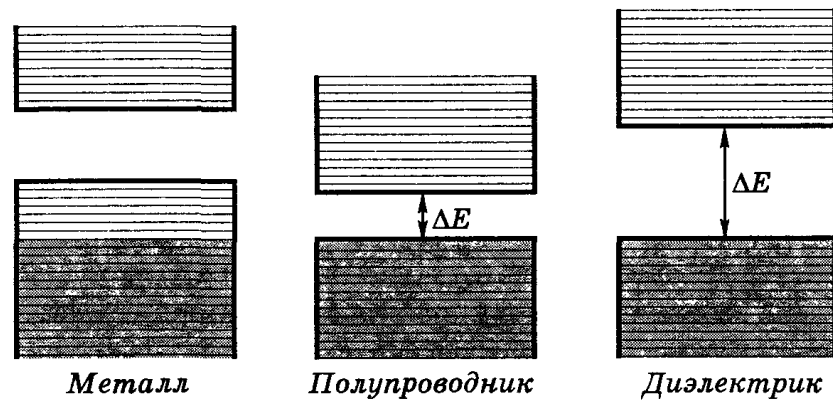
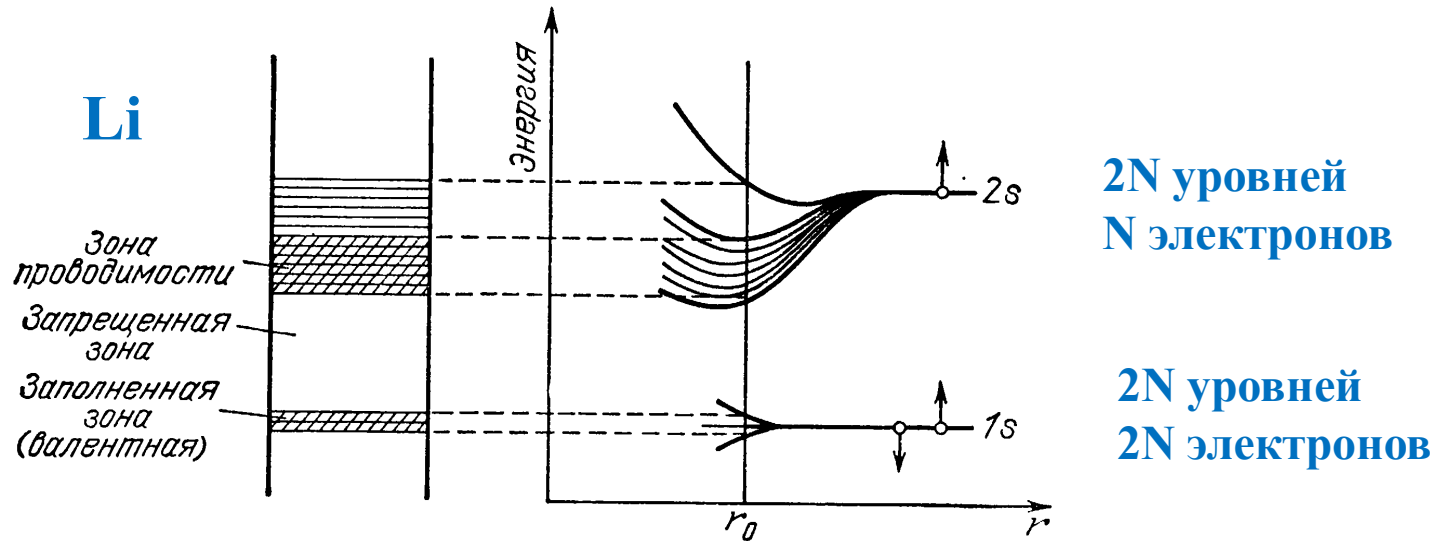


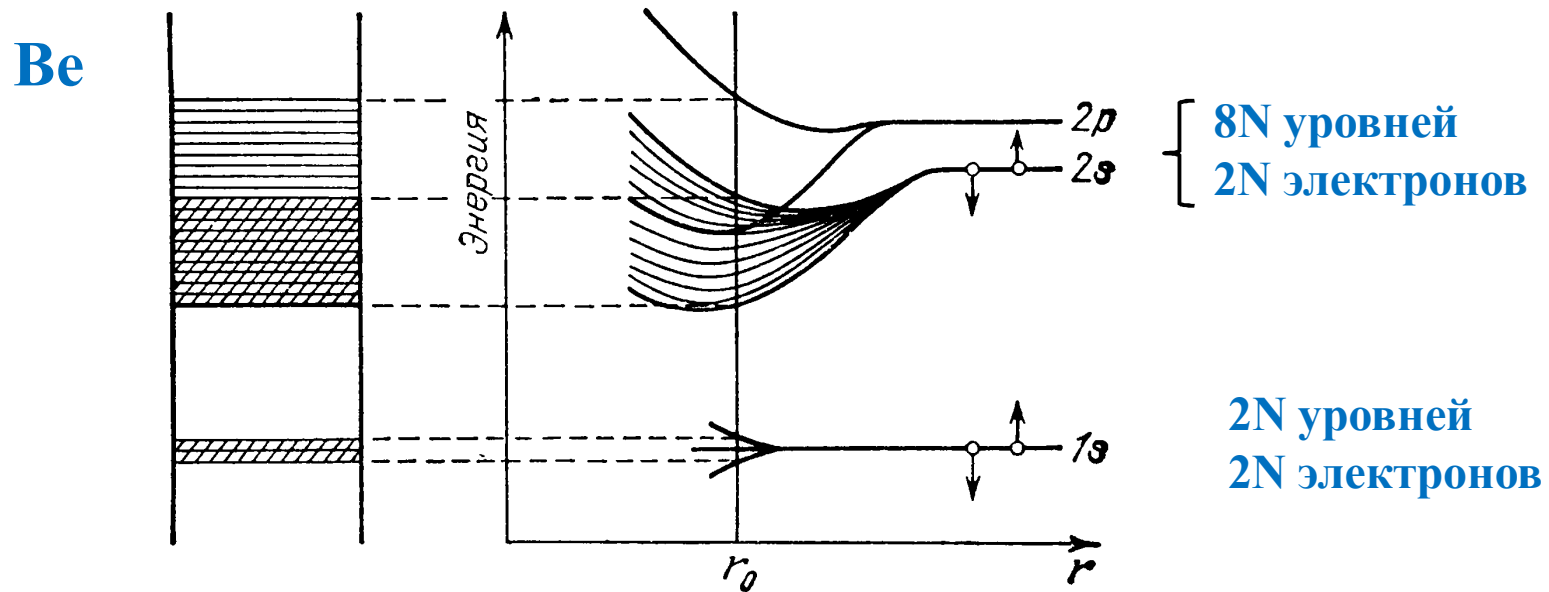
Энергетические зоны в кристаллах

Одновалентные атомы: Li, Na, K, Cu ... - проводники



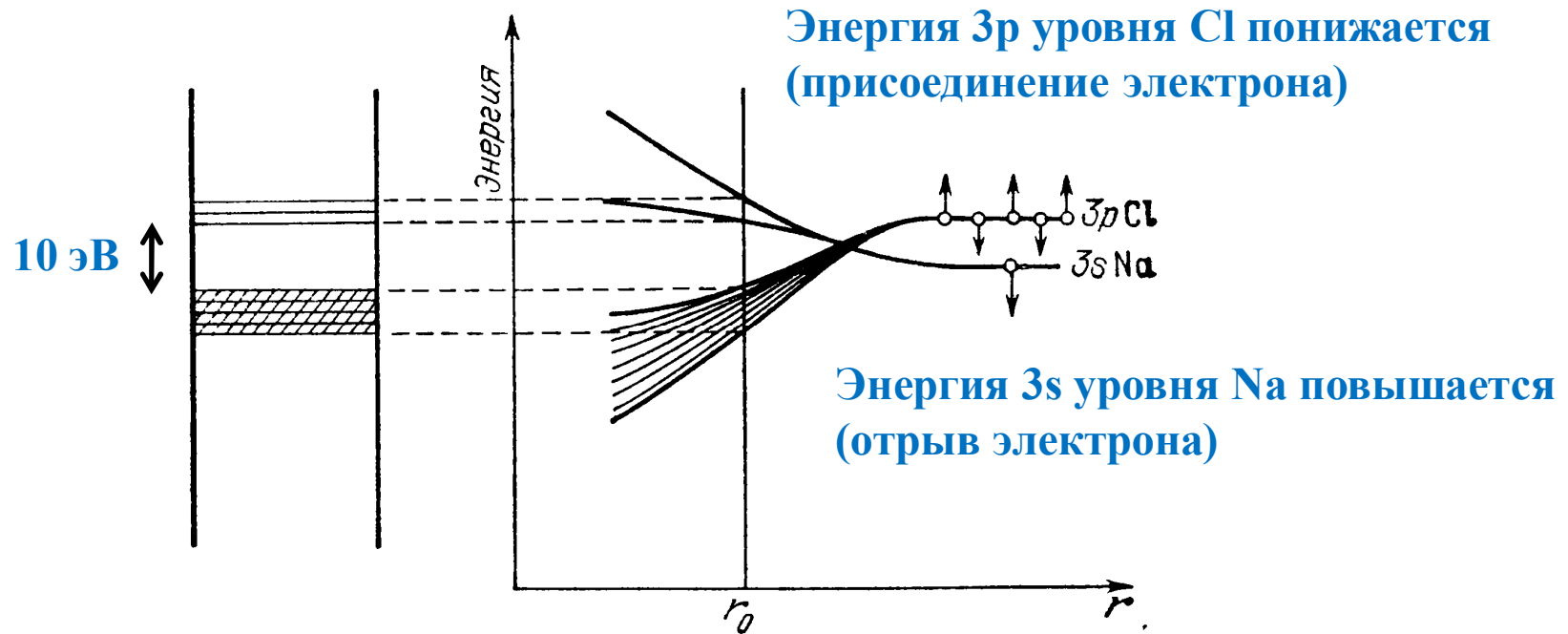
Энергетические зоны в кристаллах

Двухвалентные атомы: Be, Mg, Zn ... - проводники



Be: 2s зона заполнена, но перекрывается с 2p

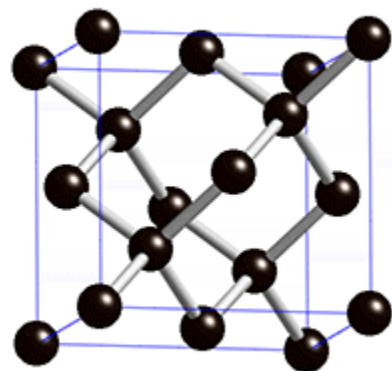
Энергетические зоны в кристаллах



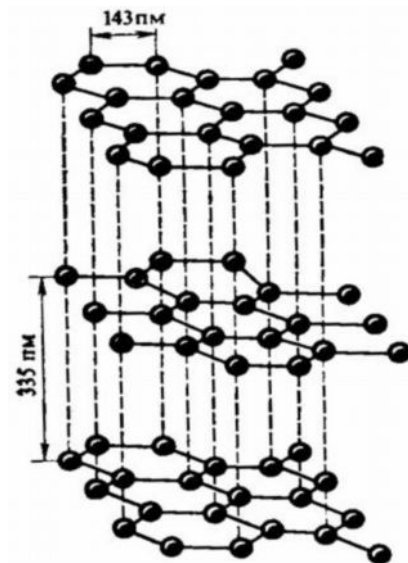
NaCl - изолятор

Моделирование: Band Structure

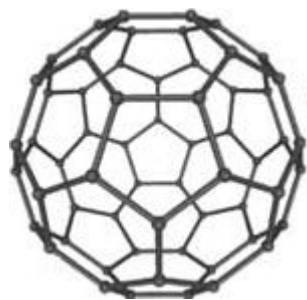
Кристаллическая структура твердых тел



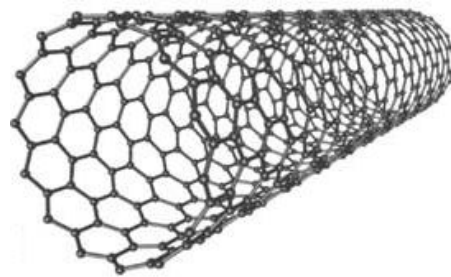
Алмаз



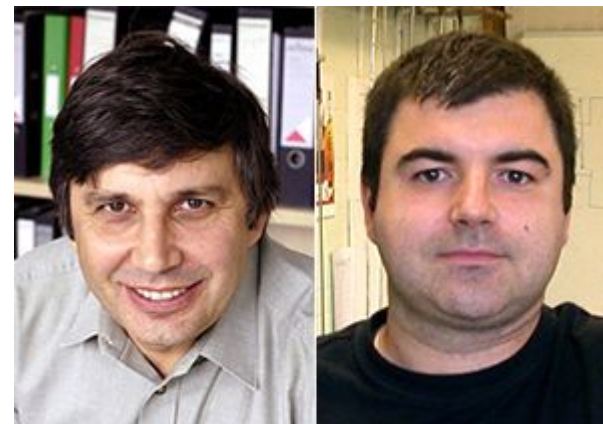
Графит



Фуллерен C₆₀

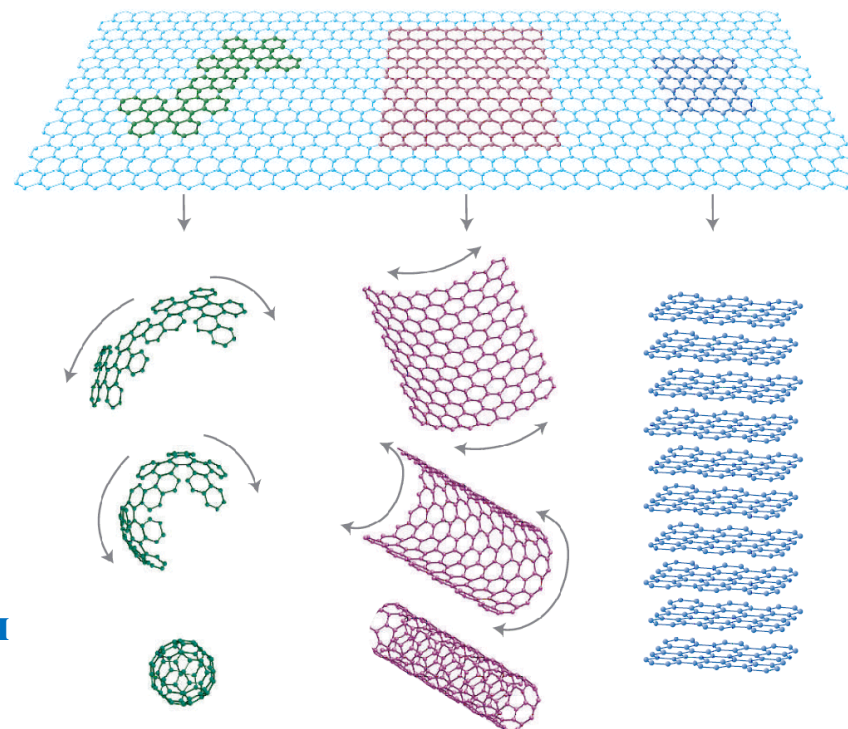


Одностенная углеродная
нанотрубка



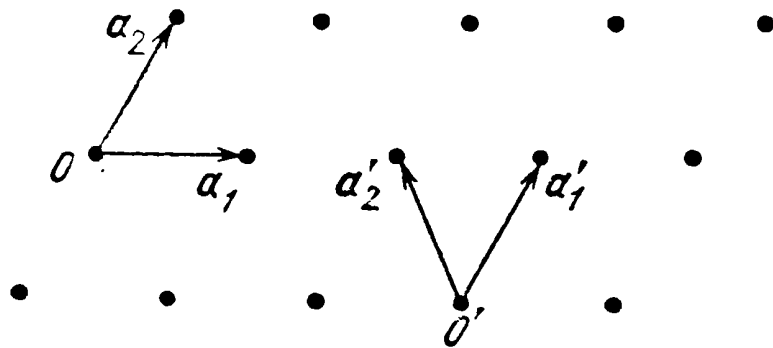
Лауреаты Нобелевской премии по физике за
2010 год Андрей Гейм (слева) и Константин
Новосёлов. Фото с сайта nobelprize.org

Графен



Кристаллическая структура ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Теорема Блоха



Волновая функция должна удовлетворять условию периодичности

$$\psi_k(x + a) = \exp(ika)\psi_k(x)$$

Волновой вектор k и импульс $\hbar k$ определены неоднозначно

$$k = k + \frac{2\pi n}{a}$$

Кристаллическую решетку можно построить трансляцией элементарной ячейки

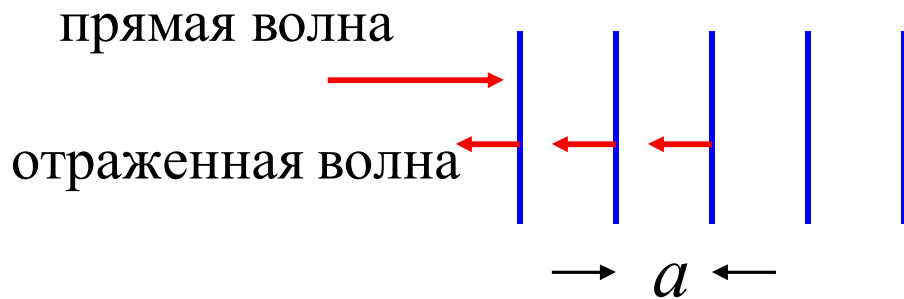
Различные состояния при

(Первая зона Бриллюэна)

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

Откуда берутся запрещенные зоны?

Рассеяние волны блоховского электрона



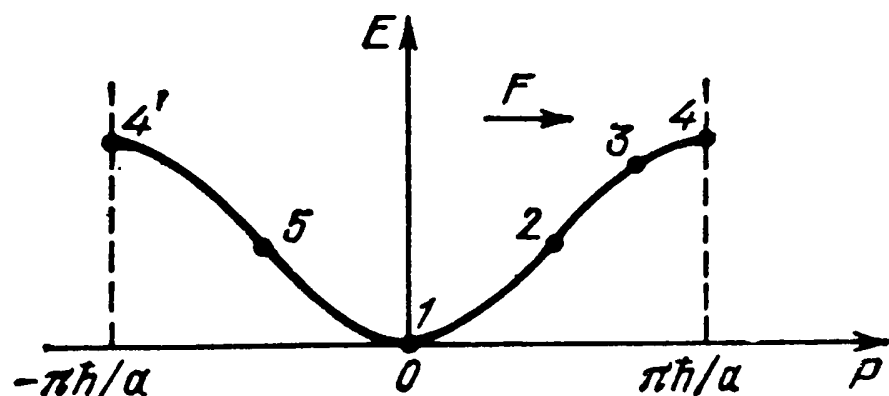
Условие сильного рассеяния:

$$2a = \lambda_n n \quad \Rightarrow \quad a = \frac{\lambda_n}{2} n$$

$$\Rightarrow k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{2\pi}{2a} n = \frac{\pi}{a} n \quad \Rightarrow \quad k_n = \frac{\pi}{a} n \quad \Rightarrow \quad p_n = \frac{\pi}{a} \hbar n$$

Из решения УШ следует существование областей частот, с которыми блоховские волны могут распространяться (разрешенные зоны) и не могут распространяться (запрещенные зоны)

$$\omega = \omega(k) \quad \text{или} \quad \boxed{E = E(p)} \quad \text{вместо} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

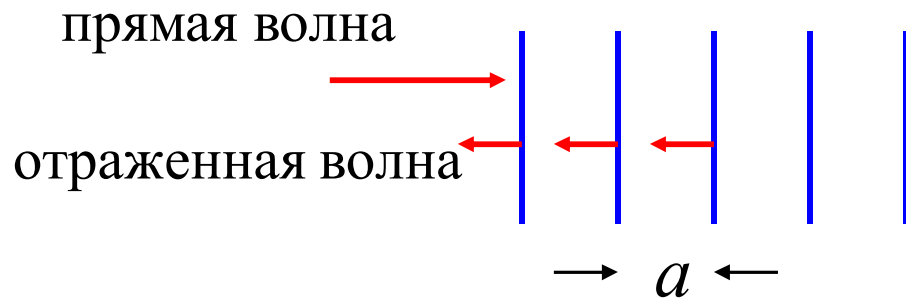


$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE(p)}{dp}$$

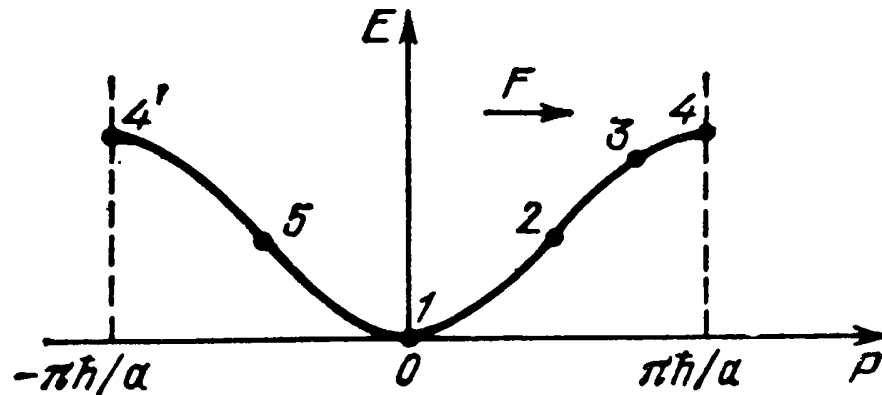
$$E = \frac{p^2}{2m^*} \quad m^* \frac{dv_{gr}}{dt} = F$$

$$\left\{ \frac{1}{m^*} \right\}_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}$$

Процесс переброса импульса электрона



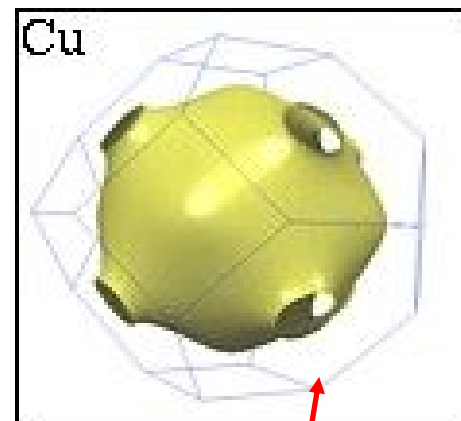
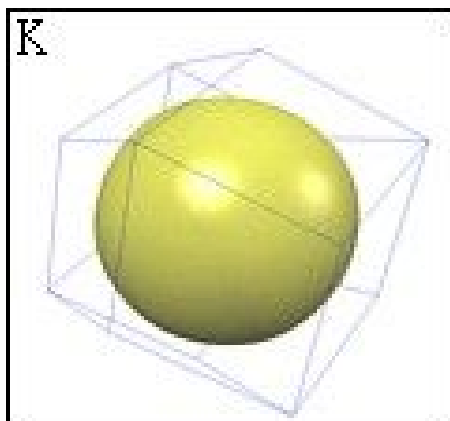
$$p_n = \frac{\pi}{a} \hbar n$$



$$\vec{p}' = -\frac{\pi}{a} \hbar \quad \vec{p} = \frac{\pi}{a} \hbar$$

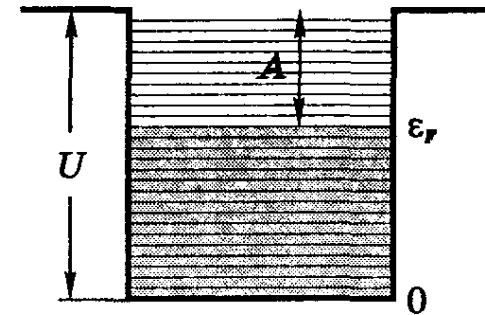
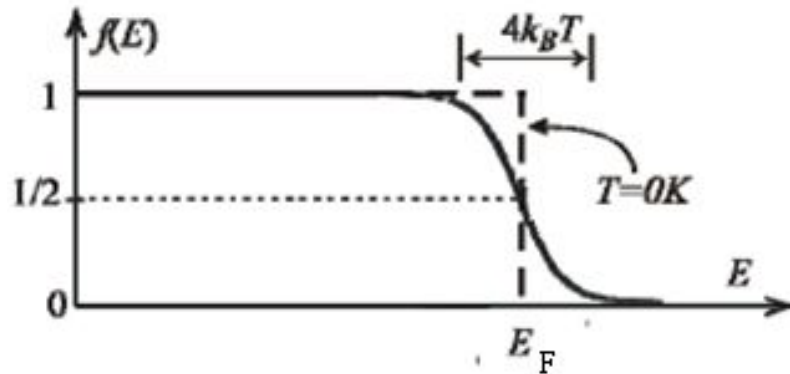
$$\vec{p} - \vec{p}' = \frac{2\pi}{a} \hbar = b\hbar$$

Процесс переброса



Зона Бриллюэна

Распределение электронов при $T \neq 0$



$$E_F \sim 5\text{эВ} \gg kT = 0.025\text{эВ}$$

Электропроводность металлов

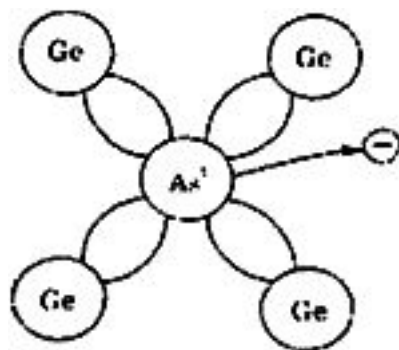
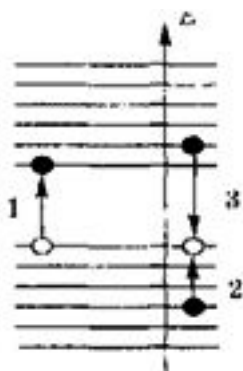
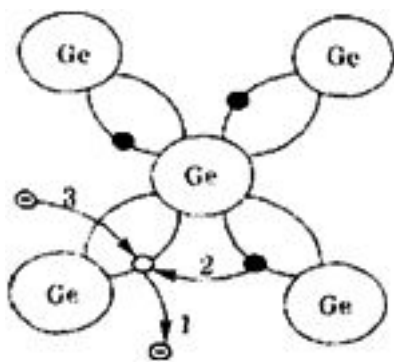
- *Электронный газ сильно вырожден при любых температурах*
- *Только электроны в области $\sim kT$ (вблизи поверхности Ферми) могут перераспределяться при различных физических процессах*

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

Моделирование: Conductivity

Электропроводность полупроводников

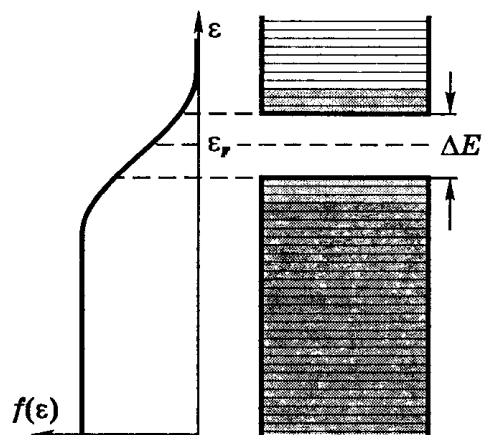


Примесная n-типа

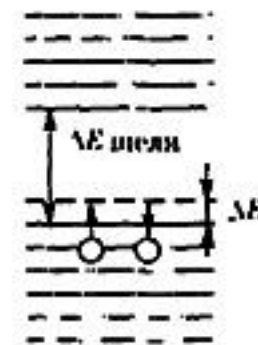
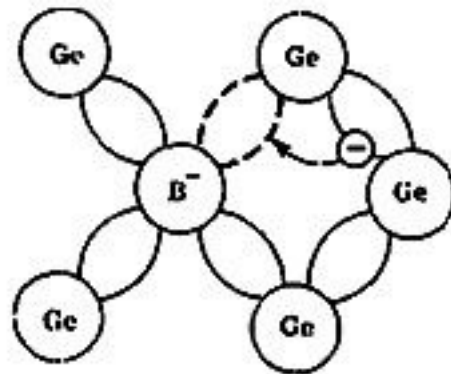
$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

$$f(E) \sim e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$$

$$\sigma \sim e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$$



Собственная



Примесная p-типа

Полупроводниковые гетероструктуры

