

ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

1.1. НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ О СТРОЕНИИ АТОМА

Физические свойства полупроводников тесно связаны со структурой валентных оболочек атомов, из которых они образованы; поэтому начнем с краткого качественного рассмотрения этого вопроса.

Атом любого элемента состоит из положительно заряженного ядра с зарядом ze (где e — заряд электрона и z — порядковый номер атома в системе Менделеева) и z электронов, расположенных в виде системы оболочек с постепенно возрастающими размерами: линейные размеры оболочек соотносятся между собой как квадраты целых чисел. Первая оболочка носит название K -оболочки, вторая — L -оболочки, третья — M -оболочки и т. д.

Первая, K -оболочка, имеет только одну подоболочку, обозначаемую s , вторая (L) делится на s - и p -подоболочки, третья (M) — на s -, p - и d -подоболочки и т. д.

Мы уже упоминали о том, что размеры оболочек определяются их номером; подоболочки отличаются друг от друга конфигурацией (формой). В упрощенной модели электронного строения атома предполагается, что электрон подобен заряженному волчку, обладающему собственным и магнитным и механическим моментами (называемыми спинами), а каждый атом подобен солнечной системе, в которой электроны движутся вокруг ядра по эллиптическим орбитам, причем номер оболочки определяет длину большей полуоси орбиты, а номер подоболочки — ее форму (эксцентриситет). Каждая подоболочка, начиная со второй,

состоит из ряда орбит, отличающихся друг от друга своей ориентацией в пространстве; первая, *s*-подоболочка, имеет только одну орбиту, на которой могут разместиться два электрона с противоположно направленными спинами. Вторая подоболочка, *p*, состоит из трех орбит, на каждой из которых может разместиться по 2 электрона; таким образом, всего во второй подоболочке может разместиться 6 электронов; третья, *d*-подоболочка, состоит из пяти орбит, на которых может поместиться 10 электронов, и т. д. Номер оболочки называется также главным квантовым числом и обозначается *n*, номер подоболочки называется орбитальным или побочным квантовым числом и обозначается *l*. Побочное квантовое число определяет эксцентриситет орбиты, а следовательно, и орбитальный момент количества движения электрона, находящегося на ней. Полный момент количества движения электрона складывается из орбитального и собственного (спина) и определяется третьим квантовым числом *j*, которое в зависимости от ориентации спина может принимать значения $j_1 = l + 1/2$ и $j_2 = l - 1/2$. Наконец, ориентация орбиты в пространстве характеризуется четвертым магнитным квантовым числом *m*.

Согласно принципу Паули в атоме не может существовать двух или большего числа электронов с одинаковой четверкой квантовых чисел; этим законом и определяется число электронов, помещающихся на одной орбите (2), в одной подоболочке ($2l + 1$) и в одной оболочке — $2n^2$.

В таблице приведены максимальные числа электронов, которые могут разместиться в каждой подоболочке. В последнем столбце приведено полное число электронов, которое размещается в данной оболочке.

ТАБЛИЦА 1

Номер оболочки (<i>n</i>)	Номер подоболочки					z_n
	0(<i>s</i>)	1(<i>p</i>)	2(<i>d</i>)	3(<i>f</i>)	4(<i>g</i>)	
1 (<i>K</i>)	2	—	—	—	—	2
2 (<i>L</i>)	2	6	—	—	—	8
3 (<i>M</i>)	2	6	10	—	—	18
4 (<i>N</i>)	2	6	10	14	—	32
5 (<i>P</i>)	2	6	10	14	18	50

Радиусы круговых орбит и энергии электрона на них могут быть найдены из двух условий:

1) условия классической устойчивости — равенства центробежной и центростремительной силы:

$$\frac{m_0 v^2}{r} = \frac{z e^2}{r^2}, \quad (1.1)$$

2) условия квантовой устойчивости. Согласно квантовой механике (см. подробнее § 2.1) электрон, движущийся со скоростью v , описывается волной, длина которой $\lambda = h/m_0 v$, где m_0 — масса электрона и h — универсальная постоянная, так называемая постоянная Планка, равная $6,57 \cdot 10^{-27}$ эрг/сек. Для того чтобы орбита была устойчива, на ней должно укладываться целое число волн (для того чтобы при многократном прохождении орбиты электронная волна находилась в фазе сама с собой, а не гасила самое себя):

$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{m_0 v}. \quad (1.2)$$

Решая совместно (1.1) и (1.2), находим

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} \frac{1}{z}, \quad (1.3)$$

где $\hbar = h/2\pi$.

Величина r равна $a_0 = \hbar^2/m_0 e^2$ при $n=1$ и $z=1$, т. е. представляет собой радиус первой (самой близкой к ядру) орбиты в атоме водорода ($a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8}$ см). Радиусы других орбит в атоме водорода или в одноэлектронных ионах с зарядом ядра z выражаются через a_0 :

$$r_n = n^2 \frac{a_0}{z}. \quad (1.4)$$

Полная энергия электрона на n -й орбите равна сумме его кинетической и потенциальной энергии:

$$\mathcal{E}_n = T_n + U_n = \frac{1}{2} m_0 v^2 - \frac{z e^2}{r}.$$

Используя (1.1) и (1.3), получаем

$$\mathcal{E}_n = -\frac{z e^2}{2r} = -\frac{m_0 e^4 z^2}{2\hbar^2 n^2}. \quad (1.5)$$

Одним из основных постулатов квантовой механики является предположение, что, находясь на стабильной орбите, электрон не излучает энергии, а при переходе с одной орбиты на другую излучает (или поглощает) квант энергии, величина которого равна разности энергий электрона в начальном и конечном состояниях:

$$h\nu = \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{n'} = \frac{m_0 e^4 z^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right). \quad (1.6)$$

Формула (1.6) дает точное значение частот спектра испускания и поглощения атома водорода; этот факт был первым триумфом квантовой теории атома Бора, основанной на модели круговых орбит. Однако теория Бора не только имела целый ряд внутренних противоречий, но и не объясняла особенностей спектров более сложных атомов, требовавших учета эллиптических орбит, релятивистских эффектов спина и магнитного момента электрона. Соответствующие дополнения к теории были сделаны Зоммерфельдом и Вильсоном, Уленбеком и Гоудсмитом; мы ограничимся здесь ссылкой на популярное изложение этих вопросов в книге Де Бройля [5].

ВАЛЕНТНОСТЬ

По мере роста порядкового номера элемента заполняется сначала первая, *K*-оболочка (самые нижние энергетические уровни), затем последовательно *s*- и *p*-уровни второй, *L*-оболочки, и т. д. В водороде имеется один электрон на *s*-уровне *) первой оболочки, что записывается следующим образом: $1s_1$. (Первая цифра означает номер оболочки, *s* определяет уровень подоболочки, и индекс справа — число электронов на ней.) В гелии имеются два электрона, которые целиком заполняют первую оболочку (в соответствии с этим его электронная структура записывается как $1s_2$).

Два электрона, движущиеся по одной и той же орбите, образуют так называемую электронную пару. Спаренное состояние электронов энергетически более устойчиво, чем неспаренное. Поэтому, вступая в соединение, атомы стремятся таким образом изменить число и характер движения электронов внешней оболочки, чтобы не осталось

*) Или, что то же самое, на орбите или в *s*-подоболочке.

неспаренных. В ряде случаев неспаренные электроны отдельных атомов вступают во взаимодействие друг с другом и изменяют характер своего движения таким образом, что начинают вращаться по новым молекулярным орбитам в виде электронных пар. Такие соединения называются ковалентными.

Однако число неспаренных электронов в изолированных атомах очень невелико — один или два; поэтому нередки и такие случаи, когда внутриатомные пары разрушаются и электроны изолированных атомов в ковалентном соединении образуют новые молекулярные пары. Поэтому в ковалентном соединении предельная валентность элемента определяется числом электронов во внешней незаполненной оболочке.

В других случаях, входя в соединение, атом либо стремится полностью отдать электроны внешней оболочки, либо увеличить их число до полного ее заполнения. Такие соединения называются ионными. Отсюда следует, что в ионных соединениях максимальная валентность электронов определяется числом электронов (валентность по кислороду) или числом пустых мест (валентность по водороду) на внешней оболочке. Этим объясняется с точки зрения современной физики периодический закон, открытый Менделеевым.

Здесь следует заметить, что между ковалентными и ионными соединениями не существует резкой границы. Подробнее этот вопрос будет рассмотрен в § 2.3.

1.2. ЭНЕРГИЯ И ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ

Посмотрим теперь, как изменяется характер движения и энергетический спектр валентных электронов в твердом теле. При образовании твердого тела соседние атомы настолько сближаются друг с другом, что внешние электронные оболочки не только соприкасаются, но даже перекрываются. В результате этого характер движения электронов резко изменяется: электроны, находящиеся на определенном энергетическом уровне одного атома, получают возможность переходить без затраты энергии на соответ-