Статистика дефектов в твёрдых телах.

E_S - энергия активации

$\Delta U = nE_S$

$\Delta S = k\ln p$, p – число способов перестановок по узлам решётки.

$p = \frac{N!}{n!(N-n)!}$ $N! \cong N^N$

$\Delta F = \Delta U - T\Delta S$

$\Delta S = k\ln p = k(N\ln N - n\ln n - (N-n)\ln(N-n))$

$\frac{\partial(\Delta F)}{\partial n} = 0 = E_S - kT((N-n)\ln(N-n))$

$n \ll N$; $n \cong N\cdot e^{-\frac{E_S}{kT}}$

$E_S \sim 1$ эВ, $T \sim 10^3$ K

$\frac{n}{N} \sim 10^{-5}$ дефектов системы (10^{-3} %).

Возможна диффузия дефектов по кристаллу. При этом

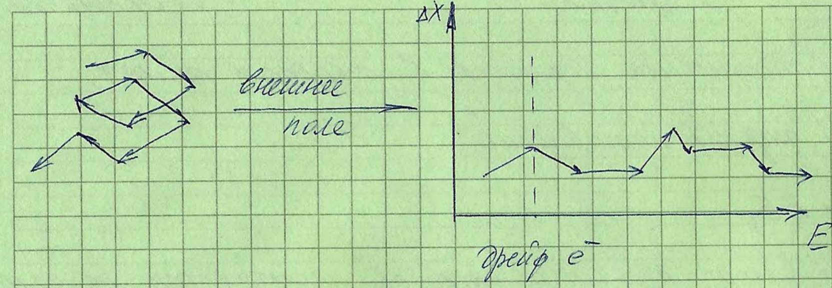
$D = D_0 e^{-\frac{E_S}{kT}}$, D_0 – коэфф. диффузии.

$\frac{\partial n}{\partial T} = \Delta D n = \frac{\partial^2 D}{\partial x^2} n$

Геттерирование дефектов – собирание дефектов в такие зоны, как граница раздела между кристаллом и пов-тью кристалла.

Электронные свойства твёрдых тел.

Модель эл. газа Лоренца



Можно рассчитать I:

$I = n \cdot S \cdot \Delta x \cdot \frac{\bar{e}}{\Delta t}$; $\frac{\Delta x}{\Delta t} = v_{др}$ дрейфовая скорость

$I = n \cdot S \cdot \bar{e} \cdot v_{др}$

$j = \frac{I}{S} = n \cdot v_{др} \cdot e^-$; j — плотность тока

$\vec{j} = n \vec{v}_{др} \cdot e$

$\frac{mu^2}{2} = \frac{3}{2} kT$, u — средняя тепловая скорость.

$a = \frac{eE}{m}$ — ускорение.

$\tau = \frac{\lambda}{u}$, λ — длина св. пробега

$\langle v_{др} \rangle = \frac{a\tau}{2}$

$j = \frac{ne^2 \lambda E}{2mu} = \sigma E$

$\sigma = \frac{ne^2\lambda}{2mu}$; $\varkappa = \frac{1}{3} C_V u \lambda$; $C_V = \frac{3}{2} nk$

$\frac{\varkappa}{\sigma} = \frac{3k^2T}{e^2}$ з-н Видемана - Франца.

$\frac{\varkappa}{\sigma} = LT$, $L = \frac{3k^2}{e^2}$.

Кв. стат.: $L = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k^2}{e^2}$.

Зонная теория твёрдых тел.

$\hat{H}\psi = E\psi$

$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n}{}' \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{j=1}^{k}{}' \frac{\hat{P}_{яд\,j}^2}{2M} + U(r_i, R_j)$

$\psi = \psi(r_1, \dots, r_i, R_1, \dots, R_j)$

(1) Адиабатич. приближение. (Борна-Оппенгеймера)

$\gamma = \frac{m}{M} \ll 1$

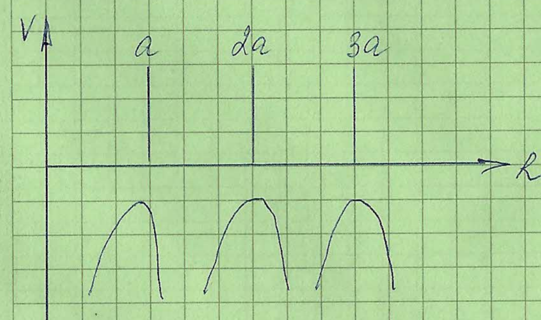
$\psi(r_i, R_j) = \psi(r_i)\,\xi(R_j)$

$u(r_i, r_j) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,k \\ i \neq k}}{}' \frac{e^2}{r_{ik}} + V(r, R)$

(2) Метод Хартри-Фока

$i \longrightarrow (N-1)\bar{e}$

$U_{ХФ}(r_i) = \sum_{k=1}^{N-1}{}' \frac{e^2 \psi_k(r')}{(r_i - r')} dV$ "размазывание" $(N-1)\bar{e}$ по всей области



$V(R) = V(R + nR)$

Задача Блоха: движение $\bar{e}$ в период. крист. поле.

$\psi(r) = V(r)\, e^{ikr}$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

а) $E_{\bar{e}} \gg V(r)$ квазисвободное $\bar{e}$

б) $E_{\bar{e}} \lesssim V(r)$ квазисвязанное $\bar{e}$