях относительно характера взаимодействия электронов с решёткой.

Простейший вид Э--ф. в. в металлах, согласно к-рому решётка металла рассматривается как статич. пространственно-периодич. поле  $V(x)$ , а все электроны двигаются независимо, подчиняясь одноэлектронному ур-нию Шрёдингера,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_k(x)+V(x)\psi_k(x)=E_k\psi_k(x),$$

где  $\psi_k(x)$ ,  $E_k$  - собств. состояние и соответствующая собств. энергия электрона. Потенциал  $V(x)$ , равный сумме потенциалов отд. ионов, обладает периодичностью решётки

$$V(x)=V(x+n_1a+n_2b+n_3c),$$

где  $a, b, c$ -базисные векторы решётки.

В отсутствие к--л. нерегулярностей решётки электроны не испытывают никакого рассеяния. При тепловом движении ионов возникает поле смещений ионов  $u(x)$  от их положений равновесия. Согласно Блоху, при движении ионов происходит деформация плотности заряда электронов вокруг иона, причём действующий на электрон потенциал  $V_d(x')$  в точке  $x' = x + u(x)$  деформированной решётки совпадает с потенциалом  $V_n(x)$  в точке  $x$  недеформированной решётки, т. е.  $V_d(x + u(x)) = V_n(x)$ . Тогда действующий на электрон возмущающий потенциал в линейном по смещению ионов приближении равен

$$V_1(x)=V_d(x)-V_n(x)\approx -u(x)\nabla V(x).$$

Наряду с концепцией Блоха существует концепция Нордгейма жёстких ионов, согласно к-рой окружение движущихся ионов почти не меняется, когда они совершают тепловые колебания, в этом случае вид действующего на электрон возмущающего потенциала будет иным. Гамильтониан Э--ф. в. строится на основании полученного одноэлектронного оператора возмущения с помощью правил для аддитивных квантовомеханич. величин (см. ниже), причём в блоховской модели существ. значение имеет поле продольных смещений решётки.

Метод потенциала деформации Бардина - Шокли. Э--ф. в. в ковалентном полупроводнике можно найти, если считать концентрацию носителей заряда малой и пренебречь их взаимодействием между собой. Если в таком кристалле возникает небольшая статич. деформация, описываемая (в континуальном приближении) вектором смещения  $u(x)$ , то соответствующий тензор деформаций имеет компоненты зависящие от координаты  $x$  элемента объёма. Обозначим через  $E_0(k)$  зонную энергию электрона до деформации среды. При малых концентрациях носителей представляет интерес область волновых векторов, близких к экстремумам энергетич. зон, где предполагается справедливым приближение эфф. массы. В присутствии пространственно-неоднородной деформации энергия электрона приобретает плавную зависимость от  $x$  вида

$$u_{\mu\nu}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_\mu}{\partial x_\nu}+\frac{\partial u_\nu}{\partial x_\mu}\right),$$

$$E(k, x)=E_0(k)+C\operatorname{div}u(x) \quad (5)$$

при условии, что  $E_0(k)$  имеет сферически-симметричный вид [в противном случае к правой части (5) следует добавить слагаемое, содержащее сдвиговые деформации]. Величина  $\text{div } u(x)$  описывает относит. изменение объёма системы, возникающее только при деформациях, обусловленных акустич. фононами, возникают дальнедействующие электростатич. потенциалы, не принимаемые здесь во внимание.

Гамильтониан Э--ф. в. принимает вид

$$H_{e-ph} = \int dx \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x) C \text{div } u(x), \quad (6)$$

где  $s$  - спиновые индексы,  $y_s^*$ ,  $y_s$  - электронные операторы рождения и уничтожения соответственно. Разложим эти операторы по блоховским ф-циям и воспользуемся разложением (4) оператора смещений  $u(x)$ . Поскольку  $\text{div} u(x)$  содержит скалярное произведение  $k e_m(k)$ , равное нулю для поперечных нормальных колебаний, вклад в (6) даёт лишь продольная фононная мода. Окончательно для Э--ф. в. получаем

$$H_{e-ph} = \sum_{k'q\sigma} \sum_{k\sigma} A_q C_{k'\sigma}^{\dagger} C_{k\sigma} (a_q - a_{-q}^{\dagger}), \quad A_{-q}^{\dagger} = -A_q, \quad (7)$$

где квазиволновые векторы электронов и фононов связаны между собой законом сохранения  $k' = k + q$  для нормальных процессов рассеяния и  $k' = k + q + K$  (где  $K$ -вектор обратной решётки) для процессов переброса Пайерлса. Гамильтониан Э--ф. в.  $H_{e-ph}$  описывает процессы рассеяния, при  $k$ -рых уничтожаются электрон и фонон с квазиимпульсами  $\hbar k$  и  $\hbar q$  соответственно и рождается электрон с квазиимпульсом  $\hbar k'$ . Второй член гамильтониана Э--ф. в. описывает процесс уничтожения одного электрона с квазиимпульсом  $\hbar k$  и рождения двух частиц - фонона и электрона с квазиимпульсами  $-\hbar q$  и  $\hbar k'$  соответственно. Т. о., благодаря Э--ф. в. электронные состояния всегда сопровождаются появлением фононов. Реальной частицей является не свободный блоховский электрон (или дырка), а электрон (дырка), окружённый облаком продольных акустич. фононов. Произошла вторичная перенормировка свойств электрона-на этот раз благодаря фононам. Эта новая квазичастица наз. поля-роном, хотя первоначально этот термин был введён для обозначения электрона, окружённого облаком продольных оптич. фононов в ионных кристаллах.

Процессы столкновения квазичастиц характеризуются также законом сохранения энергии  $k$ -рый выполняется для реальных частиц, существовавших в начале и в конце процесса взаимодействия.

$$E(k) - E(k') \pm \hbar \omega_q = 0,$$

Взаимодействие с оптическими фононами. Оптич. колебания кристаллич. решётки сопровождаются возникновением дипольных моментов и поляризацией среды. В длинноволновом пределе кристаллич. решётку можно рассматривать как сплошную среду с непрерывным распределением поляризации  $p(x)$ ,  $k$ -рая совершает колебания с частотами оптич. фононов. Энергия взаимодействия заряда  $e$ , находящегося в точке  $x$ , с дипольным моментом  $p(x')$ , находящимся в точке  $x'$ , равна

$$e(x-x')p(x')/|x-x'|^3.$$

С учётом плотности пространств. распределения заряда

$$\rho(x) = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x)$$

энергия Э--ф. в. принимает вид

$$H_{e-ph} = e \iint dx dx' \frac{(x-x')p(x')}{|x-x'|^3} \rho(x) = e \iint dx dx' \frac{(-\text{div } p(x'))}{|x-x'|} \rho(x). \quad (9)$$

Повторяя применительно к  $\text{div } p(x)$  рассуждения, связанные с  $\text{div} u(x)$  в ф-ле (6), убеждаемся, что в Э--ф. в. дают вклады только продольные волны. Следовательно, в длинноволновом пределе реализуется взаимодействие электронов только с продольными оптич. фононами.

Поляризация среды поддерживается электрич. полем. Полная поляризация среды создаётся не только смещением ионов из положений равновесия (ионная поляризация), но и деформацией электронных оболочек ионов (электронная поляризация). Оба эти механизма поляризации возникают в присутствии статич. электрич. поля и описываются статич. диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_0$ :

$$P_{\text{полн}}(x) = \frac{1}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{\epsilon_0}\right) D(x);$$

здесь  $P_{\text{полн}}$  - полный дипольный момент, создаваемый обоими факторами. Однако при исследовании электронно-колебат. взаимодействия, обусловленного оптич. фононами, следует учесть только ионную поляризацию, так что из  $P_{\text{полн}}$  следует исключить электронную поляризацию  $P_{\text{эл}}(x)$ , к-рая является безынерционной и удовлетворяет соотношению  $P_{\text{эл}}(x) = (4\pi)^{-1} (1 - 1/\epsilon_{\infty}) D(x)$ , где  $\epsilon_{\infty}$  является высокочастотной частью диэлектрич. проницаемости, равной квадрату показателя преломления света в среде.

Поэтому часть поляризации среды, обусловленная инерционным движением ионов, определяется разностью двух вышеприведённых величин:

$$P(x) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0}\right) D(x). \quad (10)$$

Далее, в (9) следует подставить разложение по плоским волнам продольной части вектора  $P(x)$ :

$$P(x) = \sum_q \sqrt{\frac{\hbar\omega_q}{8\pi V} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0}\right) \frac{q}{q}} (a_q + a_{-q}^+) e^{-iqx}.$$

Гамильтониан Э--ф. в. по-прежнему имеет вид (7), но коэффициенты  $A_q$  в данном случае имеют иной вид:

$$A_q = -\frac{4\pi i}{q} \sqrt{\frac{\hbar\omega_q e^2}{8\pi V} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)}.$$

Модель Бардина - Пайнса. Простая модель Блоха для Э--ф. в. в металле нуждается в уточнении ввиду значит. концентрации электронов проводимости и важности учёта межэлектронного взаимодействия, к-рое перенормирует осн. динамич. величины. Помимо экранировки кулонов-ского взаимодействия и замены закона  $1/r$  на  $\exp(-k_0 r)/r$  существенно меняется величина матричных элементов Э--ф. в., а также характер закона дисперсии фононов.

Согласно более точной модели Бардина - Пайнса, электроны проводимости двигаются в непрерывной положительно заряженной среде и взаимодействуют как между собой по закону Кулона, так и с продольными колебаниями этой среды (фононами). Гамильтониан такой системы состоит из гамильтониана свободных блоховских электронов  $H_e^0$ , свободных фононов  $H_{ph}^0$ , и двух слагаемых взаимодействия:  $H_{e-ph}$  является электрон-фононным, а  $H_{e-e}$  - электрон-электронным кулоновским взаимодействием:

$$H = H_e^0 + H_{ph}^0 + H_{e-ph} + H_{e-e}, \quad (11)$$

где

$$H_e^0 = \sum_{k\sigma} E(k) C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma}, \quad H_{ph}^0 = \sum_q \hbar\omega_q (a_q^+ a_q + 1/2),$$

$$H_{e-ph} = \sum_{kq\sigma} A_q (a_q + a_{-q}^+) C_{k\sigma}^+ C_{k-q,\sigma},$$

$$H_{e-e} = \frac{1}{2V} \sum_{kpq\sigma\sigma'} V(k) C_{k-p,\sigma}^+ C_{k-q,\sigma'}^+ C_{q\sigma'} C_{p\sigma},$$

$$V(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2}, \quad A_q = -\frac{4\pi}{q} \sqrt{\frac{n_i (Ze^2)^2}{MV 2\omega_q}};$$

здесь  $M$ -масса иона,  $Ze$ -его заряд,  $V$ -объём системы,  $n_i = N_i/V$ -плотность ионов. Частота  $\omega_q$  продольных колебаний ионов обладает слабой дисперсией. При  $q = 0$  эта частота равна плазменной ионной частоте

$$\omega_{pi} = \frac{4\pi n_i (Ze)^2}{M}$$

Отметим, что в рассматриваемой модели имеет место свойство

$$\frac{VAq^2}{\omega_{pi}^2} = V(q).$$

Модель Бардина - Пайнса учитывает наиб. существенные особенности металлов и приводит к качественно верному описанию Э--ф. в. в них.

В то же время существует эффект второго порядка, связанный с тем, что в ряде случаев фононы могут менять энергетический спектр свободных носителей заряда. Это явление получило название поляронный эффект, а носитель заряда, взаимодействующий с фононами, – полярон.

Классическим примером поляронного эффекта является взаимодействие электронов проводимости с длинноволновыми продольными оптическими колебаниями в ионных кристаллах. В этом случае свободный электрон за счет своего электрического поля поляризует ионный остов, возникает потенциальная яма для этого электрона, и при ее значительной величине возникает автолокализация электрона. Таким образом, электрон сам формирует потенциальную яму и за счет электростатического взаимодействия ее удерживает. Это состояние называют поляроном сильной связи. Полярон сильной связи может перемещаться по кристаллу, но, вследствие необходимости сильной поляризации в решетке ионного кристалла, эффективная масса полярона будет значительно превышать эффективную массу свободного носителя (электрона или дырки).

Количественным параметром, определяющим взаимодействие свободных электронов с колебаниями решетки, является коэффициент  $\alpha$ , называемой Фрелиховой константой связи.

$$\alpha = \left( m^* / 2k^3 \epsilon_0 \right)^{1/2} (\epsilon^2 / \epsilon)$$

$$\epsilon^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1} = R_y^* / \hbar \omega,$$

где  $m^*$  – эффективная масса электрона,  $\omega$  – частота продольных оптических фононов,  $\epsilon_0$  – статическая диэлектрическая проницаемость,  $\epsilon_\infty$  – высокочастотная диэлектрическая проницаемость,  $R_y^*$  – эффективный Ридберг, отличающийся от энергии ионизации атома водорода, составляющую 13,6 эВ, на коэффициент  $m^*/(m_0 \epsilon^2)$ , характеризующий среду.

В зависимости от значения константы связи  $\alpha$  различают поляроны сильной связи для  $\alpha \gg 1$  и для  $\alpha < 1$  – поляроны слабой связи. Для поляронов сильной связи, или поляронов Фрелиха, характерен большой радиус и наблюдается автолокализация поляронов.

### ***Экситоны Френкеля и Ванье-Мотта. Экситон-фононное взаимодействие в кристаллах. Поляритоны.***

Электроны и дырки, образующиеся в процессе генерации, испытывают кулоновское взаимодействие. Это взаимодействие приводит к тому, что неравновесные электроны и дырки следует рассматривать в координатном пространстве как связанную электронно-дырочную пару – экситон. Экситон – это квазичастица, возникающая при бестоковых возбуждениях в полупроводниках. В зависимости от характера связи существует два типа экситонов. Первый тип – свободные экситоны большого радиуса (экситоны Ванье–Мотта), характерные размеры которых достигают десятков межатомных расстояний. Второй тип – связанные экситоны малого радиуса (экситоны Френкеля), размеры которых не превышают одного межатомного расстояния .

### Свободные экситоны

Экситон большого радиуса можно рассматривать как водородоподобный атом, аналогично водородоподобной модели мелких донорных или акцепторных состояний. Энергия связи экситона выражается в этой модели так же, как и для атома водорода, и имеет вид:

$$E_n = -\frac{m_r e^4}{8 \cdot (\epsilon_r \epsilon_0 \hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2},$$

где  $m_r$  – приведенная масса электрона и дырки;  
 $\epsilon_r$  – диэлектрическая проницаемость рассматриваемого кристалла;  
 $n$  – главное квантовое число экситона.

При  $n = 1$  получаем энергию связи для основного состояния экситона. Для основного состояния можно определить радиус экситона  $r$  как среднее расстояние между неравновесным электроном и дыркой в связанном состоянии.

$$r = \frac{m_0}{m_r} \frac{1}{\epsilon_r} a_B,$$

где  $a_B$  – боровский радиус атома водорода, равный 0,52 ангстрема.

Полная энергия экситона состоит из суммы его кинетической энергии  $\frac{\hbar^2 k^2}{2 \cdot M}$ , определяемой движением центра масс, и потенциальной энергии  $E_n + E_g$ :

$$E(k) = E_g + E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2 \cdot M} = E_g - \frac{m_r e^4}{8 \cdot (\epsilon_r \epsilon_0 \hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2 \cdot M},$$

где  $k$  – волновой вектор экситона как целой частицы,  $M = m_n^* + m_p^*$  – эффективная масса экситона.

Каждая из зависимостей  $E(k)$  с заданным  $n$  образует экситонную зону (рис. 1).

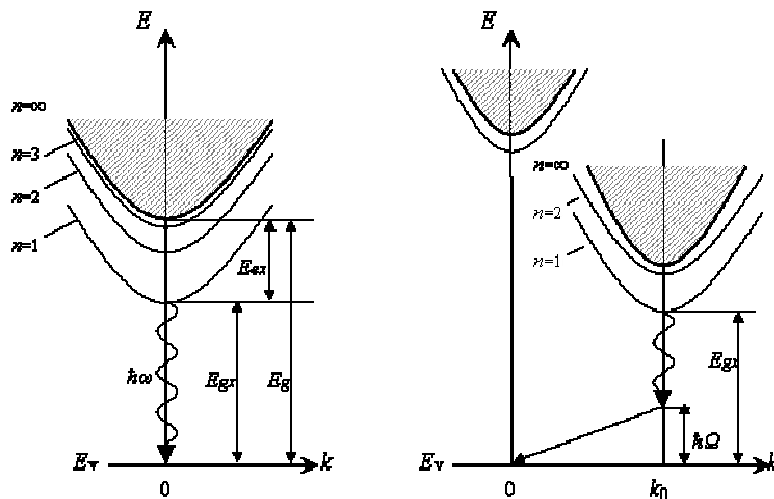


Рис. 1. Прямые (слева) и непрямые (справа) экситонные оптические переходы

Минимальная энергия  $E_{gn} = E_g - E_{en}$ , необходимая для создания экситона, называется экситонной шириной запрещенной зоны.

Прямой оптический переход из экситонного состояния с испусканием фотона  $\hbar\omega$  требует выполнения законов сохранения энергии и квазиимпульса:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2 \cdot M} + E_g + E_x$$

$$\hbar k_{\text{фот}} = \hbar k$$

Поскольку квазиимпульс фотона существенно меньше квазиимпульса электрона и дырки, то оптические переходы возможны только в состоянии  $k = 0$ .

При фундаментальном поглощении возможны не прямые экситонные переходы. Законы сохранения в этом случае будут иметь вид:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2 \cdot M} + E_g + E_x - \hbar\Omega$$

Энергия связи для основного состояния экситона равняется

$$E_x = |E_1| = \frac{m_e e^4}{8 \cdot (\epsilon_r \epsilon_0 \hbar)^2} = \frac{m_r}{m_0} \epsilon_r^2 R_y$$

Эту величину называют также энергией диссоциации экситона, или, по аналогии с постоянной Ридберга для атома водорода, экситонным Ридбергом.

Связанные экситоны

При определенных условиях неравновесные электрон и дырка в кристаллах могут образовывать не только экситон, свободно перемещающийся по кристаллу и называемый свободным (экситон Ванье–Мотта), но и локализованный на дефекте экситон малого радиуса, являющийся связанным (экситон Френкеля).

В большинстве случаев связанные экситоны образуются на нейтральных центрах, хотя в определенных условиях возможно их образование и на заряженных дефектах. С высокой вероятностью связанные экситоны образуются на изоэлектронных ловушках. Изоэлектронной примесью называется атом такого элемента, который находится в одной группе периодической таблицы с замещаемым атомом. Однако не любая изоэлектронная примесь способна связать экситон. Изоэлектронные примеси замещения образуют связанные экситоны тогда, когда примесный и замещаемый атомы существенно отличаются как по электроотрицательности, так и по ковалентным радиусам. В этом случае примесный атом искажает потенциальную энергию электрона в решетке, образуя при этом глубокую потенциальную яму, не превышающую в размере межатомное расстояние. В эту потенциальную яму вблизи изоэлектронной примеси захватывается электрон или дырка. После того как носитель одного знака (например, электрон) будет захвачен – локализован, изоэлектронный центр приобретает заряд и затем довольно легко захватывает носитель противоположного знака (в нашем случае – дырку). Таким образом, образуется связанная электронно-дырочная пара в виде экситона, сильно локализованного в пространстве.

Экситон Френкеля имеет два существенных отличия по сравнению с экситоном Ванье–Мотта:

1) Энергетический уровень основного состояния экситона Френкеля находится ниже аналогичного уровня экситона Ванье–Мотта, т. е. энергия диссоциации  $E_{ex}$  для связанного экситона больше, чем для экситона Ванье–Мотта. Для некоторых материалов энергия диссоциации может составлять доли электрон вольта. Поэтому экситон Френкеля более стабилен при комнатной температуре по сравнению с экситоном большого радиуса.

2) Поскольку экситон Френкеля локализован в координатном пространстве, то, согласно соотношению неопределенностей Гейзинберга, он полностью делокализован в  $k$ -пространстве. Используя соотношение неопределенностей:  $\Delta p \cdot \Delta r \geq \hbar$ , проведем оценку величины  $\Delta k$ .

Если область локализации электрона в координатном пространстве  $\Delta r \sim a$ , то изменение импульса

$$\Delta p = \Delta(\hbar k) = \hbar \Delta k \geq \frac{\hbar}{\Delta r} = \frac{\hbar}{a}$$



$$\Delta E \geq \frac{1}{a}$$

отсюда следует:

Другими словами, квазиволновой вектор связанного экситона может принимать любые значения в пределах зоны Брюллена. Этот факт достаточно важный для непрямозонных полупроводников, поскольку не требует для связанных экситонов участия фононов в излучательной рекомбинации.

Спектр излучательной рекомбинации связанных экситонов более узкий, чем спектр свободных экситонов, т. к. связанный экситон локализован в координатном пространстве и его кинетическая энергия невелика по сравнению с таковой у свободного экситона большого радиуса.

$$\frac{E^*}{\hbar}$$

При взаимодействии Э. с фотонами, имеющими частоты  $\omega = \frac{E^*}{\hbar}$ , возникают новые квазичастицы — смешанные экситон-фотонные состояния, называемые поляритонами. Свойства поляритонов (например, их закон дисперсии) существенно отличаются от свойств как Э., так и фотонов. Поляритоны играют существенную роль в процессах переноса энергии электронного возбуждения в кристалле, они обуславливают особенности оптических спектров полупроводников в области экситонных полос и др.

При малых концентрациях Э. ведут себя в кристалле подобно газу квазичастиц. При больших концентрациях становится существенным их взаимодействие. Возможно образование связанного состояния двух Э. — экситонной молекулы (биэкситона). Однако, в отличие от молекулы водорода, энергия диссоциации биэкситона значительно меньше, чем его энергия связи (эффективные массы электронов и дырок в полупроводниках одного порядка).

При повышении концентрации Э. расстояние между ними может стать порядка их радиуса, что приводит к разрушению Э. Это может сопровождаться возникновением «капель» электронно-дырочной плазмы. Электронно-дырочные капли обладают рядом интересных свойств: высокой плотностью электронов и дырок при малой (средней по объёму) концентрации, большой подвижностью в неоднородных полях и т.п.

При малых концентрациях экситонов Э., состоящий из двух Фермионов (электрона проводимости и дырки), можно рассматривать как Бозон. Это означает, что возможна бозе-конденсация Э. (накопление большого числа Э. на наименьшем энергетическом уровне). Бозе-конденсация Э. может привести к существованию в кристалле незатухающих потоков энергии. Однако, в отличие от сверхтекучего жидкого гелия или сверхпроводника, сверхтекучий поток Э. может существовать не сколь угодно долго, а лишь в течение времени жизни Э.

Влияние магнитного и электрического полей на экситонные спектры. Наряду с зеемановским расщеплением спектральных линий атомов и атомоподобных систем в магн. поле, может наблюдаться их сдвиг в фиолетовую часть спектра. Этот сдвиг — следствие возмущающего действия магн. поля на орбитальное движение электронов. Сдвиг всегда положителен, а величина его  $\Delta \mathcal{E} = e^2 H^2 r^2 / 8\mu c^2$  мала для состояний атома или атомоподобных систем с малыми радиусами  $r$ . Поскольку радиус возбуждённых экситонных состояний составляет сотни и тысячи  $\text{Å}$ , сдвиг, пропорциональный  $r^2$ , хорошо наблюдается в полях  $H$ , не превышающих десятки к Э. Существование большого радиуса у В.-М. э. первоначально и было доказано экспериментами по наблюдению сдвига экситонных линий под влиянием магн. поля.

В сильных магн. полях возникают т.н. диамагнитные экситоны, определяющие структуру спектра межзонного оптич. поглощения в полупроводниках, помещённых в сильное магн. поле. Описание воздействия электрич. поля на край поглощения в полупроводниках также требует учёта экситонных состояний.

Влияние В.-М. э. на фотопроводимость и др. свойства полупроводников. Согласно предположению Френкеля, оптич. переходы в экситонные состояния не должны приводить к

фотопроводимости. Однако взаимодействия экситонов, напр. с фононами или примесными атомами, приводят к возникновению фотопроводимости при возбуждении экситонов светом. Одним из видов такого взаимодействия может быть, напр., ионизация примеси или самого экситона и появление свободных электрона или дырки в зонах. Поэтому В.-М. э. играют существ. роль в разл. механизмах фотопроводимости полупроводников. Представления об экситонах используются при изучении спектра и кинетики люминесценции в полупроводниках. Существенная роль В.-М. э. в комбинационном рассеянии света в полупроводниках, особенно в процессах неупругого резонансного рассеяния света.

Способность экситонных возбуждений перемещаться по кристаллич. решётке приводит к проявлению в экситонных спектрах дисперсии пространственной. Взаимодействие В.-М. э. со световой волной приводит к образованию смешанных, т. н. свето-экситонных, состояний (поляритонов). Учёт этих эффектов лежит в основе кристаллооптики сред с пространственной дисперсией. Нелинейные явления, наблюдаемые в области энергий, соответствующих экситонным поляритонам, перспективны для развития методов генерации суб-пикосекундных импульсов света.

#### ***Модуль 4 «Конденсация бозонов. Сверхтекучесть»***

*Сверхтекучесть*, особое состояние квантовой жидкости, находясь в котором жидкость протекает через узкие щели и капилляры без трения; при этом протекающая часть жидкости обладает равной нулю энтропией. Единственным представителем семейства сверхтекучих жидкостей долгое время считался жидкий гелий  $^4\text{He}$ , становящийся сверхтекучим ниже температуры  $T_1 = 2,17$  К. Сверхтекучий  $^4\text{He}$  назывался He II. He II была открыта П. Л. Капицей в 1938. В 1972—74 было установлено, что сверхтекучестью обладает также жидкий  $^3\text{He}$  при температуре ниже  $T_c = 2,6 \times 10^{-3}$  К на кривой плавления. Переход нормальных жидких  $^4\text{He}$  и  $^3\text{He}$  в сверхтекучее состояние представляет собой фазовый переход II рода.

Сверхтекучую жидкость нельзя представлять как жидкость, не обладающую вязкостью, т. к. эксперименты с крутильными колебаниями диска, погруженного в He II, показали, что затухание колебаний при температуре, не слишком далёкой от  $T_1$  ("лямбда-точки"), мало отличается от затухания аналогичных колебаний в He I, который сверхтекучестью не обладает.

Теория сверхтекучести He II была объяснена Л. Д. Ландау в 1941. Теория Ландау, получившая название двухжидкостной гидродинамики, основана на представлении о том, что при низких температурах свойства He II как слабовозбуждённой квантовой системы обусловлены наличием в нём элементарных возбуждений, или квазичастиц. Согласно этой теории, He II можно представить состоящим из двух взаимопроникающих компонент: нормальной и сверхтекучей.

Нормальная компонента при температурах, не слишком близких к  $T_1$ , представляет собой совокупность квазичастиц двух типов — фононов (квантов звука) и ротонов (квантов коротковолновых возбуждений, обладающих большей, чем у фононов, энергией). При  $T = 0$  плотность нормальной компоненты  $r_n = 0$ , поскольку при этом любая квантовая система находится в основном состоянии и возбуждения (квазичастицы) в ней отсутствуют. При температурах от абсолютного нуля до  $1,7—1,8$  К совокупность элементарных возбуждений в  $^4\text{He}$  можно рассматривать как идеальный газ квазичастиц. С дальнейшим приближением к  $T_1$  из-за заметно усиливающегося взаимодействия квазичастиц модель идеального газа становится неприменимой. Взаимодействие квазичастиц между собой и со стенками сосуда обуславливает вязкость нормальной компоненты.

Остальная часть He II — сверхтекучая компонента — вязкостью не обладает и поэтому свободно протекает через узкие щели и капилляры; её плотность  $r_s = r - r_n$ , где  $r$  — плотность жидкости. При  $T = 0$ ,  $r_s = r$ , при увеличении температуры концентрация квазичастиц растёт, поэтому  $r_s$  уменьшается и, наконец, обращается в нуль при  $T = T_1$ .

Согласно теории Ландау, жидкость перестаёт быть сверхтекучей и в случае, когда скорость её потока превышает критическое значение, при котором начинается спонтанное образование ротонов. При этом сверхтекучая компонента теряет импульс, равный импульсу испускаемых ротонов, и, следовательно, тормозится. Однако экспериментальное значение критической скорости существенно меньше той, которая требуется по теории Ландау для разрушения сверхтекучести.

С микроскопической точки зрения появление сверхтекучести в жидкости, состоящей из атомов с целым спином (бозонов), например атомов  ${}^4\text{He}$ , связано с переходом при  $T < T_1$  значительного числа атомов в состояние с нулевым импульсом. Это явление называется *Бозе — Эйнштейна конденсацией*, а совокупность перешедших в новое состояние атомов — Бозе-конденсатом. Существование в He II атомов, обладающих различным характером движения, — атомов конденсата и атомов, не вошедших в конденсат, — приводит к двухжидкостной гидродинамике Ландау. В He II из-за сильного взаимодействия атомов  $n_0$  составляет при  $T = 0$  лишь несколько процентов  $n_s$ . Это означает, что сверхтекучая компонента движется потенциально и, следовательно, не испытывает сопротивления со стороны обтекаемых ею предметов и стенок канала или сосуда.

Потенциальность течения сверхтекучей компоненты может нарушаться на осях т. н. квантованных вихрей, которые отличаются от вихрей в обычных жидкостях тем, что циркуляция скорости вокруг оси вихря квантуется. Квант циркуляции скорости равен  $h/m$ . Квантованные вихри осуществляют взаимодействие между сверхтекучей и нормальной компонентами сверхтекучей жидкости. Это взаимодействие приводит хотя и к слабому, но конечному затуханию потока сверхтекучей жидкости в замкнутом канале. При некоторой скорости движения сверхтекучей компоненты относительно нормальной компоненты или стенок сосуда квантованные вихри начинают образовываться настолько интенсивно, что свойство сверхтекучести исчезает. В рамках этой теории сверхтекучесть пропадает при скоростях, существенно меньших предсказываемых теорией Ландау и более близких к реальным значениям критической скорости. Квантованные вихри наблюдаются экспериментально при вращении сосуда с He II. Кроме того, в экспериментах с ионами, инжектируемыми в He II, обнаружены квантованные вихри, имеющие форму кольца.

Сверхтекучесть  ${}^3\text{He}$ . При определённых условиях сверхтекучесть может осуществляться и в системах, состоящих из атомов с полуцелым спином — фермионов. Это происходит в том случае, когда между фермионами имеются силы притяжения, которые приводят к образованию связанных состояний пар фермионов, т. н. куперовских пар. Куперовские пары обладают целым спином, поэтому могут образовывать Бозе-конденсат. Сверхтекучесть такого рода осуществляется для электронов в некоторых металлах и носит название сверхпроводимости. Аналогичная ситуация имеет место в жидком  ${}^3\text{He}$ , атомы которого имеют спин  $1/2$  и образуют типичную квантовую ферми-жидкость. Свойства ферми-жидкости можно описать как свойства газа квазичастиц-фермионов с эффективной массой примерно в 3 раза большей, чем масса атома  ${}^3\text{He}$ . Силы притяжения между квазичастицами в  ${}^3\text{He}$  очень малы, лишь при температурах порядка нескольких  $mK$  в  ${}^3\text{He}$  создаются условия для образования куперовских пар квазичастиц и возникновения сверхтекучести.

Эффекты, сопутствующие сверхтекучести. В сверхтекучей жидкости, кроме обычного (первого) звука (колебаний плотности), может распространяться т. н. второй звук, представляющий собой звук в газе квазичастиц (колебания плотности квазичастиц, а следовательно, и температуры). Сверхтекучая жидкость обладает аномально высокой теплопроводностью, причиной которой является конвекция, — теплота переносится макроскопическим движением газа квазичастиц. При нагревании He II в одном из сообщающихся (через капилляр) сосудов между сосудами возникает разность давлений (термомеханический эффект). Этот эффект объясняется тем, что в сосуде с большей температурой оказывается повышенной концентрация квазичастиц. Из-за того, что узкий капилляр не пропускает вязкого потока нормальной компоненты, возникает избыточное давление газа квазичастиц, подобное осмотическому давлению в растворе. Существует и

обратный — механокалорический — эффект: при быстром вытекании He II через капилляр из сосуда температура внутри сосуда повышается (в нём увеличивается концентрация квазичастиц), а вытекающий гелий охлаждается. Интересными свойствами обладает сверхтекучая плёнка гелия, образующаяся на твёрдой стенке сосуда. Так, например, она может выравнивать уровни He II в сосудах, имеющих общую стенку.

В классической гидродинамике идеальной жидкости показывается, что если в некоторый момент времени движение является потенциальным ( $\text{rot}V = 0$ ) во всём объёме жидкости, то оно будет потенциальным и во все другие моменты времени (так называемая теорема Лагранжа). Оказывается, что в квантовой гидродинамике имеется аналог этой теоремы. Согласно правилу коммутации  $\text{rot}V$  всегда коммутирует с плотностью  $\rho$ . Компоненты  $\text{rot}V$ , однако, не коммутируют, вообще говоря, ни друг с другом, ни с компонентами скорости  $v$ . Поэтому  $\text{rot}V$  не коммутирует, вообще говоря, и с оператором Гамильтона; как известно из квантовой механики, это означает, что  $\text{rot}V$  не сохраняется. Исключение составляет случай, когда во всём объёме жидкости  $\text{rot}V = 0$ . Таким образом, равный нулю ротор скорости сохраняется. Другими словами, квантовая жидкость всегда обладает такими стационарными состояниями, в которых  $\text{rot}V$  равен нулю во всём объёме. Такие состояния могут быть названы, по аналогии с классической гидродинамикой, состояниями потенциального движения жидкости. Отсюда можно сделать существенное заключение об основных свойствах энергетического спектра жидкости (подчеркнём, что речь

идёт не об уровнях для отдельных атомов гелия, а об уровнях, соответствующих состояниям всей жидкости в целом). Именно, не может существовать уровней энергии, сколь угодно близких к нормальному, которые соответствовали бы вихревому движению жидкости. Другими словами, достаточно близкие к нормальному возбуждённые состояния должны соответствовать потенциальному движению жидкости. Необходимо подчеркнуть, что в этом рассуждении предполагается, что нормальное состояние жидкости — безвихревое. Принципиально, однако, логически допустимы обе возможности — вихревое и безвихревое нормальное состояние. Мы увидим ниже, что к свойству сверхтекучести приводит энергетический спектр с безвихревым нормальным состоянием; поэтому следует принять, что в жидком гелии имеет место именно этот случай. Надо, впрочем, иметь в виду,

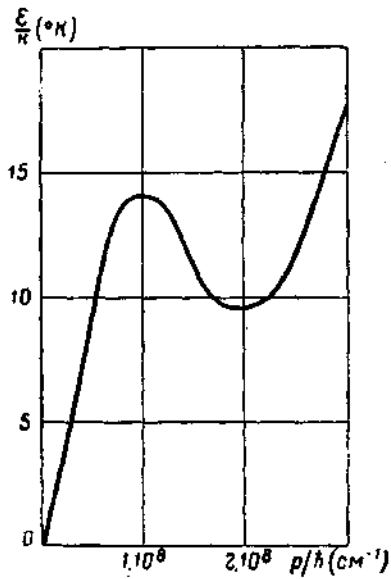
что поскольку в природе существует всего лишь одна квантовая жидкость — жидкий гелий, то вопрос о том, является ли такой энергетический спектр, а потому и сверхтекучесть, общим свойством квантовых жидкостей, не может быть решён экспериментально. Теоретически же вполне допустимо существование и несверхтекучих квантовых жидкостей.

Рассмотрим возбуждённый уровень, расположенный не слишком высоко над началом спектра (нормальным уровнем). Всякое слабо возбуждённое состояние макроскопического тела может рассматриваться в квантовой механике, как совокупность отдельных «элементарных возбуждений». Эти «элементарные возбуждения» ведут себя, как некоторые «квазичастицы», движущиеся в занимаемом телом объёме и обладающие определёнными энергиями и импульсами. Так, например, тепловое возбуждение твёрдого тела (кристалла), в котором атомы совершают малые колебания вокруг своих положений равновесия, может рассматриваться, как известно, как совокупность движущихся в теле «звуковых квантов» (фононов).

Обозначим посредством  $\varepsilon(\rho)$  энергию «элементарного возбуждения» в жидком гелии как функцию его импульса  $\rho$ . Вид зависимости  $\varepsilon$  от  $\rho$  представляет собой основную характеристику энергетического спектра жидкости. На основании сказанного выше не представляет труда установить вид этой функции при достаточно малых значениях импульса (длинные волны). Действительно, достаточно малые энергии возбуждения соответствуют потенциальным движениям жидкости. Но потенциальное внутреннее движение представляет собой не что иное, как продольные звуковые волны. Поэтому соответствующие элементарные возбуждения представляют собой просто звуковые кванты, т. е. фононы. Энергия же фононов является, как известно, линейной функцией их импульса, т. е.

$$\varepsilon = c\rho,$$

где  $s$  — скорость звука.



Таким образом, в своей начальной части кривая зависимости  $\varepsilon$  от  $p$  прямолинейна. По мере увеличения импульса  $p$  кривая  $\varepsilon = \varepsilon(p)$  отклоняется от линейности. Однако представляется невозможным определить в общем виде зависимость  $\varepsilon$  от  $p$  для квантовой жидкости из одних только теоретических соображений, и для определения вида энергетического спектра гелия II приходится привлечь также и имеющиеся экспериментальные данные; речь идёт об измерениях различных термодинамических величин гелия II (энтропии, теплоёмкости), а также скорости распространения так называемого «второго звука» в гелии II. После начального линейного участка (фононы) энергия  $\varepsilon$  достигает максимума, затем начинает уменьшаться и при некотором значении импульса  $p=p_0$  функция  $s(p)$  имеет минимум. В тепловом равновесии имеющиеся в жидкости элементарные возбуждения распределены в ос-

новном вблизи минимумов энергии, т. е. в области малых  $\varepsilon$  (область вблизи  $\varepsilon = 0$ ) и в области вблизи значения  $\varepsilon(p_0)$ .

### Модуль 5 «Оптические свойства твердых тел»

#### Оптическое поглощение в полупроводниках.

##### Собственное поглощение

Если при поглощении полупроводником кванта излучения электроны валентной зоны, приобретая дополнительную энергию, превышающую или равную ширине запрещенной зоны, переходят в зону проводимости, то такое поглощение называется собственным или фундаментальным. При изучении собственного поглощения полупроводника следует учитывать строение его энергетических зон. Известные в настоящее время полупроводники в соответствии с конфигурацией энергетических зон делятся на два основных вида. У первого из них минимум энергии в зоне проводимости, характеризуемый волновым вектором  $k_{\min}$ , и максимум энергии в валентной зоне, определяемый волновым вектором  $k_{\max}$ , расположены в одной и той же точке зоны Бриллюэна (обычно это точка  $k = 0$ ). Другими словами, у этих полупроводников  $k_{\min} = k_{\max}$ . В качестве примера таких полупроводников можно назвать

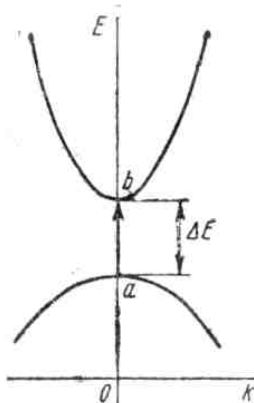


Рис.1. Собственное поглощение в антимониде

антимонид индия. У второго вида веществ экстремумы зоны проводимости и валентной зоны находятся при различных  $k$ . К последнему типу веществ относится большинство полупроводников, в том числе германий и кремний.

Переходы электронов через запрещенную зону будут происходить, прежде всего, между энергетическими состояниями, соответствующими максимуму валентной зоны и минимуму зоны проводимости, т.е. при значениях квазиимпульса или волнового вектора  $k$ , близких к нулю (рис. 1). При взаимодействии электрона с электромагнитным полем излучения должен выполняться закон сохранения энергии и закон сохранения квазиимпульса или волнового вектора:

$$E_b^{эл} = E_a^{эл} + \hbar \nu_{\phi},$$

$$\vec{k}_b = \vec{k}_a + \vec{\eta},$$

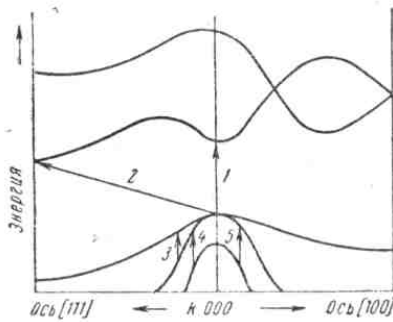


Рис.2. Энергетические зоны германия

Волновой вектор фотона очень мал по сравнению с волновым числом электрона. В связи с этим, в уравнении волновым вектором фотона можно пренебречь. Поэтому

$$\vec{k}_b = \vec{k}_a.$$

### Экситонное поглощение

При поглощении света полупроводником возможно такое возбуждение электрона валентной зоны, при котором он не переходит в зону проводимости, а образует с дыркой связанную систему. Такая система получила название *экситона*.

Полная энергия экситона

$$E_{ex} = \frac{\hbar^2}{2M} k_{ex}^2 - \frac{R'}{n^2}.$$

При условии изотропности  $m_n$ ,  $m_p$ ,  $e$  и если оптический переход прямой и совершается при  $k = 0$ , экситон будет характеризоваться водородоподобной серией линий поглощения, удовлетворяющих условию

$$\hbar \nu = \hbar \nu_{\infty} - \frac{R'}{n^2},$$

### Примесное поглощение.

Оптическое поглощение, обусловленное ионизацией или возбуждением примесных центров в кристалле, называется примесным. Как известно, при наличии в полупроводнике донорной и акцепторной примесей в его запрещенной зоне появляются локальные энергетические состояния. При освещении полупроводника светом наблюдается непрерывная полоса поглощения, вызываемая переходами электронов с энергетических уровней примеси в зону проводимости. Подобным образом электрон валентной зоны может быть переведен при освещении на акцепторный уровень.

Кроме основных состояний примесные центры могут иметь и энергетические уровни возбуждения. Возбуждение электронов примеси, т. е. перевод электрона из основного состояния в возбужденное, приведет к появлению поглощения, в спектре которого будет наблюдаться несколько полос.

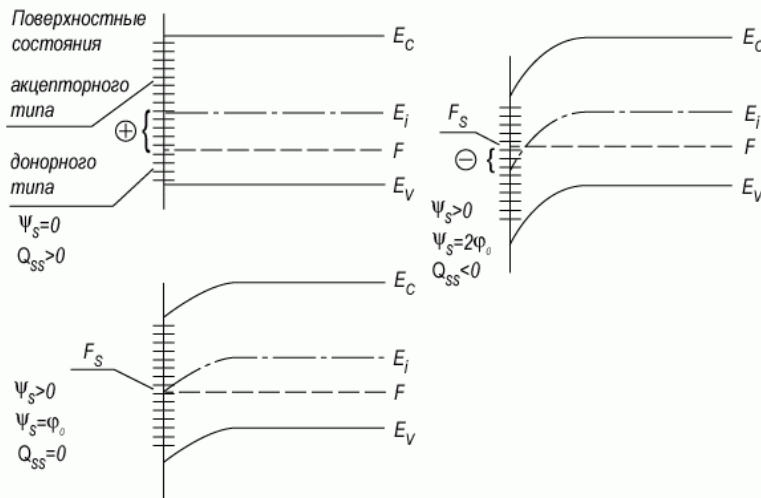
**Модуль 6 «Поверхностные состояния электронов. Состояния электронов в структурах с пониженной размерностью»:**

*Основные определения*

Одной из принципиальных особенностей, характеризующих поверхность полупроводников или границу раздела полупроводника с каким-либо веществом, является изменение энергетического спектра для электронов на поверхности по сравнению с объемом полупроводника. Это различие объясняется наличием на поверхности полупроводников поверхностных состояний (ПС).

Под поверхностными состояниями будем понимать электронные состояния, пространственно локализованные на границе раздела полупроводника с какой-либо средой (диэлектрик, металл, газ, электролит, вакуум), имеющие энергетическое положение в запрещенной зоне полупроводника и изменяющие свое зарядовое состояние в зависимости от положения уровня Ферми на поверхности полупроводника.

По зарядовому состоянию ПС, так же как и объемные состояния в запрещенной зоне полупроводника, бывают двух типов - донорные и акцепторные. Состояния донорного типа положительно заряжены, если расположены выше уровня Ферми, и нейтральны, если расположены ниже уровня Ферми. Состояния акцепторного типа нейтральны, если расположены выше уровня Ферми, и отрицательно заряжены, если расположены ниже уровня Ферми. Многочисленные эксперименты показали, что обычно на поверхности полупроводников в верхней половине запрещенной зоны расположены ПС акцепторного типа, а в нижней половине - ПС донорного типа. На рисунке в качестве примера приведены зонные диаграммы полупроводника при различных значениях поверхностного потенциала, иллюстрирующие это заполнение поверхностных состояний.



Зонная диаграмма ОПЗ полупроводника р-типа, показывающая заполнение поверхностных состояний при различных изгибах зон

Из рисунка видно, что знак заряда ПС  $Q_{ss}$  совпадает со знаком заряда основных носителей на поверхности. (Обозначение заряда ПС значком  $Q_{ss}$  происходит от слов "surface states - поверхностные состояния"). Из этого факта следует, что, по-видимому, ПС амфотерны по своей природе и могут захватывать как электроны, так и дырки. Преобладание носителей определенного типа на поверхности в ОПЗ обуславливает их преимущественный захват на ПС и определяет соответствующий знак заряда ПС.

В зависимости от энергетического положения уровней поверхностных состояний в запрещенной зоне полупроводника различают моноэнергетические ПС, имеющие дискретный уровень, и ПС, квазинепрерывно распределенные по энергии в запрещенной зоне по определенному закону, образующие континуум ПС.

*Природа поверхностных состояний*

По физической природе поверхностные состояния разделяются на четыре основных типа:

- 1) поверхностные состояния типа Тамма;
- 2) поверхностные состояния типа Шокли;
- 3) поверхностные состояния, обусловленные дефектами кристаллической решетки на поверхности;
- 4) поверхностные состояния, обусловленные примесью на поверхности полупроводника.

Таммовские поверхностные состояния обусловлены обрывом периодической решетки кристалла. Рассматривая модель Кронига - Пенни, с учетом обрыва хода потенциала на поверхности, Тамм получил, что решение уравнения Шредингера дает в этом случае для спектра энергии дискретные значения, при выполнении определенных условий лежащие в запрещенной зоне полупроводника. Волновая функция, описывающая состояние электрона на этих уровнях, оказывается локализованной вблизи поверхности полупроводника. Концентрация таммовских ПС равна поверхностной концентрации атомов в кристалле, т.е. величине порядка  $10^{15} \text{ см}^{-2}$ . При такой высокой концентрации состояний в поверхностной зоне, если эта зона заполнена частично, возможно появление металлической проводимости вдоль поверхности кристалла.

Шокли, рассчитывая энергетический спектр цепочки атомов конечных размеров, показал, что наличие границ приводит к отщеплению от разрешенных зон по одному объемному состоянию и возникновению состояний в запрещенной зоне, локализованных вблизи границы. Концентрация шоклиевских состояний, так же как и таммовских, по порядку равна концентрации поверхностных атомов. Шоклиевские ПС можно трактовать как ненасыщенные химические связи атомов, находящихся на поверхности.

Поверхностные состояния за счет дефектов кристаллической решетки на поверхности (вакансии, междоузлия, дислокации) имеют аналогичную с локальными уровнями природу за счет этих же дефектов в объеме.

Локализованные состояния на поверхности могут быть обусловлены также примесью в кристаллической решетке вблизи поверхности, абсорбцией атомов и молекул на поверхности полупроводника.

### Статистика заполнения ПС

Рассмотрим, как меняется заряд ПС при изменении величины поверхностного потенциала  $\psi_s$ . Функцию заполнения ПС возьмем в виде функции Ферми - Дирака. Величина энергии Ферми на поверхности полупроводника  $F_s$  будет равна:

$$F_s = F - q\psi_s.$$

Расстояние от уровня Ферми на поверхности  $F_s$  до энергетического уровня ПС  $E_t$ , входящее в функцию Ферми - Дирака, равняется:

$$\Delta E = E_t + q\phi_0 - q\psi_s,$$

где  $E_t$  - энергия ПС, отсчитанная от середины запрещенной зоны. Для ПС в верхней половине запрещенной зоны  $E_t > 0$ , в нижней  $E_t < 0$ .

Функция заполнения для ПС будет иметь вид:

$$f = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_t - F_s}{kT}}} = \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{E_t}{q} + \phi_0 - \psi_s\right)}}.$$

Для моноэнергетических акцепторных ПС заряд  $Q_{ss}$  отрицателен и равен по величине:

$$Q_{ss} = -qN_{ss}f,$$

где  $N_{ss}$  - плотность моноэнергетических состояний, т.е. их число на единицу площади. Если уровень Ферми на поверхности  $F_s$  выше уровня ПС на  $(2\div 3)kT/q$ , то  $f = 1$  и  $Q_{ss} = -qN_{ss}$ . Если уровень Ферми  $F_s$  совпадает с уровнем ПС, то  $f = 1/2$  и  $Q_{ss} = -(1/2)qN_{ss}$ . И наконец, если уровень Ферми ниже уровня ПС на  $(2\div 3)kT/q$ , то  $f = 0$  и  $Q_{ss} = 0$ .



Для моноэнергетических донорных ПС можно с учетом определения, сделанного в разделе, и свойств функции заполнения записать аналогичное выражение.

При квазинепрерывном энергетическом распределении ПС основной величиной, характеризующей ПС, является энергетическая плотность ПС  $N_{ss}(E)$ , имеющая размерность  $[\text{см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}]$ .

По смыслу величина  $N_{ss}(E)$  есть плотность состояний на единичный энергетический интервал  $dE = 1$  вблизи значения энергии  $E$ , а величина  $N_{ss}(E)dE$  дает число состояний на единицу площади в энергетическом интервале  $(E; E+dE)$ . Если величина  $N_{ss}(E)$  не зависит от энергии, т.е. плотность ПС постоянна по ширине запрещенной зоны полупроводника, для заряда ПС  $Q_{ss}$  имеем с точностью до размытия функции распределения:

$$Q_{ss} = q \int_{-\infty}^{\infty} N_{ss}(E) f(E) dE = -q N_{ss} (\psi_s - \varphi_0).$$

Из соотношения следует, как это видно из рисунка, что при  $\psi_s < \varphi_0$  заряд ПС  $Q_{ss}$  положителен, при  $\psi_s = \varphi_0$  заряд  $Q_{ss}$  равен нулю и при  $\psi_s > \varphi_0$  заряд  $Q_{ss}$  отрицателен.

Поскольку заряд ПС не зависит от поверхностного потенциала  $\psi_s$  и изменяется при изменении последнего, ПС должны обладать определенной емкостью  $C_{ss}$ , называемой емкостью поверхностных состояний.

Для моноэнергетических ПС:

$$C_{ss} = \left| \frac{\partial Q_{ss}}{\partial \psi_s} \right| = \frac{q^2 N_{ss}}{kT} f(1-f).$$

Исследование соотношения показывает, что зависимость  $C_{ss}(\psi_s)$  имеет вид колоколообразной кривой с шириной на полувысоте, равной  $4(kT/q)$  и имеющей максимум при пересечении уровнем Ферми на поверхности энергетического уровня ПС, что соответствует условию  $\psi_s = \varphi_0 + E_t/q$ . В области максимума величина  $f = 1/2$ , поэтому максимальное значение емкости ПС

$$C_{ss\text{max}} = \frac{1}{4} \frac{q^2 N_{ss}}{kT}.$$

При квазинепрерывном спектре ПС величина емкости  $C_{ss}$  ПС, равна

$$C_{ss} = \left| \frac{\partial Q_{ss}}{\partial \psi_s} \right| = q N_{ss}.$$

При экспериментальных измерениях емкость ПС  $C_{ss}$  подключается параллельно емкости ОПЗ  $C_{sc}$ . Минимального значения емкость ОПЗ  $C_{sc}$  достигает в области слабой инверсии при  $\psi_s \approx 2\varphi_0$ . Для кремния при концентрации акцепторов  $N_A = 1,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  и комнатной температуре, величина емкости ОПЗ  $C_{sc} = 1,6 \cdot 10^8 \text{ Ф/см}^2$ . Энергетическая плотность ПС  $N_{ss}$ , обеспечивающих емкость ПС  $C_{ss}$ , равную емкости ОПЗ  $C_{sc}$ , будет,  $N_{ss} = 10^{11} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$ . Таким образом, если плотность ПС на границе раздела полупроводника со средой существенно меньше приведенной цифры, то следует ожидать, что в емкостных измерениях ПС не проявляются.

#### *Размерное квантование и квантово-размерные структуры*

Рассмотрим электрон массой  $m$  в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной ямы: в интервале  $0 < z < L$  потенциальная энергия равна нулю  $U(z) = 0$ , а вне этого интервала обращается в бесконечность  $U(z) = \infty$ . Движение частицы происходит только на ограниченном точками  $z = 0, L$  отрезке, и граничное условие в этих точках  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ .

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = E \psi.$$

Решение этой задачи является волновые функции и энергетические уровни квантовых состояний:

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} z\right),$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3,$$

Значения энергии уровней пространственного квантования неэквидистантны и уменьшаются пропорционально квадрату ширины потенциальной ямы  $L^2$ .

Для описания состояния электрона необходимо три квантовых числа. Рассмотрим движение электрона в очень тонкой металлической или полупроводниковой пленке. Учитывая энергию движения электрона в плоскости  $(x, y)$  получаем:

$$E = E_n + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m},$$

где  $p_x$  и  $p_y$  - компоненты импульса в плоскости слоя.

Заметим, что за счет непрерывной компоненты энергетического спектра  $p^2/2m = (p_x^2 + p_y^2)/2m$  электроны, принадлежащие одному и тому же уровню  $E_n$ , могут иметь любую энергию от  $E_n$  до бесконечности (рис. 1.1, б). Такую совокупность состояний называют подзоной размерного (пространственного) квантования.

Пусть все или почти все электроны в системе имеют энергии, меньшие  $E_2$ , и потому принадлежат нижней подзоны пространственного квантования. Тогда никакой упругий процесс (например, рассеяние на примесях или акустических фононах), равно как и рассеяние электронов друг на друге, не может изменить квантовое число  $n$ , переведя электрон на вышележащий уровень, поскольку это потребовало бы дополнительных затрат энергии.

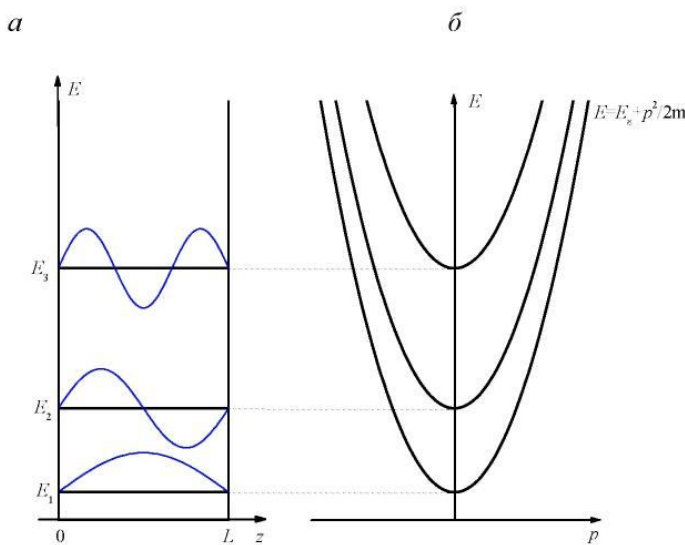


Рис. 1. 1 Энергетический спектр квантово-размерной структуры.

Это означает, что электрон при упругом рассеянии могут изменять только свой импульс в плоскости  $xу$ , т.е. ведут себя как чисто двумерные частицы. Поэтому квантово-размерные структуры, в которых заполнен лишь один квантовый уровень, часто называют двумерными электронными структурами (если заполнено больше одного уровня – квазидвумерными).

Если движение носителей ограничено не в одном, а в двух направлениях, то в этом случае носители могут свободно двигаться лишь в одном направлении, вдоль нити (пусть это будет ось  $x$ ). В поперечном сечении (плоскость  $yz$ ) энергия квантуется и принимает дискретные значения  $E_{mn}$  (как любое двумерное движение, оно описывается двумя квантовыми числами,  $m$  и  $n$ ). Полный спектр при этом тоже является дискретно-непрерывным, но лишь с одной непрерывной степенью свободы:

$$E = E_{mn} + \frac{p_x^2}{2m},$$

По аналогии с пленочными структурами данные системы называются одномерными электронными структурами или квантовыми нитями. Спектр квантовых нитей также представляет собой совокупность подзон пространственного квантования, но уже не двумерных, а одномерных.

Наконец, существуют технологические возможности создать квантовые структуры напоминающие искусственные атомы, где движение ограничено во всех трех направлениях. Здесь энергетический спектр уже не содержит непрерывной компоненты, т.е. не состоит из подзон, а является чисто дискретными. Как и в атоме, он описывается тремя дискретными квантовыми числами (не считая спина) и может быть записан в виде  $E = E_{lmn}$ , причем, как и в атоме, энергетические уровни могут быть вырождены. Подобные системы носят название нуль-мерных электронных структур или квантовых точек.

В низкоразмерных системах квантование происходит, когда длина волны де Бройля ( $\lambda = h/p = h/(2mE)^{1/2}$ ) носителей заряда становится сравнима с шириной потенциальной ямы. Уровни пространственного квантования отвечают стоячие волны условием образования, которых  $n\lambda/2 = L$ , где  $n$  – номер уровня пространственного квантования.

Для того чтобы квантование энергетического спектра могло проявляться в каких-либо наблюдаемых эффектах, расстояние между энергетическими уровнями  $E_{n+1} - E_n$  должно быть достаточно велико. В первую очередь оно должно значительно превосходить тепловую энергию носителей:

$$E_{n+1} - E_n \gg k_B T$$

поскольку в противном случае практически одинаковая заселенность соседних уровней и частые переходы носителей между ними делают квантовые эффекты ненаблюдаемыми.

Если электронный газ вырожден и характеризуется энергией Ферми  $E_F$  то желательно также выполнение условия

$$E_{n+1} - E_n \geq E_F$$

При невыполнении указанного условия заполнено много квантовых уровней и квантовые размерные эффекты, будучи в принципе наблюдаемыми, имеют весьма малую относительную величину.

Существует еще одно необходимое требование для наблюдения квантовых размерных эффектов. В реальных структурах носители всегда испытывают рассеяние на примесях, фононах и др. Интенсивность рассеяния обычно характеризуется временем релаксации импульса  $\tau$  и связанной с ней пропорциональностью с другой важной характеристикой носителей - их подвижностью  $\mu = e \tau / m$ . Величина  $\tau$  представляет собой среднее время жизни в состоянии с данными фиксированными квантовыми числами (например,  $n, p_x, p_y$  для двумерного электронного газа). В силу соотношений неопределенности конечное значение  $\tau$  влечет за собой неопределенность в энергии данного состояния. Очевидно, что говорить о наличии в системе отдельных дискретных уровней можно лишь в случае, когда расстояние между ними превышает неопределенность  $E$ , т. е. при выполнении условия

$$E_{n+1} - E_n \gg \frac{\hbar}{\tau} = \frac{\hbar e}{m \mu}$$

Поскольку расстояние между уровнями размерного квантования пропорционально  $1/L^2$  следует, что для наблюдения квантовых размерных эффектов необходимы малые размеры структур, достаточно низкие температуры и высокие подвижности носителей, а также не слишком высокая их концентрация. Приведем некоторые конкретные оценки. Чтобы наблюдать квантовые размерные эффекты в полупроводниках с  $m = 0.1 m_0$  ( $m_0$  - масса свободного электрона) при температурах вплоть до комнатной, необходимо иметь  $a < 10$  нм. При этом подвижность носителей должна заметно превосходить величину  $1000 \text{ см}^2/(\text{Вс})$ . Если изготовить столь малые структуры не представляется возможным, то наблюдение квантовых эффектов возможно лишь при пониженных температурах и требует более высоких подвижностей носителей.

Заметим также, что металлические структуры мало подходят для наблюдения квантовых размерных эффектов, поскольку  $E_F$  в типичных металлах составляет несколько электронвольт, что заведомо больше любых расстояний между уровнями. Полупроводниковые или полуметаллические структуры здесь явно предпочтительнее.

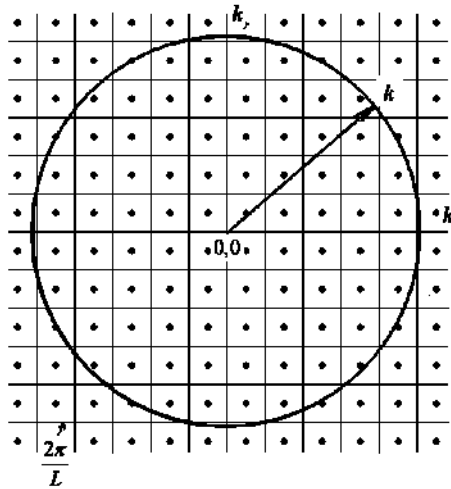
Проведем теперь расчет плотности электронных состояний в структурах различной размерности. Будем считать спектр электронов изотропным и квадратичным:

$$\varepsilon = E - E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Плотность состояний есть число состояний приходящихся на единицу энергии в единице объема:

$$g^d(\varepsilon) = \frac{1}{V_d} \frac{\partial N}{\partial \varepsilon},$$

здесь  $d$  – размерность системы (3, 2, 1);  $N$  – число электронных состояний,  $V_d$  – объем системы в зависимости от размерности системы, для куба со стороной  $L$ :  $V_d = L^d$ .



Двумерный случай: Прежде всего, вычислим плотность состояний 2D электронов, находящихся в одной подзоне размерного квантования. Сначала определим число состояний, у которых энергия меньше  $\varepsilon$ . На одно состояние приходится объем  $k$ -пространства. Эти состояния находятся внутри круга радиуса  $k$ . Разделив площадь этого круга на площадь, приходящуюся на одно состояние (см. Рис.), найдем полное число состояний с энергией меньше  $\varepsilon$  (с учетом спина):

$$N^{2D} = \frac{\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \cdot 2 = L^2 \frac{m}{\pi \hbar^2} \varepsilon.$$

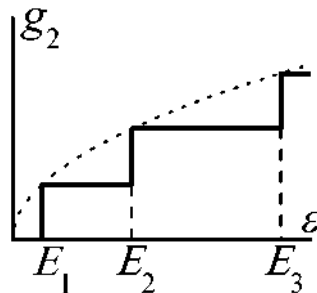
Здесь мы учли, что каждое состояние двукратно вырождено по спину, получим плотность состояний в одной подзоне пространственного квантования:

$$g^{2D}(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2}.$$

При энергиях, больших  $E_2$ , возможно существование электронов не только в первой, но и в вышележащих подзонах. Каждая подзона будет давать дополнительный вклад в  $g(E)$ . Поэтому плотность состояний будет испытывать скачки, каждый раз, когда энергия электронов сравнивается с дном очередной подзоны:

$$g^{2D}(\varepsilon) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_n),$$

где  $\Theta(x)$  - единичная функция Хевисайда, равная единице при  $x > 0$  и нулю при  $x < 0$ . На Рис. приведен график этой ступенчатой функции.



Аналогично можно найти плотности состояний в трехмерном и одномерном случае.

### Статистика электронов. Свободные и связанные электроны.

Как известно, свойства равновесных электронов в полупроводниках определяются фермиевской функцией распределения и потому зависят от температуры  $T$  и положения уровня химического потенциала  $E_F$ . Однако в реальных экспериментах известной величиной, как правило, является не  $E_F$ , а концентрация носителей. Поэтому одной из первых задач является нахождение связи между уровнем химического потенциала и концентрацией. Мы начнем с нахождения такой связи в двумерном электронном газе, полагая, что все носители находятся в нижней подзоне  $E_1$ .

Концентрация носителей  $n_s$  находится путем суммирования по всем состояниям подзоны. Вероятность заполнения каждого из них дается функцией распределения Ферми

$$n_s = \frac{m}{\pi\hbar^2} \int_{E_1}^{\infty} \frac{dE}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} = N_c \ln \left\{ 1 + e^{(E-E_F)/k_B T} \right\},$$

Критерий вырождения двумерного электронного газа и выражения для концентрации в предельных случаях невырожденных и полностью вырожденных электронов. Невырожденный случай реализуется, если

$$n_s \ll \frac{mk_B T}{\pi\hbar^2}.$$

При этом принимает более простой вид:

$$n_s = N_c e^{(E-E_F)/k_B T}.$$

Формула напоминает соответствующее выражение для трехмерного электронного газа, отличаясь лишь сдвигом начала отсчета энергии на  $E_1$  и иным выражением для  $N_c$ , более слабо зависящим от температуры ( $\sim T$  вместо  $\sim T^{3/2}$ ).

Заметим, что в квантово-размерных системах за счет меньшей плотности состояний условие полного вырождения не требует экстремально высоких концентраций или низких температур и достаточно часто реализуется в экспериментах.

В случае вырождения необходимо дополнительно, чтобы уровень Ферми лежал ниже  $E_2$ , это означает, что

$$n_s < \frac{m}{\pi\hbar^2} (E_2 - E_1).$$

Для тонких пленок это условие принимает простой вид:

$$n_s a^2 < \frac{3\pi}{2}.$$

Потенциальная яма, ограничивая движение носителей узкой областью пространства, изменяет свойства не только свободных, но и связанных электронов. Мы кратко обсудим влияние размерного квантования на мелкий водородоподобный примесный центр.

Пусть притягивающий центр располагается внутри квантовой ямы в точке с координатой  $0 < z_0 < a$ . Энергии уровней  $E_i$  создаваемых этим центром, определяются из уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_0)^2}} \psi = E_i \psi.$$

Однако при наличии стенок ямы граничные условия изменяются и для бесконечных стенок принимают вид

$$\psi(0) = \psi(a) = 0.$$

Получить точное решение для таких граничных условий в общем виде не удастся. Однако это можно сделать в пределе, когда эффективный борковский радиус значительно превосходит ширину потенциальной ямы (толщину пленки):

$$a_B \equiv \frac{\kappa \hbar^2}{m e^2} \gg a.$$

При этом в знаменателе кулоновского члена можно опустить член  $(z - z_0)^2$ , поскольку для электрона на связанном состоянии типичные значения  $x$  и  $y$  по абсолютной величине имеют порядок  $a_B$ , в то время как всюду внутри пленки  $< a$ .

Собственные значения энергии отличаются от случая трехмерной водородоподобной задачи лишь заменой квантового числа  $i$  на  $i - 1/2$ . В результате энергетический спектр примесных состояний в тонкой пленке имеет вид

$$E_i = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m a^2} - \frac{\varepsilon_0}{(i - 1/2)^2}.$$

Это означает, что под каждым квантово-размерным уровнем с фиксированным  $n$ , существует своя ридберговская серия. При этом примесные уровни, связанные со всеми подзонами, кроме основной  $E_1$  находятся на фоне состояний сплошного спектра нижележащих подзон и могут самопроизвольно распадаться за счет переходов в эти состояния. Поэтому указанные уровни имеют конечное время жизни и, следовательно, конечную ширину даже в отсутствие столкновений.

Основное связанное состояние примесного центра в двумерном случае имеет энергию связи, в 4 раза большую, чем в трехмерном. Физическая картина возрастания энергии связи достаточно понятна. Ограничение стенками ямы приводит к тому, что электрон не может уйти далеко от примеси и в среднем находится от нее на меньшем расстоянии, чем в однородном полупроводнике. Поэтому средняя энергия притяжения, определяющая энергию связи, увеличится.

Еще более разительно увеличение энергии связи в квантовых нитях. Существенное отличие от только что рассмотренного случая квантовых ям заключается в невозможности рассмотрения предельного случая нулевой толщины нити. Это означает, что в достаточно тонких нитях примесное состояние может быть в принципе сколь угодно глубоким.

До сих пор при рассмотрении кулоновской задачи, как в пленке, так и в нити мы полагали диэлектрическую проницаемость одинаковой во всем пространстве. Однако в большинстве реальных структур это далеко не так. Наиболее характерны в этом отношении тонкие пленки, представляющие собой структуры даже не с двумя, а с тремя (подложка-пленка-воздух), порой сильно различающимися проницаемостями. Разница в проницаемостях приводит к тому, что потенциал заряженного центра в структуре, входящий в уравнение

Шредингера, уже не носит кулоновский характер, а существенно искажается за счет сил изображения. Это не может не сказаться на энергии связи примесного центра. Количественные расчеты здесь достаточно сложны, но некоторые качественные выводы могут быть легко получены. Если в области локализации носителей (в пленке или нити) больше, чем в окружающей среде, то электрическое поле «выталкивается» из указанной области. В результате взаимодействие носителя с полем ослабляется и энергия связи уменьшается по сравнению с диэлектрически однородными системами.

Полученные выше результаты для мелких примесных состояний могут быть непосредственно приложимы для расчета экситонов в квантово-размерных системах. Покажем это для случая двумерной системы. Волновая функция в этом случае зависит от координат как электрона  $\mathbf{r}_e$ , так и дырки  $\mathbf{r}_h$ , и уравнение Шредингера более сложно,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_e\psi - \frac{\hbar^2}{2m_h}\Delta_h\psi - \frac{e^2}{\kappa\sqrt{(x_e-x_h)^2+(y_e-y_h)^2+(z_e-z_h)^2}}\psi = E_i\psi.$$

Переходя к новым переменным в плоскости  $xy$ :

$$\mathbf{R} = \left[ \frac{m_e x_e + m_h x_h}{m_e + m_h}, \frac{m_e y_e + m_h y_h}{m_e + m_h} \right], \quad \rho = [x_e - x_h, y_e - y_h].$$

описывающим соответственно движение центра тяжести системы и относительное движение электрона и дырки. В этих переменных волновая функция системы принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \chi_e(z_e)\chi_h(z_h)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\phi(\rho).$$

и уравнение Шредингера сводится к уравнению для волновой функции относительного движения  $\phi(\rho)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_\rho\phi - \frac{e^2}{\kappa\rho}\phi = E_{ex}\phi,$$

Уравнение отличается от уравнения Шредингера для примесных состояний в двумерных системах лишь заменой  $m$  на приведенную массу  $\mu$ . Поэтому ответ для энергии связи экситонов может быть записан по аналогии:

$$E_{ex} = \frac{m_e m_h e^4}{2\kappa^2 \hbar^2 (m_e + m_h) (i - 1/2)^2}.$$

Энергия связи экситонов, так же как и примесей, в двумерном случае оказывается существенно увеличенной (для основного состояния - в 4 раза). За счет этого экситонные эффекты в квантово-размерных системах оказываются значительно сильнее выражены, чем в массивном образце, и могут наблюдаться при достаточно высоких температурах, включая комнатные.

#### *Оптика квантово-размерных структур.*

Оптические свойства квантовых структур вызывают интерес по двум причинам: во-первых, с помощью оптических измерений можно выяснить детали энергетического спектра носителей заряда в этих структурах, а во-вторых, квантовые структуры являются основой оптоэлектронных приборов, прежде всего лазеров. Оптические эффекты в структурах с квантовыми ямами, как правило, проявляются с большей интенсивностью, чем в объемных полупроводниках. Оптическим свойствам квантовых структур посвящена обширная литература. В настоящей главе рассмотрены некоторые вопросы оптики полупроводниковых гетероструктур с квантовыми ямами.

Под действием электромагнитного излучения электроны в квантовых ямах и сверхрешетках могут совершать переходы между подзонами размерного квантования. Для обозначения таких переходов принято использовать термин «оптические» или «излучательные» переходы. Правила, определяющие возможные квантовые переходы

электрона, называются правилами отбора. Переходы, вероятность которых равна нулю, называются запрещенными, а те, вероятность которых отлична от нуля - разрешенными.

Рассмотрим взаимодействие электрона с электромагнитным излучением. В присутствии электромагнитной волны гамильтониан, описывающий движение электрона в кристалле, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}),$$

пренебечь. Используя условие  $\text{div} \mathbf{A} = 0$  и пренебрегая слагаемыми, пропорциональными  $\mathbf{A}^2$ , можно представить в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) - \frac{e\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}}{m_0} = \hat{H}_0 - \frac{e\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}}{m_0},$$

При оптических переходах электрон мало изменяет свой импульс, т.е. оптические переходы на диаграмме энергия - квазиимпульс вертикальны; во-вторых, при вычислении матричных элементов оператора взаимодействия электрона с полем электромагнитной волны можно пренебечь зависимостью векторного потенциала от координат.

Вероятность перехода электрона в единицу времени из начального состояния в конечное под действием электромагнитного излучения, определяемая по правилу Ферми, пропорциональна квадрату матричного элемента полного импульса, взятого между этими состояниями:

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 F^2}{m_0^2 \omega^2} \left| \mathbf{e}_\xi \mathbf{p}_{if} \right|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i \pm \hbar\omega),$$

Напомним, что между матричными элементами полного импульса и координаты существует простая связь

$$\frac{\mathbf{p}_{if}}{m_0} = i \frac{\varepsilon_f - \varepsilon_i}{\hbar} \mathbf{r}_{if}.$$

Используя ее можно переписать в виде

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 F^2 \left| \mathbf{e}_\xi \mathbf{r}_{if} \right|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i \pm \hbar\omega).$$

Для нахождения полного числа переходов в единицу времени в кристалле необходимо взять сумму от  $W_{if}$  по всем начальным и конечным состояниям. В частности, полное число переходов  $W$  единицу времени, сопровождающихся поглощением фотонов, описывается выражением

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 F^2 \sum_{i,f} \left| \mathbf{e}_\xi \mathbf{r}_{if} \right|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega).$$

Здесь предполагается, что начальные состояния электронов полностью заняты, а конечные - свободны. Зная величину  $W$  можно найти коэффициент поглощения электромагнитной волны.

Проанализируем теперь выражение для матричного элемента оператора квазиимпульса  $\mathbf{p}$ . Учитывая, что волновые функции электрона в начальном и конечном состояниях можно представить в виде произведения огибающей и быстро осциллирующей функции, выражение для  $\alpha$ -компоненты  $\mathbf{p}_{if}$ , можно представить в виде

$$p_{if}^\alpha = -i\hbar \int \Psi_i^* \varphi_i^* \left( \Psi_f \frac{\partial \varphi_f}{\partial x_\alpha} + \varphi_f \frac{\partial \Psi_f}{\partial x_\alpha} \right) d^3 \mathbf{r},$$

В силу ортонормированности быстроосциллирующих функций интеграл от произведения по элементарной ячейке равен ее объему, деленному на объем всего кристалла. Заменяя суммирование по элементарным ячейкам на интегрирование, получаем следующее



выражение для матричного элемента импульса при переходе электрона между подзонами, принадлежащими одной зоне:

$$p_{if}^{\alpha} = -i\hbar \int \Psi_i^* \frac{\partial \Psi_f}{\partial x_{\alpha}} d^3 \mathbf{r}.$$

Рассмотрим полупроводник с прямыми разрешенными переходами. В обычном трехмерном случае коэффициент межзонного оптического поглощения такого полупроводника описывается известной формулой [6]:

$$\alpha(\omega) \sim |p_{cv}|^2 \int d^3 \mathbf{k} \int d^3 \mathbf{k}' \delta \left( E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_h} - \hbar\omega \right) \int [\Psi_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r})]^{\dagger} \Psi_{\mathbf{k}}^e(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}, \quad (4.10)$$

где  $p_{cv}$  - межзонный матричный элемент импульса (начальное и конечное состояние принадлежит разным зонам - зоне проводимости и валентной);  $E_g$  - ширина запрещенной зоны; индексы  $e$  и  $h$  относятся соответственно к электронам и дыркам;  $\Psi_{\mathbf{k}}$  - огибающие волновые функции в приближении эффективной массы, представляющие собой плоские волны  $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ ;  $\delta(x)$  - дельта-функция Дирака.

Мы ограничимся рассмотрением систем типа тонкой пленки или квантовой ямы, в которых эффекты размерного квантования существуют как для электронов, так и для дырок. При этом компонента волнового вектора  $k_z$  уже не является хорошим квантовым числом и  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  перестает быть чисто плоской волной:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^e(\mathbf{r}) = e^{i(k_x x + k_y y)} \psi_n^e(z), \quad (4.11)$$

где  $\psi_n^e$  - волновая функция квантово-размерного уровня электронов (см., например, (1.2)) и  $\psi_m^h$  - аналогичная функция для дырок. В результате интегрирования по  $k$  и  $k'$  в (4.10) должно быть заменено на суммирование по номеру квантового уровня. Интегралы по  $dx$  и  $dy$  дают законы сохранения соответствующих компонент волнового вектора:  $\int \exp[i(k_x - k'_x)x] dx$  и окончательно

$$\alpha(\omega) = \alpha_0 \sum_{m,n} \int [\psi_m^h(z)]^{\dagger} \psi_n^e(z) dz \int \delta(E_g + E_n^e + E_m^h + \varepsilon - \hbar\omega) d\varepsilon, \quad (4.12)$$

где  $\alpha_0$  - константа, пропорциональная  $|p_{cv}|^2$ . Следует подчеркнуть, что, несмотря на резко анизотропный характер двумерных систем, коэффициент межзонного поглощения в них изотропен, т. е. не зависит от поляризации падающего света.

Формула (4.12) содержит интеграл  $\int [\psi_m^h(z)]^{\dagger} \psi_n^e(z) dz$ , определяющий правила отбора при межзонных переходах. Для бесконечно глубоких квантовых ям волновые функции (1.2) не содержат эффективной массы носителей и потому одинаковы для электронов и дырок. Поэтому в силу ортогональности волновых функций различных состояний данный интеграл отличен от нуля лишь при  $n = m$ . Для ям конечной глубины правила отбора по-прежнему могут существовать, хотя и не столь жесткие. Если потенциал ямы симметричен (например, для прямоугольной ямы), то функции характеризуются определенной четностью по  $z$ , будучи четными при нечетных  $n$  и нечетными - при четных. При этом интеграл заведомо обращается в нуль, если  $m$  и  $n$  имеют различную четность. Непременного равенства  $n = m$  здесь не требуется. В асимметричных ямах переходы возможны для любых  $m$  и  $n$ . Вместе с тем численные расчеты показывают, что при  $n=m$  интеграл почти всегда значительно меньше единицы. Поэтому в большинстве случаев можно приблизительно считать, что правило отбора для межзонных переходов  $n = m$  справедливо для любых ям.

Обсудим вид спектра поглощения в условиях данного правила отбора. Прежде всего отметим, что минимальная энергия поглощаемого фотона равна  $E_g + E_1^e + E_1^h$ , т. е. энергия края поглощения больше, чем в однородном полупроводнике, и растет с уменьшением ширины квантовой ямы. В интервале энергий фотона  $E_g + E_1^e + E_1^h < \hbar\omega < E_g + E_2^e + E_2^h$  коэффициент поглощения постоянен, а при  $\hbar\omega = E_g + E_2^e + E_2^h$  скачком увеличивается. В целом

$a(\omega)$  имеет ступенчатый вид со скачками при  $h\omega = E_g + E_n^e + E_n^h$ . Это есть отражение известного утверждения теории полупроводников о том, что при прямых разрешенных оптических переходах спектр поглощения воспроизводит функцию плотности состояний. Если правило отбора  $n = m$  не выполняется, то возникает дополнительное дробление  $a(\omega)$  на более мелкие ступеньки, отвечающие  $h\omega = E_g + E_n^e + E_m^h$  с  $n \neq m$ .

Сделанный вывод о виде спектра поглощения получен в идеализированной модели невзаимодействующих носителей. Экситонные эффекты могут заметно исказить ф). Во-первых, вблизи каждой ступеньки появляется серия экситонных пиков. Во-вторых, кулоновский потенциал электронно-дырочного взаимодействия не только создает дискретные связанные состояния, но и искажает плотность состояний в непрерывном спектре на расстоянии от края.

Строгое теоретическое рассмотрение [7] дает следующую формулу для спектра поглощения вблизи края с учетом экситонных эффектов:

$$\alpha(\omega) = \alpha_0 \left[ \sum_{i=1}^{\infty} \frac{4}{\left(i - \frac{1}{2}\right)^3} \delta \left( \Delta + \frac{1}{\left(i - \frac{1}{2}\right)^2} \right) + \Theta(\Delta) \frac{\exp(\pi/\sqrt{\Delta})}{\text{ch}(\pi/\sqrt{\Delta})} \right],$$

Свет с частотами, меньшими края межзонного поглощения, рассмотренного в предыдущем параграфе, может вызывать лишь переходы внутри энергетических зон. Такое внутризонное поглощение в отличие от межзонного существенно различно для света разной поляризации. Если свет падает по нормали к двумерному слою, то электрическое поле световой волны лежит в плоскости слоя, где электроны ведут себя как свободные. Поэтому свет с такой поляризацией испытывает лишь обычное поглощение на свободных носителях, существующее лишь в меру их рассеяния, имеющее небольшую величину и монотонную зависимость от частоты света.

Значительно более интересно поведение света, поляризованного перпендикулярно плоскости слоя. Такой свет может вызывать резонансное поглощение между уровнями размерного квантования. Наличие или отсутствие поглощения (правила отбора) и его относительная интенсивность определяются межуровневым матричным элементом импульса

$$P_{nm} = -i\hbar \int \Psi_m^*(z) \frac{d\Psi_n(z)}{dz} dz.$$

для симметричных квантовых ям правила отбора противоположны тем, что имеют место для межзонных переходов: межуровневые переходы возможны лишь между состояниями противоположной четности, иными словами, электроны с первого уровня могут переходить лишь на второй, четвертый и др., но не на третий или пятый. Если же яма не обладает свойством четности, как например в МДП-структуре или одиночном гетеропереходе, то оптические переходы могут происходить между любыми уровнями.

Из сказанного следует, что спектр внутризонного поглощения  $z$ -поляризованного света представляет собой ряд узких резонансных полос. Если в квантовой яме имеется  $N$  уровней и заполнен только нижний из них, то таких полос будет  $N-1$  в несимметричной и  $\text{mod}(N/2)$  в симметричной яме (функция  $\text{mod}(x)$  означает целую часть числа). В МДП-структурах наблюдают такое поглощение и проверяют его резонансный характер чаще всего не путем изменения частоты света  $\omega$ , а путем изменения напряжения на затворе при фиксированной  $\omega$ . При этом меняются энергетические зазоры между уровнями, определяемые величиной электрического поля затвора, и в какой-то момент для данной  $\omega$  реализуется условие резонанса.

*Кинетические эффекты в двумерных системах.*

Обсудим некоторые черты проводимости и других кинетических явлений в слое двумерного электронного газа. Поскольку в плоскости слоя носители ведут себя как свободные, их поведение в этой плоскости можно описать в рамках классического кинетического уравнения аналогично тому, как это делается для обычного трехмерного электронного газа. Отличие от трехмерного случая может возникнуть, во-первых, за счет иной плотности состояний в двумерной системе и, во-вторых, благодаря наличию в двумерных структурах некоторых специфических механизмов рассеяния, отсутствующих в трехмерном электронном газе.

Чтобы понять, как соотносятся между собой подвижности носителей в двумерном и трехмерном электронном газе, сопоставим между собой процессы рассеяния для обоих случаев. В свободном трехмерном газе волновые функции электронов представляют собой плоские волны. В двумерных системах рассеяние связано с изменением импульса в плоскости слоя, где волновые функции - также плоские волны. Поэтому для одного и того же потенциала рассеяния  $V(\mathbf{r})$  матричный элемент рассеяния  $M(\mathbf{q})$  ( $\mathbf{q}$  - переданный импульс) в дву- и трехмерном случаях будет одинаков.

Время релаксации  $\tau$ , определяющее подвижность носителей, связано с  $M(\mathbf{q})$  известной формулой [39]:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |M(\mathbf{q})|^2 \delta \left[ \frac{p^2}{2m} - \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{q})^2}{2m} \right] \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{p^2}.$$

Различие между дву- и трехмерными случаями состоит в том, что суммирование (т. е. интегрирование) в первом случае по двумерному, а во втором по трехмерному пространству возможных переданных импульсов  $\mathbf{q}$ .

Основное отличие от трехмерного случая здесь состоит в том, что рассеивающие центры зачастую располагаются не в плоскости двумерного газа, а на некотором расстоянии от нее. В МДП-структурах - это ионы так называемого встроенного заряда, неизменно существующего в оксиде, а в гетероструктурах с модулированным легированием - ионы легирующей примеси, намеренно удаленные от электронного газа. Поэтому подвижность здесь будет определяться не только концентрацией примеси, но и пространственным расположением ионов.

При рассмотрении рассеяния двумерных электронов на фононах чаще всего полагают, что фононный спектр системы остается таким же, как и в массивном полупроводнике. При рассеянии на акустических фононах  $s = 0$  и, кроме того,  $\mathbf{u}$  содержит дополнительный множитель  $T^l$ , отражающий температурную зависимость числа фононов в образце.

Сплавное рассеяние - этот своеобразный механизм имеет место только в полупроводниковых твердых растворах. Если взять микроскопический локальный объем в таком веществе, то за счет статистического характера распределения атомов веществ, образующих твердый раствор, отношение концентраций его компонент, т. е. локальный состав раствора в этом микрообъеме, может отличаться от среднего по образцу. Поскольку ширина запрещенной зоны  $E_g$  определяется составом твердого раствора, то в образце возникают флуктуации  $E_g$  и, следовательно, случайный потенциал, модулирующий энергетические зоны. Этот потенциал и вызывает дополнительное рассеяние носителей.

Рассеяние на стенках квантовой ямы - данный механизм рассеяния обусловлен неидеальностью потенциальных стенок, ограничивающих движение носителей в квантовой яме. Роль таких стенок в тонких пленках играют внешние поверхности пленки, в МДП-структурах - граница полупроводник-диэлектрик, а в гетероструктурах - граница узкозонного и широкозонного полупроводников. Если указанные границы не являются идеальными плоскостями, а содержат шероховатости, то отражение носителей от них не является абсолютно зеркальным и приводит к частичной потере направленного импульса носителей, т. е. вызывает релаксацию импульса.

*Применение квантово-размерных структур в приборах микро- и нанoeлектроники.*

Специфические электронные свойства низкоразмерных систем открывают широкую перспективу для создания на их основе новых типов полупроводниковых приборов. Самым распространенным типом полупроводникового лазера является лазер на двойной гетероструктуре, где активная область представляет собой тонкий слой узкозонного полупроводника между двумя широкозонными. При достаточно малой толщине активной области она начинает вести себя как квантовая яма и квантование энергетического спектра в ней существенно меняет свойства лазеров.

Основное влияние на свойства лазеров оказывает изменение плотности состояний, происходящее под влиянием размерного квантования. Если в массивном полупроводнике в непосредственной близости от края зоны эта величина мала, то в квантово-размерной системе она не убывает вблизи края. Благодаря этому факту условия создания инверсной населенности в двумерных системах оказываются более благоприятными, чем в трехмерных. Это привело к конкретным практическим результатам. Создание лазеров с квантово-размерной активной областью позволило получить непрерывную генерацию при комнатной температуре и в дальнейшем снизить пороговый ток инжекционного лазера до рекордно низких значений, составляющих к настоящему моменту величину порядка  $50 \text{ А/см}^2$ . Благодаря иной энергетической зависимости плотности состояний меняется не только величина порогового тока, но и его температурная зависимость. Она становится более слабой, в силу чего непрерывную генерацию удается получить не только при комнатной температуре, но и при температурах на много десятков градусов выше. Другой важной особенностью лазеров на квантовых ямах является возможность их частотной перестройки. Она меняется при изменении ширины квантовой ямы  $L$ , т. е. путем изменения  $L$  можно осуществлять перестройку частоты генерации, сдвигая ее в коротковолновую сторону по сравнению с лазерами с широкой (классической) активной областью. В квантовых точках энергетический спектр меняется еще более радикально, чем в квантовых ямах.

Структуры с квантовыми ямами могут использоваться не только для генерации, но и для модуляции светового излучения из области межзонного оптического поглощения. Физической основой эффекта модуляции являются два следующих экспериментальных факта:

- а) в структурах с квантовыми ямами существуют резкие линии экситонного поглощения, имеющие значительно большую интенсивность, чем в однородных полупроводниках, и наблюдаемые не только при низких, но и при комнатных температурах;
- б) спектральное положение линий заметно сдвигается при приложении сильного электрического поля перпендикулярно слоям гетероструктуры.

Практический интерес представляют структуры, содержащие не однотипные слои, а так называемые *pi*-сверхрешетки. Это периодическая последовательность чередующихся  $\delta$ -слоев  $n$ - и  $p$ -типа проводимости. Если концентрация примесей в  $n$ - и  $p$ -слоях одинакова, то система в равновесии может вообще не содержать свободных носителей. Возможности практического применения таких сверхрешеточных структур в качестве фоточувствительных элементов обусловлены двумя их основными отличиями от однородных полупроводников: длинноволновым сдвигом края фоточувствительности и очень большим временем жизни фотовозбужденных носителей.

Процессы оптической ионизации квантовых ям могут использоваться для создания новых типов приемников инфракрасного излучения. Принцип приемника весьма прост: выброс носителей в зону проводимости широкозонного полупроводника (потенциального барьера) увеличивает проводимость в направлении, перпендикулярном слоям гетероструктуры. По своему действию такой приемник напоминает примесный фоторезистор, где в роли центров выступают квантовые ямы. Поэтому в качестве времени жизни неравновесных носителей — важнейшей характеристики фоточувствительного материала — выступает характерное время захвата в квантовую яму.

Лавинные фотодиоды представляют собой фоточувствительные приборы с внутренним усилением, позволяющие получить высокую чувствительность. Основным их

недостатком является то, что с лавинным умножением связан дополнительный шум, ограничивающий возможность детектирования слабых сигналов. Уже давно установлено, что для получения низкого уровня шума при большом внутреннем усилении необходимо, чтобы коэффициенты ударной ионизации электронов  $\alpha$  и дырок  $\beta$  резко различались между собой.

### 3 Методические указания (рекомендации)

#### 3.1 Методические указания для преподавателей

Дисциплина «Физика конденсированного состояния» относится к разделу «Теоретическая физика» общепрофессионального цикла. Для изучения дисциплины предусмотрена аудиторная и самостоятельная формы работы.

В пунктах 3 и 5 рабочей программы приведены формы текущего, итогового контроля и форма самостоятельной работы. К аудиторным видам работы относятся лекции.

На лекциях излагается основной материал по темам дисциплины. Подготовка лекции непосредственно начинается с разработки структуры рабочего лекционного курса по конкретной дисциплине. Количество лекций определяется с учетом общего количества часов, отведенных для лекционной работы.

Структура лекционного курса обычно включает в себя вступительную, основную и заключительную части. После определения структуры лекционного курса по темам можно приступить к подготовке той или иной конкретной лекции.

Методика работы над лекцией предполагает примерно следующие этапы:

- выяснение того, что и в каком объеме было изучено студентами ранее по родственным дисциплинам;
- определение места изучаемой дисциплины в учебном процессе подготовки специалиста;
- отбор материала для лекции;
- определение объема и содержания лекции;
- выбор последовательности и логики изложения, составление плана лекции;
- подбор иллюстративного материала;
- выработка манеры чтения лекции.

Отбор материала для лекции определяется ее темой. Следует тщательно ознакомиться с содержанием темы в базовой учебной литературе, которой пользуются студенты. Выяснить, какие аспекты изучаемой проблемы хорошо изложены, какие данные устарели и требуют корректировки. Следует определить вопросы, выносимые на лекцию, обдумать обобщения, которые необходимо сделать, выделить спорные взгляды и четко сформировать свою точку зрения на них.

Определение объема и содержания лекции – ещё один важный этап подготовки лекции, определяющий темп изложения материала. Это обусловлено ограниченностью временных рамок, определяющих учебные часы на каждую дисциплину. Не рекомендуется идти по пути планирования чтения на лекциях всего предусмотренного программой материала в ущерб полноте изложения основных вопросов. Лекция должна содержать столько информации, сколько может быть усвоено аудиторией в отведенное время. Лекцию нужно разгружать от части материала, переносить его на самостоятельное изучение. Самостоятельно изученный студентами материал, наряду с лекционным, выносится на экзамен. Если лекция будет прекрасно подготовлена, но перегружена фактическим (статистическим, и т.п.) материалом, то она будет малоэффективной и не достигнет поставленной цели.

Кроме того, при выборе объема лекции необходимо учитывать возможность «среднего» студента записать ту информацию, которую он должен обязательно усвоить. Приступая к решению вопроса об объеме и содержании лекции, следует учитывать ряд особенных, специфических черт этого вида занятия, в том числе и дидактическую характеристику лекции. Лекция входит органичной частью в систему учебных занятий и должна быть содержательно увязана с их комплексом, с характером учебной дисциплины, а также с образовательными возможностями других форм обучения.

Содержание лекции должно отвечать ряду дидактических принципов. Основными из них являются: целостность, научность, доступность, систематичность и наглядность.

После определения объёма и содержания лекции, необходимо с современных позиций проанализировать состояние проблемы, изложенной в учебных материалах, и составить расширенный план лекции.

В учебном плане по каждой дисциплине имеется графа «Самостоятельная работа» с указанием количества часов, отведенных на эту работу. В рабочей программе дисциплины предусмотрен раздел «Самостоятельная работа», в котором должны быть изложены:

1. Количество часов, выделенных в учебном плане на самостоятельную работу.
2. Число заданий на самостоятельную работу, которое студент должен выполнить в процессе изучения дисциплины.
3. Краткое содержание каждого задания.
4. Сроки и формы промежуточного контроля по выполненным заданиям.

Все виды самостоятельной работы, предусмотренные в рабочей программе по каждой дисциплине, должны быть обеспечены методическими указаниями, являющимися неотъемлемой частью методического обеспечения читаемой дисциплины.

К видам самостоятельной работы в пределах данной дисциплины относятся:

- 1) написание конспектов по темам, прочитанных на лекциях в краткой форме,
- 2) подготовка к зачету по дисциплине.

В процессе накопления опыта проведения самостоятельной работы возможно появление и других её видов, не входящих в вышеприведённый перечень.

Критериями оценки результатов работы студентов в течение студента являются: уровень освоения студентом учебного материала, умения студента использовать теоретические знания при выполнении практических задач, обосновать четкость изложения ответов. По окончании курса студенты обязаны сдать зачет и экзамен. Сроки проведения итогового контроля устанавливается графиком учебного процесса. При проведении итогового контроля по дисциплине преподаватель должен оценить уровень сформированности у студентов умений и навыков при освоении программы дисциплины.

### **3.2 Методические указания для студентов**

В процессе изучения лекционного материала рекомендуется использовать не только опорные конспекты, но и учебники и учебные пособия. Перед каждой лекцией рекомендуется просмотреть материал по предыдущей лекции.

Самостоятельная работа студентов – это процесс активного, целенаправленного приобретения студентом новых для него знаний и умений без непосредственного участия преподавателей. Самостоятельная работа сопровождается эффективным контролем и оценкой ее результатов.

Предметно и содержательно самостоятельная работа определяется государственным образовательным стандартом, действующим учебным планом, рабочей программой дисциплины, средствами обеспечения самостоятельной работы.

Самостоятельная работа – это важнейшая часть любого образования. Для студента она начинается с первых дней учебы в высшем учебном заведении. Это работа, которую за него никто не в состоянии выполнить и обязанность преподавателя – научить студента самостоятельно трудиться, самостоятельно пополнять запас знаний.

Для успешной самостоятельной работы студент должен планировать свое время и за основу рекомендуется брать рабочую программу учебной дисциплины.

#### Самостоятельная работа студента при подготовке и изучению лекционного материала.

После прослушивания лекции необходимо проработать и осмыслить полученный материал. Умение слушать, творчески воспринимать излагаемый материал – это необходимое условие для его понимания. Внимательное слушание требует умственного напряжения, волевых усилий. В процессе лекционного занятия необходимо выделять важные моменты, выводы, анализировать основные положения. Если при изложении

материала преподавателем создана проблемная ситуация, пытаться предугадать дальнейший ход рассуждений. Это способствует лучшему усвоению материала лекции и облегчает запоминание отдельных выводов. Из сказанного следует, что для более прочного усвоения знаний лекцию необходимо конспектировать.

Конспект лекций должен быть в отдельной тетради. Не надо стремиться подробно слово в слово записывать всю лекцию. Конспектируйте только самое важное в рассматриваемом параграфе: формулировки определений и законов, выводы основных уравнений и формул, то, что старается выделить лектор, на чем акцентирует внимание студентов. Старайтесь отфильтровывать и сжимать подаваемый материал. Более подробно записывайте основную информацию и кратко – дополнительную. Не нужно просить лектора несколько раз повторять одну и ту же фразу для того, чтобы успеть записать. По возможности записи ведите своими словами, своими формулировками. Лекция не должна превращаться в своеобразный урок-диктант. Поскольку в этом случае вы не учитесь мыслить и анализировать услышанное и лекция превращается в механический процесс.

Тетрадь для конспекта лекций также требует особого внимания. Ее нужно сделать удобной, практичной и полезной, ведь именно она является основным информативным источником при подготовке к различным отчетным занятиям, зачетам, экзаменам. Целесообразно отделить поля, где можно бы изложить свои мысли, вопросы, появившиеся в ходе лекции. Полезно одну из страниц оставлять свободной. Она потребует потом, при самостоятельной подготовке. Сюда можно будет занести дополнительную информацию по данной теме, полученную из других источников: чертежи и рисунки, схемы и графики, цитаты и биографии выдающихся ученых и т.д. Таким образом, на лекции студент должен совместить два момента: внимательно слушать лектора, прикладывая максимум усилий для понимания излагаемого материала и одновременно вести его осмысленную запись.

Рабочей программой дисциплины предусматривается самостоятельное изучение определенных тем, приведенных в пункте 7.3, и их конспектирование. При составлении конспектов можно пользоваться теми же принципами, что при написании лектора. Не нужно полнотекстовое копирование, научитесь в процессе конспектирования разбивать текст на смысловые части и заменять их содержание короткими фразами и формулировками.



#### 4. Контроль знаний.

Контроль знаний, умений и навыков студентов по изучению дисциплины осуществляется на уровне текущего и итогового контроля.

##### 4.1 Текущий контроль знаний

Текущий контроль успеваемости проводится с целью повышения качества и прочности знаний, проверки процесса и результатов усвоения учебного материала. Текущий контроль успеваемости проводится в течении семестра и предполагает вставление каждому студенту отметок, оценивающих выполнение им всех видов работ, предусмотренных учебной программой дисциплины.

Текущий контроль осуществляется при работе на лекциях, при выполнении заданий для самостоятельной работы.

##### Темы конспектов на самостоятельное изучение

###### *Модуль 1 «Состояния электронов в кристаллической решетке»*

Классификация твердых тел на основе энергетического спектра их электронных состояний. Изоэнергетические поверхности. Квантование движения электрона в зоне проводимости при наличии магнитного поля. Примеси и примесные уровни. Дефекты. Плотность электронных состояний в шкале энергий.

###### *Модуль 3 «Квазичастицы и механизмы их возникновения в твердых телах»*

Акустические и оптические фононы в молекулярных и ионных кристаллах. Элементарная теория взаимодействия света с фононами.

###### *Модуль 4 «Конденсация бозонов. Сверхтекучесть»*

Элементарная теория взаимодействия света с фононами. Кинетические явления в сверхтекучей жидкости.

###### *Модуль 5 «Оптические свойства твердых тел»*

Рассеяние света и люминесценция кристаллов. Прохождение света через кристаллы.

###### *Модуль 6 «Поверхностные состояния электронов. Состояния электронов в структурах с пониженной размерностью»*

Оптика квантово-размерных структур. Кинетические эффекты в двумерных системах. Применение квантово-размерных структур в приборах микро- и нанoeлектроники. Свободные и связанные электроны.

##### 4.2 Итоговый контроль знаний

К итоговой форме контроля, проводимой по данной дисциплине, является зачет. Примерные зачетные вопросы представлены в рабочей программы дисциплины.

##### Примерный зачетный билет

Амурский государственный университет

Утверждаю

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Факультет ИФ

ФКС

Зачет 7 семестр

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

##### Билет № 1

1. Зоны Бриллюэна, энергетические зоны.
2. Электрон-фононное взаимодействие в кристаллах. Полярон Фрелиха.

## **5. Интерактивные технологии и инновационные методы, используемые в образовательном процессе.**

При преподавании дисциплины используется технология модульного обучения. Дисциплина разделена на 5 модулей, исходя из того, что модуль, его оптимальный объем логически соответствует завершеному разделу учебной дисциплины. При этом в соответствии с целевым назначением модули являются смешанными, т.е. соединяют в себе познавательные и операционные функции. В модуле излагается принципиально важное содержание учебной информации, дается разъяснение к этой информации, определяются условия погружения в информацию (с помощью средств ТСО, конкретных литературных источников, методов добывания информации). Для достижения поставленной цели применяются объяснительно-иллюстративные, проблемные, поисковые, активные и интерактивные технологии. При чтении лекций по данной дисциплине используется такой неимитационный метод активного обучения, как «Проблемная лекция».