

Лекции 1-2. В(в)одные занятия.

Цель: напомнить основные свойства фотонов, электронов, фононов, механизмов их взаимодействия и сферы применения соответствующих явлений.

Интересные факты.

Фотоны существуют по крайней мере со времен Большого Взрыва.

Фотоны, по определению, всегда пребывают в движении. В воздухе скорость фотона составляет $3 \cdot 10^8$ м/с.

Ряд прорывов человеческой цивилизации достигнуто благодаря изобретению новых способов управлением процессов с участием фотонов. Примеры: получение и контроль огня, разработка линз, изобретение фотографии, радиовещание, создание лазеров, оптической записи и др.

Судя по содержанию научных и учебных трудов, именуемых «фотоникой», это название просто замещает старое название «оптика»; последнее сегодня используется в основном по отношению к процессам, где корпускулярная природа фотонов не нуждается в описании.

Два смысловых шара понятия «фотоника» [[1](#)]:

1). Фотоника — это наука о генерации, управлении и обнаружении фотонов, особенно в видимом и ближнем инфракрасном спектре, а также о их распространении на ультрафиолетовой (длина волны 10...380 нм), длинноволновой инфракрасной (длина волны 15...150 мкм) и сверхинфракрасной части спектра (например, 2...4 ТГц соответствует длине волны 75...150 мкм), где сегодня активно развиваются квантовые каскадные лазеры.

2). Фотоника – область физики и технологии, связанная с излучением, детектированием, поведением, последствиями существования и уничтожения фотонов. Сюда входят: контроль и преобразование оптических сигналов, в частности передача света через оптические волокна; сенсоры, которые отображают параметры среды одним из параметров светового сигнала [1].

Достижениями фотоники пользуются быстроразвивающиеся направления:

Экология:

- солнечная энергетика;
- мониторинг качества воздуха и загрязнений.

Получение изображений:

- спутниковые снимки для прогнозирования погоды;
- видеокамеры;
- цифровые камеры;
- ночное видение;
- военные наблюдения.

Информационные дисплеи:

- компьютерные терминалы;
- дорожные знаки;
- контрольные дисплеи в автомобилях.

Хранение и запись информации:

- CD-ROM;
- DVD-ROM;
- Blue-Ray.

Биологические науки:

- распознавание молекул и протеинов.

Освещение

Медицина:

- терапия с минимальным инвазивным воздействием;
- фотодинамическая химиотерапия.

Телекоммуникации:

- лазеры;
- фотодетекторы;
- модуляторы света.

Особое место занимает в фотонике ее применение к телекоммуникационным технологиям. Это связано с развитием интернет-коммуникаций, и потребности передавать качественные аудио- видеопотоки. Последнее стало возможным благодаря революции в полупроводниковых лазерах, быстродействующих модуляторах света, фотодиодах, оптоволоконных линиях связи.

1.1. Электроны и фотоны.

Экспериментальным путем легко установить, что все диоды, независимо от их назначения, чувствительны к свету. Облучим светом катод вакуумного фотодиода или $p-n$ - или $p-i-n$ -переход полупроводникового диода. Если частота света не слишком мала, мы будем наблюдать рост тока в цепи диода. Поведение электронов меняется при облучении светом; это однозначно указывает, что электроны и фотоны *взаимодействуют*.

С помощью диодов можно обнаружить *корпускулярную (квантовую)* природу света (см. [\[лаб., внешний фотоэффект\]](#)), являющуюся фундаментальным свойством материи. Макс Планк в 1900 г. предположил, что свет излучается порциями («квантами»). Эйнштейн в 1905 г. экспериментально доказал передачу света порциями, в частности основываясь на существовании «красной границы фотоэффекта» (законы фотоэффекта, Нобелевская премия по физике, 1921 г.). Исходя из обоих этих фактов, Эйнштейн предположил, что свет не только передается/поглощается, но и существует в виде квантов.

Фотонные устройства основаны на взаимодействии электронов и фотонов. Электрон и фотон – это две элементарные квантово-механические частицы. Как и все элементарные частицы, электронам и фотонам наряду с *корпускулярной* присуща *волновая* природа.

Поверхностно рассмотрим волновые и корпускулярные аспекты природы электронов и фотонов.

Во-первых, процессы с участием электрона и фотона – это массовые процессы; отметим, что:

1. каждый электрон, участвующие в токопереносе, распределен между миллионами атомов (обобществлен);

2. даже самые крошечные полупроводниковые компоненты и их отдельные структурные части содержит огромное количество электронов;

Пп. 1 и 2 не позволяют отследить траекторию движения каждого отдельного электрона. На малых размерах это усугубляется принципом неопределенности, из которого следует, что понятие траектории в масштабах микромира не вообще имеет смысла, идет ли речь об одном электроне или о миллиардах. В таких условиях естественно проводить статистическое описание.

Статистическое описание проводится с помощью функции распределения, которая состоит из функции плотности состояний и вероятности их заполнения.

Функцию плотности состояний можно сравнить с картой дорог. На карте не показано, как быстро и где движутся машины, а лишь дороги, по которым движение в принципе возможно. Аналогичная карта для электронов в полупроводнике носит название «зонная структура (диаграмма)».

Понятия «координата» и «скорость» каждого отдельно взятого электрона в кристалле *непродуктивны* и редко используются. Однако необходимо учитывать, что при взаимодействии этих двух частиц всегда должны выполняться два фундаментальных закона: *закон сохранения импульса* и *закон сохранения энергии*. Возможные механизмы взаимодействия электрона и фотона можно анализировать по взаимному изменению энергии и импульса. Для этой цели наиболее удобно использовать зонную диаграмму.

2.2. Основные соотношения

Почти вся наука об устройствах и приборах фотоники строится на двух простых принципах:

- 1) соотношение Больцмана;
- 2) уравнение Планка, связывающее энергию фотона и частоту света.

Людвиг Больцман

Больцман занимался изучением газов и движения их молекул. В идеальном газе, полагал Больцман, скорости частиц статистически распределены вокруг средней скорости $\langle v \rangle = 0$ ($\langle x \rangle$ означает среднее значение x). Это отражение *Закона Больших Чисел* (статистика) утверждающего, что эмпирическое среднее (среднее арифметическое) достаточно большой конечной выборки из фиксированного распределения близко к теоретическому среднему (математическому ожиданию) этого распределения.

Известно также, что физическая величина (в данном случае – скорость), изменения которой подвержены множеству независимых факторов, стремится к «нормальному» («гауссовому») распределению. Больцман тоже исходил из этой позиции.

Если производить измерение скорости какой-то одной частицы, вероятность найти значение v_1 задается гауссовым распределением:

$$P(v = v_1) = A \exp\left(-\frac{(v_1^2 - \langle v \rangle^2)}{\langle v^2 \rangle}\right), \quad (1.1)$$

где v_0 – средняя скорость, которая равняется нулю, а $\langle v^2 \rangle$ – среднее квадрата скорости. Не смотря на то, что средняя скорость $\langle v \rangle = 0$, среднее квадрата скорости $\langle v^2 \rangle$ определено отличается от нуля. Это «размытие» или «разброс» в распределении скоростей.

Если считать, что движение молекул газа подчиняется классической механике, то есть $E = \frac{mv^2}{2}$, (1.1) можно представить в виде:

$$P(v = v_1) = A \exp\left(-\frac{\frac{1}{2}mv_1^2}{\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle}\right) = A \exp\left(-\frac{E_1}{\langle E \rangle}\right), \quad \text{где} \quad \langle E \rangle \equiv \frac{m\langle v^2 \rangle}{2}$$

величина «размытия» энергии (т.н. «дисперсия»).

Таким образом:

$$P(E = E_1) = A \exp\left(-\frac{E_1}{\langle E \rangle}\right).$$

Из исследований столетней давности Роберта Броуна было известно, что средняя энергия молекул идеального газа пропорциональна температуре: $E = \text{const} \cdot T$, то есть:

$$P(E = E_1) = A \exp\left(-\frac{E_1}{\text{const} \cdot T}\right).$$

Нетрудно догадаться, что $\text{const} \equiv k_B$ – постоянная Больцмана, а нормальное распределение (1.1) принимает привычный вид распределения Больцмана:

$$P(E = E_1) = A \exp\left(-\frac{E_1}{k_B T}\right).$$

При комнатной температуре ($T = 295 \text{ K}$) $k_B T \approx 0.026 \text{ эВ}$.

Если общее количество молекул в некотором объеме равно N_t , количество молекул, имеющих энергию E_1 будет равно произведению общего количества молекул и вероятности, что молекула обладает энергией E_1 :

$$n(E_1) = N_t \cdot P(E = E_1) = N_t \cdot \exp\left(-\frac{E_1}{k_B T}\right) \quad (1.2)$$

Из (1.2) следует, что отношение количества электронов, имеющих энергию E_2 к количеству электронов, имеющих энергию E_1 равно:

$$\frac{n(E_2)}{n(E_1)} = \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}\right) \quad (1.3)$$

Соотношение Больцмана (1.3) – основной инструмент для изучения устройств фотоники. Оно применимо также для молекул, находящихся в термодинамическом равновесии. С небольшими изменениями, это соотношение можно распространить на неравновесные процессы. В частности, вид ВАХ *p-n* диода можно установить, используя для оценки протекающего тока (неравновесный процесс) соотношение (1.3).

2.3. Свойства фотонов.

а) по Максвеллу, свет есть электромагнитная волна: *«Мы едва ли можем отказаться от вывода, что свет состоит из поперечных колебаний той же самой среды, которая является причиной электрических и магнитных явлений»* (Максвелл);

б) из опытов Микельсона и Морли стало известно, что свет распространяется с постоянной скоростью, *c*;

в) скорость света равна произведению длины волны и частоты: $c = \lambda f$.

г) видимый свет:

$$400 \text{ нм} < \lambda < 700 \text{ нм}$$

(400 нм – голубой, 700 нм – красный)

ближний ИК:

$$700 \text{ нм} < \lambda < 2000 \text{ нм}.$$

Видимый и ближний инфракрасный диапазон используются для многочисленных приложений. Например, для передачи сигналов по оптоволоконным линиям связи используют видимый...ближний ИК диапазоны. Высокопроизводительное оптоволокно делают из стекла. Затухание обусловлено флуктуацией плотности стекла на атомарном уровне, и от остаточной концентрации молекул воды. Молекулы воды

поглощают свет вблизи особых значений длин волн. Между этими особыми значениями существует окно низкого уровня затухания, простирающееся от $\lambda = 1300$ нм до $\lambda = 1500$ нм. Эту ситуацию хорошо иллюстрирует рис. 2.2 для современного оптоволокна. На нем показаны свойства нескольких типов оптических волокон, каждый из которых изготовлен с помощью химического осаждения из газовой фазы.

Другое важное применение для ИК волн – это бинокли ночного видения. Они делают снимок объекта в ИК диапазоне и преобразуют этот сигнал в видимое изображение.

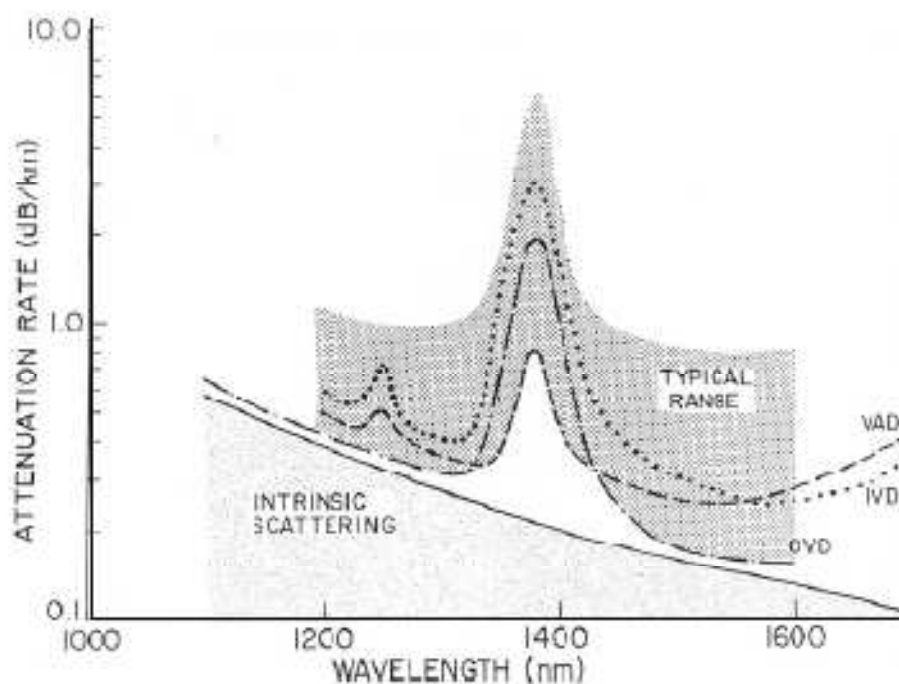


Figure 2.2. Optical fibers are made of glass and can be very transparent if the glass is pure. At 1500 nm, the loss is about 0.2 dB per kilometer. This means that a kilometer of optical fiber is about as transparent as an ordinary windowpane. Fibers are drawn like taffy from a preform. The properties of preforms made in three different ways are shown: vapor axial deposition, outside vapor deposition, and inside vapor deposition. The large loss peak at 1400 nm is the result of absorption by the first harmonic of residual CH molecules in the glass. Please see Chapter 9 for more details. (Adapted from D. Keck et al., Proc. SPIE, by permission.)

Рис. 2.2. Оптическое волокно, изготовленное из стекла может быть очень прозрачным, если стекло чистое. На длине волны 1500 нм потери составляют 0.2 дБ/км. Это означает, что прозрачность километра оптоволокна такая, как у одинарного стеклопакета. Волокна вытягивают из преформы с отверстиями. На графики показаны свойства волокон, вытянутых из преформ, изготовленных по трем технологиям: 1 – аксиальное, 2 – внешнее, 3 – внутреннее осаждение из газовой фазы. Большой пик потерь на длине 1400 нм – результат абсорбции первой гармоникой остаточных молекул ОН в стекле. [D. Keck, Proc. SPIE]

Лучи света ведут себя как волны; легко наблюдать волновые свойства света:

- дифракция;
- дисперсия (напр. радуга);
- интерференция;

К параметрам лучей относят:

- длину волны;
- частоту;
- поляризацию.

Лучи света также проявляют свойства, которые присущи частицам. Эти эффекты не так ясны из повседневного опыта – в основном их можно наблюдать в лаборатории.

Обсудим изыскания Макса Планка при изучении излучение нагретых тел (1900 г.).

Вот что он наблюдал: при нагревании тел, они начинают светиться. При нагревании (1) излучаемый свет более яркий, (2) изменяется цвет свечения. Разные цвета, как известно, соответствуют разным частотам. Поэтому у него создалось впечатление, что между частотой и температурой существует функциональная связь.

Планк предположил, что температура пропорциональна частоте. Но Больцман уже знал, что температура пропорциональна энергии частиц. Таким образом, делаем вывод, что *цвет «пропорционален» энергии*. Но какая из его характеристик f , c ?

С ростом энергии длина волны становится короче. Однако, частота должна возрасти, поскольку $\lambda \cdot f = c$. Таким образом, энергия пропорциональна частоте:

$$E = h \cdot f,$$

где $h = 6.63 \times 10^{-34}$ Дж·с – коэффициент пропорциональности между энергией и частотой квантов, он же постоянная Планка.

Энергия монохромного луча света красного цвета равна $n \cdot h \cdot f_{кр}$, где n – амплитуда или количество осцилляторов, каждый из которых обладает энергией $h \cdot f$:

$$E = \sum_f h \cdot f \cdot n_f, \text{ (сумма берется по всем частотам)}$$

где n_f – количество фотонов, распределенных в соответствии со статистикой Бозе-Эйнштейна:

$$n_f = const \cdot \left(\frac{1}{e^{hf/k_B T} - 1} \right).$$

Если $hf > k_B T$, как в случае нагретым телом, например конфоркой, n_f хорошо аппроксимируется законом Больцмана.

Пример 1.1.

Длина волны света $\lambda = 1000 \text{ нм} = 1 \text{ мкм} = 10^{-4} \text{ см}$ (для вольфрамовой лампы это длина максимально интенсивного излучения). Чему равна энергия квантов, соответствующая этой длине волны?

→

$$\lambda f = c, \text{ или } f = c/\lambda;$$

$$f = \frac{3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}}{10^{-4} \text{ см}} ;$$

$$f = 3 \cdot 10^{14} \text{ Гц};$$

$$E = h \cdot f = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \times 3 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1} = 1.98 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}.$$

Полученная энергия очень мала в масштабах человека. Однако, она вполне соизмерима с энергией электрона, который ускоряется разностью потенциалов 1 В:

$$1 \text{ эВ} \equiv 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} \times 1 \text{ В} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}.$$

В фотонике обычно имеют дело с электронами, ускоренными напряжением порядка 1 В. Поэтому энергию удобно измерять в эВ.

Энергия фотона из **примера 1.1** ($\lambda \approx 1 \text{ мкм}$) равна:

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1.98 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}}{1.6 \cdot 10^{-19} \text{ эВ/Дж}} = 1.24 \text{ эВ}.$$

Очевидно, что фотону с энергией 1 эВ соответствует длина волны 1.24 мкм (или 1240 нм). Это стоит запомнить, так как из него получается формула связи энергии и частоты (**пример 1.2**)

Пример 1.2

Доказать, что энергия любого фотона задается формулой:

$$E [\text{эВ}] = 1.24 / \lambda [\text{мкм}]$$

Доказать, что длина волны любого фотона задается формулой:

$$\lambda [\text{мкм}] = 1.24 / E [\text{эВ}],$$

→

Поскольку $1.24 \text{ эВ} = hc / (1 \text{ мкм}) \Rightarrow hc = 1.24 \text{ эВ мкм}$.

Отсюда: $E [\text{эВ}] = 1.24 / \lambda [\text{мкм}]$ и $\lambda [\text{мкм}] = 1.24 / E [\text{эВ}]$.

Вопросы 1,2:

Чему равна энергия фотона, которому соответствует длина волны 0.5 мкм?

(ответ: $E = 2.48 \text{ эВ}$)

Чему равна энергия «красных» фотонов ($\lambda = 612 \text{ нм}$)?

(ответ: $E = 2 \text{ эВ}$)

Поскольку фотоны всегда движутся со скоростью света, естественно задать вопрос об энергии или мощности светового луча. Мощность измеряется в Вт:

Ватт = мощность, которая излучается лампочкой накаливания = Энергия / время

Ватт = количество фотонов с частотой f , излучаемое в секунду \times энергия, просуммированное по всем частотам f :

$$\text{Мощность} = \sum_f n_f E_f .$$

Таким образом, мощность луча состоит из суммы всех этих маленьких пакетов: $E = hf$.

В некоторых случаях более удобно использовать круговую частоту ω вместо обычной частоты:

$$\omega = 2\pi f.$$

С использованием круговой частоты ω формулу Планка можно записать в виде:

$$E = \hbar\omega,$$

где $\hbar = h / (2\pi)$.

В фотонике преимущественно используются понятия «длина волны» λ и «энергия фотона» E . Реже используется частота f , поскольку средства измерения, позволяющие непосредственно определять частоту фотона не существует.

2.4. Свойства электронов.

Электроны – это «ОНИКА» в слове «фотОНИКА». В одиночку электроны могут взаимодействовать с фотонами, преимущественно, только находясь в кристалле. Когда полупроводник поглощает фотон, энергия последнего может передаваться электрону, увеличивая его потенциальную энергию. Когда электрон теряет потенциальную энергию, в полупроводнике может происходить излучение фотона.

Пример 1.3

Фотон с энергией 1.5 эВ бомбардирует GaAs. Поглощенная энергия тратится на разрыв одной связи, отправляя электрон из связанного состояния (валентная зона) в антисвязанное состояние (зону проводимости). При этом в валентной зоне остается вакантное состояние – дырка. Через некоторое время электрон рекомбинирует с дыркой, создавая связь и излучая фотон с энергией 1.42 эВ (1.42 эВ – это энергия связи в GaAs

при комнатной температуре).

Электрон характеризуется: массой и зарядом, которые имеют фиксированное значение. Электрон характеризуется энергией и импульсом, которые могут принимать произвольные значения, а также спином, проекция которого на выбранное направление может равняться $\pm(1/2)\hbar$.

Хотя размеры электрона четко невозможно определить, во многих явлениях электрон ведет себя как частицы. Например, для теннисного мячика справедливы соотношения:

$$\text{импульс} = mv = p$$

$$\text{кинетическая энергия} = \frac{mv^2}{2} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

Такие же соотношения справедливы для электронов в свободном пространстве. Фотоны массы не имеют, поэтому такое выражение для них «не работает».

График зависимости энергии свободного электрона от его импульса, как и для теннисного мячика, – парабола (см. **рис. 2.3**).

Напомним, что фотону с энергией 1 эВ соответствует волна длиной 1240 нм. У фотонов нет массы, но они обладают импульсом, который равен:

$$p = h/\lambda = \hbar k, \text{ где } k = 2\pi/\lambda.$$

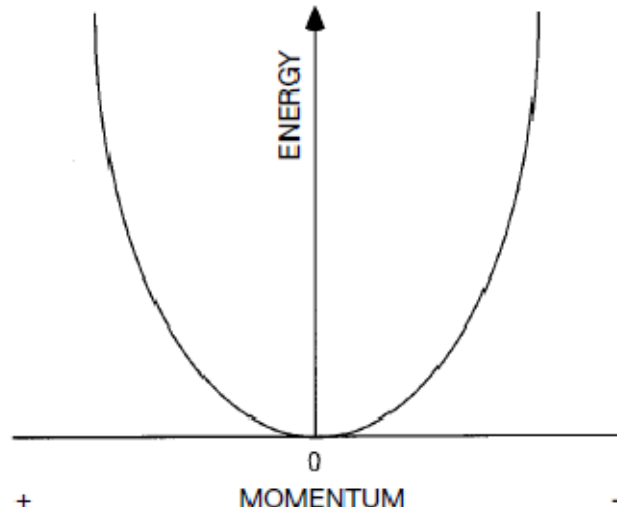


Рис. 2.3. Кинетическая энергия частицы, имеющей массу, например электрона, пропорциональна квадрату импульса.

Электроны тоже обладают импульсом, но могут ли они характеризоваться длиной волны? Если бы Вас звали Принц Луи-Виктор Дюк де Бройль, и на дворе стоял 1924, эта идея не выглядела такой уж необычной. Если сопоставить электрону длину волны, энергия электрона должна была бы равняться:

$$E = \frac{p^2}{2m} = |p = \hbar k, k = 2\pi / \lambda| = \frac{1}{2m} \frac{h^2}{\lambda^2}.$$

Используя это выражение, можно рассчитать длину волны электрона, если задана его энергия. Пусть энергия электрона равна 1 эВ. Это энергия электрона, ускоренного разностью потенциалов 1 В:

$$1 \text{ эВ} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ Дж.}$$

Длина волны:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{\sqrt{2 \cdot 9 \times 10^{-31} \text{ кг} \cdot 1.6 \times 10^{-19} \text{ Дж}}} = 12 \text{ \AA}.$$

В 1929 г. де Бройль получил Нобелевскую премию за эту революционную, на то время, идею. Предпосылки, который он использовал, отличны от вышеупомянутых; они содержали некоторые математические выкладки и уравнения Максвелла.

Его догадка основывалась на аналогии с ежедневным опытом, и была представлена в Главе 2.6 его диссертации. Лишь спустя 10 лет, в 1937, Нобелевской премии был удостоен Клинт Дэвиссон, впервые наблюдавший дифракцию электронов (дифракция, как явление, свойственное волновым процессам, экспериментально подтвердила гипотезу о волновой природе электрона). Его партнер по лаборатории, Лестер Гермер, по неизвестным доселе причинам лауреатом не стал.

Работы Дэвиссона и Гермера привели напрямую к созданию электронного микроскопа, устройства, которое нашло широчайшее применение во всех сферах материаловедения и инженерии.

Итак,

- для фотона энергией 1 эВ длина волны $\lambda = 12,400 \text{ \AA}$;
- для электрона с энергией 1 эВ длина волны $\lambda = 12 \text{ \AA}$.

При энергии 1 эВ (это справедливо только для этой энергии)

$$\frac{\lambda_{\text{электрон}}}{\lambda_{\text{фонон}}} = 1000.$$

Это соотношение зависит от энергии электрона. Однако энергии порядка 1 эВ характерны для электронов в твердом теле. Так что же означает этот результат?

Энергия кванта света и «типичного» электрона одного порядка, но у фотона импульс гораздо меньше. Это видно из графика (**рис. 2.4**), где в единой координатной системы построены зависимости энергии частиц от импульса.

За исключением нефизичного случая, когда $E = 0$, кривые $E(k)$ для свободного электрона и фотона не пересекаются. Другими словами, нет таких энергий, для которых импульсы электрона и фотона были бы одинаковыми. Легко показать, что **свободный электрон и фотон взаимодействовать не могут.**

Однако, а твердом теле ситуация меняется. Электроны и фотоны могут взаимодействовать, поскольку материал-хозяин может «предоставлять» импульс, которого не хватает для взаимодействия свободных электрона и фотона.

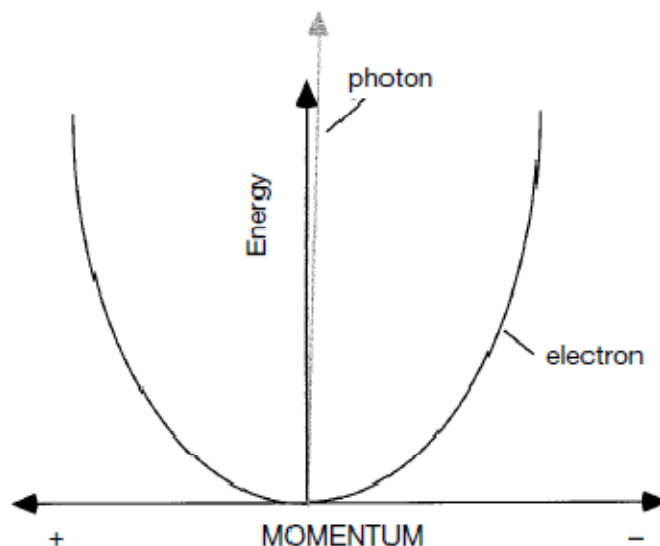


Figure 2.4. The energy of a photon is linearly proportional to its momentum. When plotted on the same graph as that for an electron, the energy-momentum relationship for a photon looks like a vertical line.

Рис. 2.4. Энергия фотона пропорциональна импульсу, а электрона – квадрату импульса. Будучи построенными в одной координатной системе, кривая $E(k)$ выглядит как вертикальная прямая.

Рассмотрим газ, состоящий из атомов одного элемента. До того как формируются связи между атомами, последние не ограничены в своем движении. Они находятся в антисвязанном (обобществленном, свободном) состоянии. Возьмем, к примеру, кремний. Когда два атома кремния встречаются, они могут образовывать связь. Связь образуется потому, что в связанном состоянии энергия системы из двух атомов ниже, чем в свободном. Валентные электроны при образовании связи «падают» в некоторую потенциальную яму, при этом отдавая некоторую часть своей энергии. Эта энергия, которая отделяет связанные состояния от антисвязанных состояний, называется энергией связи. В кремнии соответствующая разность энергий примерно равна 1 эВ.

При участии фотона одна из этих связей может оборваться, и появится электрон, который перешел из «связанного»

состояния в «антисвязанное». Если все связи нарушатся, кремний перейдет в жидкую фазу. Но какой будет ситуация в нашем случае? Есть ли при комнатной температуре у идеального кристалла кремния разорванные связи? И как оценить их количество?

Пример 1.4

На каждую разорванную связь в идеальном кристалле кремния приходится электрон, который перешел из валентной зоны в зону проводимости. Используя статистику Больцмана, можно записать:

$$\frac{n_{\text{связанные}}}{n_{\text{свободные}}} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right).$$

При комнатной температуре, когда $kT \approx 0.025$ эВ,

$$\frac{n_{\text{свободные}}}{\approx 10^{24} \text{ атомов/см}^3} = e^{-1/0.025} = e^{-40}$$

$$n_{\text{свободные}} = e^{-40} 10^{24} =$$

$$\left| \log_{10}(n_{\text{свободные}}) = 24 - 40 \log_{10} e = 24 - 40 \times 0.4 = 8 \right| = \\ = 10^8 \text{ связей / см}^3$$

Эти грубые оценки показывают, что в среднем полупроводник, запрещенная зона (разность между энергиями связанных и свободных электронов) которого равна 1 эВ будет содержать около 10^8 разорванных связей в каждом кубическом см. Более точные расчеты, основанные на тех же принципах, дают 10^{10} см^{-3} разорванных связей при комнатной температуре.

Когда связь нарушается, электрон переходит из валентной зоны, или связанной орбитали в зону проводимости или в «антисвязывающую» орбиталь.

2.5. Фононы?

Когда связи не разрушены, они играют роль пружинок, которые держат атомы кристалла на нужном расстоянии друг от друга. Эти пружинки колеблются, таким образом поддерживая данную температуру кристалла. Энергия колебания каждого кристалла составляет $\frac{1}{2}kT$ для каждой степени свободы, в сумме – $\frac{3}{2}kT$. Таким образом, средняя колебательная энергия при комнатной температуре составляет 40 мэВ. Частота и длина волны этих вибраций связаны между собой скоростью звука:

$$v_s = f\lambda.$$

Скорость звука в твердом теле составляет около 10^5 см/с = 10^3 м/с.

Пример 1.5

Как скорость звука v_s соотносится со скоростью света?

$$v_s/c \sim 10^5/10^{10} \sim 10^{-5}$$

Как соотносятся длины волн фотона и фонона одной частоты?

$$\frac{\lambda_s}{\lambda_\phi} = \frac{v_s/f}{c/f} = 10^{-5}$$

Какова частота колебания, имеющего энергию 40 мэВ?

$$f = \frac{E}{h} = \frac{(40 \times 10^{-3})\text{эВ} (1.6 \times 10^{-19})\text{Дж/эВ}}{6.6 \times 10^{-34}\text{Дж} \cdot \text{с}} = 9 \times 10^{12} \text{ Гц} \approx 10^{13} \text{ Гц}.$$

Чему равна длина волны соответствующего фонона?

$$\lambda = v_s/f = 10^5/10^{13} = 10^{-8} \text{ см}.$$

Это всего лишь в несколько раз больше, чем постоянная решетки для Si.

Не является ли такой результат противоречивым?

Нижний предел длин волн равен межатомному расстоянию для кремния, составляющее 0.12×10^{-8} см. Таким образом, длина колебаний решетки равна целому числу постоянных решетки. Эти кванты колебания называются фононами. Их роль состоит в установлении равновесии в полупроводнике.

Выше мы показали, что:

Длина волны электрона с энергией $1 \text{ эВ} = 12 \text{ \AA}$

Длина волны фотона с энергией $1 \text{ эВ} = 1240 \text{ нм}$
 $= 1000 \times \lambda_{\text{электрона}}$
(справедливо только в
районе 1 эВ)

А чему же равна длина волны, соответствующая фонону с энергией 1 эВ? - А фонон с такой энергией **не существует!** Это невозможно, поскольку длина волны была бы много меньше, чем расстояние между атомами, а фонон представляет собой колебание атомов. Однако, длина волны фонона энергией в 40 эВ приблизительно такая же, как и для электрона с энергией 1 эВ.

Поскольку импульс $= h/\lambda$, при комнатной температуре импульс типичного фонона имеет тот же порядок, что и импульс электрона с энергией 1 эВ.

Во время движения в полупроводнике электроны должны сохранять свою энергию и импульс. В этой непрекращающейся борьбе фононы служат источником энергии, дающим очень малый импульс. Когда электрон взаимодействует со светом, электрическим полем, и т.д., как фононы, так и фотоны взаимодействуют с электронами, так что сохраняются и импульс, и энергия.

2.6. Немного истории

Идея де Бройля в свое время вызвала больше вопросов, чем ответов. Главным результатом его предположения стало открытия пути для количественного описания микрочастиц с

помощью волнового уравнения Шредингера, в частности объяснение движения электронов в атомах. У де Бройля было [сомнительное] преимущество – он был еще аспирантом. Он кое-что знал, но этих знаний было немного. Это обстоятельство, по видимому, и сыграло главную роль: он смог увидеть картину целиком, а не отдельные мазки. Позже в своей жизни он сделал намного меньше, чем это открытие; а к его мнению прислушивались лишь из-за известности.

де Бройль защитил свою диссертацию в конце ноября 1924 г. Обложка этой работы приведена на **рис. 2.5**. Она была короткой – всего около 100 страниц. Почти все главы затрагивали специальную теорию относительности в аспекте таких свойств элементарных частиц, как энергия, фаза и распространение лучей света.

В третьем разделе своей работы он неожиданно меняет тему и обращается к гипотезе, выдвинутой Бором, чтобы объяснить существование дискретных уровней энергии в атомах. За семь лет до этого Нильс Бор предположил, что электроны движутся в атоме по стабильным орбитам, позволяя тем самым атомам существовать длительное время, в чем нас убеждает ежедневный опыт. Условие, впервые предложенное Бором, выглядело таким образом:

$$m_0 \omega R^2 = n \frac{h}{2\pi},$$

где m – масса электрона, ω – круговая частота вращения вокруг атома, R – радиус орбиты. Для круговой орбиты $\omega = v/R$, и условие Бора приобретает вид:

$$m_0 v R = n \frac{h}{2\pi} \quad (1.4)$$

Его можно просто интерпретировать: момент импульса электрона (который равен mvR) квантуется в единицах

$$h = \frac{h}{2\pi}.$$

В 1924 году еще никто не понимал, почему наблюдается такое квантование, и каким свойством электрона оно обусловлено.

На странице 44 своей диссертации (**рис. 2.6**) де Бройль предлагает интерпретацию, согласующуюся с его ежедневным опытом: условия Бора похожи на то, как ведут себя волны воды в закрытой круглой емкости. Стационарным состояниям соответствуют стоячие волны.

Стоячие волны воды образуются, когда длина окружности равна целому числу длин волн стоячей волны. Есть лишь определенные длины резервуара, благоприятные для существования стоячих волн. Возможные длины резервуара задаются соотношением $L = n\lambda$. Отметим, что аргументы де Бройля не содержали уравнений.

При подстановке резонансного условия де Бройля в уравнение (1.4) (учитывая, что $R = l/2\pi$), получим:

$$\begin{aligned} m_0 v \left(\frac{l}{2\pi} \right) &= n \frac{h}{2\pi}, \\ m_0 v (n\lambda) &= nh, \\ m_0 v &= \frac{h}{\lambda}. \end{aligned} \tag{1.5}$$

Уравнение (1.5) говорит, что длина волны электрона обратно пропорциональна его импульсу. Этого простого уравнения не было в диссертации де Бройля, отсутствовало также обобщение этого результата на случай свободного электрона или других частиц, - например фотонов. Однако де Бройль, так сказать, выпустил когти из мешка, за что и был удостоен Нобелевской Премии в 1929 г. с формулировкой «первое правдоподобное физическое объяснение условия существования стабильных орбит, предложенных Бором и Зоммерфельдом».

SÉRIE A. N° 988
N° D'ORDRE :
1819

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Louis de BROGLIE

1^{re} THÈSE. — RECHERCHES SUR LA THÉORIE DES QUANTA.

2^e THÈSE. — PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ.

Soutenues le 7^e Novembre 1924 devant la Commission d'examen

MM. J. PERRIN..... *Président.*

CARTAN..... } *Examinateurs.*
MAUGUIN..... }
Paul LANGEVIN.



PARIS

MASSON ET C^{ie}, ÉDITEURS

LIBRAIRES DE L'ACADÉMIE DE MÉDECINE

120, BOULEVARD SAINT-GERMAIN

1924

D.55435

Рис. 2.5. Титульная страница диссертации Луи де Бройля. В то время каждая диссертация должна была посвящаться двум темам: одна выбиралась самим соискателем, вторая – назначалась. Заголовок его темы на выбор гласил «Исследование по теории квантов».

un des rayons de son onde de phase, celle-ci doit courir le long de la trajectoire avec une fréquence constante (puisque l'énergie totale est constante) et une vitesse variable dont nous avons appris à calculer la valeur. La propagation est donc analogue à celle d'une onde liquide dans un canal fermé sur lui-même et de profondeur variable. Il est physiquement évident que, pour avoir un régime stable, la longueur du canal doit être en résonance avec l'onde; autrement dit, les portions d'onde qui se suivent à une distance égale à un multiple entier de la longueur l du canal et qui se trouvent par suite au même point de celui-ci, doivent être en phase. La condition de résonance est $l = n\lambda$ si la longueur d'onde est constante et $\oint \frac{v}{V} dl = n$ (entier) dans le cas général.

Рис. 2.6. Гипотеза де Бройля, выдвинутая в его диссертации, состояла в том, что электроны в атоме ведут себя как волны воды в закрытой круглой емкости. Перевод текста в рамочке: «Распространение электрона, таким образом, аналогично поведению волн жидкости в резервуаре, которые формируют замкнутый путь. Для получения условий стационарности волн, физически очевидно, что длина резервуара для волны должна быть резонансной. Другими словами, части волны, занимающие всю длину резервуара, должны находиться в той же фазе, что и предыдущие части. Условие резонанса: $l = n\lambda$ ».

Наиболее продуктивной частью аргументов де Бройля была, очевидно, идея о том, что **поскольку существует квантование, то должен быть и некий волновой процесс**, связанный с ним.

2.7. Поведение электронов в твердом теле: перемена мест.

Закон дисперсии (зависимость энергии от импульса) для свободного электрона имеет такой же вид, как, скажем, для теннисного мячика. Но поскольку электрону соответствует *волна*, мы можем сопоставить ему *волновую функцию*. Пусть модуль квадрата волновой функции, к примеру, будет такой:

$$\rho = |\Psi|^2 = A \sin(kx) \quad (1.6)$$

Полупроводниковый кристалл есть периодически расположенные атомы. Периодичность свойственна всем физическим величинам, его характеризующим. Это означает, что *разрешенные уровни энергии и импульса также должны быть периодичными:*

$$\rho(x, k) = |\Psi(x, k)|^2 = A \sin(k(x + a)) \quad (1.7)$$

где a = периоду кристаллической решетки.

Это справедливо, если

$$ka = 2\pi$$

или

$$k = \frac{2\pi}{a}.$$

При этих особых значениях k все должно выглядеть одинаково. Поскольку все повторяется, мы просто берем центральную зону $\left[-\frac{\pi}{a}; \frac{\pi}{a}\right]$, в которой содержится неповторяющаяся информация. Эта зона называется «зона Бриллюэна». К слову Бриллюэн был одноклассником де Бройля.

Вид графика (**рис. 2.7**) объясняется периодичностью, или, пользуясь более общим термином, трансляционной симметрией. В зависимости энергии от импульса в кристалле и реальных материалах есть два базовых компонента: симметрия и химический состав. Компонент, вносимый стехиометрическим составом, - это потенциал, который создают атомы кристалла. Атомы Si имеют отличный от атомов Ge потенциал, а зависимость энергии от импульса для Si немного отличается от одной для Ge.

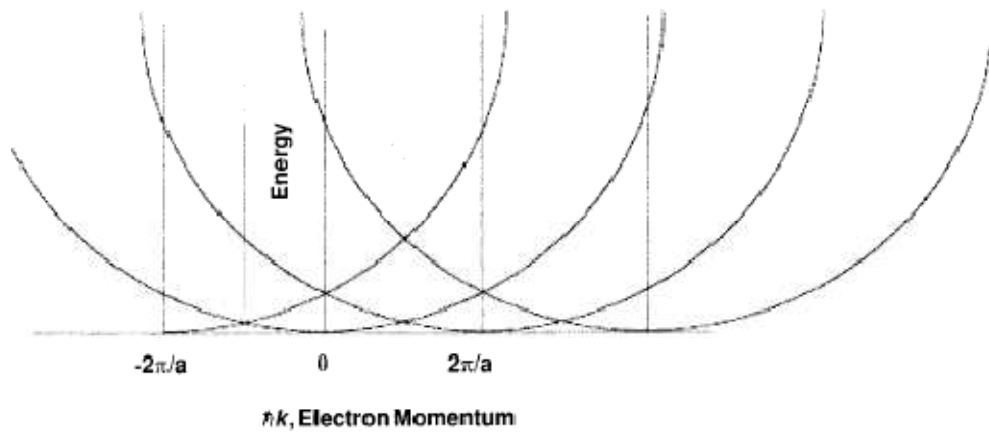


Рис. 2.7. Зависимость энергии электрона от импульса в периодической среде (закон дисперсии). На каждом периоде графика, его структура, как зеркало, отражает одно и то же поведение электрона.

Из закона дисперсии для энергии и импульса можно извлечь информацию о том, какие состояния для электронов в принципе существуют. Чтобы узнать, какие состояния реально заняты, необходима дополнительная информация. На **рис. 2.8** изображена в некотором смысле подобная закону дисперсии карта автомобильных дорог. На ней видно некоторые линии, обозначающие дороги. Эти линии говорят нам о том, какие именно места (или состояния) могут занимать машины в нормальных или равновесных условиях. Однако для того, чтобы знать, какие именно состояния заняты, нужно знать дополнительную информацию. Карта дорог может кое-что сказать также и о скорости автомобилей. Из **рис. 2.8, а** видно, что форма дорог с красивыми прямыми линиями дает нам определенную информацию о местности региона: вероятно, это равнина. На **рис. 2.8, б** показана другая карта. На ней линии не такие простые, указывая на то, что местность содержит спуски и подъемы. Эти отличия в местности – то же самое, что отличия в потенциалах для кристалла. Они играют ту же роль на картах дорог, что и стехиометрия (химический состав) в законе дисперсии для электронов.

Зависимость энергии от импульса также называется зонной структурой. Она показывает, какие значения энергии и

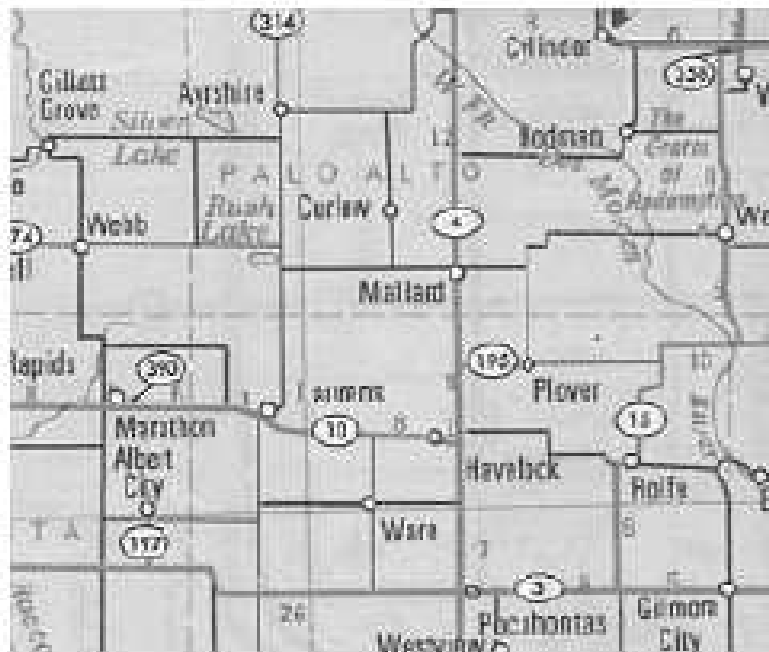
импульса электрона в крайней зоне (или в валентной зоне) разрешены. Зонная структура аналогична карте дорог, она также говорит о том, какие именно стационарные состояния возможны для электрона. Как карта говорит о том, в каких местах может ехать машина. Зонная структура также говорит о свойствах электрона, который будет иметь ту или иную энергию подобно тому, как на карте есть шоссе и небольшие улочки, в которых свойства машин также отличаются, к примеру, допустимыми скоростями и правилами движения.

Электрон – сильно отличается от теннисного мячика не только своим весом и размером, но и тем, что задача определения его скорости (импульса) и положения имеет ограниченный смысл в силу принципа неопределенности Гейзенберга и тем, что размер электрона не вполне определен. Полностью свободный электрон находится во всем пространстве с одинаковой вероятностью. Поскольку положение такой волны тяжело определить, одинаково тяжело определить и скорость.

С другой стороны, энергия и импульс электрона определить можно. Более того, условия, которые определяют взаимодействие электрона в твердом теле с фотонами, фононами, и другими электронами – это *законы сохранения энергии и законы сохранения импульса*. Таким образом, «карта дорог», в которой дается описание возможных состояний электрона в пространстве энергии и импульса – это очень важный инструмент.

Зонные структуры можно свести в две большие группы. Есть две зоны, между которыми существует запрещенная зона. Если минимальная энергия высшей зоны наблюдается при том же значении импульса, что и максимальная энергия низшей зоны, соответствующий материал называется *прямозонным*. Такого типа зонная структура показана на **рис. 2.9**. Во всех остальных случаях материал считается *непрямозонным*.

Прямозонность или непрямозонность материала полностью определяется потенциалом кристаллической решетки, который вызывает расщепление зон.



(a)



(b)

Рис. 2.8. На обычной карте автомобильных дорог показывают стационарные состояния, в которых могут находиться автомобили. Карта не говорит, где сейчас находятся автомобили и как быстро они движутся. Положение состояний зависит, по большому счету, от кратчайшего расстояния между двумя точками с учетом барьеров, обусловленных местностью. На **рис. 2.8, а** показана карта равнинной местности. Есть

несколько вариаций потенциала, а дороги – прямые. На **рис. 2.8, б** показана пересеченная местность. Из-за этого дороги извивисты.

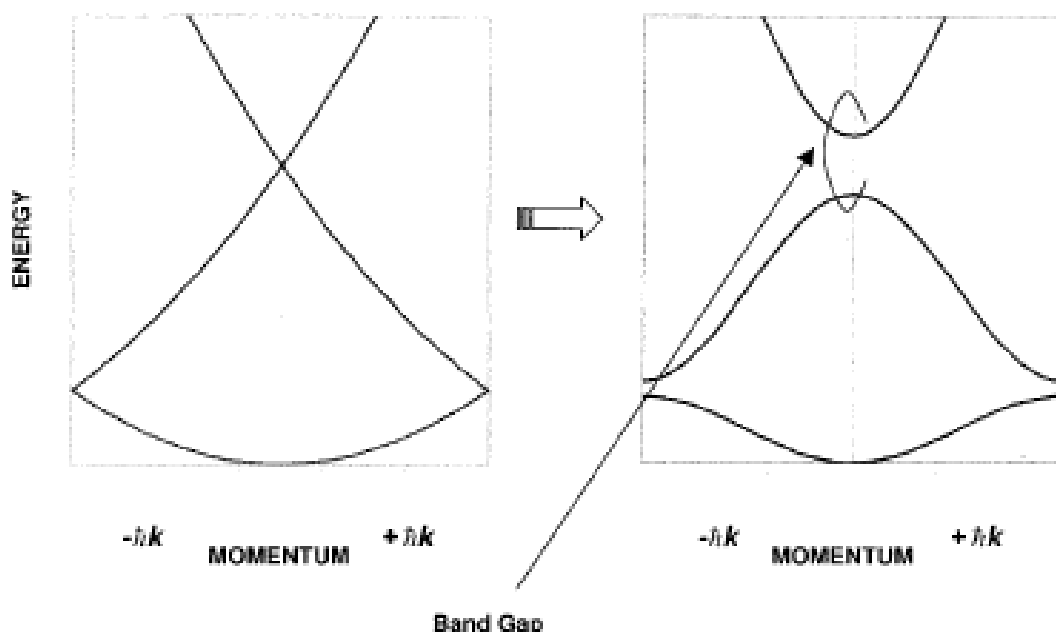


Рис. 2.9. Дисперсионное соотношение показывает зоны допустимой энергии электрона. Когда электрон находится в кристалле, периодический атомный потенциал вызывает «открытие энергетических щелей» [в англ. языке «запрещенная зона» звучит как «*energy gap*», что переводится дословно как «энергетическая щель»]. Существование щели означает, что электрон не может обладать такими энергиями.

Расщепление символически показано на **рис. 2.9**. На рис. 2.10 и 2.11, мы показываем, как происходит расщепление в реальной зонной структуре GaAs и Ge. Кристаллический потенциал – это прямое отражение структуры атомов, формирующих материал Si. Таким образом, отличие прямозонных материалов от непрямозонных есть предмет изучения химии.

Ширина запрещенной зоны представляет собой разность энергии электрона в связанном и обобществленном («*antibonding*») состоянии. В обобществленном состоянии электрон может принимать участие в токопереносе, поэтому эти «верхние» состояния также известны как «зона

проводимости». Связанные состояния или нижняя зона также известны как «валентная зона».

Электрон, занимающий состояние с минимальной энергией в зоне проводимости может совершить переход на потолок валентной зоны, при условии, что это состояние не занято. Эти состояния пренебрежительно мало отличаются по значению импульса. Сохранение энергии обеспечивается эмиссией фотона. Поскольку импульс фотона по сравнению с импульсом электрона пренебрежительно мал, при таком переходе сохраняются как энергия, так и импульс. Такие переходы называются *прямыми*.

Для сравнения, рассмотрим электрон, занимающий состояние на дне зоны проводимости в непрямозонном материале. Этот случай отличается от вышеописанного. Разница импульсов между этими двумя состояниями уже не «пренебрежительно мала». Электрон может совершить переход в состояние на потолке валентной зоны, излучив фотон (что обеспечит сохранение энергии), и последующим излучением фонона соответствующей длины, (что обеспечить сохранение импульса). Такой переход называется *непрямым*, поскольку он состоит из двух стадий.

В случае, показанном на **рис. 2.10**, состояния на потолке валентной зоны и дне зоны проводимости не отличаются импульсом. На **рис. 2.11** показан другой случай. В этом случае импульс электрона в состоянии с наименьшей энергией в зоне проводимости отличается от импульса электрона с наибольшей энергии в валентной зоне. В состоянии равновесия при $T = 0$ К все состояния валентной зоны заняты, а все состояния зоны проводимости – свободны. Теперь давайте оборвем связь в Ge. Это означает, что у электрона появилась достаточная избыточная энергия для перехода из связанного в обобщественное состояние. Наименьшее количество избыточной энергии – это ширина зоны проводимости. В германии оно равно 0.7 эВ (мы используем эВ как единицу измерения, чтобы не удерживать в сознании

немыслимые порядки 10 , которые были бы, оперируя мы единицами СИ). Для кремния непрямозонная запрещенная зона равна 1.1 эВ.

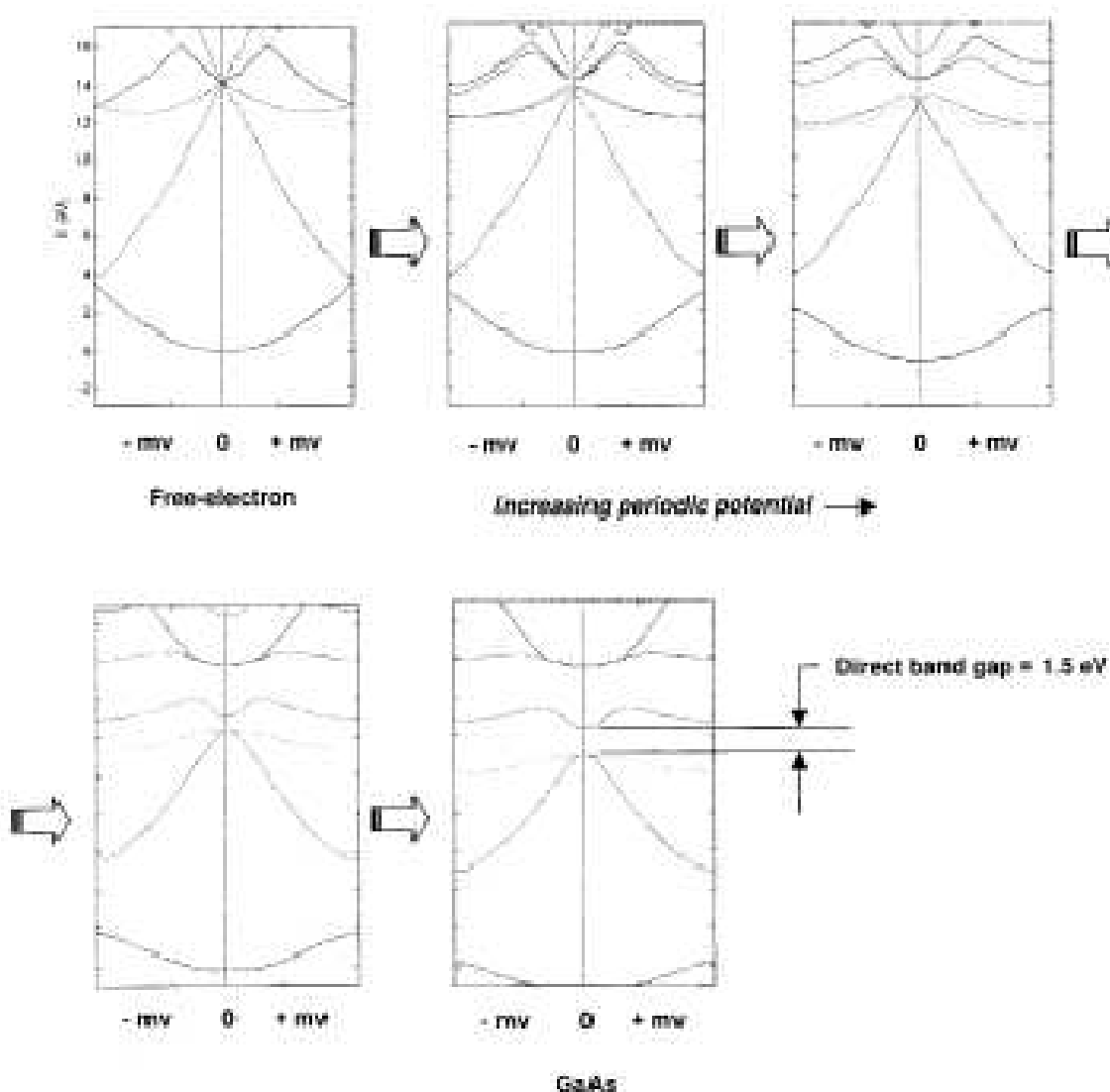


Рис. 2.10. При помощи ряда последовательных приближений показано, как периодический потенциал изменяет дисперсионные кривые для реального трехмерного полупроводника GaAs. На первом графике можно ясно видеть параболическую зависимость между энергией по вертикальной оси и импульсом по горизонтальной оси. В последующих графиках мы добавляем дополнительные потенциалы, которые обусловлены реальными атомами. Это заставляет пересекающиеся кривые расщепляться. Когда мы доходим до GaAs, между валентной зоной и зоной проводимости формируется запрещенная зона. Поскольку минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны наблюдаются при одинаковых значениях импульса, это прямозонный полупроводник. GaAs, InP, GaInAsP и GaN – прямозонные полупроводники.

Из дисперсионных кривых для Ge видно, что для совершения наименее энергозатратного перехода электрону необходимо получить дополнительный импульс. Таким образом, переход в обобществленное состояние не прямой. Для его осуществления нужны два шага: первое – приобретение энергии, второе – одновременное получение требуемого импульса, обусловленного колебаниями кристаллической решетки. Такой процесс называется прямым переходом, а германий, соответственно, непрямозонным полупроводником.

Глядя на зонную структуру GaAs, можно сказать, что переходы могут осуществляться «за один заход» с малым изменением или вовсе без изменения импульса. Это происходит, поскольку электрон в валентной зоне имеет максимальную энергию при таком же значении импульса, при котором он обладает минимальной энергией в зоне проводимости. Поскольку фотон может передавать электрону энергию, фактически не передавая при этом импульса, электрон может поглотить единственный фотон и совершить переход запрещенную зону прямо. Такие переходы называются прямыми, а соответствующие полупроводники (напр., GaAs) называются прямозонными полупроводниками.

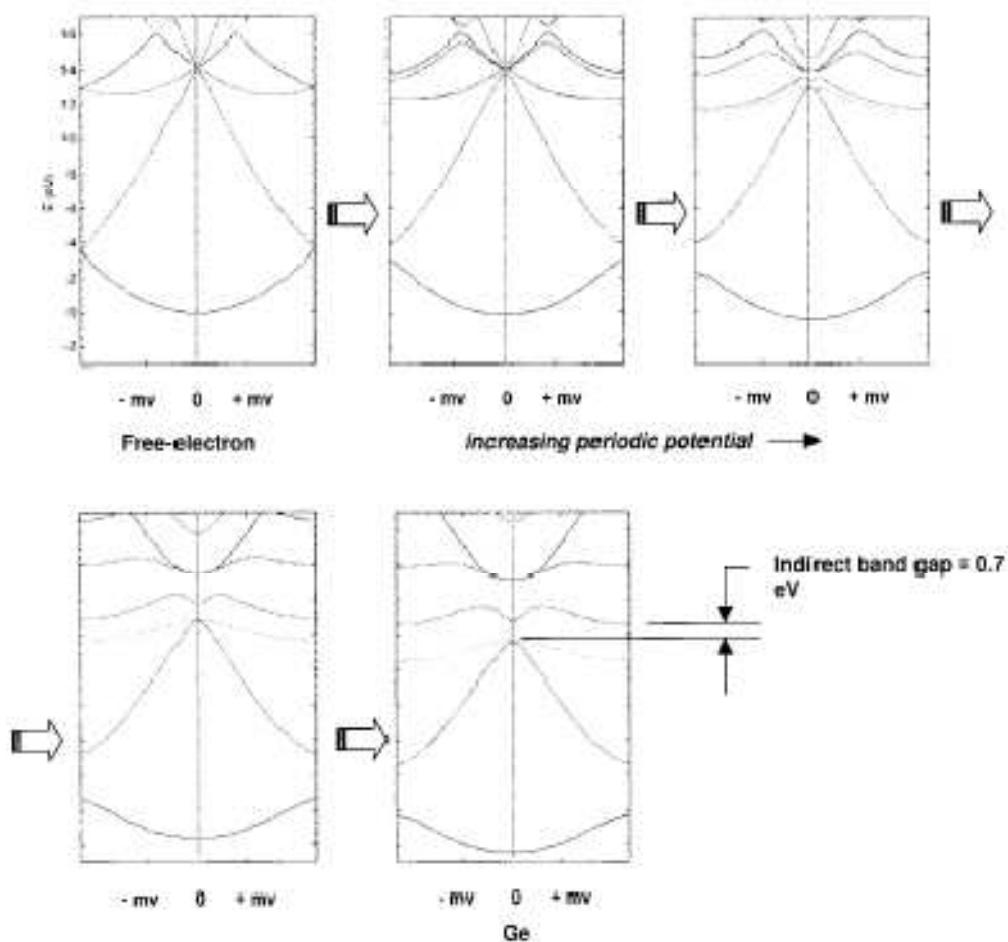


Рис. 2.11. При помощи ряда последовательных приближений показано, как периодический потенциал изменяет дисперсионные кривые для другого полупроводника – Ge. На первом графике можно ясно видеть параболическую зависимость между энергией по вертикальной оси и импульсом по горизонтальной оси. Он идентичный первому графику из **рис. 2.10**, поскольку мы начинаем из того же случая, случая свободного электрона. В последующих графиках мы добавляем периодический потенциал, обусловленный реальными атомами Ge. Это вызывает расщепление ранее пересекающихся кривых. Когда мы доходим до Ge, между зоной проводимости и валентной зоной уже существует щель (запрещенная зона). Однако минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны имеют место при разных значениях импульса. Это непрямоугольная энергетическая щель (непрямоугольная запрещенная зона). Si и Ge – примеры непрямоугольных полупроводников.