

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.

равных энергий). Придавая различные значения константе, стоящей в правой части (6.1), и задавая форму соответствующей изоэнергетической поверхности, мы полностью описываем закон дисперсии.

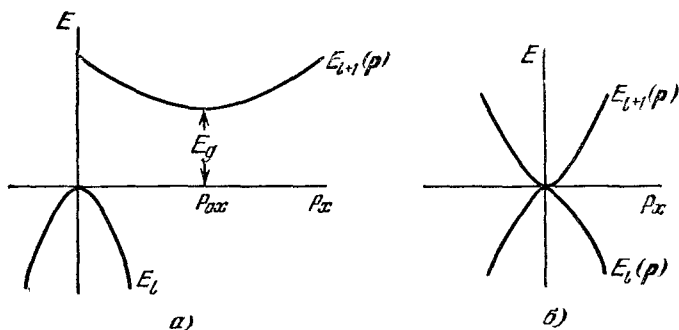


Рис. 3.4. Дисперсионные кривые (схематически): а) для двух неперекрывающихся зон; б) для смыкающихся зон.

Изоэнергетические поверхности обладают некоторыми свойствами симметрии. Прежде всего, согласно (4.4) они имеют центр симметрии, расположенный в точке $\mathbf{p} = 0$: при изменении знаков у всех компонент \mathbf{p} изоэнергетическая поверхность переходит сама в себя. Этот факт является совершенно общим — он не связан ни со структурой данной кристаллической решетки, ни с видом силового поля в ней. Дальнейшие свойства симметрии навязываются структурой решетки: помимо центра симметрии, изоэнергетическая поверхность обладает и всеми элементами симметрии данной кристаллической решетки.

Рассмотрим возможный вид дисперсионных кривых и изоэнергетических поверхностей вблизи точек экстремума в зонах. На рис. 3.4, а схематически изображены кривые дисперсии для случая неперекрывающихся зон. Для определенности принято, что минимум $(l+1)$ -й и максимум l -той зоны достигаются, соответственно, в точках $(p_{x0}, 0, 0)$ и $(0, 0, 0)$, причем, вообще говоря, $p_{0x} \neq 0$; энергия отсчитывается от потолка нижней зоны.

Дисперсионные кривые для случая, когда зоны смыкаются в центре зоны Бриллюэна, схематически представлены на рис. 3.4, б. Здесь одно и то же значение энергии $E_l(0) = E_{l+1}(0) = 0$ попадает сразу в две зоны. Иначе говоря, одному и тому же собственному значению энергии $E = 0$ принадлежат две собственные функции: $u_{0,l}$ и $u_{0,l+1}$, т. е. имеет место вырождение. Соответственно

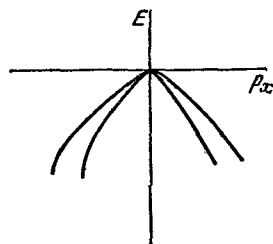


Рис. 3.5. Пример вырождения зон в точке максимума.

точка, в которой смыкаются зоны, называется *точкой вырождения*, а сами зоны — *вырожденными* в этой точке. Точка вырождения есть особая точка функции $E(\mathbf{p})$: в ней смыкаются две ветви $E_l(\mathbf{p})$ и $E_{l+1}(\mathbf{p})$, т. е. это есть точка ветвления 2-го порядка.

Возможен и более сложный случай, когда в точке вырождения смыкается большее число зон. Мы имеем тогда точку ветвления более высокого порядка. Может случиться также, что в точке вырождения обе зоны (или большее их число) имеют максимум (или минимум). Пример такой ситуации представлен на рис. 3.5.

Из рассмотрения вырожденных зон (рис. 3.4, б) ясен смысл условия (4.2): как видно из рис. 3.4, б, только в этом случае равенство (4.4) оказывается справедливым для каждой зоны в отдельности *).

§ 7. Металлы и полупроводники

Представление о разрешенных и запрещенных зонах в сочетании с принципом Паули позволяет выяснить причину глубокого различия между металлами и полупроводниками, влекущую за собой различие в наблюдаемых электрических и других их свойствах. Для этой цели рассмотрим, как распределяются электроны по зонам в предельном случае температуры, стремящейся к абсолютному нулю.

Как мы знаем, объем зоны Бриллюэна составляет $(2\pi\hbar)^3/V_0$, где V_0 — объем элементарной ячейки. С другой стороны, дозволенные значения компонент квазиимпульса даются формулами (3.10'). Из них следует, что каждому дозволенному вектору \mathbf{p} — точке в зоне Бриллюэна — в обратной решетке соответствует ячейка объема $(2\pi\hbar)^3/V$, где V — объем кристалла. Таким образом, зона Бриллюэна содержит всего

$$\frac{(2\pi\hbar)^3}{V_0} / \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} = \frac{V}{V_0} = G$$

состояний с разными квазиимпульсами — ровно столько, сколько элементарных ячеек имеется в данном кристалле. С учетом спина это означает, что полное число состояний в зоне Бриллюэна равно $2G$. Согласно § 4 это же есть и число дозволенных квантовых состояний, содержащихся в каждой отдельной энергетической зоне. По принципу Паули каждое из этих состояний может быть занято только одним электроном. Пусть в элементарной ячейке данного кристалла содержится z электронов. Тогда общее число электронов в решетке есть zG . При достаточно низкой температуре они займут

*) При доказательстве соотношения (4.4) мы воспользовались тем обстоятельством, что вещественная величина $E_l(\mathbf{p})$ не изменяется при переходе к сопряженному уравнению. В точке вырождения, однако, заранее не ясно, к каким именно зонам следует относить одинаковые значения энергии $E(\mathbf{p})$ и $E(-\mathbf{p})$.