

ФИЗИКАНЫҢ ӘДІСТЕМЕСІ

МЕТОДИКА ФИЗИКИ

УДК 378:621.1(574)

К.Т.Ермаганбетов, Л.В.Чиркова

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова

К МЕТОДИКЕ ИЗЛОЖЕНИЯ ТЕМЫ: «ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ» В СПЕЦКУРСАХ СПЕЦИАЛЬНОСТИ «ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

«Техникалық физика» мамандығы бойынша оқылатын арнайы курстарда жартылайөткізгіштер физикасы олардан жасалған құралдардың жұмыс істеу негіздерінде жатқан физикалық құбылыстар қарастырылады. Мақалада шалаөткізгіштерден жасалатын құралдардың сипаттамаларын алдын ала болжау, есептеу үшін қажет болатын шалаөткізгіштердегі электрондардың энергия спектрінің ерекшеліктерін баяндау әдістемесі келтірілген. Энергия спектрінің максимумдары мен минимумдарында энергияның импульске тәуелділігі квадратты функция болатындығы шалаөткізгіштерден жасалатын құралдардың қасиеттерін алдын ала болжай алу мүмкіндігін тудыратындығы көрсетілген.

Some special courses of specialty «Technical Physics» are foreseeing the study of basis of physics semiconductor's and principle of function semiconductor apparatus. In order to understand the physic function of semiconductor's apparatus and the possibility of pretinary an estimation their characters is necessary the knowledge of energetic spectrum of charge is semiconductor. The method of account the peculiarities of energetic spectrum of charges in semiconductors in externals points. It is necessary to estimation the observed parameters of semiconductor apparatus in this article. The spectrum of bearer charges for extreme points is described quadratic dependence of energy from impulse are proved. It is allow the turn into from space of "kvazy" impulse to energetic space. It is lighten the calculation some parameters of semiconductor apparatus.

Функционирование полупроводниковых и оптоэлектронных приборов, логических элементов цифровой электроники основано на особенностях физических процессов в полупроводниках, обусловленных их энергетической структурой и энергетическим спектром носителей заряда. Поэтому знание последнего необходимо для глубокого понимания учащимися сущности и принципов работы конкретных полупроводниковых приборов.

В связи с этим при чтении таких лекционных курсов, как «Физическая электроника», «Физика полупроводниковых приборов», «Полупроводниковая электроника», «Основы оптоэлектроники» и ряда других, предусмотренных учебным планом специальности «Техническая физика» (специализация «Радиофизика и электроника»), важное значение приобретает методика изложения учебного материала по теме «Энергетический спектр электронов в полупроводниках».

Исходя из многолетнего опыта чтения лекций по указанным дисциплинам авторы предлагают следующий порядок изложения учебного материала по данной теме:

- обоснование необходимости рассмотрения темы, т.е. нужно ответить на вопрос «Зачем нужно знание энергетического спектра электронов в полупроводниках?»;
- формулировка задачи и основные этапы и пути её решения;
- анализ трудностей, возникающих при решении рассматриваемой задачи;
- необходимость демонстрации обучающимся возможности использования особенностей свойств объекта исследования (в рассматриваемом случае это то, что полупроводниковый кристалл можно рассматривать как систему, во-первых, состоящую из двух подсистем — подсистемы

тем электронов и подсистем ядер; а во-вторых, обладающей определенной симметрией) для решения рассматриваемой задачи;

– решение задачи и формулирование выводов.

В качестве одного из ярких примеров при обосновании необходимости изучения энергетического спектра полупроводников можно привести принцип функционирования генератора Ганна. Элементы на основе эффекта Ганна перспективны при разработке интегральных модулей маломощных передатчиков и приемников. Они позволяют создавать генераторы и усилители СВЧ, а также такие функциональные устройства, как импульсно-кодовые модуляторы, компараторы, аналого-цифровые преобразователи, нейристорные линии задержки, полный ряд логических элементов, генераторы колебаний сложной формы, регистры сдвига и др.

Принцип действия генератора Ганна, как известно [1–3], заключается в следующем. Энергетическая диаграмма AsGa-го полупроводника, построенная в пространстве квазиимпульсов (в \vec{k} -пространстве), имеет несколько минимумов (рис. 1). В зоне проводимости, кроме центральной долины с минимумом энергии, соответствующем нулевому значению волнового вектора $\vec{k} = 0$, имеются еще боковые долины, у которых минимумы энергии выше центрального на величину ΔE_g . Эффективные массы электронов в энергетических минимумах долин существенно различаются. Электроны, находящиеся на энергетических уровнях центрального минимума, называются легкими ($m_1^* = 0,072m_0$, где m_0 — масса свободного электрона; m^* — его эффективная масса), а электроны, расположенные в боковых минимумах, — тяжелыми ($m_2^* = 1,2m_0$). Так как подвижность носителей заряда определяется соотношением $\mu = \frac{q}{m^*} \langle \tau \rangle$, т.е. обратно пропорциональна m^* , то легкие электроны имеют высокую подвижность ($\mu_1 \approx (5-8)10^3 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$), а тяжелые — низкую ($\mu_2 \approx 100 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$).

При малых напряженностях электрического поля в полупроводнике все электроны находятся в нижнем центральном энергетическом минимуме, и плотность тока через полупроводник определяется выражением

$$j_1 = qn\mu_1 E. \quad (1)$$

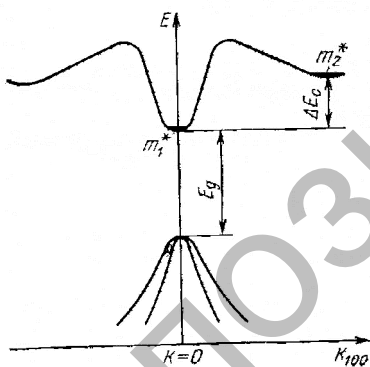


Рис. 1. Структура энергетических зон арсенид галлия в кристаллографическом направлении [100] [1]

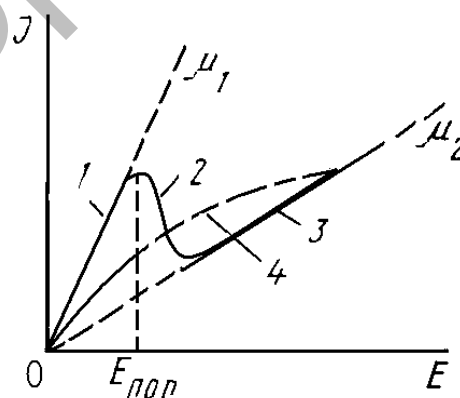


Рис. 2. Зависимость плотности тока от напряженности электрического поля [4, 5]: 1 — при наличии электронов только с большой подвижностью μ_1 (в центральной долине); 2 — переходной участок; 3 — при наличии электронов только с малой подвижностью $\mu_2 \ll \mu_1$ (в боковой долине); 4 — при наличии в кристалле локальных напряженностей, отличных от средней напряженности электрического поля

С ростом напряженности электрического поля, как только у части электронов появится энергия больше ΔE_g , они смогут перейти в боковой минимум с малой подвижностью. Напряженность поля $E_{пор}$, при которой начинается такой переход, называют пороговой. При достижении напряженности электрического поля E_0 все электроны перейдут в боковой минимум, и плотность тока будет определяться выражением $j_2 = qn\mu_2 E_0$. Если выполняется неравенство $\mu_1 E_{пор} > \mu_2 E_0$, то, соответственно,

$j_1 > j_2$, и с ростом E от $E_{\text{пор}}$ до E_0 произойдет уменьшение тока через полупроводник. Это означает, что на вольт-амперной характеристике появится участок с отрицательной дифференциальной проводимостью.

График зависимости плотности тока через полупроводниковый кристалл AsGa от напряженности электрического поля, приложенного в кристалле вдоль направления $[100]$, представлен на рисунке 2.

Наличие на вольт-амперной характеристике полупроводника AsGa участка с отрицательной дифференциальной проводимостью, обусловленного особенностью энергетического спектра электронов, и является физической основой функционирования генератора Ганна.

Таким образом, особенности энергетического спектра электронов в полупроводниковых кристаллах могут служить физической основой функционирования полупроводниковых приборов.

Следовательно, знание энергетического спектра носителей заряда в полупроводниках и их особенностей позволяет разработать физическую основу функционирования полупроводниковых приборов. Поэтому задача «определение и расчет энергетического спектра носителей заряда» имеет первостепенное значение для решения и практических и теоретических задач.

В связи с этим возникает задача «научить обучающихся методам расчета энергетического спектра носителей заряда в полупроводниках».

Обучающимся необходимо объяснить, что для расчета энергетического спектра должны использовать многочастичное уравнение Шредингера, описывающее движение электронов и ядер полупроводникового кристалла.

Далее, совместно с учащимися следует рассмотреть способ составления и методы решения уравнения Шредингера для электронов в полупроводниках.

Основные проблемы и трудности, возникающие при решении уравнения Шредингера для электронов в кристалле, как известно, состоят прежде всего в наличии в уравнении большого количества независимых переменных; а также скрещенных (перекрестных) произведений независимых переменных типа xy, xz, yz , что не позволяет использовать метод разделения переменных при решении дифференциального уравнения многих переменных.

В основном приближения, используемые для решения уравнения Шредингера, подразделяются на приближения, связанные с особенностями объекта исследования (например, приближения, связанные с тем, что кристалл состоит из двух подсистем: подсистем электронов и подсистем ядер, массы частиц образующих которые существенно отличаются друг от друга: $M_{\text{Я}} \gg m_e$), и приближения, вытекающие из симметрии кристаллической решетки.

Необходимо напомнить учащимся общую методику решения уравнения Шредингера. В общем случае решение уравнения Шредингера вида

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = \varepsilon \psi(\vec{r}) \quad (2)$$

сводится по существу к двум задачам:

- определение вида периодического потенциала $U(r)$;
- решение уравнения при выбранном потенциале.

Далее желательно совместно со студентами составить уравнение Шредингера, описывающее состояние кристалла и обсудить возможные пути его решения.

Уравнение Шредингера для кристалла можно представить в виде

$$\left\{ -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_i^2 - \sum_l \frac{\hbar^2}{2M_l} \nabla_l^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{\hbar^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{l \neq n} \frac{\hbar^2}{|\vec{R}_l - \vec{R}_n|} - \sum_{i,l} \frac{Z_l e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_l|} \right\} \Psi = E \Psi, \quad (3)$$

где $M_i, Z_i, \vec{R}_i, \vec{R}_j, \vec{r}_i, \vec{r}_j$ — массы, зарядовое число и радиусы векторов ядер и электронов.

Его решение возможно на основе применения адиабатического приближения, когда уравнение расщепляется на два отдельных уравнения, описывающих движение только ионов и только электронов. Однако в этом случае уравнение для электронной подсистемы остается по-прежнему многочастичным. Поэтому для приведения многоэлектронной задачи к одноэлектронной применяют приближение самосогласованного потенциала.

Студентам нужно объяснить суть адиабатического приближения, которое состоит в том, что кристалл можно рассматривать как объект, состоящий из подсистемы электронов и подсистемы ядер.

Учитывая, что масса ядер намного больше массы электронов, т.е. $M_{я} \gg m_0$, уравнение (3) можно расщепить на два уравнения. Из-за $M_{я} \gg m_0$ средняя скорость движения электронов будет намного больше скорости движения ядер, и движение электронов можно рассматривать происходящим в поле неподвижных ядер.

Следовательно, приближенно можно утверждать, что волновая функция электронной подсистемы зависит от координат ядер как от параметра. Иначе говоря, можно считать, что электронная подсистема движется независимо от подсистемы ядер. Тогда полную волновую функцию всей системы $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$ можно представить в виде произведения волновых функций подсистем ядер $\Phi(\vec{R})$ и электронов $\psi(\vec{r}, \vec{R})$:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \psi(\vec{r}, \vec{R})\Phi(\vec{R}). \quad (4)$$

Подставив (4) в уравнение (3), получаем два уравнения:

$$\left\{ -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i,j} \frac{Z_i e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_i|} \right\} \psi(\vec{r}, \vec{R}) = \varepsilon(\vec{R}) \psi(\vec{r}, \vec{R}), \quad (5)$$

$$\left\{ -\sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq n} \frac{Z_i Z_n e^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_n|} + \varepsilon(\vec{R}) \right\} \Phi(\vec{R}) = E \Phi(\vec{R}). \quad (6)$$

Уравнение (5) описывает движение электронов в поле фиксированных ядер. Как следует из (5), волновая функция $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$ и энергия электронов $\varepsilon(\vec{r}, \vec{R})$ зависят от координат ядер \vec{R} как от параметров.

Уравнение (6) описывает движение ионов в поле, которое создано как взаимодействующими ионами, так и средним пространственным распределением системы электронов.

Затем следует обсудить со студентами возможности приведения уравнения многоэлектронной системы (5) к одноэлектронному уравнению. Одним из наиболее эффективных приближенных методов, использующихся с этой целью, является метод Хартри-Фока.

Суть метода Хартри-Фока заключается в замене потенциальной энергии взаимодействия электронов $\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$ в уравнении (5) некоторым эффективным внешним полем вида $\sum_i U_{\text{эфф}}(\vec{r}_i)$, в ко-

тором каждый электрон движется независимо. Такая замена взаимодействия каждого электрона с остальными, которое зависит от мгновенной конфигурации всех электронов, эффективным полем, характеризующим усредненное действие всех остальных электронов на данный, приводит к тому, что уравнение для системы электронов распадается на одноэлектронные уравнения вида

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_i^2 + U'(\vec{r}_i) + U_{\text{эфф}}(\vec{r}_i) \right\} \psi_{i(\vec{r}_i)} = \varepsilon_i \psi_{i(\vec{r}_i)}, \quad (7)$$

где $U'(\vec{r}_i) = -\sum_i \frac{Z_i e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_i|}$ — потенциальная энергия электрона с координатами $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ в поле всех ионов. Это уравнение получено Хартри. Поэтому его называют уравнением Хартри.

Таким образом, многоэлектронная задача приводится к одноэлектронной применением очень важного приближения: каждому электрону в кристалле приписывается индивидуальная волновая функция.

Решением уравнения (5), в котором энергия взаимодействия $\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$ заменена энергией

$\sum_i U_{\text{эфф}}(\vec{r}_i)$, является произведение одноэлектронных функций

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_n(\vec{r}_n), \quad (8)$$

где индекс i у функции $\psi_i(\vec{r}_i)$ обозначает три квантовых числа, характеризующих квантовое состояние i -го электрона, т.е. электрона с координатами \vec{r}_i .

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_i^2 - \sum_l \frac{Z_l e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_l|} + \sum_{i \neq l} \int \frac{e^2 |\psi_j(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} d\vec{r}_j - \sum_j \frac{\psi_j^*(\vec{r}_1)}{\psi_i(\vec{r}_1)} \int \frac{e^2 \psi_j^*(\vec{r}_2) \psi_i(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} d\vec{r}_2 \right\} \psi_i(\vec{r}_i) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}_i). \quad (13)$$

Используя антисимметризованную волновую функцию (11) и уравнение Хартри-Фока (13), можно найти полную энергию ε системы электронов в поле неподвижных ядер.

Затем желательно более детально ознакомить студентов с методикой вычисления полной энергии электронной системы. С этой целью можно рассмотреть систему из двух электронов. В этом случае антисимметризованная волновая функция имеет вид

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_1(\vec{r}_1, s_1) \varphi_2(\vec{r}_2, s_2) - \varphi_1(\vec{r}_2, s_2) \varphi_2(\vec{r}_1, s_1) \}. \quad (14)$$

Тогда полная энергия этой системы вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \sum_{s_1, s_2} \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \int \{ \varphi_1^*(\vec{r}_1, s_1) \varphi_2^*(\vec{r}_2, s_2) - \varphi_1^*(\vec{r}_2, s_2) \varphi_2^*(\vec{r}_1, s_1) \} \times \\ &\times \left\{ \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right\} \{ \varphi_1(\vec{r}_1, s_1) \varphi_2(\vec{r}_2, s_2) - \varphi_1(\vec{r}_2, s_2) \varphi_2(\vec{r}_1, s_1) \} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_i^2 + U'(\vec{r}_i), i = 1, 2, \quad (16)$$

а

$$U'(\vec{r}_i) = -\sum_l \frac{Z_l e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_l|}. \quad (17)$$

Раскрывая скобки в (15), получаем:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \sum_{l=1}^2 \sum_{s_1, s_2} \int \varphi_l^*(\vec{r}_1, s_1) \hat{H}_1 \varphi_l(\vec{r}_1, s_1) d\vec{r}_1 + \frac{1}{2} \sum_{l, j=1}^2 \sum_{s_1, s_2} \int \left| \varphi_l(\vec{r}_1, s_1) \right|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \left| \varphi_j(\vec{r}_2, s_2) \right|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{l, j=1}^2 \sum_{s_1, s_2} \int \varphi_l^*(\vec{r}_1, s_1) \varphi_l(\vec{r}_1, s_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \varphi_j(\vec{r}_2, s_2) \varphi_j^*(\vec{r}_2, s_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \end{aligned} \quad (18)$$

Аналогичное выражение может быть получено и для системы из n электронов. Суммирование ведется при этом от 1 до n . Так как операторы \hat{H} и $\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ не зависят от спиновой координаты S_1 ,

суммирование по ней можно выполнить независимо от интегрирования по пространственным координатам. В последнем слагаемом (18) суммирование по электронам с противоположно направленными спинами дает ноль. В результате выражение для энергии может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \sum_{i=1}^n \int \psi_i^*(\vec{r}_i) \hat{H} \psi_i(\vec{r}_i) d\vec{r}_i + \frac{1}{2} \sum_{i, j=1}^n \int \left| \psi_i(\vec{r}_i) \right|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \left| \psi_j(\vec{r}_2) \right|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i, j=1}^n \int \psi_i^*(\vec{r}_i) \psi_j(\vec{r}_i) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_i(\vec{r}_2) \psi_j^*(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \end{aligned} \quad (19)$$

В последнем слагаемом в уравнении (19) суммирование ведется по состояниям электронов с параллельными спинами.

Обучающимся надо особо обсудить *природу появления* в энергии носителей заряда члена, связанного с *обменным взаимодействием*.

Энергетический спектр носителей заряда в кристалле определяется волновой функцией системы (т.е. решением уравнения Шредингера). При этом значения энергии, соответствующие симметричным решениям (8) уравнения Шредингера, могут реализоваться тогда, когда спины электронов попарно направлены, антипараллельны, так что полный спин системы равен нулю. Значения же энергии, соответствующие антисимметричным решениям (11) уравнения Шредингера, могут реализоваться тогда, когда спины электронов попарно направлены параллельно.

Отсюда следует, что возможные значения энергии системы зависят от ее полного спина. Такую зависимость можно рассматривать как результат чисто квантового взаимодействия электронов, которое называется обменным.

Обменные интегралы, входящие в последние слагаемые уравнения (19), не имеют классического электростатического аналога. Им можно сопоставить кулоновское взаимодействие с обменными плотностями заряда

$$\rho_{ij}(\vec{r}_i) = -e\psi_i^*(\vec{r}_i)\psi_j(\vec{r}_i) \text{ и } \rho_{ij}^* = -e\psi_j^*(\vec{r}_2)\psi_i(\vec{r}_2). \quad (20)$$

Эти величины могут быть комплексными, поэтому выражение «плотность заряда» употребляется здесь формально. Два электрона с параллельными спинами находятся частично в j -м, а частично i -м состояниях, как бы обмениваясь местами. Следовательно, обменная энергия определяется «перекрытием» волновых функций состояний $\psi_i(\vec{r}_1)$ и $\psi_j(\vec{r}_2)$. Если электроны относятся к различным атомам, то обменная энергия уменьшается при росте расстояния между атомами.

Таким образом, для определения энергии электронов в кристалле надо знать волновую функцию системы, т.е. надо выбрать наилучшее решение интегро-дифференциальных уравнений Хартри-Фока (13).

Полезно обсудить со студентами методику выбора оптимального решения уравнения Шредингера для электронов в кристалле. Оно зависит от потенциальной энергии межэлектронного взаимодействия и взаимодействия электронов с ядрами, т.е. от вида выбранного потенциала взаимодействия. Выбор наилучшего решения уравнения Шредингера проводится вариационным методом.

Для определения электронных волновых функций $\psi_i(\vec{r})$, лучшим образом аппроксимирующих точное решение, требуют, чтобы энергия системы была минимальной по отношению к произвольным малым вариациям функции $\psi_i(\vec{r})$. Оказывается, что приближение Хартри-Фока является наилучшим из одноэлектронных приближений в том смысле, что вариационная процедура на функциях Хартри-Фока (11) дает наименьший минимум энергии по сравнению с любыми другими одноэлектронными функциями.

Выше было продемонстрирована возможность определения полной энергии системы путем использования антисимметризованной волновой функции и уравнения Хартри-Фока. Точность и успех определения энергии системы зависят от выбранных одноэлектронных волновых функций, из которых составляется антисимметризованная волновая функция системы.

Общая идея практически всех используемых методов расчета зонной структуры заключается в следующем.

Всякое решение уравнения Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = \varepsilon \psi(\vec{r}) \quad (21)$$

разлагается в ряд по полной системе функций

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \varphi_i(\vec{r}), \quad (22)$$

удовлетворяющих тем же граничным условиям, что и искомое решение.

На практике при составлении приближенного решения задачи ограничиваются конечным членом ряда. Выбирают некоторую, необязательно полную, систему функций $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_l$, наилучшим образом удовлетворяющих ее граничным условиям. Из этих функций составляется линейная комбинация

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^l c_i \varphi_i(\vec{r}). \quad (23)$$

В зависимости от выбора нулевого приближения одноэлектронных волновых функций ψ_i различают два подхода к решению уравнения Хартри-Фока:

- метод атомных орбит Гайтлера-Лондона-Гейзенберга (ГЛГ);
- метод коллективизированных или молекулярных орбит Гунда-Муликена-Блоха (ГМБ).

В методе атомных орбит в качестве одноэлектронных волновых функций выбираются волновые функции электронов в изолированном атоме кристаллической решетки. Действие на выбранный электрон ионов и электронов, принадлежащих другим атомам, рассматривают как возмущение. Такой выбор функций тем лучше соответствует реальным условиям, чем слабее взаимодействие между ато-

мами кристалла, т.е. чем меньше перекрываются волновые функции ψ_i электронов, принадлежащих различным атомам.

Однако атомные волновые функции разных узлов решетки нельзя рассматривать как решения уравнения Хартри-Фока, так как они не ортогональны друг другу. В конкретных расчетах либо пренебрегают неортогональностью (перекрытием) атомных волновых функций разных узлов, либо их ортогонализируют.

В методе коллективизированных орбит в качестве одноэлектронных волновых функций выбираются состояния электрона, находящегося в поле всех атомов кристаллической решетки. Поле, создаваемое положительно заряженными ионами, чрезвычайно велико, в связи с чем рассматриваются состояния электрона в поле ионов, заряд которых в среднем нейтрализуется зарядом остальных электронов. Иначе говоря, рассматриваются состояния электрона в поле периодического потенциала кристаллической решетки. Взаимодействие между электронами является здесь возмущением. В методе коллективизированных орбит считают, что каждая волновая функция ψ_i простирается по всему кристаллу и имеет одинаковые амплитуды у эквивалентных атомов. То есть считается, что электроны принадлежат не отдельным атомам, а всему кристаллу. Очевидно, что метод коллективизированных орбит должен описывать лучше, в основном, состояние валентных электронов.

Список литературы

1. Цидильковский И.М. Электроны и дырки в полупроводниках. — М.: Наука, 1972.
2. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. — М.: Физматгиз, 1985.
3. Цидильковский И.М. Зонная структура полупроводников. — М.: Наука, 1978. — 328 с.
4. Викулин И.М., Стафеев В.И. Физика полупроводниковых приборов. — М.: Сов. радио, 1980. — 296 с.
5. Пасынков В.В., Чиркин Л.К. Полупроводниковые приборы: Учеб. для вузов по спец. «Полупроводники и диэлектрики» и «Полупроводниковые и микроэлектронные приборы». — М.: Высш. шк., 1987. — 479 с.