

ПРОБЛЕМЫ ОБОСНОВАНИЯ ЗОННОЙ ТЕОРИИ И ЗАДАЧИ, ВЫХОДЯЩИЕ ЗА ЕЕ РАМКИ

§ 1. Три вопроса к зонной теории

Как мы видели в предыдущих главах, зонная теория твердого тела позволяет успешно интерпретировать множество экспериментальных данных, касающихся электрических, гальваномагнитных, оптических и других свойств полупроводников. Вместе с тем справедливость основных предположений, на которых базируется зонная теория, отнюдь не очевидна. Поэтому возникает задача об обосновании зонной теории и об установлении границ ее применимости. Здесь можно выделить три основных вопроса, соответствующие трем основным предположениям, принятым в § III.1.

Во-первых, уравнение Шредингера (III.2.4) описывает движение электрона при фиксированном расположении тяжелых частиц, рассматриваемых просто как источники поля. Фактически тяжелые частицы также движутся. Это движение мы изучали в гл. XII. Там, однако, не принималось явно во внимание наличие свободных электронов. Между тем они не только испытывают действие со стороны тяжелых частиц, но и сами действуют на них. Возникает вопрос: можно ли — и если да, то на каком основании — рассматривать по отдельности движение тяжелых частиц — атомных ядер — и электронов?

Во-вторых, уравнение (III.2.4) описывает движение электрона в периодическом поле. Это означает, в частности, что решетка предполагается идеальной: тяжелые частицы считаются покоящимися строго в ее узлах, в результате чего потенциальная энергия электрона оказывается периодической функцией координат. Фактически, однако, такое состояние не может реализоваться: оно отвечало бы точно заданным значениям координат и скоростей частиц, что не допускается принципом неопределенности. Иначе говоря, кристаллическая решетка в принципе не может быть идеальной. Отражением этого обстоятельства являются нулевые колебания решетки. Как мы видели в гл. XIV, наличие колебаний решетки (в том числе и нулевых) приводит к появлению дополнительного слагаемого в операторе энергии электрона — энергии взаимодействия электрона с колебаниями решетки.

Возникает вопрос: можно ли — и если да, то на каком основании — рассматривать задачу об энергетическом спектре электрона

в идеальной решетке, пренебрегая его взаимодействием с ее колебаниями?

Наконец, в-третьих, уравнение (III.2.4) описывает движение одного электрона. На самом деле в любой конденсированной среде, в том числе и в полупроводнике, мы всегда имеем дело со многими электронами, взаимодействующими друг с другом. Такая система описывается волновой функцией, зависящей от координат и спинов всех электронов, а не только одного из них. Для определения этой волновой функции надо было бы написать уравнение Шредингера с гамильтонианом, содержащим не только операторы кинетической энергии электронов и потенциальной энергии их в поле тяжелых частиц, но и операторы энергии взаимодействия электронов друг с другом.

Возникает вопрос: можно ли — и если да, то на каком основании — рассматривать одноэлектронную задачу (III.2.4) вместо многоэлектронной?

Проблема обоснования данной теории твердого тела состоит в том, чтобы выяснить, можно ли дать положительные ответы на три поставленных выше вопроса.

Как мы увидим, такая возможность действительно существует для определенного (достаточно широкого) класса материалов и круга явлений. Обращаясь к изучению других материалов и других явлений, мы тем самым перейдем к задачам, выходящим за рамки зонной теории.

§ 2. Адиабатическое приближение

Обратимся к вопросу о возможности отдельно рассматривать движение электронов и тяжелых частиц. Под последними пока будем понимать ядра атомов кристаллической решетки.

Физическая причина, оправдывающая указанное разделение, состоит в резком различии масс электрона и ядра. В силу этого различия можно ожидать, что скорости и ускорения электронов будут в среднем значительно превышать скорости и ускорения ядер. При этом характер движения электронов будет определяться мгновенным расположением ядер. С другой стороны, ядра, в силу инерционности своего движения, будут «замечать» лишь среднее расположение электронов.

Задача состоит теперь в квантовомеханическом оформлении этих полуинтуитивных соображений классического характера. При этом, в частности, надо придать и точный смысл словам «среднее расположение» и т. п.

Пронумеруем электроны индексами i, j , а тяжелые частицы — индексами a, b . Каждый из этих индексов принимает, независимо от других, столько значений, сколько соответствующих частиц есть в системе. Обозначим радиус-векторы электронов и тяжелых частиц,