

щенная зона». В противоположность запрещенным, энергетические зоны, о которых мы говорили выше, называются *разрешенными*.

Ситуация, соответствующая случаю (4.7а), изображена на рис. 3.2, а. Разрешенные зоны, в которых лежат собственные значения энергии, заштрихованы; между ними расположена запрещенная зона.

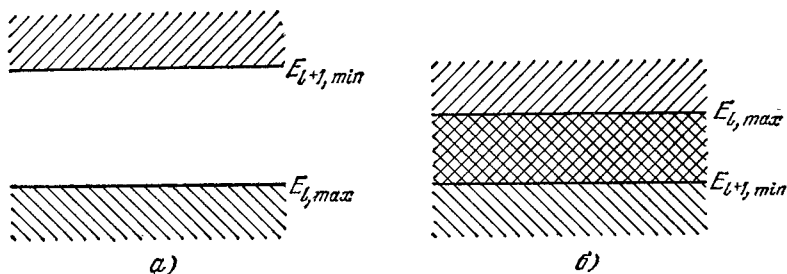


Рис. 3.2. Энергетические зоны: а) неперекрывающиеся; б) перекрывающиеся.

В случае (4.7б) мы будем говорить, что  $l$ -тая и  $(l + 1)$ -я зоны перекрываются (или смыкаются, если имеет место знак точного равенства). Запрещенной зоны здесь, очевидно, нет. Такая ситуация изображена на рис. 3.2, б. Разрешенные зоны ( $l$ -тая и  $(l + 1)$ -я) заштрихованы там в разных направлениях; значения энергии из области, покрытой двойной штриховкой, принадлежат обеим зонам.

Характеристики зонного спектра, т. е. ширины разрешенных и запрещенных зон, значения квазиимпульса, при которых функции  $E_l(p)$  достигают максимумов и минимумов, и т. п. определяются конкретными особенностями данного кристалла. Их можно найти, решая уравнение Шредингера для данной конкретной системы. Практически, однако, проще определять необходимые величины непосредственно из опыта (см. § IV.3 и гл. XVIII).

## § 5. Метод сильно связанных электронов

Доказанная в § 2 теорема Блоха приводит к выводу о зонном характере энергетического спектра идеального кристалла. Она, однако, не раскрывает физического механизма образования зон. Существо дела можно понять, рассматривая, как дискретные энергетические уровни, характерные для свободных атомов, превращаются в зоны при постепенном сближении атомов и объединении их в кристаллическую решетку. Для явного решения этой задачи удобно воспользоваться приближенным методом, предложенным впервые также Ф. Блохом и применимым, когда расстояния между соседними атомами велики по сравнению с их размерами. Для упрощения выкладок будем рассматривать не трехмерный кристалл,

а одномерную бесконечную цепочку одинаковых периодически расположенных одновалентных атомов. Обобщение на случай трех измерений и атомов большей валентности требует — в рамках данного метода — лишь не принципиального усложнения вычислений.

Пусть нам известна волновая функция валентного электрона в изолированном атоме. Обозначим ее через  $\varphi_g(\mathbf{r} - \mathbf{R}_g)$ , где  $g$  — номер атома в цепочке,  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{R}_g$  — радиус-векторы электрона и  $g$ -го атомного остова \*). Функция  $\varphi_g$  удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \varphi_g + U_g(\mathbf{r}) \varphi_g = E_a \varphi_g. \quad (5.1)$$

Здесь  $U_g(\mathbf{r})$  — потенциальная энергия взаимодействия электрона с  $g$ -м атомом,  $E_a$  — собственное значение энергии, принадлежащее собственной функции  $\varphi_g$ , т. е. дискретный энергетический уровень валентного электрона в данном атоме. Будем считать, что функция  $\varphi_g$  описывает  $s$ -состояние. Тогда уровень с энергией  $E_a$  вырожден (двукратно) только по спину.

Волновые функции, описывающие дискретные атомные уровни, быстро убывают по мере удаления электрона от ядра. Асимптотически на больших расстояниях  $\varphi_g$  ведет себя, в основном, как показательная функция:

$$\varphi_g \sim \exp \left\{ -\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_g|}{r_a} \right\}, \quad (5.2)$$

где  $r_a$  — константа размерности длины. Она играет роль «эффективного радиуса» атома и часто называется радиусом валентной орбиты. Мы будем считать ее малой по сравнению с расстоянием между соседними атомами  $d$ :

$$r_a \ll d. \quad (5.3)$$

В реальных кристаллах это условие, как правило, не выполняется; поэтому излагаемый ниже метод расчета, основанный, по существу, на неравенстве (5.3), может иметь только ориентировочное значение. Тем не менее он позволяет понять физическую причину образования энергетических зон и разобраться в ряде их характеристик.

В силу предположения об идентичности атомов цепочки, функции  $\varphi_g$  с различными номерами  $g$  отличаются друг от друга лишь тем, что они «центрированы» около различных атомов; уровни энергии, которые им принадлежат, разумеется, одинаковы, почему мы и не снабдили  $E_a$  значком  $g$ .

При постепенном сближении атомов электрон начинает взаимодействовать не только со «своим», но и с «чужими» атомными остовами. Соответствующее уравнение Шредингера имеет вид (2.4).

\*) Если направить, например, ось  $x$  вдоль цепочки, то  $\mathbf{R}_g$  есть вектор с компонентами  $\{dg, 0, 0\}$ .

Условие (5.3) позволяет ожидать, что вблизи каждого атомного остова валентный электрон движется в основном так же, как и в изолированном атоме. Иначе говоря, вблизи  $g$ -го атомного остова волновая функция электрона в цепочке  $\psi$  должна быть близка к  $\varphi_g$ . В соответствии со сказанным будем искать решение уравнения (2.4) в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_g a_g \varphi_g, \quad (5.4)$$

где  $a_g$  — коэффициенты, подлежащие определению. Подставляя (5.4) в (2.4), мы имеем

$$\sum_{g=-\infty}^{+\infty} a_g \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \varphi_g + (U - U_g) \varphi_g + U_g \varphi_g - E \varphi_g \right\} = 0. \quad (5.5)$$

С учетом уравнения (5.1) равенство (5.5) принимает вид

$$\sum_{g=-\infty}^{+\infty} a_g \{ (E_a - E) \varphi_g + (U - U_g) \varphi_g \} = 0. \quad (5.6)$$

Для определения коэффициентов  $a_g$  умножим обе части уравнения (5.6) на комплексно сопряженную волновую функцию  $\varphi_{g'}^*$  электрона в изолированном атоме  $g'$  и проинтегрируем по координатам электрона  $\mathbf{r}$ . Введем обозначения

$$\int \varphi_{g'}^* \varphi_g \, d\mathbf{r} = S_{g'g}, \quad \int \varphi_{g'}^* (U - U_g) \varphi_g \, d\mathbf{r} = U_{g'g}. \quad (5.7)$$

Получим следующую систему уравнений:

$$\sum_{g=-\infty}^{+\infty} a_g \{ (E_a - E) S_{g'g} + U_{g'g} \} = 0. \quad (5.8)$$

Очевидно,  $S_{gg} = 1$ , так как это просто нормировочный интеграл для функции  $\varphi_g$ . Однако при  $g' \neq g$  интеграл  $S_{g'g}$  не равен нулю. Можно лишь утверждать, что он мал по сравнению с единицей: из условия (5.3) и асимптотического вида волновых функций (5.2) вытекает, что с увеличением расстояния между атомами интегралы  $S_{g'g}$  и  $U_{g'g}$  убывают, в основном, как  $\exp\left(-\frac{d}{r_a} |g' - g|\right)$ . Величину  $S_{g'g}$  при  $g' \neq g$  иногда называют *интегралом неортогональности* или интегралом перекрытия. Величина  $U_{g'g}$  при  $g' \neq g$  называется *интегралом переноса*.

Поскольку все атомы цепочки одинаковы, интегралы  $S_{g'g}$  и  $U_{g'g}$  не могут зависеть от того, где именно расположены  $g$ -й и  $g'$ -й атомы: существенно только расстояние между ними. Это означает, что  $S_{g'g}$  и  $U_{g'g}$  зависят только от абсолютного значения разности аргументов:

$$S_{g'g} = S(|g' - g|), \quad U_{g'g} = U(|g' - g|). \quad (5.9)$$

Равенства (5.9) представляют собой математическое выражение условия идентичности всех атомов решетки и постоянства расстояния между соседними атомами. Иначе говоря, они выражают условие трансляционной инвариантности рассматриваемой нами системы.

Принимая во внимание равенства (5.9), легко в явном виде найти решение системы (5.8). Действительно, положим

$$a_g = N e^{i\lambda g}, \quad (5.10)$$

где нормировочный множитель  $N$  и параметр  $\lambda$  не зависят от  $g$ .

Поскольку волновая функция должна быть квадратично интегрируема, параметр  $\lambda$  должен быть вещественным. Действительно, при комплексных (или чисто мнимых) значениях  $\lambda$  коэффициент  $a_g$  (а с ним и вся волновая функция  $\psi$ ) обращался бы в бесконечность при  $g \rightarrow \infty$  или при  $g \rightarrow -\infty$ .

Выбор решения в виде (5.10) с вещественными значениями  $\lambda$  имеет ясный физический смысл. В самом деле, квадраты модулей отдельных членов ряда в (5.4) характеризуют вероятность найти электрон вблизи  $g$ -го атомного остова. Чтобы убедиться в этом, вспомним, что вероятность найти электрон в некотором элементе объема  $\Delta V$  дается интегралом по этому объему  $\int_{\Delta V} |\psi|^2 d\mathbf{r}$ . Подставляя сюда  $\psi$  в виде (5.4) и замечая, что в силу (5.3) функции  $\varphi_g$  и  $\varphi_{g'}$  при  $g' \neq g$  почти не перекрываются, мы получаем

$$\int_{\Delta V} |\psi|^2 d\mathbf{r} \simeq \sum_{g'=-\infty}^{+\infty} |a_{g'}|^2 \int_{\Delta V} |\varphi_{g'}|^2 d\mathbf{r} \simeq |a_g|^2,$$

если  $\Delta V$  есть малый элемент объема, окружающий  $g$ -й атомный остов.

Поскольку, согласно (5.10),  $|a_g|^2 = \text{const}$ , электрон в состоянии (5.4) с равной вероятностью может быть обнаружен около любого атома цепочки — в полном согласии с трансляционной инвариантностью системы.

Подставляя (5.10) в (5.8) и принимая во внимание (5.9), мы получаем

$$N \sum_{g=-\infty}^{+\infty} \{(E_a - E) S(|g' - g|) + U(|g' - g|)\} e^{i\lambda g} = 0.$$

Произведем здесь замену переменной суммирования, полагая  $g' - g = g''$ . Сокращая затем на  $e^{i\lambda g'}$ , находим

$$N \sum_{g''=-\infty}^{+\infty} \{(E_a - E) S(|g''|) + U(|g''|)\} e^{-i\lambda g''} = 0. \quad (5.11)$$

Это равенство уже не содержит аргумента  $g'$ , чем и доказывается правильность выбора решения в виде (5.10).

Поскольку  $N \neq 0$ , равенство (5.11) означает, что в нуль должна обращаться сумма по  $g''$ . Это есть условие для определения собственных значений энергии электрона. Заменяя индекс суммирования  $g''$  на  $g$ , имеем:

$$E = E_a + \frac{\sum_{g=-\infty}^{+\infty} U(|g|) e^{-i\lambda g}}{\sum_{g=-\infty}^{+\infty} S(|g|) e^{-i\lambda g}}. \quad (5.12)$$

Равенство (5.12) можно переписать в виде

$$E = E_a + \frac{U(0) + 2 \sum_{g=1}^{\infty} U(g) \cos \lambda g}{1 + 2 \sum_{g=1}^{\infty} S(g) \cos \lambda g}. \quad (5.12')$$

Суммы по  $g$  в (5.12) или (5.12') представляют собой периодические функции  $\lambda$  с периодом  $2\pi$ .

Легко видеть, что с точностью до множителя  $d^{-1}$  параметр  $\lambda$  представляет собой не что иное, как одномерный аналог квази-волнового вектора  $\mathbf{k}$ , введенного в § 2 из общих соображений. Действительно, волновую функцию (5.4) с учетом (5.10) можно переписать в виде

$$\Psi = N \sum_{g=-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda g} \varphi_g(\mathbf{r} - \mathbf{R}_g). \quad (5.13)$$

Введем вектор  $\mathbf{k}$  с компонентами  $\{\lambda d^{-1}, 0, 0\}$  и заметим, что компоненты вектора  $\mathbf{R}_g$  суть, по определению,  $\{dg, 0, 0\}$ . Тогда формулу (5.13) можно переписать в виде

$$\Psi = N \sum_{g=-\infty}^{+\infty} \varphi_g(\mathbf{r} - \mathbf{R}_g) e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{R}_g - \mathbf{r}) + i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (5.14)$$

Очевидно, определяемая этим соотношением функция

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N \sum_{g=-\infty}^{+\infty} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{R}_g - \mathbf{r})} \varphi_g(\mathbf{r} - \mathbf{R}_g) \quad (5.15)$$

периодична с периодом нашей одномерной решетки  $d$ . Действительно, пусть  $\mathbf{a}$  есть вектор с компонентами  $\{d, 0, 0\}$ . Для функции  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$  мы имеем

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = N \sum_{g=-\infty}^{+\infty} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{R}_g - \mathbf{r} - \mathbf{a})} \varphi_g(\mathbf{r} - \mathbf{R}_g + \mathbf{a}). \quad (5.16)$$

Производя здесь замену переменной суммирования  $g = g' + 1$ , убеждаемся, что правые части равенств (5.15) и (5.16) одинаковы.

Итак, выражение (5.14) есть частный случай общей формулы (2.15): волновая функция  $\psi$  представляет собой произведение плоской волны  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  на функцию, периодическую с периодом решетки.

Формулы (5.12), (5.12') также находятся в полном соответствии с § 4. В самом деле, период обратной решетки в данном случае равен  $b = 2\pi/d$ . Следовательно, собственные значения энергии  $E$  периодически зависят от  $\mathbf{k}$  с периодом  $b$ , как это и должно быть. Интервал  $(-b/2, +b/2)$  определяет первую (одномерную) зону Бриллюэна. Видно, далее, что  $E$  есть четная функция  $\mathbf{k}$  — опять в соответствии с результатами § 4.

Аналогичные формулы (в принятых выше предположениях) справедливы и для двух- и трехмерного случая. Так, для энергии электрона в простой трехмерной кубической решетке одновалентных атомов мы получаем

$$E = E_a + \frac{\sum_{\mathbf{g}} U(|\mathbf{g}|) e^{-i\lambda\mathbf{g}}}{\sum_{\mathbf{g}} S(|\mathbf{g}|) e^{-i\lambda\mathbf{g}}}, \quad (5.17)$$

где  $\mathbf{g}$  — вектор, компоненты которого суть целые числа (или нули). Вектор  $\lambda$  очевидным образом связан с квазиволновым вектором  $\mathbf{k}$ :

$$\lambda_x = ak_x \quad \text{и т. д.}$$

В силу неравенства (5.3) величины  $U(|\mathbf{g}|)$  и  $S(|\mathbf{g}|)$  быстро убывают с ростом аргумента  $|\mathbf{g}|$ . По этой причине в рядах, фигурирующих в правых частях (5.12), (5.12') и (5.17), можно оставить только первые члены. Тогда равенство (5.12') принимает вид

$$E = E_a + U(0) + 2[U(1) - U(0)S(1)] \cos \lambda. \quad (5.12'')$$

Интегралы  $S_{\mathbf{g}'\mathbf{g}}$  и  $U_{\mathbf{g}'\mathbf{g}}$  можно вычислить, зная волновые функции электронов в изолированных атомах. Иногда, однако, эти величины (или подходящие их комбинации) рассматривают просто как параметры, подлежащие определению из опыта. При этом недостатки рассматриваемого метода расчета исчезают, но зато теряется возможность непосредственно связать структуру зон с химическими свойствами атомов, образующих кристалл.

Формула (5.12''), как, впрочем, и (5.12') и (5.17), ясно показывает, как влияет поле кристаллической решетки на энергетический спектр электронов.

Во-первых, атомный уровень  $E_a$  сдвигается на постоянную — не зависящую от  $\lambda$  — величину  $U(0)$ . Смысл ее очевиден: согласно (5.9) и (5.7)

$$U(0) = \int \varphi_{\mathbf{g}}^*(\mathbf{r}) (U - U_{\mathbf{g}}) \varphi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (5.18)$$

Таким образом,  $U(0)$  есть средняя энергия электрона, локализованного на каком-нибудь одном ( $\mathbf{g}$ -м) атоме решетки, в поле всех

остальных атомов (результат, разумеется, не зависит от  $g$  — сдвиг энергии для всех атомов один и тот же).

Во-вторых, дискретный атомный уровень «размывается» в зону: при изменении параметра  $\lambda$  от  $-\pi$  до  $+\pi$  последнее слагаемое в правой части (5.12'') непрерывно изменяется в интервале от  $-2 |U(1) - U(0) S(1)|$  до  $+2 |U(1) - U(0) S(1)|$  (знак разности  $U(1) - U(0) S(1)$  в принципе может быть любым; для дальнейших выводов он несуществен). Все значения энергии в этом интервале дозволены: им соответствуют всюду ограниченные волновые функции (5.14), характеризующиеся (как и энергия  $E$ ) различными значениями параметра  $\lambda$ . Ширина этого интервала, т. е. «ширина разрешенной зоны», равна

$$4 |U(1) - U(0) S(1)|.$$

Согласно (5.9) и (5.7) она определяется степенью перекрытия волновых функций соседних атомов  $\varphi_g$  и  $\varphi_{g \pm 1}$ . С уменьшением перекрытия (т. е. с увеличением расстояния между атомами  $d$ ) ширина зоны быстро (экспоненциально) стремится к нулю — зона «стягивается» в дискретный уровень (возмущенный, может быть, присутствием других атомов согласно (5.18)). Зависимость  $E$  от параметра  $\lambda$  при этом исчезает.

Знак разности  $U(1) - U(0) S(1)$  определяет, лежит ли минимум энергии (5.12'') (т. е. дно зоны) в точке  $\lambda = 0$  ( $k = 0$ ) или в точке  $\lambda = \pi$ , т. е. в центре или на границе зоны Бриллюэна \*). Вблизи минимума функция (5.12'') имеет вид

$$E = E_0 + d^2 |U(1) - U(0) S(1)| k^2, \quad (5.19)$$

где  $E_0$  есть минимальное значение энергии, а величина  $k$  отсчитывается от точки минимума. Выражение (5.19) формально совпадает с формулой для энергии свободной частицы  $\hbar^2 k^2 / 2m_0$ , если массу последней  $m_0$  заменить выражением

$$m = \frac{\hbar^2}{2d^2 |U(1) - U(0) S(1)|}. \quad (5.20)$$

Величина  $m$  носит название *эффективной массы*. Заметим, что она убывает вместе с увеличением ширины разрешенной зоны.

Аналогично, вблизи максимума энергии (потолка зоны) мы имеем

$$E = \text{const} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'}, \quad m' < 0, \quad (5.21)$$

где число  $k$  отсчитывается от точки максимума. Константы здесь и в формуле (5.19), разумеется, различны; разность их равна ширине разрешенной зоны.

\*) Точки  $\lambda = \pi$  и  $\lambda = -\pi$  физически эквивалентны, и, как указывалось в § 4, их следует рассматривать как одну точку.

Правая часть (5.21) также похожа на формулу для кинетической энергии свободной частицы, но теперь эффективная масса  $m'$  отрицательна (в случае (5.12') она по абсолютной величине совпадает с  $m$ ; вообще же величины  $m$  и  $|m'|$  могут быть и различными).

Как уже отмечалось, электрон, описываемый волновой функцией (5.13), с равной вероятностью может быть обнаружен около любого атома цепочки. Это обстоятельство на первый взгляд представляется парадоксальным. Действительно, график потенциальной энергии электрона в рассматриваемой цепочке представляет собой совокупность чередующихся потенциальных ям, связанных с каждым атомным остовом, и «горбов» (рис. 3.3). Казалось бы, можно «запереть» электрон внутри какой-либо одной ямы, если полная энергия его  $E$  меньше потенциальной энергии на «горбе» (пунктирная линия на рис. 3.3). Это рас-

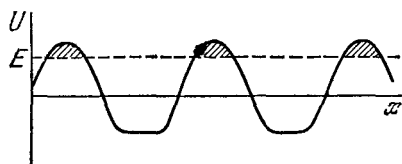


Рис. 3.3. Потенциальная энергия электрона в одномерной цепочке одинаковых атомов как функция координаты (схематически).

суждение, однако, целиком основано на классических представлениях, которые в данном случае недостаточны. В квантовой механике показывается, что «запереть» электрон в потенциальной яме конечной глубины и ширины невозможно: существует конечная вероятность обнаружить электрон в области барьера, окружающего яму (заштрихованные участки на рис. 3.3). Если, как это и имеет место в нашем случае, рядом с данной потенциальной ямой есть другие (где электрон может иметь ту же энергию), то возникает возможность изоэнергетического туннельного перехода электрона из одной ямы в другую. При этом он уже не связан с каким-либо отдельным атомом решетки, а обобществляется между ними. Именно этот туннельный эффект и позволяет электронам беспрепятственно перемещаться через кристалл без предварительной термической активации.

Вероятность туннельного перехода определяется степенью перекрытия волновых функций электрона в соседних потенциальных ямах, т. е., в нашем случае, интегралами  $S_{g'g}$  и  $U_{g'g}$ . При безграничном раздвижении атомов вероятность туннельного эффекта обращается в нуль. И действительно, в неионизованном газе электроны локализованы у «своих» атомов.

В условиях, нами рассматриваемых (размеры атомов малы по сравнению с расстоянием между ними), вероятность туннельного перехода оказывается небольшой: электроны довольно сильно связаны со «своими» атомами \*).

\*) Отсюда — название «метод сильно связанных электронов».



Связь между вероятностью туннельного перехода и расстоянием между атомами позволяет наглядно интерпретировать зависимость эффективной массы от интегралов неортогональности и переноса (5.7). Именно уменьшение вероятности перехода (т. е. уменьшение  $S_{g'g}$  и  $U_{g'g}$ ) затрудняет перемещение электрона по кристаллу, что выражается, в частности, в «утяжелении» его:  $m \rightarrow \infty$  при  $S(1)$  и  $U(1) \rightarrow 0^*$ ). Тот факт, что вероятность туннельного перехода приближенно пропорциональна ширине разрешенной зоны, не должен вызывать удивления. Действительно, образование зон и туннельное просачивание электронов с одного атома на другой представляют собой два аспекта одного и того же явления — обобществления электронов между всеми атомами решетки, — наступающего благодаря перекрытию атомных волновых функций.

Итак, энергетические зоны в кристаллах возникают в результате «размытия» дискретных атомных уровней, обусловленного взаимодействием электронов с соседними (и, может быть, более далекими) атомами решетки и перекрытием волновых функций соседних атомов. Этот вывод, к которому мы пришли на основании приближенного расчета простейшей модели, оказывается совершенно общим. С другой стороны, как уже отмечалось, полученные в настоящем параграфе количественные соотношения на большую точность претендовать не могут \*\*).

Тем не менее метод сильно связанных электронов иногда оказывается полезным. Главное его достоинство состоит в том, что он позволяет установить связь между характеристиками энергетических зон и химическими свойствами атомов, образующих кристалл, в частности — типом химической связи в данном материале. Действительно, расчет, изложенный в настоящем параграфе, нетрудно обобщить на более сложные случаи, принимая во внимание трехмерность задачи, наличие нескольких атомных уровней и т. д. (см., например, [M7]). При этом оказывается, что каждому атомному уровню соответствует столько зон, какова его кратность вырождения, причем различные зоны могут и перекрываться. Иначе говоря, вырожденным атомным уровням обычно соответствуют и вырожденные зоны. Аналогичным образом обстоит дело и в тех случаях, когда уровни энергии валентных электронов в атомах не вырождены, но достаточно близки по энергии.

Соответствующие волновые функции можно представить в виде сумм типа (5.4), с той лишь разницей, что теперь суммирование ведется не только по номерам атомов, но и по атомным состояниям, принимаемым нами в расчет. Иначе говоря, при образовании зон в результате размытия вырожденных или близких по энергии уровней роль «атомных функций»  $\varphi_g$  играют линейные комбинации

\*) С этим связано и само название «интеграл переноса».

\*\*\*) Обзор современных методов расчета зонной структуры твердого тела, претендующих на количественную точность, можно найти в книге [3].

атомных функций, принадлежащих названным уровням. Об этом говорят как о гибридизации соответствующих атомных состояний.

Эти качественные выводы не связаны непременно с условием (5.3); соответственно они дают известную ориентацию и в условиях, когда метод сильно связанных электронов в буквальной своей форме уже не применим. То же относится и к выводам о свойствах симметрии блоховских волновых функций; эта информация оказывается существенной во многих задачах, например в задаче о поглощении или испускании света при переходах электронов из одной энергетической зоны в другую (гл. XVIII).

## § 6. Закон дисперсии. Изоэнергетические поверхности

Ситуация, с которой мы встретились в двух последних параграфах, характерна для современной теории твердого тела. Именно, часто оказывается возможным, исходя из довольно общих физических соображений, выяснить некоторые общие особенности и свойства энергетического спектра системы, однако попытка явного расчета, например зависимости энергии от квазиимпульса, встречается с большими математическими трудностями. Как правило, при этом приходится вводить ряд упрощающих предположений и аппроксимаций. По этой причине важную роль играет экспериментальное исследование зонной структуры твердого тела. Чтобы правильно поставить его, надо прежде всего выяснить, с помощью каких понятий и величин удобно описывать энергетический спектр электронов в кристаллической решетке.

Введем прежде всего представление о *законе дисперсии*. Так называется зависимость энергии от квазиимпульса в разрешенной зоне \*).

Закон дисперсии удобно изображать графически. Обычно пользуются одним из двух представлений.

Во-первых, можно фиксировать две из трех компонент квазиимпульса. Пусть, например, фиксированы компоненты  $p_y$  и  $p_z$ . Тогда зависимость  $E_l(p_x)$  определяет некоторую кривую на плоскости  $(E_l, p_x)$ . Кривые такого типа называются *дисперсионными*. Совокупность их, соответствующая различным значениям  $p_y$  и  $p_z$ , полностью характеризует закон дисперсии.

Во-вторых, можно фиксировать значение энергии в  $l$ -той зоне, полагая

$$E_l(\mathbf{p}) = \text{const.} \quad (6.1)$$

Уравнение (6.1) определяет поверхность в трехмерном пространстве квазиимпульсов. Ее называют *изоэнергетической* (или *поверхностью*

\*) Название связано с волновыми представлениями об электроне. Действительно, в силу соотношений де Бройля закон дисперсии есть не что иное, как зависимость частоты электронной волны от квазиволнового вектора.