

Решение. Поправка к гриновской функции фононов дается, согласно (64,8), интегралом

$$i\delta D^{-1}(K) = -\frac{2\omega^2}{\rho^2} \int G^{(0)}(P) G^{(0)}(P-K) \frac{d^4P}{(2\pi)^4}, \quad P = (p_0, \mathbf{p}), \quad K = (\omega, \mathbf{k}).$$

В G -функциях надо, однако, еще учесть поправки, связанные со взаимодействием электронов с коротковолновыми фононами. Согласно сказанному в тексте, эти поправки приводят просто к замене $G^{(0)}$ на функцию G , отличающуюся от (65,3) лишь заменой скорости $v_F^{(0)}$ на v_F , и перенормировочной постоянной Z на некоторую другую Z' . При малых K для произведения $G^{(0)}(P) G^{(0)}(P-K)$ можно воспользоваться формулой (17,10). Интегрирование по $dp_0 dp$ сводится к устранению δ -функций, после чего остается еще интегрирование по $d \cos \theta$ (θ —угол между \mathbf{p} и \mathbf{k});

$$\delta D^{-1}(\omega, k) = -\frac{Z'^2 \omega^2 \rho_F^2 k}{2\pi^2 \rho^2} \int_{-1}^1 \frac{\cos \theta d \cos \theta}{\omega - v_F k \cos \theta + i0}$$

(полагаем $\omega > 0$). Полюс $\cos \theta = \omega/kv_F$ находится внутри области интегрирования (поскольку $v_F > u$), и мнимая часть интеграла

$$\text{Im } \delta D^{-1} = -\frac{Z'^2 \omega^2 \rho_F^2 \omega}{2\pi \rho^2 v_F^2 k}.$$

Закон дисперсии фононов определяется как корень уравнения $D^{(0)-1} + \delta D^{-1} = 0$, откуда находим (в обычных единицах)

$$\omega = uk(1 - i\alpha), \quad \alpha = \frac{Z'^2 \omega^2 \rho_F^2}{4\pi \hbar^3 \rho v_F^2}$$

(поправкой к вещественной части ω не интересуемся). Произведение $\rho \propto \sqrt{M}$; поэтому в грубой оценке $\alpha \sim \sqrt{m/M}$, т. е. затухание всегда мало.

§ 66. Электронный спектр твердых диэлектриков

Характерная особенность электронного энергетического спектра диэлектрического немагнитного кристалла состоит в том, что уже первый возбужденный уровень находится на конечном расстоянии от основного уровня; другими словами, между основным уровнем и спектром возбужденных уровней имеется энергетическая щель (у обычных диэлектриков—порядка нескольких электрон-вольт).

Элементарное возбуждение в диэлектрическом кристалле может быть наглядно описано как возбужденное состояние атома, которое, однако, нельзя приписывать какому-либо определенному атому; трансляционная симметрия решетки, как всегда, приводит к «коллективизированию» возбуждения, распространяющегося в кристалле, как бы перескакивая от одного атома к другому. Как и в других случаях, эти возбуждения можно рассматривать как квазичастицы (называемые в этом случае

экситонами) с определенными энергиями и квазимпульсами. Как и всякие квазичастицы, которые могут появляться поодиночке, экситоны обладают целочисленным моментом и подчиняются статистике Бозе¹⁾.

При заданном квазимпульсе k энергия экситона может пробегать дискретный ряд различных значений $\epsilon_s(k)$. Когда квазимпульс пробегает значения в одной ячейке обратной решетки, каждая из функций $\epsilon_s(k)$ пробегает некоторую зону значений энергии экситона; различные зоны могут частично перекрывать друг друга. Минимальные значения каждой из функций $\epsilon_s(k)$ отличны от нуля.

Наряду с экситонами в диэлектрике могут существовать электронные возбуждения также и другого рода. Их можно рассматривать как возникающие в результате ионизации отдельных атомов. Каждая такая ионизация приводит к появлению в диэлектрике двух независимо распространяющихся квазичастиц — электрона проводимости и «дырки». Последняя представляет собой недостаток одного электрона в атоме и потому ведет себя как положительно заряженная частица. И здесь, говоря о движении электрона и дырки, мы в действительности имеем в виду некоторые коллективные возбужденные состояния электронов диэлектрика, сопровождающиеся (в противоположность экситонным состояниям) переносом отрицательного или положительного элементарного заряда.

Электроны и дырки обладают полусцелым спином и подчиняются статистике Ферми. Подчеркнем, однако, что электронно-дырочный спектр диэлектрика отнюдь не имеет характера электронного спектра фермиевского типа в металлах. Для последнего характерно существование граничной ферми-поверхности в k -пространстве, в окрестности которой и лежат квазимпульсы электронов. В данном же случае никакой подобной поверхности вообще нет, и одновременно появляющиеся электрон и дырка могут иметь произвольные квазимпульсы.

Более глубоко различие между обоими типами спектров можно понять, рассматривая затухание элементарных возбуждений. В ферми-жидкости любая квазичастица, находящаяся вне ферми-поверхности, может рождать пары новых возбуждений (частицу и дырку) и потому обладает конечным временем жизни, быстро убывающим при удалении от ферми-поверхности (электрон в металле может, кроме того, испускать фононы — см. § 65). Затухание же одиночного электрона (или дырки) в диэлектрике в идеальной решетке (при $T=0$) строго равно нулю в конечном интервале энергий над ее минимальным зна-

¹⁾ Понятие об экситонах было впервые введено Я. И. Френкелем (1931).

чением¹⁾. Действительно, образование электронно-дырочной пары во всяком случае требует (в виду наличия энергетической щели Δ —см. ниже) конечной затраты энергии. Испускание же квазичастицей фонона (акустического) возможно, лишь если скорость v квазичастицы не меньше скорости звука u (см. примечание на стр. 321).

Возможные значения энергии электронов проводимости $\epsilon^{(e)}(\mathbf{k})$ и дырок $\epsilon^{(h)}(\mathbf{k})$ тоже заполняют зоны. Шириной энергетической щели в диэлектрике обычно называют сумму $\Delta = \epsilon_{\min}^{(e)} + \epsilon_{\min}^{(h)}$ наименьших возможных значений энергий электрона и дырки. Поскольку электрон и дырка появляются или исчезают вместе, то реальным смыслом обладает именно эта сумма, а не величины $\epsilon_{\min}^{(e)}$ и $\epsilon_{\min}^{(h)}$ по отдельности; обычно условно полагают $\epsilon_{\min}^{(h)} = 0$. Минимальные значения энергии могут достигаться для электронов и дырок при одном и том же или при различных значениях квазиимпульса $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$; в первом случае говорят о *прямой*, а во втором—о *непрямой* щели. Если уровни энергии в зоне невырождены (или вырождены только двукратно по спину как следствие симметрии по отношению к обращению времени), то вблизи своего минимума функции $\epsilon(\mathbf{k})$ имеют вид

$$\epsilon^{(e)}(\mathbf{k}) = \Delta + \frac{1}{2} m_{ik}^{(e)-1} q_i q_k, \quad \epsilon^{(h)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} m_{ik}^{(h)-1} q_i q_k, \quad (66,1)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, а $m_{ik}^{(e)}$ и $m_{ik}^{(h)}$ —тензоры эффективных масс электронов и дырок.

В литературе электронную зону нередко называют просто *зоной проводимости*, а вместо дырочной зоны говорят о *валентной зоне*, которая в основном состоянии кристалла полностью заполнена электронами. Возникновение пары квазичастиц—электрона и дырки—рассматривается при этом как результат перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости с оставлением дырки на покидаемом месте.

На больших (по сравнению с атомными) расстояниях электрон и дырка притягиваются по закону Кулона. Поэтому они могут образовывать связанные состояния. Совокупность связанных электрона и дырки представляет собой электрически нейтральную квазичастицу, т. е. экситон. При заданном значении квазиимпульса связанным состояниям отвечают дискретные уровни энергии системы электрон+дырка; каждый уровень отвечает одной из экситонных энергетических зон. Энергии экситонов расположены, таким образом, под энергиями электронно-дырочных возбуждений (энергетическая щель в указанном в начале параграфа смысле не совпадает поэтому с величиной Δ , а

¹⁾ Затухание же при конечных температурах, разумеется, всегда имеется из-за рассеяния на других квазичастицах.

меньше ее на величину, равную максимальной энергии связи экситона)¹⁾.

Уровни энергии экситона легко вычислить в предельном случае слабо связанных состояний, когда средние расстояния между электроном и дыркой велики по сравнению с постоянной решетки a ; такой экситон называют *экситоном Ванье — Мотта*. В обратном же предельном случае, когда расстояние между электроном и дыркой порядка атомного, говорят об *экситоне Френкеля*; разумеется, экситон Френкеля можно рассматривать как связанное состояние электрона и дырки лишь формально.

Рассмотрим диэлектрический кристалл кубической симметрии. Для экситона Ванье — Мотта можно считать, что электрон и дырка притягиваются по закону Кулона, причем роль остальных атомов в решетке сводится лишь к созданию однородного диэлектрического фона, ослабляющего взаимодействие в ϵ раз, где ϵ — диэлектрическая проницаемость кристалла (взятая для значений частот, отвечающих по порядку величины энергии связи экситона); другими словами, энергия взаимодействия электрона и дырки записывается в виде $U = -e^2/\epsilon r$. Пусть щель в спектре прямая и для простоты будем считать, что минимумы энергий электрона и дырки лежат при $\mathbf{k} = 0$. В кубическом кристалле тензоры эффективных масс сводятся к скалярным константам m_e и m_h , так что

$$\epsilon^{(e)}(\mathbf{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad \epsilon^{(h)}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}. \quad (66,2)$$

В конце § 56 было указано, что движение частицы в кристаллической решетке с наложенным на нее медленно меняющимся в пространстве внешним электрическим полем описывается уравнением Шредингера с гамильтонианом, в котором роль кинетической энергии играет функция $\epsilon(\mathbf{k})$. Поскольку в данном случае функции $\epsilon^{(e)}(\mathbf{k}) - \Delta$ и $\epsilon^{(h)}(\mathbf{k})$ совпадают по форме с кинетическими энергиями обычных свободных частиц, то и уравнение Шредингера рассматриваемой системы совпадает по форме с таковым для системы двух обычных частиц, взаимодействующих по закону Кулона, т. е. с уравнением Шредингера задачи об атоме водорода. Мы можем поэтому сразу написать уровни энергии системы, т. е. энергию экситона в виде

$$\epsilon_n^{(ex)}(\mathbf{k}) - \Delta = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)} - \frac{me^4}{2\epsilon^2 \hbar^2 n^2} \quad (66,3)$$

(G. H. Wannier, 1937). Первый член в этом выражении есть энергия движения экситона «как целого» с квазиимпульсом \mathbf{k} .

¹⁾ Экситонные состояния обладают, однако, конечным временем жизни, так как электрон и дырка могут рекомбинировать с испусканием, например фотона или фотона.

Второй же член дает энергию связи электрона и дырки в экситоне ($m = m_e m_h / (m_e + m_h)$) — приведенная масса системы). При заданном k дискретные уровни энергии системы сгущаются по мере увеличения энергии к границе непрерывного спектра. Условие применимости формулы (66,3) состоит в требовании достаточно большой величины «радиуса орбиты» $r_{ex} \sim \hbar^2 \epsilon n^2 / m_e^2 \gg a$. Это условие заведомо выполняется при больших n , но в кристаллах с большим ϵ может выполняться и для $n \sim 1$ ¹⁾.

В заключение этого параграфа вернемся к упомянутому в § 61 утверждению о существовании нижней границы для плотности числа электронов проводимости в полуметалле.

В диэлектрике, где электроны и дырки при $T = 0$ отсутствуют, возможность образования ими связанных состояний означает лишь появление новых ветвей энергетического спектра. В компенсированном же металле такая возможность означала бы, что состояние со свободными электронами и дырками не является низшим, т. е. спектр металлического типа был бы неустойчивым. Возможность образования связанных состояний устраняется экранировкой кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой находящимися «между ними» другими квазичастицами. Другими словами, среднее расстояние между квазичастицами должно быть порядка величины или меньше размеров экситона r_{ex} (в его основном состоянии). Обратим внимание на то, что устанавливаемый этим требованием нижний предел допустимых для металла плотностей числа электронов и дырок падает с уменьшением их эффективных масс.

§ 67. Электроны и дырки в полупроводниках

Энергетический спектр чистых (или, как говорят, *собственных*) полупроводниковых кристаллов отличается от спектра диэлектриков только в количественном отношении — меньшими значениями щели Δ , в результате чего при обычных температурах в полупроводнике имеется значительная (по сравнению с диэлектриком) плотность носителей тока. Ясно, что это различие условно, и к тому же зависит от интересующей нас области температур²⁾. В *примесных* (или *легированных*) полупроводниках дополнительным источником электронов или дырок являются атомы примесей, для которых энергетическая щель

¹⁾ Интересно отметить, что вблизи верхнего края (максимума) зоны, где эффективные массы отрицательны, могут образовываться связанные состояния два электрона (или две дырки). Энергия таких состояний лежит в запрещенной области выше максимума суммарной энергии электронов.

²⁾ Приведем значения энергетической щели Δ для некоторых полупроводников: Si — 1,17 эв, Ge — 0,74 эв, InSb — 0,24 эв, GaAs — 1,52 эв, PbS — 0,29 эв. Для типичного диэлектрика алмаза $\Delta = 5,4$ эв.