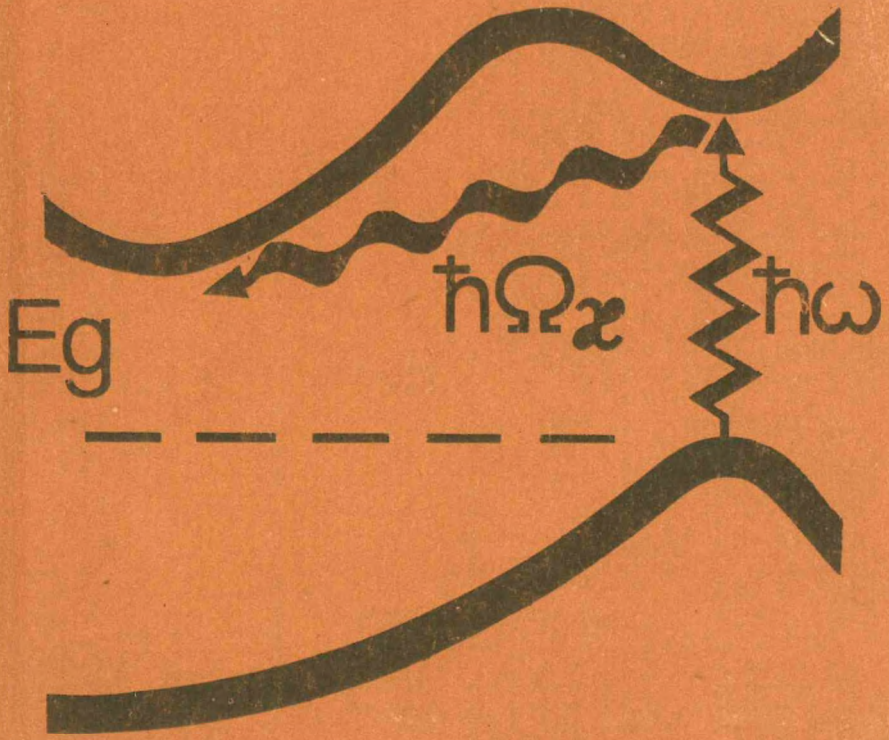
Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

В. Г. Тютерев
В. Н. Чернышов



Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Сибирский физико-технический институт им. В.Д.Кузнецова
при Томском государственном университете им. В.В.Куйбышева

В.Г.ТЮТЕРЕВ, В.Н.ЧЕРНЫШОВ

1-66222

ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Под редакцией доктора физико-математических наук Г.Ф.Караваева

Издательство Томского университета

Томск - 1988

539.2(075.8)

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

УДК 539.2.

Тютерев В.Г., Чернышов В.Н. Введение в теорию кристаллических твердых тел: Учебное пособие. - Томск: Изд-во Том.ун-та, 1988. - 117 с. - 20 к. - 300 экз.

В учебном пособии главное внимание уделяется изложению идей, лежащих в основе теоретических методов физики твердого тела. Рассматриваемый круг вопросов охватывает геометрию решетки идеального кристалла, теорию энергетических спектров электронов и фононов, их взаимодействие друг с другом и с электромагнитным полем. Рассмотрены элементарные решения кинетического уравнения и рассчитаны кинетические коэффициенты для электронов и дырок в полупроводниках. Курс предполагает наличие у читателя знаний основ квантовой механики, классической статистики и электродинамики.

Для студентов III-IV курсов физического факультета университета.

Рецензент - доцент А.А.Вааль

Т $\frac{1704060000}{177(012)-88}$ 47-88

© Издательство Томского университета, 1988

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение 5
I. Структура кристаллических твердых тел 7
I.I. Прямая кристаллическая решетка 7
I.2. Обратная кристаллическая решетка 9
I.3. Кристаллическая структура ковалентных и ионно-ковалентных кристаллов II
I.4. Некоторые правила суммирования и интегрирования. I3
2. Колебания атомов кристаллической решетки I8
2.I. Адиабатическое приближение I8
2.2. Гамильтониан системы ядер в адиабатическом приближении. 20
2.3. Акустические и оптические фононы. Континуальный предел 28
2.4. Колебания решетки в полярных кристаллах. 32
3. Элементы теории упругости. 36
3.I. Потенциальная энергия в приближении упругого континуума 36
3.2. Тензор деформации и тензор упругих постоянных. 37
3.3. Уравнение Грина-Кристоффеля 42
3.4. Тензор напряжений. Условия равновесия. Закон Гука. . . . 45
4. Электроны в идеальном кристалле. 48
4.I. Одноэлектронное приближение. Зонное уравнение. 48
4.2. Теорема Блоха. 49
4.3. Общие свойства зонных энергий и зонных волновых функций. 5I
4.4. Эффективная масса. 55
4.5. Периодические граничные условия. 58
4.6. Плотность состояний. 60
4.7. Классификация твердых тел по зонному спектру 6I
4.8. Зонная структура ковалентных и ионно-ковалентных кристаллов 62
5. Метод эффективного гамильтониана 66
5.I. Функции Ванье. 66
5.2. Уравнение движения электрона во внешнем медленно меняющемся поле. 68
5.3. Электроны и дырки в полупроводниках. 7I
5.4. Полуклассическое приближение 74

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

6. Взаимодействие электронов с колебаниями кристаллической решетки 76
6.I. Деформационный потенциал 76
6.2. Полярон. 79
6.3. Рассеяние электронов на колебаниях решетки 82
7. Кинетические явления в кристаллах. 84
7.I. Кинетическое уравнение 84
7.2. Структура интеграла столкновений 87
7.3. Приближение времени релаксации 88
7.4. Неравновесная добавка к функции распределения. 89
7.5. Вычисление времени релаксации. 93
7.6. Время релаксации для рассеяния на акустических фононах. 94
7.7. Время релаксации для рассеяния на ионах примеси. 95
7.8. Суммарное время релаксации для независимых процессов . . 96
7.9. Элементарные решения кинетического уравнения 97
8. Оптические свойства кристаллов I03
8.I. Основные соотношения оптики сплошных сред. I03
8.2. Поглощение света свободными носителями заряда в полупроводнике I05
8.3. Взаимодействие света с колебаниями решетки в полярных кристаллах. I07
8.4. Фундаментальное (междузонное) поглощение света в изоляторах и полупроводниках I08
Литература. II6

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

ВВЕДЕНИЕ

История развития квантовой теории твердого тела насчитывает уже много десятилетий. Успехи исследований последних лет позволяют причислить ее к наиболее быстро развивающимся разделам теоретической физики. Среди многочисленных областей практической деятельности, для которых теоретические представления оказались наиболее плодотворными, достаточно назвать полупроводниковую микроэлектронику и твердотельную оптику.

К настоящему времени уже накоплена обширная информация, написано много учебников и монографий по физике твердого тела (некоторые из них перечислены в списке литературы). Поэтому студент, приступающий к изучению теории твердого тела, сталкивается, в сущности, с необъятным количеством материала. В связи с этим, как нам кажется, существует необходимость в создании достаточно компактного пособия, которое могло бы ввести студентов в курс современного состояния предмета, определив основную последовательность изучения материала.

Учебное пособие написано на основе многолетнего опыта чтения лекций по теории твердого тела и физике полупроводников на физическом и радиофизическом факультетах Томского университета.

Авторы оставили в стороне целый ряд важных проблем (фазовые переходы, магнитные свойства, нелинейная оптика, неидеальные и разупорядоченные материалы, неустойчивости твердотельной плазмы и др.) и сосредоточили внимание на задачах,

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

которые могут быть рассмотрены в рамках представлений об идеальном кристалле с периодическими граничными условиями.

Предлагаемый вводный курс должен послужить основой для последующего углубленного изучения предмета на более строгом и современном уровне в процессе дальнейшей специализации студентов по теории твердого тела.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

I. СТРУКТУРА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

I.I. ПРЯМАЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

Известно, что кристаллические твердые тела образованы периодически повторяющимися элементами, расположенными в узлах так называемой кристаллической решетки. Этими элементами могут быть атомы, группы атомов, ионы, молекулы и т.п. Кристаллическая решетка инвариантна относительно некоторых преобразований. Совокупность всех преобразований, переводящих кристаллическую решетку саму в себя, образует группу симметрии кристалла или пространственную группу. Существует 230 различных пространственных групп. Наиболее важным свойством кристаллических решеток является их периодическая структура или трансляционная симметрия. Для описания трансляционной симметрии используется фундаментальное понятие решетки Браве. Решетка Браве образована всеми точками с радиус-векторами вида

$$\vec{R}_\ell = \ell_1 \vec{a}_1 + \ell_2 \vec{a}_2 + \ell_3 \vec{a}_3 , \qquad (I.I)$$

где $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ – некомпланарные векторы, такие, что при смещении кристалла как целого на любой из них, кристалл совмещается сам с собой. $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ называются основными векторами решетки; ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 – целые положительные и отрицательные числа; ℓ – совокупность чисел ℓ_i; $\ell = \{\ell_1, \ell_2, \ell_3\}$.

Можно дать и другое эквивалентное определение решетки Браве. Решетка Браве есть дискретное множество векторов, не лежащих в одной плоскости, являющееся полным относительно векторного сложения и вычитания (т.е. сумма и разность любых двух векторов из этого множества также принадлежит ему).

Одной и той же решетке Браве можно сопоставить разные основные векторы решетки. Эта неоднозначность несущественна, если с помощью выбранных основных векторов можно определить положение всех узлов

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

решетки Браве.

По определению все узлы решетки Браве эквивалентны, следовательно, она должна иметь бесконечную протяженность. Реальные кристаллы имеют конечные размеры, но они достаточно велики и большинство атомов находятся далеко от поверхности, поэтому при изучении объемных свойств можно пренебречь влиянием поверхности и рассматривать кристаллы бесконечных размеров. Следовательно, абстрактное математическое представление о бесконечной решетке Браве оказывается очень полезной идеализацией. При рассмотрении поверхностных свойств понятие решетки Браве также оказывается плодотворным, но в этом случае необходимо учитывать, что реальный кристалл занимает лишь конечную область в идеальной решетке Браве. При изучении объемных свойств также бывает удобно рассматривать кристаллы конечных размеров, что достигается введением неких искусственных граничных условий (так называемых периодических граничных условий, рассмотренных далее).

Кроме трансляционной симметрии кристаллическая решетка обладает еще точечной симметрией, т.е. имеется совокупность операций, переводящих вектор $\vec{R}_\ell$ в другой вектор $\vec{R}_{\ell'}$, исходящий из той же точки, причем $|\vec{R}_\ell| = |\vec{R}_{\ell'}|$. Это множество операций образует точечную группу решетки Браве. Показано, что существует только 7 различных точечных групп, которые может иметь решетка Браве. Любая кристаллическая структура принадлежит к одной из семи кристаллических систем (сингоний). Кроме того, показано, что существует 14 различных пространственных групп решеток Браве, т.е. имеется 14 различных решеток Браве.

Наименьшая часть кристалла, пространственным повторением которой образуется весь кристалл, называется элементарной ячейкой. Ясно, что в элементарной ячейке могут содержаться лишь неэквивалентные точки (точки $\vec{r}$ и $\vec{r}'$ называют эквивалентными, если они отличаются на вектор $\vec{R}_\ell$). Выбор элементарной ячейки для данной решетки Браве неоднозначен. Например, в качестве элементарной ячейки можно взять так называемую примитивную ячейку. Это параллелепипед, построенный на векторах $\vec{a}_i$. Объем такой элементарной ячейки $v_a = |\vec{a}_1 [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]|$. Недостатком выбора элементарной ячейки в виде примитивной ячейки является то, что симметрия примитивной ячейки часто не полностью отражает точечную симметрию решетки Браве. Элементарной ячейкой, инвариантной относительно всех преобразований из точечной группы решетки Браве, является ячейка

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Вигнера-Зейтца. Ячейкой Вигнера-Зейтца называется фигура наименьшего объема, образованная пересечением плоскостей, которые делят пополам и перпендикулярны линиям, соединяющим выбранный узел решетки Браве со всеми остальными. Можно показать, что объем ячейки Вигнера-Зейтца равен объему примитивной ячейки.

Кристаллическая решетка называется простой, если можно выбрать элементарную ячейку, содержащую один атом. При выборе начала координат на одном из атомов, положение других узлов простой кристаллической решетки задается соотношением (I.I). Простая кристаллическая решетка – это решетка Браве.

Решетка называется сложной, если с каждым узлом решетки Браве связана совокупность атомов (ионов) с определенным взаимным расположением, т.е. для сложной кристаллической решетки в элементарной ячейке содержится более одной частицы. В этом случае расположение узлов кристаллической решетки задается вектором $\vec{R}_{ls}$.

$$\vec{R}_{ls} = \vec{R}_l + \vec{R}_s, \qquad (I.2)$$

где $s = 1, 2, \ldots, p$; p – число частиц в элементарной ячейке; $\vec{R}_s$ – радиус-вектор частицы в элементарной ячейке.

Сложную кристаллическую решетку можно представить себе как совокупность решеток Браве, сдвинутых относительно друг друга на векторы $\vec{R}_s$.

Кристаллическая решетка называется одноатомной, если ее узлы заняты атомами одного сорта, и многоатомной в противном случае. Простая кристаллическая решетка всегда одноатомная. Сложная кристаллическая решетка может быть либо одноатомной, либо многоатомной.

I.2. ОБРАТНАЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

В теории твердого тела кроме реально существующей кристаллической решетки (прямой кристаллической решетки) широко используется понятие обратной кристаллической решетки.

Определим основные векторы обратной решетки $\vec{B}_j$ с помощью следующего соотношения:

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}. \qquad (I.3)$$

Таким образом, каждой решетке Браве можно поставить во взаимно однозначное соответствие некоторую обратную решетку. Узлы в обратной решетке задаются точками с радиус-векторами $\vec{K}_n$

$$\vec{K}_n = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3, \qquad (I.4)$$

где n_1, n_2, n_3 - целые положительные и отрицательные числа; n - совокупность чисел n_i ; $n = \{n_1, n_2, n_3\}$.
Легко показать, что решением (I.3) являются следующие $\vec{b}_j$:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]}{\vec{a}_1[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]},$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1]}{\vec{a}_1[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]}, \qquad (I.5)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{[\vec{a}_1 \times \vec{a}_2]}{\vec{a}_1[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]}.$$

Можно доказать несколько основных свойств обратной решетки.

I. Объем элементарной ячейки v_b обратной кристаллической решетки равен $v_a^{-1}(2\pi)^3$.

2. Прямая кристаллическая решетка является обратной по отношению к своей обратной решетке.

3. Прямая и обратная к ней решетка принадлежат к одной и той же сингонии.

4. $$\vec{K}_n \cdot \vec{R}_\ell = 2\pi N, \qquad (I.6)$$

где N - целые (положительные и отрицательные) числа.

Исходя из соотношения (I.6), можно дать другое часто используемое определение обратной решетки. Обратная кристаллическая решетка - это множество векторов $\vec{K}_n$, определенных соотношением

$$\exp\left(i\left(\vec{K}_n\vec{R}_\ell\right)\right) = 1. \qquad (I.7)$$

В качестве элементарной ячейки для обратной кристаллической решетки обычно выбирается зона Бриллюэна. Зона Бриллюэна - это ячейка Вигнера-Зейтца для обратной кристаллической решетки. Из определения зоны Бриллюэна ясно, что внутри нее могут содержаться только неэквивалентные точки (точки $\vec{K}$ и $\vec{K}'$ в обратном пространстве

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

называются эквивалентными, если $\vec{k}$ и $\vec{k}'$ отличаются на вектор обратной решетки). Также очевидно, что каждая точка, лежащая на границе зоны Бриллюэна, эквивалентна по крайней мере одной точке, тоже лежащей на поверхности зоны Бриллюэна.

I.3. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА КОВАЛЕНТНЫХ И ИОННО-КОВАЛЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Для иллюстрации введенных понятий рассмотрим кристаллические структуры ковалентных и ионно-ковалентных кристаллов. Ковалентные кристаллы (полупроводники Ge, Si) имеют структуру типа алмаза (пространственная группа O_h^7). Ионно-ковалентные кристаллы ($GaAs$, GaP, $InSb$ и другие полупроводники типа A^3B^5 и A^2B^6) имеют кристаллическую структуру типа сфалерита (пространственная группа T_d^2). Обе эти структуры образованы двумя гранецентрированными кубическими решетками Браве (ГЦК), сдвинутыми относительно друг друга на четверть пространственной диагонали куба (рис.I.I).

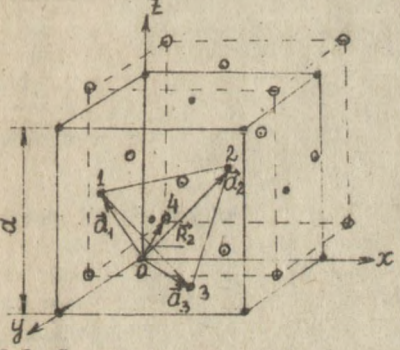


Рис.I.I. Структуры типа алмаза и сфалерита. Для структуры типа алмаза черные и белые кружки обозначают атомы одного вида, для структуры типа сфалерита - разных видов

В решетке типа алмаза обе решетки Браве образованы атомами одного вида (одноатомная решетка). Решетка типа сфалерита является двухатомной; в ней решетки Браве состоят из атомов разных видов.

Положение узлов кристаллической решетки этих структур дается формулой (I.2), где $\vec{a}_i$ - основные векторы для ГЦК-решетки:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k}),$$
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{k}), \qquad (I.8)$$
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}),$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ -орты декартовой системы координат, а $\vec{R}_s$ имеют вид:

$$\vec{R}_1 = 0, \qquad \vec{R}_2 = \frac{a}{4}(\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}), \tag{I.9}$$

где a - длина ребра куба. Эти векторы также изображены на рис.I.I. Объем элементарной ячейки v_a равен $\frac{a^3}{4}$. Можно показать, что точки 0,I,2,3 (см.рис.I.I) лежат в вершинах тетраэдра с длиной ребра $\frac{1}{\sqrt{2}}a$, а точка 4 с координатами $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$ расположена в центре этого тетраэдра. Аналогичное утверждение можно доказать для любого другого узла данных кристаллических структур. Таким образом, для структур типа алмаза и сфалерита каждый атом имеет тетраэдрическое окружение, причем для структуры типа сфалерита атом одного сорта окружен четырьмя атомами другого сорта. Точечные группы для кристаллов обоих типов - это группа симметрии тетраэдра T_d. Кроме того, пространственная группа структуры типа алмаза O_h^7 содержит элементы симметрии, связанные с нецелочисленными трансляциями, т.е. O_h^7 - несимморфная группа.

Обратная кристаллическая решетка для этих структур совпадает с обратной для ГЦК-решеток. В соответствии с формулами (I.5) и (I.8) основные векторы обратной решетки имеют вид

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}),$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}), \tag{I.10}$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}).$$

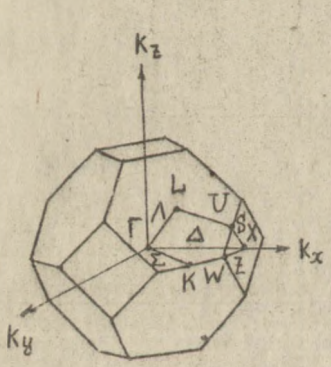


Рис.I.2. Зона Бриллюэна для ГЦК-решетки

Зона Бриллюэна для ГЦК-решетки приведена на рис.I.2. Это усеченный октаэдр с I4 гранями, 8 из которых - правильные шестиугольники, остальные 6 - квадраты. Для точек и линий, обладающих определенной симметрией, существуют стандартные обозначения. Эти обозначения приведены на рис.I.2 и в табл.I.I. Из-за наличия точечной симметрии в зоне Бриллюэна существует несколько симметричных точек и направлений данного типа. Например, имеется 8 точек типа L, расположенных в центре шести-

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

угольных граней. Среди симметричных точек данного типа могут быть эквивалентные точки. Каждой точке типа L эквивалентна точка, лежащая в центре противоположной грани, т.е. 8 точек L образуют 4 набора неэквивалентных точек, содержащих две точки.

Таблица I.I

Симметричные точки и направления для ГЦК-решетки

Обозначение	K_x	K_y	K_z	Число точек или направлений данного типа	Число неэквивалентных наборов точек
Γ	0	0	0	I	I
X	I	0	0	6	3
L	I/2	I/2	I/2	8	4
W	I	I/2	0	24	6
K	3/4	3/4	0	I2	I2
U	I	I/4	I/4	24	24
Λ	x	x	x	8	
Δ	$2x$	0	0	6	
Σ	$3/2\,x$	$3/2\,x$	0	I2	
Z	I	x	0	24	
S	I	$x/2$	$x/2$	24	

Примечание: $0 < x \leq 1/2$. K_x, K_y, K_z приведены в единицах $2\pi/a$.

I.4. НЕКОТОРЫЕ ПРАВИЛА СУММИРОВАНИЯ И ИНТЕГРИРОВАНИЯ

В этом параграфе мы найдем значения некоторых сумм и интегралов, часто встречающихся в теории твердого тела.

I.4.I. Вычисление $\sum_{\vec{l}} \exp\left[i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}_{\vec{l}}\right]$.

Вычисление этой суммы начнем с рассмотрения ограниченного кристалла из N элементарных ячеек. Предположим, что кристалл имеет форму параллелепипеда, образованного векторами $2L_1\vec{a}_1$, $2L_2\vec{a}_2$ и $2L_3\vec{a}_3$, где L_i – целые числа. Ясно, что $N = 8L_1L_2L_3$. Можно считать, что l_i в формуле (I.I) меняются следующим образом: $-L_i \leq l_i \leq L_i - 1$; $i = 1, 2, 3$.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Представим вектор $\vec{K}-\vec{K}'$ в виде линейной комбинации векторов обратной решетки

$$\vec{S}=\vec{K}-\vec{K}'=s_1\vec{b}_1+s_2\vec{b}_2+s_3\vec{b}_3.$$

Используя формулу (I.6), получим

$$(\vec{K}-\vec{K}')\vec{R}_\ell=2\pi(s_1\ell_1+s_2\ell_2+s_3\ell_3).$$

Рассмотрим сумму

$$S_1=\frac{1}{N}\sum_{\ell}e^{i(\vec{K}-\vec{K}')\vec{R}_\ell}=\frac{1}{8\ell_1\ell_2\ell_3}\sum_{\ell_1=-\ell_1}^{\ell_1-1}\sum_{\ell_2=-\ell_2}^{\ell_2-1}\sum_{\ell_3=-\ell_3}^{\ell_3-1}e^{2\pi i(s_1\ell_1+s_2\ell_2+s_3\ell_3)} \qquad (I.11)$$

Суммирование по индексам ℓ_i можно провести независимо, используя формулу для суммы геометрической прогрессии

$$S_1=\frac{1}{8\ell_1\ell_2\ell_3}\,\frac{\sin(2\pi\ell_1 s_1)\sin(2\pi\ell_2 s_2)\sin(2\pi\ell_3 s_3)}{\sin(\pi s_1)\cdot\sin(\pi s_2)\cdot\sin(\pi s_3)}\,e^{-\pi i(s_1+s_2+s_3)} \qquad (I.12)$$

Для больших ℓ_i S_1 имеет заметную величину лишь тогда, когда числитель и знаменатель одновременно обращаются в нуль. Это возможно при $s_i=n_i$, где n_i - целые числа, то есть если $\vec{K}-\vec{K}'=\vec{K}_n$, где $\vec{K}_n$ - вектор обратной решетки. В противном случае $S_1\sim(8\ell_1\ell_2\ell_3)^{-1}\sim N^{-1}$. Таким образом,

$$S_1=\begin{cases}1, & \vec{K}-\vec{K}'=\vec{K}_n,\\ \sim\frac{1}{N}, & \vec{K}-\vec{K}'\neq\vec{K}_n,\end{cases}\qquad S_1=\delta_{\vec{K},\vec{K}'+\vec{K}_n}. \qquad (I.13)$$

Устремим N к бесконечности. Используя известное соотношение

$$\lim_{b\to\infty}\frac{\sin(bx)}{\pi x}=\delta(x),$$

получим

$$\lim_{\ell_1,\ell_2,\ell_3\to\infty}(8\ell_1\ell_2\ell_3 S_1)=\sum_{n_1,n_2,n_3}\delta(s_1-n_1)\delta(s_2-n_2)\delta(s_3-n_3)=$$

$$=\sum_{n_1,n_2,n_3}\delta(s_x-K_{n_1})\delta(s_y-K_{n_2})\delta(s_z-K_{n_3})J=J\sum_{n}\delta(\vec{S}-\vec{K}_n),$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

где

$$J = \frac{\partial(s_x, s_y, s_z)}{\partial(s_1, s_2, s_3)} = v_B = \frac{(2\pi)^3}{v_a}$$

– якобиан преобразования от переменных s_1, s_2, s_3 к декартовым координатам s_x, s_y, s_z.

Таким образом,

$$\sum_l e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}_l} = \frac{(2\pi)^3}{v_a} \sum_h \delta(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{K}_h), \qquad (I.I4)$$

где суммирование по l производится по бесконечной решетке, а суммирование по h – по всем векторам обратной решетки. Если векторы $\vec{k}$ и $\vec{k}'$ расположены внутри зоны Бриллюэна, то в правую часть (I.I4) входит лишь $\vec{K}_h = 0$, поэтому в данном случае

$$\sum_l e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}_l} = \frac{(2\pi)^3}{v_a} \delta(\vec{k}-\vec{k}'). \qquad (I.I5)$$

I.4.2. Вычисление $\int_{(v_B)} (d\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{R}_l - \vec{R}_{l'})}$.

Представим вектор $\vec{k}$, лежащий в зоне Бриллюэна, в виде

$$\vec{k} = s_1\vec{b}_1 + s_2\vec{b}_2 + s_3\vec{b}_3,$$

где $-\frac{1}{2} \le s_i < \frac{1}{2}$.

Тогда, используя (I.6), получим

$$\vec{k}(\vec{R}_l - \vec{R}_{l'}) = 2\pi\left[s_1(l_1 - l_1') + s_2(l_2 - l_2') + s_3(l_3 - l_3')\right];$$

$$\int_{(v_B)} (d\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{R}_l - \vec{R}_{l'})} = \int_{-1/2}^{1/2} ds_1 \int_{-1/2}^{1/2} ds_2 \int_{-1/2}^{1/2} ds_3 e^{2\pi i[s_1(l_1-l_1') + s_2(l_2-l_2') + s_3(l_3-l_3')]} \times$$

$$\times \frac{\partial(k_x, k_y, k_z)}{\partial(s_1, s_2, s_3)},$$

где $\frac{\partial(k_x, k_y, k_z)}{\partial(s_1, s_2, s_3)} = \frac{(2\pi)^3}{v_a}$.

Поскольку $\int_{-1/2}^{1/2} ds_j e^{2\pi i s_j (l_j - l_j')} = \delta_{l_j l_j'}$,

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

то окончательно получим

$$\int_{(v_\ell)} (d\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'})} = \frac{(2\pi)^3}{v_a} \delta_{\ell\ell'}. \qquad (I.16)$$

Заменяя в формулах (I.14) и (I.16) векторы из прямого пространства на векторы из обратного пространства и наоборот, аналогично можно получить следующие соотношения:

$$\sum_n e^{i\vec{K}_n(\vec{r}-\vec{r}')} = v_a \sum_\ell \delta(\vec{r}-\vec{r}'-\vec{R}_\ell), \qquad (I.17)$$

$$\int_{(v_a)} (d\vec{r}) e^{i\vec{r}(\vec{K}_n - \vec{K}_{n'})} = v_a \delta_{nn'}. \qquad (I.18)$$

Кроме того, известно, что

$$\int_\infty (d\vec{r}) e^{i\vec{r}(\vec{k}-\vec{k}')} = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}'), \qquad (I.19)$$

$$\int_\infty (d\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} = (2\pi)^3 \delta(\vec{r}-\vec{r}'). \qquad (I.20)$$

В этих выражениях интегрирование ведется по бесконечному пространству.

I.4.3. При решении различных задач иногда удобно считать, что волновые векторы $\vec{k}$ принимают не непрерывное множество значений в зоне Бриллюэна, а являются векторами из счетного множества, причем число различных $\vec{k}$ в зоне Бриллюэна равняется числу элементарных ячеек в кристалле N и $\vec{k}$ равномерно распределены по зоне Бриллюэна. При этом на каждое $\vec{k}$ приходится объем $\Delta k = v_B N^{-1}$. Часто возникает необходимость вычисления сумм по зоне Бриллюэна. При $N \to \infty$ можно перейти к интегрированию по зоне Бриллюэна

$$\sum_{\vec{k}(v_B)} f(\vec{k}) \Delta k = \frac{v_B}{N} \sum_{\vec{k}(v_B)} f(\vec{k}) = \int_{(v_B)} (d\vec{k}) f(\vec{k}).$$

Таким образом,

$$\sum_{\vec{k}(v_B)} f(\vec{k}) = \frac{N}{v_B} \int_{(v_B)} f(\vec{k})(d\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{(v_B)} f(\vec{k})(d\vec{k}), \qquad (I.21)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

где $V = N v_a$ - объем кристалла.

Используя формулу (I.2I), можно из (I.I6) и (I.20) получить

$$\sum_{\vec{k}(v_a)} e^{i\vec{k}(\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'})} = N\delta_{\ell\ell'}. \qquad (I.22)$$

I.4.4. Рассмотрим разложение в ряд Фурье периодических по кристаллу функций: $f(\vec{r}+\vec{R}_\ell) = f(\vec{r})$:

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} f_{\vec{q}}\, e^{i\vec{q}\vec{r}}.$$

Из условия периодичности функции $f(\vec{r})$ находим, что

$$e^{i\vec{q}\vec{R}_\ell} = 1,$$

т.е. $\vec{q}$ - векторы обратной решетки. Таким образом,

$$f(\vec{r}) = \sum_{n} f_n\, e^{i\vec{K}_n\vec{r}}. \qquad (I.23)$$

Определим Фурье-коэффициенты f_n. Для этого умножим (I.23) на $\exp(-i\vec{K}_{n'}\vec{r})$ и проинтегрируем по объему элементарной ячейки. Учитывая (I.I6), получим

$$f_n = \frac{1}{v_a}\int_{(v_a)} f(\vec{r})\, e^{-i\vec{K}_n\vec{r}}\,(d\vec{r}) \qquad (I.24)$$

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА ТГУ ДЛЯ КНИГ

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

2. КОЛЕБАНИЯ АТОМОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

2.I. АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Твердое тело как совокупность взаимодействующих между собой электронов и ядер является квантовой системой и должно описываться на языке квантовой механики. Волновая функция твердого тела зависит от совокупности координат электронов $r = \{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_n\}$ и ядер $R = \{\vec{R}_1, \vec{R}_2, \ldots, \vec{R}_N\}$. Она является решением уравнения Шредингера

$$H\Psi = E\Psi \qquad (2.I)$$

с гамильтонианом

$$H = T(r) + T(R) + V_{ээ}(r) + V_{эя}(r,R) + V_{яя}(R),$$

где $T(R) = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{k\alpha}\frac{1}{M_k}\frac{\partial^2}{\partial R_{k\alpha}^2}$ – оператор кинетической энергии ядер; M_k – масса ядра, $\alpha = x, y, z$; $T(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i\alpha}\frac{\partial^2}{\partial r_{i\alpha}^2}$ – оператор кинетической энергии электронов; m – масса электрона, $V_{ээ}(r), V_{эя}(r,R), V_{яя}(R)$ – соответственно потенциальная энергия взаимодействия электронов друг с другом, электронов с ядрами и ядер друг с другом.

Волновая функция $\Psi(r,R)$ зависит от чрезвычайно большого ($\sim 10^{24}$) числа переменных, что делает решение задачи (2.I) практически невозможным. По необходимости решение уравнения (2.I) является приближенным и делится на несколько этапов. Первым и важнейшим из них является разделение электронного и ядерного движений – так называемое адиабатическое приближение.

Физической предпосылкой для такого разделения являются следующие соображения. Ядра атомов примерно в тысячу раз тяжелее электронов, поэтому должны совершать более медленные движения.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Более легкие электроны движутся быстрее и должны успевать подстраиваться под движение ядер. Поэтому достаточно хорошим приближением для электронов должна являться задача, в которой ядра считаются покоящимися. В математическом плане эта идея реализуется следующим образом.

Предположим, что решена задача

$$\left(T(r) + V_{ээ}(r) + V_{эя}(r,R)\right)\Phi_n(r,R) = \varepsilon_n(R)\Phi_n(r,R). \qquad (2.2)$$

Поскольку в (2.2) не содержится дифференциальных операций по R, то собственные функции и собственные значения зависят от R как от параметра. При каждом R функции $\Phi_n(r,R)$ образуют полную систему. Волновую функцию $\Psi(r,R)$ можно разложить по ней

$$\Psi(r,R) = \sum_n \chi_n(R)\Phi_n(r,R). \qquad (2.3)$$

$\chi_n(R)$ – коэффициенты разложения. Подставив (2.3) в (2.1), умножив затем слева на $\Phi_n^*(r,R)$ и проинтегрировав по r с учетом ортонормированности базиса $\Phi_n(r,R)$, получим

$$\sum_n \left[T_{mn}(R) + U_{mn}(R)\right]\chi_n(R) = E\chi_m(R), \qquad (2.4)$$

где

$$U_{mn}(R) = \left(V_{яя}(R) + \varepsilon_n(R)\right)\delta_{nm},$$

$$T_{mn}(R) = T(R)\delta_{nm} + \hat{\Lambda}_{mn}(R),$$

$$\hat{\Lambda}_{mn}(R) = -\hbar^2 \sum_{k\alpha} \frac{1}{M_k}\left\{A_{mn}^{(k\alpha)}(R)\frac{\partial}{\partial R_{k\alpha}} + \frac{1}{2}B_{mn}^{(k\alpha)}(R)\right\},$$

$$A_{mn}^{(k\alpha)} = \int \Phi_m^* \frac{\partial \Phi_n}{\partial R_{k\alpha}}\, d^n r; \quad B_{mn}^{(k\alpha)} = \int \Phi_m^* \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial R_{k\alpha}^2}\, d^n r.$$

Выражение (2.4) представляет собой систему зацепляющихся дифференциальных уравнений. Если уровень $\varepsilon_n(R)$ является невырожденным, то по известным правилам теории возмущений в

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

первом порядке следует отбросить недиагональные матричные элементы гамильтониана, тогда (2.4) сводится к

$$[T_{nn}(R) + U_{nn}(R)]\chi_n(R) = E\chi_n(R).$$

То есть

$$[T(R) + W(R)]\chi_n(R) = E\chi_n(R), \qquad (2.5)$$

где

$$W(R) = V_{эл}(R) + \varepsilon_n(R) + \Lambda_{nn}(R).$$

Нетрудно видеть, что (2.5) эквивалентно пренебрежению в (2.3) всеми слагаемыми, кроме

$$\Psi(r,R) = \chi_n(R)\Phi_n(r,R). \qquad (2.6)$$

Приближения (2.5),(2.6) означают, что движение ядер не вызывает электронных переходов, или, что то же самое, для каждого мгновенного положения ядер устанавливается стационарное состояние электронной подсистемы. Оценки показывают [5] , что приближение (2.5) справедливо с точностью до членов порядка $(m/M_K)^{1/2}$.

Адиабатическое приближение (2.5),(2.6) неприменимо в случае, когда электронные термы $\varepsilon_n(R)$ пересекаются. Такие ситуации в нашем курсе не рассматриваются. Интересующимся можно рекомендовать обратиться к книге [5] .

2.2. ГАМИЛЬТОНИАН СИСТЕМЫ ЯДЕР В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В уравнении (2.5) функция $W(R)$ играет роль эффективной потенциальной энергии. Для ее вычисления необходимо было бы решить вначале задачу (2.2), что в подавляющем большинстве случаев невозможно ввиду возникающих при этом математических

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

трудностей. Поэтому функция $W(R)$ обычно моделируется на основании физических соображений.

Чаще всего можно считать, что атомы совершают малые колебания относительно положений равновесия, которые, в свою очередь, представляют собой узлы кристаллической решетки, рассмотренной нами в гл.I. Ввиду малости смещений атомов из положений равновесия можно разложить потенциальную энергию в ряд Тейлора. Поскольку предполагается, что $W(R)$ в равновесном положении имеет минимум, то линейные члены разложения должны отсутствовать. Ограничиваясь квадратичными членами (гармоническое приближение) и принимая равновесное значение энергии за уровень отсчета, имеем

$$W(R)=\frac{1}{2}\sum_{\substack{nn'\\ \alpha\alpha'}} U_{n\alpha}\, W^{(2)}_{\alpha\alpha'}\left(\vec{R}^{\circ}_{n},\vec{R}^{\circ}_{n'}\right) U_{n'\alpha'}. \qquad (2.7)$$

Здесь $\vec{U}_n$ – смещение n -го ядра из его равновесного положения $\vec{R}^{\circ}_n$; $W^{(2)}_{\alpha\alpha'}(\vec{R}^{\circ}_n,\vec{R}^{\circ}_{n'})$ – вторые производные от энергии по декартовым компонентам векторов смещений, взятые в точках $\vec{R}^{\circ}_n$. Номер атома n – сложный индекс $n=\ell s$, $\ell=1,2,\dots,N$ – номер ячейки, $s=1,2,\dots,p$ – номер атома в ячейке (см.гл.I),

Физические свойства кристалла не должны зависеть от того, в какой ячеике выбрано начало координат, поэтому

$$W^{(2)}_{\alpha\alpha'}\left(\vec{R}^{\circ}_{n}-\vec{R}^{\circ}_{\ell},\ \vec{R}^{\circ}_{n'}-\vec{R}^{\circ}_{\ell}\right)=W^{(2)}_{\alpha\alpha'}\left(\vec{R}^{\circ}_{n},\vec{R}^{\circ}_{n'}\right). \qquad (2.8)$$

Здесь $\vec{R}^{\circ}_{\ell}$ – радиус-вектор начала ячейки с номером ℓ .

Отметим еще одно важное свойство величин $W^{(2)}_{\alpha\alpha'}(\vec{R}^{\circ}_{n},\vec{R}^{\circ}_{n'})$ Пусть кристалл в целом сдвинут на вектор $\vec{V}$. Тогда формально все атомы приобретают смещения $\vec{U}_n=\vec{V}$. Ясно, что при этом энергия не изменится, следовательно, при нашем выборе начала отсчета энергии $W(R)=0$. Иначе говоря,

$$\sum_{\substack{nn'\\ \alpha\alpha'}} V_{\alpha}\, W^{(2)}_{\alpha\alpha'}\left(\vec{R}^{\circ}_{n},\vec{R}^{\circ}_{n'}\right) V_{\alpha'}=0. \qquad (2.9)$$

Ввиду произвольности $\vec{V}$, из (2.9) вытекает

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\sum_{nn'} W^{(2)}_{\alpha\alpha'}(\vec{R}^0_n, \vec{R}^0_{n'}) = 0. \qquad (2.10)$$

Будучи матрицей вторых производных, $W^{(2)}_{\alpha\alpha'}(\vec{R}^0_n, \vec{R}^0_{n'})$ симметрична относительно перестановки пар индексов αn, $\alpha' n'$ и вещественна.

Для дальнейшего удобно ввести векторы в $3pN$ -мерном пространстве $Q = \{Q_{n\alpha}\}$ с компонентами

$$Q_{n\alpha} = \sqrt{M_n}\, U_{n\alpha}. \qquad (2.11)$$

Определим обычным образом скалярное произведение

$$\langle F|G\rangle = \sum_{n\alpha} F^*_{n\alpha} G_{n\alpha} \qquad (2.12)$$

и действие матрицы на вектор

$$(\hat{A}|F\rangle)_{n\alpha} = \sum_{n'\alpha'} A_{\alpha\alpha'}(nn') F_{n'\alpha'}. \qquad (2.13)$$

Тогда, учитывая вещественность смещений $U_{n\alpha} = U^*_{n\alpha}$, имеем

$$W = \frac{1}{2}\langle Q|\hat{\Phi}|Q\rangle, \qquad (2.14)$$

где

$$\Phi_{\alpha\alpha'}(nn') = \frac{1}{\sqrt{M_n M_{n'}}}\, W^{(2)}_{\alpha\alpha'}(\vec{R}^0_n, \vec{R}^0_{n'}). \qquad (2.15)$$

Матрица $\hat{\Phi}$ имеет размерность $3pN \times 3pN$, она вещественная и симметричная, кроме того, она - положительно определенная. Последнее вытекает из того, что $W(R)$ имеет минимум. Следовательно, собственные значения $\hat{\Phi}$ вещественны и неотрицательны.

$$\hat{\Phi} e^\lambda = \omega^2_\lambda e^\lambda. \qquad (2.16)$$

$3pN$ - векторы e^λ с компонентами $e^\lambda_{n\alpha}$ образуют в $3pN$-мерном пространстве ортонормированный базис.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\sum_{\alpha n} e^{*\lambda}_{n\alpha} e^{\lambda'}_{n\alpha} = \delta_{\lambda\lambda'}\,; \quad \sum_{\lambda} e^{*\lambda}_{n\alpha} e^{\lambda}_{n'\alpha'} = \delta_{nn'}\delta_{\alpha\alpha'}. \qquad (2.17)$$

Вектор смещений Q можно разложить по этому базису

$$Q = \sum_{\lambda} A_\lambda e^{\lambda}\,; \quad A_\lambda = \sum_{n\alpha} Q_{n\alpha} e^{*\lambda}_{n\alpha}\,. \qquad (2.18)$$

Ввиду вещественности $Q_{n\alpha}$ справедливо также

$$Q = \sum_{\lambda} A^{*}_{\lambda} e^{*\lambda}\,; \quad A^{*}_{\lambda} = \sum_{n\alpha} Q_{n\alpha} e^{\lambda}_{n\alpha}\,. \qquad (2.18')$$

Тогда (2.14) переписывается в виде

$$W = \frac{1}{2}\sum_{\lambda} A_\lambda A^{*}_{\lambda}\,\omega^2_\lambda\,. \qquad (2.19)$$

Оператор кинетической энергии $T = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{n} M_n^{-1}\frac{\partial^2}{\partial U^2_{n\alpha}}$ также может быть выражен через A_λ

$$\frac{\partial}{\partial U_{n\alpha}} = \sqrt{M_n}\,\frac{\partial}{\partial Q_{n\alpha}} = \sqrt{M_n}\sum_{\lambda}\frac{\partial A_\lambda}{\partial Q_{n\alpha}}\frac{\partial}{\partial A_\lambda} = \sqrt{M_n}\sum_{\lambda} e^{*\lambda}_{n\alpha}\frac{\partial}{\partial A_\lambda}, \qquad (2.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial A_\lambda} = \sum_{n\alpha}\frac{1}{\sqrt{M_n}}\, e^{\lambda}_{n\alpha}\frac{\partial}{\partial U_{n\alpha}}\,.$$

Ввиду вещественности смещений также

$$\frac{\partial}{\partial U_{n\alpha}} = \sqrt{M_n}\sum_{\lambda} e^{\lambda}_{n\alpha}\frac{\partial}{\partial A^{*}_{\lambda}}\,; \quad \frac{\partial}{\partial A^{*}_{\lambda}} = \sum_{n\alpha}\frac{1}{\sqrt{M_n}}\, e^{*\lambda}_{n\alpha}\frac{\partial}{\partial U_{n\alpha}}\,. \qquad (2.20')$$

На основании (2.20),(2.20') гамильтониан (2.5) записывается в виде

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\lambda}\left\{-\hbar^2\frac{\partial}{\partial A_\lambda}\frac{\partial}{\partial A^{*}_{\lambda}} + \omega^2_\lambda A_\lambda A^{*}_{\lambda}\right\}. \qquad (2.21)$$

Рассмотрим свойства решений (2.16). Введем унитарную матрицу $\hat{T}^{(\ell)}$ соотношением

$$T^{(\ell)}_{\alpha\alpha'}(nn') = \delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\vec{R}^{\circ}_{n'},\,\vec{R}_n - \vec{R}^{\circ}_{\ell}}\,. \qquad (2.22)$$

Нетрудно видеть, что свойство (2.8) с учетом (2.9)

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

можно записать, как

$$\hat{T}^{(\ell)}\,\hat{\Phi}\,\hat{T}^{(\ell)+} = \hat{\Phi}. \qquad (2.23)$$

Следовательно, $\hat{\Phi}$ и $\hat{T}^{(\ell)}$ – коммутирующие матрицы. Тогда система собственных функций у них может быть выбрана общей. Рассмотрим задачу на собственные значения для матрицы

$$\hat{T}^{(\ell)}\,\hat{e} = t^{(\ell)}\,\hat{e}. \qquad (2.24)$$

Очевидно свойство $t^{(\ell+\ell')} = t^{(\ell)}\,t^{(\ell')}$. Ввиду унитарности $\hat{T}^{(\ell)}$ справедливо $|t^{(\ell)}|^2 = 1$. Обоим свойствам можно удовлетворить, выбрав $t^{(\ell)} = e^{i\vec{q}\vec{R}_\ell^0}$. Здесь $\vec{q} = q_1\vec{b}_1 + q_2\vec{b}_2 + q_3\vec{b}_3$ – вектор в обратном пространстве; $\vec{b}_i$ – введенные в гл.I базисные векторы обратного пространства. Различные $\hat{e}$ в (2.24) различаются постольку, поскольку различаются $\vec{q}$, т.е. $\vec{q}$ нумеруют решения. Тем же индексом, следовательно, характеризуются и решения задачи (2.I6). Решения могут различаться еще по какому-либо признаку, поэтому в (2.I6) индекс λ – сложный: $\lambda = \vec{q}\varkappa$. Итак,

$$\hat{T}^{(\ell)}\hat{e}_{\varkappa\vec{q}} = e^{i\vec{q}\vec{R}_\ell^0}\,\hat{e}_{\varkappa\vec{q}}. \qquad (2.25)$$

Поскольку $e^{i\vec{K}_n\vec{R}_\ell^0} = 1$, если $\vec{K}_n$ – вектор обратной решетки (см.гл.I), получается, что векторы $\vec{q}$ и $\vec{q}+\vec{K}_n$ характеризуют одно и то же решение. Для устранения неоднозначности считают, что $\vec{q}$ лежит в первой зоне Бриллюэна, т.е. $\vec{K}_n = 0$ всегда.

Матрица $\hat{\Phi}$ имеет размерность $3pN \times 3pN$ и имеет, следовательно, $3pN$ собственных значений. В то же время вектор $\vec{q}$ принимает бесконечное множество значений. Для устранения этого противоречия принято считать, что допустимы только N дискретных значений $\vec{q}$, равномерно распределенных в зоне Бриллюэна. Нетрудно подсчитать, что на одно значение $\vec{q}$ приходится в обратном пространстве объем $V_\ell/N = (2\pi)^3/V_a N = (2\pi)^3/V$, где V_a – объем элементарной ячейки прямого пространства; V – объем всего кристалла. Оставшиеся индексы $\varkappa$ могут, следовательно, принимать $3p$ различных значений. Принятый способ нумерации собственных векторов удобен тем, что

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

позволяет правильно производить предельный переход к бесконечному кристаллу, при этом отношение N/V , т.е. плотность кристалла, автоматически остается неизменным.

Перепишем соотношение (2.25) с учетом (2.22)

$$e^{x\vec{q}}_{n-\ell,\alpha} = e^{i\vec{q}\vec{R}^0_\ell}\, e^{x\vec{q}}_{n\alpha} . \qquad (2.26)$$

Вспомним теперь, что $n = \ell s$, т.е. $\vec{R}^0_n = \vec{R}^0_\ell + \vec{R}^0_s$,следовательно,

$$e^{x\vec{q}}_{n\alpha} = e^{-i\vec{q}\vec{R}^0_\ell}\, e^{x\vec{q}}_{0s\alpha} . \qquad (2.27)$$

Подвергнем комплексному сопряжению обе части соотношения (2.I6)

$$\hat{\Phi}\, e^{x\vec{q}*} = \omega^2_{x\vec{q}}\, e^{x\vec{q}*} \qquad (2.28)$$

Соотношение (2.28) означает, что вектор $e^{x\vec{q}*}$ также является собственным вектором задачи (2.I6) с тем же собственным значением. Согласно (2.27)

$$e^{x\vec{q}*}_{n\alpha} = e^{i\vec{q}\vec{R}^0_\ell}\, e^{x\vec{q}*}_{0s\alpha} . \qquad (2.29)$$

В соответствии с нашим правилом нумерации собственных векторов и (2.29) получается, что $\hat{e}^{x\vec{q}*}$ есть некоторый вектор, нумерующийся индексом $(-\vec{q})$, т.е. $\hat{e}^{x\vec{q}*} = \hat{e}^{\bar{x}(-\vec{q})}$. Условимся нумеровать векторы так, чтобы $x = \bar{x}$, тогда, имея в виду (2.28),

$$\hat{e}^{x\vec{q}*} = \hat{e}^{x(-\vec{q})}\,; \quad \omega^2_{x\vec{q}} = \omega^2_{x(-\vec{q})} . \qquad (2.30)$$

Перепишем условие ортогональности (2.I7)

$$\sum_{\ell s\alpha} e^{x\vec{q}}_{\ell s\alpha}\, e^{x'\vec{q}'*}_{\ell s\alpha} = \delta_{xx'}\, \delta_{\vec{q}\vec{q}'} . \qquad (2.3I)$$

С другой стороны, подставляя явный вид $e^{x\vec{q}}_{\ell s\alpha}$ из (2.27) и используя соотношение (I.I3), получим

$$\sum_{\ell s\alpha} e^{x\vec{q}}_{\ell s\alpha}\, e^{x'(-\vec{q}')}_{\ell s\alpha} = N\delta_{\vec{q}\vec{q}'} \sum_{s\alpha} e^{x\vec{q}}_{s\alpha}\, e^{x'(-\vec{q})}_{0s\alpha} . \qquad (2.32)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Введем величины $\xi^{x\vec{q}}_{sa}$ соотношением $e^{x\vec{q}}_{sa} = \frac{1}{\sqrt{N}} \xi^{x\vec{q}}_{sa}$, тогда из (2.31) и (2.32) следует

$$\sum_{sa} \xi^{x\vec{q}}_{sa} \xi^{x'(-\vec{q})}_{sa} = \delta_{xx'}; \quad e^{x\vec{q}}_{sa} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\vec{q}\vec{R}^0_{\ell}} \xi^{x\vec{q}}_{sa}. \tag{2.33}$$

В соответствии с (2.18), (2.20) $A^*_{x\vec{q}} = A_{x(-\vec{q})}$; $\frac{\partial}{\partial A^*_{x\vec{q}}} = \frac{\partial}{\partial A_{x(-\vec{q})}}$.

Теперь мы имеем возможность привести гамильтониан (2.21) к более простому виду. Введем операторы

$$a_{x\vec{q}} = \sqrt{\frac{\omega_{x\vec{q}}}{2\hbar}} A_{x\vec{q}} + \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{x\vec{q}}}} \frac{\partial}{\partial A_{x(-\vec{q})}},$$

$$a^+_{x\vec{q}} = \sqrt{\frac{\omega_{x\vec{q}}}{2\hbar}} A_{x(-\vec{q})} - \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{x\vec{q}}}} \frac{\partial}{\partial A_{x\vec{q}}}, \tag{2.34}$$

$$A_{x\vec{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{x\vec{q}}}} \left(a_{x\vec{q}} + a^+_{x(-\vec{q})}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial A_{x\vec{q}}} = \sqrt{\frac{\omega_{x\vec{q}}}{2\hbar}} \left(a_{x(-\vec{q})} - a^+_{x\vec{q}}\right). \tag{2.34'}$$

Непосредственным вычислением нетрудно установить, что (2.21) приводится к виду

$$H = \sum_{x\vec{q}} \hbar\omega_{x\vec{q}} \left(a^+_{x\vec{q}} a_{x\vec{q}} + \frac{1}{2}\right). \tag{2.35}$$

Суммирование по $\vec{q}$ в (2.35) проводится по зоне Бриллюэна; наряду с $\vec{q}$ в ней содержится и $-\vec{q}$, так что

$$\sum_{\vec{q}} a^+_{x\vec{q}} a_{x\vec{q}} = \sum_{\vec{q}} a^+_{x(-\vec{q})} a_{x(-\vec{q})}.$$

Также непосредственно проверяются коммутационные соотношения

$$[a_{x\vec{q}}, a^+_{x\vec{q}}] = \delta_{xx'} \delta_{\vec{q}\vec{q}'}; \quad [a_{x\vec{q}} a_{x'\vec{q}'}] = [a^+_{x\vec{q}} a^+_{x'\vec{q}'}] = 0. \tag{2.36}$$

Оператор (2.35) представляет собой не что иное, как гамильтони-

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

ан системы независимых гармонических осцилляторов, нумерующихся индексами $x\vec{q}$.

Решение задачи (2.5) с гамильтонианом (2.35) хорошо известно

$$\chi(R) = \chi(\{u_{n\alpha}\}) = \chi(\{n_{x\vec{q}}\}) = \prod_{x\vec{q}} |n_{x\vec{q}}\rangle,$$

$$|n_{x\vec{q}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{x\vec{q}}!}} (a^{+}_{x\vec{q}})^{n_{x\vec{q}}} |0\rangle ; \quad E(\{n_{x\vec{q}}\}) = \sum_{x\vec{q}} \hbar\omega_{x\vec{q}} \left(n_{x\vec{q}} + \frac{1}{2}\right), \tag{2.37}$$

$n_{x\vec{q}}$ - целые числа (числа заполнения). Отметим еще полезные соотношения

$$a_{x\vec{q}}|0\rangle = 0 ; \quad a^{+}_{x\vec{q}}|n_{x\vec{q}}\rangle = \sqrt{n_{x\vec{q}}+1}\,|n_{x\vec{q}}+1\rangle,$$

$$a_{x\vec{q}}|n_{x\vec{q}}\rangle = \sqrt{n_{x\vec{q}}}\,|n_{x\vec{q}}-1\rangle. \tag{2.38}$$

В гайзенберговской картине движения эволюция системы во времени определяется соотношениями

$$i\hbar \frac{\partial a_{x\vec{q}}}{\partial t} = [a_{x\vec{q}} H]; \quad i\hbar \frac{\partial a^{+}_{x\vec{q}}}{\partial t} = [a^{+}_{x\vec{q}} H]. \tag{2.39}$$

Подставляя (2.35) и используя (2.36), имеем

$$\frac{\partial a_{x\vec{q}}}{\partial t} = -i\omega_{x\vec{q}} a_{x\vec{q}} ; \quad \frac{\partial a^{+}_{x\vec{q}}}{\partial t} = i\omega_{x\vec{q}} a^{+}_{x\vec{q}}. \tag{2.40}$$

Следовательно,

$$a_{x\vec{q}}(t) = e^{-i\omega_{x\vec{q}}t} a_{x\vec{q}}(0); \quad a^{+}_{x\vec{q}}(t) = e^{i\omega_{x\vec{q}}t} a^{+}_{x\vec{q}}(0). \tag{2.41}$$

Объединяя (2.11), (2.18), (2.33), (2.34), (2.41), имеем для смещений атомов из положений равновесия

$$u_{\ell\alpha}(t) = \sum_{x\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{x\vec{q}} N M_s}}\, e^{-i\vec{q}\vec{R}^{0}_{\ell}} \xi^{x\vec{q}}_{\alpha} \left(e^{-i\omega_{x\vec{q}}t} a_{x\vec{q}}(0) + e^{i\omega_{x\vec{q}}t} \cdot a^{+}_{x-\vec{q}}(0)\right). \tag{2.42}$$

Выражение (2.42) имеет совершенно прозрачный смысл. Атомы колеблются около своих положений равновесия. Наличие множителей $e^{\pm i\omega_{x\vec{q}}t}$ указывает на то, что колебания происходят с частотами $\omega_{x\vec{q}}$. Колебания распространяются по кристаллу в виде плоских волн с волновым вектором $\vec{q}$ (на это указывает мно

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

житель $e^{-i\vec{q}\vec{R}_\ell^0}$). Направление смещений каждого атома номера ℓ в волне типа $\varkappa\vec{q}$ определяется вектором $\vec{\xi}_s^{\varkappa\vec{q}}$. Такие квантованные волны колебаний кристаллической решетки называются фононами. Совокупность частот $\omega_{\varkappa\vec{q}}$ называется фононным спектром.

2.3. АКУСТИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ ФОНОНЫ. КОНТИНУАЛЬНЫЙ ПРЕДЕЛ

Для решения задачи (2.I6) необходимо задать матрицу $\hat{\Phi}$. В большинстве случаев вычислить ее не удается, поэтому элементы матрицы приходится считать константами теории.

Некоторые свойства решений (2.I6) являются общими для всех кристаллов, независимо от вида $\hat{\Phi}$. Прежде всего, из (2.I0) вытекает, что существуют три вектора $\hat{e}^{\varkappa a\kappa}$, где $\varkappa=(x),(y),(z)$ с компонентами

$$e_{np}^{(\alpha)a\kappa}=\sqrt{\frac{M_n}{NM}}\,\delta_{\alpha\beta}\,;\quad \hat{\Phi}\hat{e}^{(\alpha)a\kappa}=0. \qquad (2.43)$$

Здесь $M=\sum_s M_s$. Таким образом, существует трехкратно вырожденная частота $\omega_{a\kappa}^2=0$. Учитывая независимость массы иона от индекса ℓ $M_{\ell s}=M_s$, имеем $e_{n-\ell,\beta}^{(\alpha)a\kappa}=e_{n,\beta}^{(\alpha)a\kappa}$, что, согласно (2.26), означает, что $\vec{q}=0$. Следовательно, колебания с частотой $\omega_{a\kappa}$ соответствуют волнам бесконечной длины. Смещение ℓs-го атома в пределе $\vec{q}\to 0$ при таком колебании равно, согласно (2.II), (2.I8),

$$u_{\ell s\alpha}(t)=\sum_{(\beta)}\frac{1}{\sqrt{M_s}}A_{(\beta)}\,e_{\ell s\alpha}^{(\beta)a\kappa}=\frac{A_{(\alpha)}}{\sqrt{MN}}\,e^{-i\vec{q}\vec{R}_\ell^0} \qquad (2.44)$$

(Для удобства мы формально сохраняем множитель $e^{-i\vec{q}\vec{R}_\ell^0}$ в пределе $\vec{q}\to 0$). Как видно из (2.44), все атомы смещаются на одну и ту же величину, т.е. кристалл смещается как целое.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Векторы поляризации, введенные соотношением (2.43), пропорциональны в данном случае ортам декартовой системы $\vec{h}^{(\alpha)}$

$$e^{(\alpha)}_{s\beta} = \delta_{\alpha\beta}; \quad \vec{\xi}^{(\alpha)ak}_{s} = \sqrt{\frac{M_s}{M}}\,\vec{h}^{(\alpha)}. \qquad (2.45)$$

Пока мы никак не фиксировали положение координатных осей. Всегда можно направить одну из них, например ось z, вдоль направления вектора $\vec{q}$. Обозначим этот вектор индексом l (*longitudinal* – продольный). Для соответствующего колебания $\vec{\xi}^{(l)ak}_{s} = \sqrt{\frac{M_s}{M}}\,\vec{q}/q$, и смещения атомов в такой волне, согласно (2.42) происходят вдоль направления ее распространения. Оставшиеся два вектора $\vec{\xi}^{(T)ak}_{s}$ описывают поперечные колебания.

Частоту ω^{2ak}_{xq}; $(x = l, T)$ при малых $\vec{q}$ разложим по волновому вектору. Ввиду (2.30) линейный член разложения должен быть равен нулю, кроме того, $\omega^{2ak}_{xq} \to 0$; $\vec{q} \to 0$, поэтому $\omega^{2ak}_{xq} = \sum_{\alpha\beta} C^{x}_{\alpha\beta} q_\alpha q_\beta$. Тензор $C^{x}_{\alpha\beta}$ может быть приведен к главным осям, тогда $C^{x}_{\alpha\beta} = C^{x}_{\alpha}\delta_{\alpha\beta}$. В изотропной среде $C^{x}_{\alpha} = C^{x}$, тогда $\omega^{2ak}_{xq} = C^{x} q^2$ и $\omega^{ak}_{xq} = v_x q$, где $v_x = \sqrt{C^x}$. Такая зависимость частоты от волнового вектора характерна для звуковых колебаний, где v_x – скорость звука, поэтому колебания с частотами ω^{ak}_{xq} принято называть акустическими. Более подробно акустические колебания мы рассмотрим в гл.3.

Смещение атомов при акустических колебаниях, согласно (2.42) при $\vec{q} \to 0$ записывается в виде

$$u_{\alpha s}(t) = \sum_{x=l,T} \sqrt{\frac{\hbar}{2 v_x q M N}}\,\vec{h}^{(x)}\left(a_{x\vec{q}}(t) + a^{+}_{x-\vec{q}}(t)\right) e^{-i\vec{q}\vec{R}^{0}_{\ell}}. \qquad (2.46)$$

Все колебания, не являющиеся акустическими, согласно (2.31) должны при $q = 0$ удовлетворять соотношению

$$\sum_{n\alpha} e^{x\vec{q}(opt)}_{n\alpha}\, e^{x(-\vec{q})(ak)}_{n\alpha} = 0. \qquad (2.47)$$

Эти колебания принято называть оптическими. Из (2.43) следует

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\sum_n \sqrt{\frac{M_n}{NM}}\, e^{x\vec{q}(опт)}_{n\alpha} = 0. \qquad (2.48)$$

Домножая на $A^{(опт)}_{x\vec{q}}$ и имея в виду (2.18) и (2.11), получим $\sum_n M_n U^{(опт)}_{n\alpha} = 0$, следовательно, при оптических колебаниях центр тяжести кристалла неподвижен.

В важном случае двухатомного кристалла ($j = 1,2$) имеем

$$\sum_l \left(\sqrt{M_1}\, \vec{e}^{\,x\vec{q}(опт)}_{l_1} + \sqrt{M_2}\, \vec{e}^{\,x\vec{q}(опт)}_{l_2} \right) = 0. \qquad (2.49)$$

В предельном случае $\vec{q} \to 0$ соотношение (2.33) дает

$$\vec{e}^{\,x\vec{q}}_{l_1} = \frac{1}{\sqrt{N}}\, \vec{\xi}^{\,x\vec{q}}_1 ; \quad \vec{e}^{\,x\vec{q}}_{l_2} = \frac{1}{\sqrt{N}}\, \vec{\xi}^{\,x\vec{q}}_2 . \qquad (2.50)$$

Согласно соотношению ортогональности (2.33)

$$\left|\vec{\xi}^{\,x\vec{q}}_1\right|^2 + \left|\vec{\xi}^{\,x\vec{q}}_2\right|^2 = 1. \qquad (2.51)$$

Введем векторы $\vec{h}^{(x)}$ соотношением $\vec{\xi}^{\,x\vec{x}_0}_1 = \vec{h}^{(x)} \sqrt{\frac{M_2}{M_1+M_2}}$, тогда из (2.49), (2.50) следует $\vec{\xi}^{\,x\vec{x}_0}_2 = -\vec{h}^{(x)} \sqrt{\frac{M_1}{M_1+M_2}}$, а из (2.51) $\left|\vec{h}^{(x)}\right|^2 = 1$. Необходимо еще, чтобы удовлетворялось второе соотношение ортогональности (2.17). Отметим, прежде всего, что $x(опт)$ и $x(ак)$ в двухатомном кристалле могут совместно принимать $3s = 6$ значений, тогда $x(опт)$ принимают три значения. Нетрудно видеть, что для выполнения (2.17) при учете (2.45) необходимо, чтобы $\vec{h}^{(x)}$ совпадали с ортами декартовой системы. Разумеется, орты всегда можно выбрать так, чтобы выделить, так же как и в случае акустических фононов, продольное $\vec{h}^{(1)} = \vec{q}/q$ и два поперечных колебания.

Удобно ввести вектор взаимных смещений атомов

$$\vec{S}_l = \vec{U}_{l_1} - \vec{U}_{l_2} = \sum_x \left(\frac{1}{\sqrt{M_1}} A_{x\vec{q}}\, \vec{e}^{\,x}_{l_1} - \frac{1}{\sqrt{M_2}} A_{x\vec{q}}\, \vec{e}^{\,x}_{l_2} \right) =$$

$$= \sqrt{\frac{M_1 M_2}{N(M_1+M_2)}} \sum_x A_{x\vec{q}}\, \vec{h}^{(x)} e^{-i\vec{q}\vec{R}^0_l} \qquad (2.52)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Мы опять формально удерживаем множитель $e^{-i\vec{q}\vec{R}_e^0}$, имея в виду предел $\vec{q}\to 0$. С учетом (2.34')

$$\vec{S}_e = \sum_{\varkappa=1,T} \sqrt{\frac{\hbar}{2M_0 N\omega_{\varkappa\vec{q}}^{опт}}}\,\vec{h}^{(\varkappa)} e^{-i\vec{q}\vec{R}_e^0}\left(a_{\varkappa\vec{q}}(t)+a^{+}_{\varkappa-\vec{q}}(t)\right), \quad (2.53)$$

Здесь $1/M_0 = 1/M_1 + 1/M_2$, M_0 – приведенная масса. Частоты $\omega^{(опт)}_{\varkappa\vec{q}}$ принимают, вообще говоря, ненулевые значения при $\vec{q}=0$. В пределе $\vec{q}\to 0$ длина волны значительно превышает размеры элементарной ячейки кристалла, поэтому дискретность кристаллической структуры не имеет значения. В этом случае удобно считать кристалл непрерывной средой. Для перехода к этому (континуальному) пределу заменим в (2.46) и (2.53) $\vec{R}_e^0$ непрерывной переменной $\vec{r}$

$$\vec{u}(\vec{r},t) = \sum_{\varkappa ak} \sqrt{\frac{\hbar}{2v_\varkappa q\rho V}}\,\vec{h}^{(\varkappa)}\left(a_{\varkappa\vec{q}}(t)+a^{+}_{\varkappa-\vec{q}}(t)\right)e^{-i\vec{q}\vec{r}}, \quad (2.54)$$

$$\vec{S}(\vec{r},t) = \sum_{\varkappa опт} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\varkappa q}\rho_0 V}}\,\vec{h}^{(\varkappa)}\left(a_{\varkappa\vec{q}}(t)+a^{+}_{\varkappa-\vec{q}}(t)\right)e^{-i\vec{q}\vec{r}}. \quad (2.55)$$

$\rho = M/v_a$ – плотность кристалла; $\rho_0 = M_0/v_a$; $V = N v_a$ – объем кристалла. Часть потенциальной энергии, связанной с оптическими колебаниями $W^{опт}$, можно записать при $\vec{q}=0$ в виде

$$W^{опт} = \frac{1}{2}\sum_{\varkappa опт} \rho_0 V(\vec{S}\vec{h}^{(\varkappa)})\,\omega_\varkappa^2\,(\vec{S}\vec{h}^{(\varkappa)}). \quad (2.56)$$

Для получения (2.56) использованы формулы (2.19), (2.34'); (2.55) и взаимная ортогональность тройки векторов $\vec{h}^{(\varkappa)}$. Непосредственным дифференцированием (2.55) и (2.56) нетрудно проверить, что

$$\rho_0 V\ddot{\vec{S}} = -\frac{\partial W^{опт}}{\partial \vec{S}}. \quad (2.57)$$

Смысл (2.57) совершенно очевиден – это уравнение Ньютона для взаимных смещений. Если $\omega^2_{\varkappa\vec{q}} = \omega_\varkappa^2$ не зависит от $\vec{q}$, то

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

ввиду $\sum_{\alpha} h_{\alpha}^{(x)} h_{\beta}^{x} = \delta_{\alpha\beta}$ выражение (2.56) записывается более просто

$$W^{опт} = \frac{1}{2} \rho_0 V \omega_0^2 s^2. \qquad (2.58)$$

2.4. КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ В ПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Атомы в решетке могут нести на себе некоторый заряд. Очевидно, знак заряда для различных атомов должен различаться, так чтобы в целом кристалл был нейтральным. Для кристалла с двумя атомами в элементарной ячейке знаки зарядов атомов с номерами $s=1$ и $s=2$ должны быть противоположны. Смещение $\vec{S}$ сопровождается появлением дипольного момента и может поэтому взаимодействовать с электрическим полем. При этом возникают силы большого радиуса действия, поэтому рассмотрение колебаний решетки в таких кристаллах отличается некоторыми особенностями.

При наличии электрического поля $\vec{E}$ потенциальная энергия должна зависеть как от $\vec{S}$, так и от $\vec{E}$: $W^{опт} = W(\vec{S}, \vec{E})$. Будем предполагать поля и смещения малыми. Учитывая, что при $\vec{S}=0$, $\vec{E}=0$ энергия минимальна, запишем разложение в ряд Тейлора в виде

$$W^{опт} = V \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{1}{2} a_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta + b G_\alpha S_\beta + \frac{1}{2} C_{\alpha\beta} E_\alpha E_\beta \right). \qquad (2.59)$$

Множители V, $\frac{1}{2}$ введены для удобства. Величины $\hat{a}$, $\hat{b}$, $\hat{c}$ являются тензорами. В кристалле с кубической симметрией все направления равноправны, поэтому эти тензоры должны быть диагональными. Тогда

$$W^{опт} = V \left(\frac{1}{2} a s^2 + b (\vec{E}\vec{S}) + \frac{1}{2} c s^2 \right) \qquad (2.60)$$

Если бы атомы были не заряжены, то зависимость от поля должна была бы отсутствовать: $b=c=0$. Сравнивая с (2.58), видим, что $a = \rho_0 \omega_0^2$, где ω_0^2 – частота оптического фонона в

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

неполярном кристалле.

Будем предполагать гармоническую зависимость смещений и полей от времени $\vec{S}(t) = \vec{S}_\omega e^{-i\omega t}$, $\vec{E}(t) = \vec{E}_\omega e^{-i\omega t}$. Записывая уравнение движения для смещений в виде, аналогичном (2.57), получим

$$\rho_0 \omega^2 \vec{S} = a\vec{S} + b\vec{E} . \qquad (2.61)$$

Отсюда

$$\vec{S} = \frac{b\vec{E}}{\rho_0(\omega^2 - \omega_0^2)} . \qquad (2.62)$$

При наличии внешней электрической индукции $\vec{D}$ электрическое поле определяется матричным уравнением

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P} . \qquad (2.63)$$

Здесь $\vec{P} = -\frac{1}{V}\frac{\partial W}{\partial E}$ - электрическая поляризация среды. Согласно (2.60)

$$\vec{P} = -b\vec{S} - c\vec{E} . \qquad (2.64)$$

Подставляя (2.62),(2.64) в (2.63), получаем

$$\vec{D} = \varepsilon\vec{E} . \qquad (2.65)$$

Здесь диэлектрическая проницаемость ε имеет вид

$$\varepsilon(\omega) = 1 - 4\pi c - \frac{4\pi b^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)\rho_0} . \qquad (2.66)$$

Значения $\varepsilon(\omega)$ в пределе $\omega \to \infty$ и $\omega \to 0$ измеряются на опыте. Считая их известными, нетрудно определить b и c . Тогда (2.66) приводится к виду

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{(\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty))\,\omega_0^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)} . \qquad (2.67)$$

Согласно (2.55) смещение $\vec{S}$ представляет собой плоскую волну вида $\vec{S} = \vec{S}_q e^{i\vec{q}\vec{z}}$, ввиду (2.62),(2.63),(2.64) величины $\vec{D}, \vec{E}, \vec{P}$ - также плоские волны

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\begin{Bmatrix} \vec{D} \\ \vec{E} \\ \vec{P} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vec{D}_{\vec{q}} \\ \vec{E}_{\vec{q}} \\ \vec{P}_{\vec{q}} \end{Bmatrix} e^{i\vec{q}\vec{r}} . \qquad (2.68)$$

Рассмотрим отдельно случаи продольных и поперечных колебаний.

I. Продольные (L) колебания: $\vec{J}, \vec{E}, \vec{P}, \vec{D} \parallel \vec{q}$. Воспользуемся уравнением Максвелла $(\vec{\nabla}\vec{D}) = 0$. Ввиду (2.68) оно сводится к $(\vec{q}\vec{D}) = 0$. Поскольку $\vec{D} \parallel \vec{q}$, это означает, что $\vec{D} = 0$; тогда из (2.62), (2.65) следует, что при $\vec{J} \neq 0$ должно быть $\varepsilon = 0$; приравнивая нулю правую часть (2.66), имеем

$$\omega_L^2 = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} \omega_0^2 . \qquad (2.69)$$

2. Поперечные (T) колебания: $\vec{J} \perp \vec{q}$, тогда $\vec{E}, \vec{P}, \vec{D} \perp \vec{q}$. Воспользуемся другим уравнением из системы Максвелла

$$[\vec{\nabla} \times \vec{E}] = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} . \qquad (2.70)$$

$\vec{B}$ – магнитное поле, c – скорость света. В условиях, когда запаздыванием взаимодействия можно пренебречь, $c \to \infty$ и (2.70) сводится к $[\vec{q} \times \vec{E}] = 0$, что при $\vec{E} \perp \vec{q}$ означает $\vec{E} = 0$; с другой стороны, при $\vec{J} \neq 0$, согласно (2.64), (2.63) $\vec{P} \neq 0$ и $\vec{D} \neq 0$. Это согласуется с $\vec{E} = 0$ и (2.65) только при $\varepsilon \to \infty$. Следовательно, частота поперечного колебания (а точнее, двух поперечных колебаний со взаимно ортогональными направлениями смещений) $\omega_T^2 = \omega_0^2$, т.е. такая же, как и в неполярном кристалле.

Итак, в полярных кристаллах, в отличие от неполярных, частоты продольных и поперечных колебаний отличаются (так называемое продольно-поперечное расщепление оптических частот).

Определим электрический потенциал, $\varphi(\vec{r}) = \varphi_q e^{i\vec{q}\vec{r}}$, создаваемый колебаниями решетки соотношением $\varphi(\vec{r}) = \varphi_q e^{i\vec{q}\vec{r}}$. Тогда $\vec{E} = -i\vec{q}\varphi$ и $\varphi = i(\vec{q}\vec{E})/q^2$. Обращаясь к соотношению (2.62), получим $\varphi = i f_0 (\omega^2 - \omega_0^2)(\vec{q}\vec{J})/\beta q^2$. Нетрудно видеть, что поперечные колебания не создают электрического потенциала (в электростатическом приближении $c \to \infty$). Подставив

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

в выражение для φ значение константы b и частоту продольных колебаний (2.69), получим для электростатического потенциала, создаваемого продольными колебаниями,

$$\varphi(\vec{r}) = i\sqrt{4\pi\rho_0\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon_0}\right)\omega_l^2}\,\frac{(\vec{q}\,\vec{S}(\vec{r}))}{q^2}, \qquad (2.71)$$

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{d(\vec{q}\,\vec{S})}{q^2}, \quad d = i\sqrt{4\pi\rho_0\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon_0}\right)\omega_l^2}.$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

3. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ

3.1. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ УПРУГОГО КОНТИНУУМА

В теории упругости пренебрегают микроскопической атомной структурой и рассматривают твердое тело как непрерывную среду с постоянной плотностью в недеформированном состоянии. При этом деформация кристалла вместо смещений $\vec{u}_n$ описывается непрерывным векторным полем смещений $\vec{u}(\vec{r})$, определяющим смещение элемента объема, занимающего в равновесии положение возле точки $\vec{r}$.

Теорию упругости можно построить, совершив континуальный предел, т.е. перейдя от дискретной среды к непрерывной в выражении для потенциальной энергии (2.7). Для простоты мы ограничимся рассмотрением простых кристаллических решеток, для которых смещение частиц в любой элементарной ячейке можно полностью задать векторным полем $\vec{u}(\vec{r})$, характеризующим смещение всей ячейки.

Прямой проверкой, используя соотношения (2.8) и (2.10), можно показать, что потенциальная энергия кристаллической решетки в гармоническом приближении (2.7) имеет вид

$$W = -\frac{1}{4}\sum_{ll'\alpha\beta}(u_{l\alpha}-u_{l'\alpha})\,W^{(2)}_{\alpha\beta}(\vec{R}^{\circ}_{l-l'})(u_{l'\beta}-u_{l\beta}). \qquad (3.1)$$

В теории упругости рассматриваются плавно изменяющиеся смещения $\vec{u}_l$, т.е. $\vec{u}_l$ мало меняются при переходе от одной элементарной ячейки к другой. Введем гладкую непрерывную векторную функцию $\vec{u}(\vec{r})$, такую что $\vec{u}(\vec{r})\big|_{\vec{r}=\vec{R}^{\circ}_l} = \vec{u}_l$. Разложение функции $\vec{u}(\vec{r})$ в ряд Тейлора возле точки $\vec{r}=\vec{R}^{\circ}_l$ приводит к соотношению

$$u_{l'\alpha}-u_{l\alpha} = \sum_{\gamma}\left(R^{\circ}_{l'\gamma}-R^{\circ}_{l\gamma}\right)\frac{\partial u_\alpha(\vec{r})}{\partial x_\gamma}\Big|_{\vec{r}=\vec{R}^{\circ}_l} + \ldots . \qquad (3.2)$$

Поскольку $\vec{u}(\vec{r})$ – плавная функция и $W^{(2)}_{\alpha\beta}(\vec{R}^{\circ}_{l-l'})$ быстро убывают при увеличении $|\vec{R}^{\circ}_{l-l'}|$, то, как следует из (3.1), следующими членами разложения в (3.2) можно пренебречь.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Подставляя (3.2) в (3.I), получим

$$W = -\frac{1}{4}\sum_{ee'\alpha\beta\gamma\delta}\left(R^{\circ}_{e'\gamma}-R^{\circ}_{e\gamma}\right)\frac{\partial U_\alpha(\vec{R}^{\circ}_e)}{\partial x_\gamma}W^{(2)}_{\alpha\beta}(\vec{R}^{\circ}_{e-e'})\frac{\partial U_\beta(\vec{R}^{\circ}_e)}{\partial x_\delta}\times$$

$$\times\left(R^{\circ}_{e'\delta}-R_{e\delta}\right)=-\frac{1}{4}\sum_{e\alpha\beta\gamma\delta}\frac{\partial U_\alpha(\vec{R}^{\circ}_e)}{\partial x_\gamma}\frac{\partial U_\beta(\vec{R}^{\circ}_e)}{\partial x_\delta}\times \tag{3.3}$$

$$\times\sum_{e_1}R^{\circ}_{e_1\gamma}W^{(2)}_{\alpha\beta}(\vec{R}^{\circ}_{e_1})R^{\circ}_{e_1\delta}=$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{e\alpha\beta\gamma\delta}\frac{\partial U_\alpha(\vec{R}^{\circ}_e)}{\partial x_\gamma}\frac{\partial U_\beta(\vec{R}^{\circ}_e)}{\partial x_\delta}E_{\gamma\alpha\delta\beta},$$

где

$$E_{\gamma\alpha\delta\beta}=-\frac{1}{2}\sum_{e}R_{e\gamma}W_{\alpha\beta}(\vec{R}^{\circ}_e)R^{\circ}_{e\delta}. \tag{3.4}$$

Так как функция $\vec{W}(\vec{R})$ меняется плавно, то в (3.3) можно перейти от суммирования по e к интегрированию

$$W=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\int_{(v)}(d\vec{r})\frac{\partial U_\alpha(\vec{r})}{\partial x_\gamma}\frac{\partial U_\beta(\vec{r})}{\partial x_\delta}\bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta}, \tag{3.5}$$

где

$$\bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta}=\frac{1}{v_a}E_{\gamma\alpha\delta\beta}. \tag{3.6}$$

Выражение (3.5) является исходным для построения теории упругости.

3.2. ТЕНЗОР ДЕФОРМАЦИИ И ТЕНЗОР УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ

Как видно из соотношений (3.4) и (3.6), $\bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta}$ – тензор четвертого ранга, симметричный относительно перестановок $\alpha\leftrightarrow\beta$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

и $\gamma \sim \xi$. Следовательно, из 64 компонент этого тензора независимых не более 36. Число независимых компонент тензора $\hat{E}$ может быть уменьшено, если принять во внимание, что потенциальная энергия кристалла не должна меняться при его жестком повороте.

Рассмотрим поворот кристалла на малый угол $\delta\omega$ вокруг оси $\vec{n}$, проходящей через начало координат, которое выбрано на одном из узлов кристаллической решетки. При таком повороте каждый вектор получит приращение

$$\vec{u}(\vec{r}) = \delta\omega [\vec{n} \times \vec{r}]. \tag{3.7}$$

Используя свойства векторного произведения, можно показать, что симметричная комбинация

$$\varepsilon_{\alpha\gamma} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\alpha}\right) \tag{3.8}$$

равна нулю при любом жестком повороте. Поскольку потенциальная энергия кристалла не меняется при повороте, то W должно равняться нулю при любых $\delta\omega$ и $\vec{n}$, т.е. производные $\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\gamma}$ могут входить в выражение для потенциальной энергии только через их симметричные комбинации (3.8).

Следовательно, потенциальная энергия должна иметь вид

$$W = \int_{(V)} (d\vec{r}) \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha\gamma\beta\delta}\, \varepsilon_{\alpha\gamma}\, \varepsilon_{\beta\delta}. \tag{3.9}$$

$\varepsilon_{\alpha\gamma}$ – компоненты тензора, называемого тензором деформации. Из определения (3.8) ясно, что тензор деформации симметричный

$$\varepsilon_{\alpha\gamma} = \varepsilon_{\gamma\alpha}. \tag{3.10}$$

Рассмотрим геометрический смысл тензора деформации. Предположим, что имеются две бесконечно близкие точки, расстояние между которыми до деформации $dl = \left[\sum_i (dx_i)^2\right]^{1/2}$. После деформирования расстояние между этими точками изменится и будет равным $dl' = \left[\sum_i (dx_i')^2\right]^{1/2} = \left[\sum_i d(x_i + u_i)^2\right]^{1/2}$. Ясно, что

$$(dl')^2 - (dl)^2 = \sum_i \left[2\, du_i\, dx_i + (du_i)^2\right].$$

Подставляя $du_i = \sum_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k$ и считая деформацию малой, получим

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$(dl')^2 - (dl)^2 = 2\sum_{ik}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}dx_i\,dx_k = 2\sum_{ik}\varepsilon_{ik}\,dx_i\,dx_k.$$

Следовательно, тензор деформации определяет изменение квадрата расстояния между точками при деформировании. Деформация называется однородной, если компоненты тензора деформации не зависят от координат, что возможно, если u_i - линейные функции координат.

Рассмотрим изменение объема при малой деформации. Известно, что

$$dV' = \frac{\partial(x_1', x_2', x_3')}{\partial(x_1, x_2, x_3)}dV.$$

Входящие в якобиан производные имеют вид

$$\frac{\partial x_i'}{\partial x_k} = \frac{\partial(x_i + u_i)}{\partial x_k} = \delta_{ik} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k}.$$

С точностью до членов первого порядка малости получим

$$\frac{\partial(x_1', x_2', x_3')}{\partial(x_1, x_2, x_3)} = 1 + \sum_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 1 + \sum_i \varepsilon_{ii} = 1 + Sp\,\varepsilon.$$

Таким образом, $Sp\,\varepsilon$ определяет относительное изменение объема

$$dV' = (1 + Sp\,\varepsilon)dV, \quad \frac{dV' - dV}{dV} = Sp\,\varepsilon.$$

Вернемся к потенциальной энергии, представленной в виде (3.9). $c_{\alpha\gamma\beta\delta}$ в этом выражении - компоненты тензора, который называется тензором упругих постоянных. Из (3.9) и (3.10) видно, что

$$c_{\alpha\gamma\beta\delta} = c_{\gamma\alpha\beta\delta} = c_{\alpha\gamma\delta\beta} = c_{\beta\delta\alpha\gamma}, \qquad (3.11)$$

то есть в тензоре упругих постоянных можно делать перестановки $\alpha \leftrightarrow \gamma$, $\beta \leftrightarrow \delta$ и менять местами пары индексов $(\alpha\gamma)$ и $(\beta\delta)$. Можно подсчитать, что число независимых компонент тензора упругих постоянных равно 21.

Найдем связь между тензорами $c_{\alpha\gamma\beta\delta}$ и $\bar{E}_{\alpha\delta\beta}$. Преобразуем выражение для потенциальной энергии (3.5)

$$W = \frac{1}{2}\int_{(V)}(dV)\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\left[\frac{\partial}{\partial x_\gamma}\left(u_\alpha\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\delta}\right) - u_\alpha\frac{\partial^2 u_\beta}{\partial x_\gamma\,\partial x_\delta}\right]\bar{E}_{\alpha\delta\beta\gamma} = \qquad (3.12)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\delta} \Gamma \left[\int_{(S)} (dS)_\gamma \bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta} U_\alpha \frac{\partial U_\beta}{\partial x_\delta} - \int_{(V)} (d\bar{r}) \bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta} U_\alpha \frac{\partial^2 U_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} \right].$$

Если смещения U_α равны нулю на границах твердого тела или если граничные условия таковы, что выполняется условие (например, периодические граничные условия)

$$\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int_S (dS)_\gamma U_\alpha \frac{\partial U_\beta}{\partial x_\delta} \bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta} = 0, \qquad (3.13)$$

то потенциальная энергия имеет вид

$$W = -\frac{1}{2} \int_{(V)} (d\bar{r}) \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta} U_\alpha \frac{\partial^2 U_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} \qquad (3.14)$$

Аналогично можно показать, что

$$W = -\frac{1}{2} \int_{(V)} (d\bar{r}) \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} C_{\alpha\gamma\beta\delta} U_\alpha \frac{\partial^2 U_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} =$$

$$= -\frac{1}{4} \int_{(V)} (d\bar{r}) \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (C_{\alpha\gamma\beta\delta} + C_{\alpha\delta\beta\gamma}) U_\alpha \frac{\partial^2 U_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta}. \qquad (3.15)$$

(3.14) и (3.15) идентичны, если справедливо соотношение

$$\bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta} = \frac{1}{2} \left(C_{\alpha\gamma\beta\delta} + C_{\alpha\delta\beta\gamma} \right). \qquad (3.16)$$

Уравнение (3.16), как следует из (3.11), разрешимо относительно C, если

$$\bar{E}_{\alpha\gamma\beta\delta} = \bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta}. \qquad (3.17)$$

Условие (3.17) не следует из свойств параметров связи $W^{(2)}_{\alpha\beta}(\vec{R}^0_n, \vec{R}^0_{n'})$ (2.8) и (2.10). Для выполнения (3.17) необходимо выполнение следующего условия:

$$\sum_{ss'} W^{(2)}_{\alpha\beta} (\vec{R}^0_{ls}, \vec{R}^0_{l's'}) (R^0_{ls} - R^0_{l's'\gamma}) (R^0_{ls\delta} - R^0_{l's'\delta}) =$$

$$= \sum_{ss'} W^{(2)}_{\gamma\delta} (R^0_{ls}, R^0_{l's'}) (R^0_{ls} - R^0_{l's'\alpha}) (R^0_{ls} - R^0_{l's'\beta}). \qquad (3.18)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Как установлено Х.Кунем, (3.I8) является условием отсутствия напряжений в равновесном состоянии решетки. Для доказательства (3.I7) для простых кристаллических решеток надо использовать (3.I8), (3.4) и (3.5).

Решим (3.I6). Переставим в (3.I6) индексы α и γ

$$\frac{1}{2}\left(C_{\gamma\alpha\beta\delta} + C_{\gamma\delta\beta\alpha}\right) = \bar{E}_{\alpha\gamma\delta\beta}. \qquad (3.I9)$$

В (3.I9) поменяем местами индексы α и β

$$\frac{1}{2}\left(C_{\gamma\beta\alpha\delta} + C_{\gamma\delta\alpha\beta}\right) = \bar{E}_{\beta\gamma\delta\alpha}. \qquad (3.20)$$

Складывая (3.I6) и (3.I9), вычитая (3.20) и учитывая (3.II), получим

$$C_{\alpha\gamma\beta\delta} = \bar{E}_{\gamma\alpha\delta\beta} + \bar{E}_{\alpha\gamma\delta\beta} - \bar{E}_{\beta\gamma\delta\alpha}. \qquad (3.2I)$$

Формулы (2.I6) и (3.2I) дают взаимно-однозначное соответствие между тензорами $\bar{E}$ и C.

Таким образом, зная параметры связи $W^{(e)}_{\alpha\beta}(\vec{R}^0_e, \vec{R}^0_{e'})$, можно построить тензор упругих постоянных $C_{\alpha\gamma\beta\delta}$.

Как уже отмечалось, в общем случае число независимых компонент тензора упругих постоянных равно 2I. Покажем, что точечная симметрия кристаллов приводит к уменьшению этого числа. При преобразовании координат

$$x'_\alpha = \sum_\beta D_{\alpha\beta} x_\beta. \qquad (3.22)$$

$C_{\alpha\gamma\beta\delta}$ преобразуются как компоненты тензора

$$C'_{\alpha\gamma\beta\delta} = \sum_{\alpha'\gamma'\beta'\delta'} D_{\alpha\alpha'} D_{\gamma\gamma'} D_{\beta\beta'} D_{\delta\delta'} C_{\alpha'\gamma'\beta'\delta'}. \qquad (3.23)$$

Если преобразования (3.22) входят в точечную группу симметрии кристалла, то $C' = C$. В этом случае условия (3.23) связывают некоторые из компонент тензора упругих постоянных и тем самым приводят к уменьшению числа их независимых компонент.

Рассмотрим, например, простую кубическую решетку. Направим оси координат по осям симметрии четвертого порядка (ребра куба). В точечной группе симметрии для простой кубической решетки есть отражения от координатных плоскостей, меняющие знак у x_α: $x'_\alpha = -x_\alpha$. Используя в (3.23) преобразования такого типа,

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

получим, что все $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$, в которых любой из индексов входит нечетное число раз, равны нулю. Кроме того, все индексы в $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ равноправны, поскольку в полной кубической группе есть преобразования, переводящие x в y, x в z и y в z. Таким образом, остается всего три независимых компоненты тензора упругих постоянных C_{1111}, C_{1212}, C_{1122}, а все остальные либо равны им, либо равны нулю.

3.3. УРАВНЕНИЕ ГРИНА-КРИСТОФЕЛЯ

Получим уравнение для функции $\vec{U}(\vec{r})$. Функция Лагранжа L имеет вид

$$L = T - W = \int_V (d\vec{r}) \left[\frac{\rho}{2} \dot{U}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{\partial U_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial U_\gamma}{\partial x_\delta} \right],$$

где $\rho = MV^{-1}$ - плотность массы в решетке. При получении L из (3.9) использовано свойство симметрии (3.10) тензора деформации. Подставляя L в уравнение Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{U}_i} - \frac{\partial L}{\partial U_i} = 0$$

и учитывая, что

$$\frac{\partial}{\partial \dot{U}_i} \frac{\partial U_\alpha}{\partial x_\beta} = \delta_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial x_\beta},$$

получим уравнение Грина-Кристофеля

$$\rho \ddot{U}_\alpha(\vec{r}, t) = \sum_{\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{\partial^2 U_\gamma(\vec{r}, t)}{\partial x_\beta \partial x_\delta}. \qquad (3.24)$$

Частные решения (3.24) будем искать в виде

$$U_\alpha(\vec{r}, t) = e_\alpha e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}, \qquad (3.25)$$

где $\vec{e}$ и $\vec{k}$ - некоторые постоянные векторы, нумерующие частные решения.

(3.25) имеет вид монохроматической волны, распространяющейся

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

в направлении волнового вектора $\vec{K}$ с частотой ω, длиной волны $2\pi|\vec{K}|^{-1}$, скоростью распространения $\omega|\vec{K}|^{-1}$. $\vec{e}$ называется вектором поляризации. Упругие волны (3.25) описывают распространение звука в данной среде.

Подставляя (3.25) в (3.24), получим систему уравнений для определения компонент вектора поляризации e_α

$$\sum_\beta \left(\rho\omega^2\delta_{\alpha\beta} - \sum_{\gamma\delta} C_{\alpha\gamma\beta\delta} K_\gamma K_\delta\right) e_\beta = 0, \qquad (3.25)$$

из условия разрешимости которого

$$\det\left|\rho\omega^2\delta_{\alpha\beta} - \sum_{\gamma\delta} C_{\alpha\gamma\beta\delta} K_\gamma K_\delta\right| = 0 \qquad (3.27)$$

определяется зависимость ω от $\vec{K}$.

Рассмотрим некоторые свойства решений уравнений (3.26) и (3.27). Из (3.26) видно, что $\rho\omega^2$ являются собственными значениями матрицы $X_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\delta} C_{\alpha\gamma\beta\delta} K_\gamma K_\delta$, а $\vec{e}$ – ее собственными векторами. Как следует из (3.II), $X_{\alpha\beta}$ – симметричная матрица. Кроме того, из условий устойчивости ($W>0$ при любых смещениях из положения равновесия) ясно, что $X_{\alpha\beta}$ – положительно определенная матрица. Следовательно, каждому значению волнового вектора $\vec{K}$ соответствует три вещественных частоты $\omega_j(\vec{K})$ и три взаимно перпендикулярных вектора поляризации $\vec{e}_j(\vec{K})$, $(j=1,2,3)$. При $\vec{K}=0$ все $\omega_j(0)=0$, т.е. $\vec{K}=0$ – точка ветвления третьего порядка.

Упругое движение общего вида описывается линейной комбинацией решений (3.25) с различными $\vec{K}$.

Для примера рассмотрим решение уравнения Грина-Кристофеля (3.24) для простой кубической решетки и некоторых значений волнового вектора:

а) $K_x = K$, $K_y = K_z = 0$, $|\vec{K}| = K$.

Система (3.26) в этом случае имеет вид

$$\rho\omega^2 l_1 = K^2 C_{1111} l_1,$$
$$\rho\omega^2 l_2 = K^2 C_{2121} l_2,$$
$$\rho\omega^2 l_3 = K^2 C_{3131} l_3.$$

Принимая во внимание, что $C_{2121} = C_{3131}$, получим следующие

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

решения: $\omega_l = k\rho^{-1/2}(C_{1111})^{1/2}$, $\vec{e}_l = (e_1, 0, 0)$; e_1 - произвольное число. Поскольку $\vec{e}_l \parallel \vec{k}$, то это продольная волна (направление смещений совпадает с направлением распространения). Скорость продольных звуковых волн $v_l = \rho^{-1/2}(C_{1111})^{1/2}$

$(\omega_t)_{1,2} = k\rho^{-1/2}(C_{2121})^{1/2}$, $\vec{e}_{t1} = (0, e_2, 0)$, $\vec{e}_{t2} = (0, 0, e_3)$; e_2 и e_3 - произвольные числа. $\vec{e}_{t1} \perp \vec{k}$ и $\vec{e}_{t2} \perp \vec{k}$. Получаем две взаимно перпендикулярных поперечных волны (колебания в такой волне перпендикулярны ее направлению) с одинаковыми частотами ω_t и одинаковыми скоростями звука $v_t = \rho^{-1/2}(C_{2121})^{1/2} \neq v_l$.

б) $k_1 = k_2 = k$, $k_3 = 0$, $|\vec{k}| = \sqrt{2}k$.

(3.26) для таких $\vec{k}$ имеет вид

$$\rho\omega^2 e_1 = k^2[(C_{1111} + C_{1212})e_1 + (C_{1122} + C_{1212})e_2].$$

$$\rho\omega^2 e_2 = k^2[(C_{2121} + C_{2211})e_1 + (C_{2121} + C_{2222})e_2],$$

$$\rho\omega^2 e_3 = k^2(C_{3131} + C_{3232})e_3.$$

Для простой кубической решетки $C_{1111} = C_{2222}$ и $C_{1212} = C_{2121} = C_{3131} = C_{3232}$. В результате решения находим продольную звуковую волну с частотой $\omega_l = k\rho^{-1/2}(C_{1111} + 2C_{1212} + C_{1122})^{1/2}$, скоростью звука $v_l = (2\rho)^{-1/2}(C_{1111} + 2C_{1212} + C_{1122})^{1/2}$ вектором поляризации $\vec{e}_l = (e_1, e_1, 0)$ и две перпендикулярных поперечных волны с различными частотами и скоростями распространения: $\omega_{t1} = k\rho^{-1/2}(C_{1111} - C_{1122})^{1/2}$, $v_{t1} = (2\rho)^{-1/2}(C_{1111} - C_{1122})^{1/2}$, $\vec{e}_{t1} = (e_1, -e_1, 0)$; $\omega_{t2} = k\rho^{-1/2}(2C_{1212})^{1/2}$, $v_{t2} = \rho^{-1/2}(C_{1212})^{1/2}$, $\vec{e}_{t2} = (0, 0, e_3)$, где e_1 и e_3 — произвольные числа.

Следует отметить, что в отличие от случая изотропной среды, рассмотренного в п.2.3, где всегда можно выделить продольные и поперечные колебания, в кристалле, в общем случае, три взаимно ортогональных вектора поляризации $\vec{e}$ ориентированы произвольно относительно направления распространения волны. Только в определенных симметричных направлениях $\vec{k}$, как, например, в вышерассмотренных случаях, можно выделить чисто продольные и чисто поперечные волны.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

3.4. ТЕНЗОР НАПРЯЖЕНИЙ. УСЛОВИЯ РАВНОВЕСИЯ. ЗАКОН ГУКА

Обычно в теории упругости вводят еще один тензор, называемый тензором напряжений. Вернемся к уравнению Грина-Кристоффеля (3.24). Очевидно, что величина в правой части уравнения-это сила, действующая на единицу объема

$$F_\alpha = \sum_{\beta\gamma\delta} C_{\alpha\gamma\beta\delta} \frac{\partial^2 U_\beta}{\partial x_\delta \partial x_\gamma} = \sum_\gamma \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_{\beta\delta} C_{\alpha\gamma\beta\delta} \varepsilon_{\beta\delta}. \quad (3.28)$$

Величины

$$\sigma_{\alpha\gamma} = \sum_{\beta\delta} C_{\alpha\gamma\beta\delta} \varepsilon_{\beta\delta} \quad (3.29)$$

образуют тензор, называемый тензором напряжений. Из (3.11) ясно, что тензор напряжений – симметричный тензор

$$\sigma_{\alpha\gamma} = \sigma_{\gamma\alpha}. \quad (3.30)$$

Согласно (3.28) и (3.29) сила, действующая на единицу объема, имеет вид

$$F_\alpha = \sum_\gamma \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sigma_{\alpha\gamma}. \quad (3.31)$$

Компоненты тензора напряжений имеют следующий наглядный смысл. Силу, действующую на некоторый объем V, ограниченный поверхностью S, можно представить в виде

$$f_\alpha = \int_{(V)} F_\alpha \, dV = \sum_\gamma \int \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sigma_{\alpha\gamma} \, dV = \sum_\gamma \int_{(S)} \sigma_{\alpha\gamma} n_\gamma \, dS \quad (3.32)$$

где n_γ – компоненты единичного вектора $\vec{n}$, направленного по внешней нормали к поверхности.

Выберем малый объем в виде куба, три поверхности которого совпадают с координатными плоскостями, и рассмотрим силы, действующие на эти поверхности. Тогда n_γ совпадают с осями x_γ и $\sigma_{\alpha\gamma}$ – α -компонента силы, действующей на единицу поверхности, перпендикулярной оси x_γ. $\sigma_{\alpha\alpha}$ – нормальные компоненты напряжения; $\sigma_{\alpha\gamma}$ $(\alpha \neq \gamma)$ – тангенциальные компоненты, стремящиеся сдвинуть параллельные элементы поверхности относительно друг

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

друга.

В равновесии силы внутренних напряжений должны взаимно компенсироваться в каждом элементе объема, т.е.

$$\sum_{\beta} \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = 0. \qquad (3.33)$$

Внешние силы, приложенные непосредственно к поверхности тела и являющиеся источником деформации, определяют граничные условия для уравнения равновесия (3.33). Пусть $\bar{P}$ - внешняя сила, действующая на единицу площади поверхности тела, тогда на элемент поверхности dS действует сила $\bar{P}dS$. В равновесии эта сила должна компенсироваться силой $-\sum_{\beta}\sigma_{\alpha\beta}n_\beta dS$, действующей на этот же элемент поверхности со стороны тела. Таким образом,

$$P_\alpha = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} n_\beta. \qquad (3.34)$$

(3.34) - граничное условие, которое должно выполняться на всей поверхности тела, находящегося в равновесии.

Найдем тензор напряжений в случае равномерного всестороннего сжатия тела. При такой деформации на каждую единицу поверхности действует одинаковая по величине сила (давление), направленная по нормали к поверхности. В этом случае в соответствии с (3.34) и (3.33)

$$\sigma_{\alpha\beta} = -P\delta_{\alpha\beta}.$$

Знак "-" из-за того, что сила действует по нормали внутрь поверхности. При однородном растяжении (сжатии) стержня, например, вдоль оси x_1,

$$\sigma_{\alpha\beta} = P\delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha 1}, \qquad (3.35)$$

при сжатии $P<0$, при растяжении $P>0$.

Соотношение (3.29), связывающее тензоры напряжений и деформации, называется обобщенным законом Гука. Часто его записывают в виде обратного соотношения

$$\varepsilon_{\beta\delta} = \sum_{\alpha\beta} S_{\beta\delta\alpha\beta}\sigma_{\alpha\beta}, \qquad (3.36)$$

где $\sum_{\alpha\beta} S_{\beta\delta\alpha\beta} C_{\alpha\beta\beta_1\delta_1} = \delta_{\beta\beta_1}\delta_{\delta\delta_1}$.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Ясно, что S имеет такие же свойства симметрии, как и C. $S_{\beta\delta\alpha\gamma}$ – модули упругости.

Рассмотрим, к примеру, однородное растяжение простой кубической решетки. Из (3.35) и (3.36) получим

$$\varepsilon_{11} = PS_{1111} = PE^{-1},$$

$$\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = PS_{2211} = -P\sigma E^{-1},$$

$$\varepsilon_{\beta\delta} = 0 \quad (\beta \neq \delta),$$

где $E = (S_{1111})^{-1}$ – модуль Юнга;

$\sigma = -S_{2211}E$ – коэффициент Пуассона $(S_{2211} < 0)$.

По смыслу тензора деформации ε_{11} определяет относительное удлинение стержня, ε_{22} и ε_{33} – относительное сжатие стержня в поперечном направлении. Мы получили хорошо известный феноменологический закон Гука.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

4. ЭЛЕКТРОНЫ В ИДЕАЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ

4.1. ОДНОЭЛЕКТРОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ. ЗОННОЕ УРАВНЕНИЕ

Во второй главе в результате адиабатического приближения удалось разделить движение электронов и ядер. Тем не менее точное решение уравнения Шредингера для электронов (2.2) невозможно из-за большого (порядка 10^{24}) числа переменных, и необходимы дальнейшие приближения.

Общепринятым в теории твердого тела является приближение самосогласованного поля, или одноэлектронное приближение, суть которого в том, что электроны считаются статистически независимыми, т.е. каждому электрону можно приписать индивидуальную волновую функцию. Одноэлектронное приближение основано на замене в гамильтониане $H_э$ потенциальной энергии взаимодействия электронов некоторым оператором $U_{эфф}$, который должен наилучшим образом описывать действие всех остальных электронов на данный. Гамильтониан электронной системы в таком приближении имеет вид

$$H_э = \sum_{i=1}^{N_э} H(\vec{r}_i), \qquad (4.1)$$

где

$$H(\vec{r}_i) = T(\vec{r}_i) + V_{эя}(\vec{r}_i) + U_{эфф}(\vec{r}_i). \qquad (4.2)$$

В соответствии с принципом Паули электронная волновая функция может быть представлена в виде

$$\Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{N_э}) = N_э^{-1/2} \det |\psi_j(\vec{r}_i)|, \qquad (4.3)$$

где одноэлектронные волновые функции $\psi_j(\vec{r}_i)$ являются собственными функциями оператора (4.2).

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$H(\vec{r}_i)\Psi_j(\vec{r}_i) = E_j\Psi_j(\vec{r}_i). \qquad (4.4)$$

Вычисление $U_{эфф}(\vec{r})$ представляет собой очень сложную самосогласованную задачу, для решения которой необходимы дальнейшие упрощения. $U_{эфф}(\vec{r})$ можно представить в виде

$$U_{эфф}(\vec{r}) = Q(\vec{r}) + A(\vec{r}), \qquad (4.5)$$

где $Q(\vec{r})$ учитывает кулоновское взаимодействие электронов, $A(\vec{r})$ - обменное взаимодействие. В общем случае операторы $Q(\vec{r})$ и $A(\vec{r})$ являются нелокальными операторами, зависящими от $\Psi_j(\vec{r})$ и E_j. При расчете электронных состояний оператор $V_{яя} + U_{эфф}$ обычно заменяется оператором умножения $V(\vec{r})$, называемым кристаллическим потенциалом. В таком приближении, которое называется зонным приближением, одноэлектронное уравнение Шредингера (4.4) имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi_j(\vec{r}) = E_j\Psi_j(\vec{r}), \qquad (4.6)$$

(4.6) называется зонным уравнением.

Здесь и в дальнейшем мы пренебрегаем взаимодействием собственного магнитного поля электрона с магнитным моментом, создаваемым в результате его движения (так называемым спин-орбитальным взаимодействием). В этом случае координатные волновые функции $\Psi_j(\vec{r})$ оказываются одинаковыми для обоих значений проекций спина электрона и, следовательно, все уровни энергии E_j двукратно вырождены по спиновым квантовым числам.

4.2. ТЕОРЕМА БЛОХА

Из физических соображений очевидно, что для $\vec{r}$ внутри кристалла кристаллический потенциал является периодической функцией координат

$$V(\vec{r} + \vec{R}_\ell) = V(\vec{r}). \qquad (4.7)$$

Это равенство справедливо для всех $\vec{r}$ и $\vec{R}_\ell$ в бесконечном кристалле. Для кристалла конечных размеров (4.7) не выполняется для больших $\vec{R}_\ell$. Кроме того, при решении уравнения Шредингера (4.6)

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

необходимо задавать граничные условия, сформулировать которые достаточно сложно, поскольку многие физические явления, протекающие на поверхности, существенно отличаются от явлений в глубине кристалла. Однако для описания процессов в объеме кристалла макроскопических размеров роль поверхности в большинстве случаев несущественна, т.к. отношение числа поверхностных атомов к числу атомов в объеме мало (порядка 10^{-8}). Можно также показать, что волновые **функции** $\Psi_j(\vec{r})$ для удаленных от поверхности $\vec{r}$ практически не зависят от вида граничных условий на поверхности и мало отличаются от волновых функций для бесконечного кристалла. Следовательно, для изучения объемных свойств кристалл можно считать бесконечным.

Рассмотрим следствия, к которым приводит наличие трансляционной симметрии кристаллического потенциала (4.7). Введем оператор трансляции на вектор решетки $\vec{R}_\ell$

$$T(\vec{R}_\ell) f(\vec{r}) = f(\vec{r} - \vec{R}_\ell). \qquad (4.8)$$

Легко показать, что $\langle T(R_\ell)f, T(R_\ell)f\rangle = \langle f|f\rangle$, т.е. $T(\vec{R}_\ell)$ - унитарный оператор. Кроме того, используя (4.7), можно доказать, что **коммутатор**

$$[T(\vec{R}_\ell), H] = 0, \qquad (4.9)$$

где $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$ - одноэлектронный гамильтониан. Очевидно, что введенная во второй главе матрица $\hat{T}^{(\ell)}$ - это представление оператора $T(\vec{R}_\ell)$ в $3pN$ -мерном пространстве смещений. Действуя так же, как и в главе 2, можно показать, что

$$\Psi(\vec{r} + \vec{R}_\ell) = e^{i\vec{k}\vec{R}_\ell}\Psi(\vec{r}). \qquad (4.10)$$

(4.10) - это математическая запись теоремы Блоха. **Таким образом, волновые функции, удовлетворяющие зонному уравнению (4.6), можно нумеровать с помощью вектора $\vec{k}$, который имеет смысл волнового вектора (см. вторую главу).**

Функции, удовлетворяющие соотношению (4.10), называются блоховскими. Функцию Блоха можно представить в виде модулированной плоской волны

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}\, U(\vec{r}), \qquad (4.11)$$

где $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}_\ell)$ – периодическая по решетке функция.

Как видно из (4.10), волновой вектор $\vec{k}$ нумерует собственные функции, следовательно, и собственные значения уравнения (4.6). Из (4.10) также ясно, что эквивалентным $\vec{k}$ отвечает одна и та же собственная функция, т.е., как и во второй главе, можно ограничить область изменения вектора $\vec{k}$ зоной Бриллюэна. Рассмотрим физический смысл вектора $\vec{k}$. Как известно из механики, все законы сохранения связаны с некоторой симметрией пространства или времени. В частности, закон сохранения импульса для замкнутой системы связан с однородностью пространства. В нашем случае имеется трансляционная симметрия, с которой и связано сохранение $\vec{k}$, т.е. $\vec{k}$ является квантовым числом. Величина $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ называется квазиимпульсом. Квазиимпульс электрона совпадает с импульсом только для свободных ($V(\vec{r}) = const$) электронов.

4.3. ОБЩИЕ СВОЙСТВА ЗОННЫХ ЭНЕРГИЙ И ЗОННЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ

Подставив (4.11) в зонное уравнение (4.6), получим уравнение для периодической функции $U_{\vec{k}}(\vec{r})$

$$H(\vec{k})U_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{i\hbar^2}{m}(\vec{k},\nabla) + \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2 + V(\vec{r})\right]U_{\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k})U_{\vec{k}}(\vec{r}). \qquad (4.12)$$

Это уравнение можно рассматривать как уравнение на собственные значения $E(\vec{k})$ и собственные функции $U_{\vec{k}}(\vec{r})$ оператора $H(\vec{k})$ при фиксированном $\vec{k}$. Поскольку $U_{\vec{k}}(\vec{r})$ – периодическая функция, то достаточно решить (4.12) в одной элементарной ячейке. В результате решения получим $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$ и $E_n(\vec{k})$, где n, называемый зонным индексом, нумерует решения (4.12). Обычно зонный индекс n выбирают по мере возрастания энергии ($E_{n_1}(\vec{k}) > E_{n_2}(\vec{k})$, если $n_1 > n_2$ для данного $\vec{k}$).

Таким образом, зонные волновые функции и зонные энергии зависят от двух индексов $\vec{k}$ и n: $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ и $E_n(\vec{k})$.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Зависимость $E_n(\vec{k})$ для данного n называется энергетической зоной. Совокупность $E_n(\vec{k})$ - энергетический или зонный спектр кристалла. Расчеты зонного спектра показывают, что для некоторых интервалов энергии не существует собственных значений оператора $H(\vec{k})$ при любых вещественных $\vec{k}$. Следовательно, эти энергии являются запрещенными в энергетическом спектре. Такие области энергии называются запрещенными зонами. Каждая энергетическая зона занимает определенную полосу энергии: $(E_n)_{min} \leq E_n(\vec{k}) \leq (E_n)_{max}$ для данного номера зоны. Значения $\vec{k}_e$, в которых достигаются экстремальные значения энергии, называются экстремальными точками данной зоны. Соседние энергетические зоны могут либо перекрываться ($(E_{n+1})_{min} < (E_n)_{max}$), либо касаться ($(E_{n+1})_{min} = (E_n)_{max}$), либо быть разделенными запрещенной зоной ($(E_{n+1})_{min} > (E_n)_{max}$).

Рассмотрим некоторые свойства $E_n(\vec{k})$ и $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$.

Поскольку $\vec{k}$ и $\vec{k} + \vec{k}_e$ описывают одно и то же состояние, то зонные энергии и волновые функции должны быть периодическими в обратном пространстве

$$E_n(\vec{k}) = E_{n'}(\vec{k} + \vec{k}_e),$$
$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \Psi_{n'\vec{k}+\vec{k}_e}(\vec{r}). \qquad (4.13)$$

Зонные индексы n и n' в (4.13) можно выбрать одинаковыми, задав соответствующую нумерацию решений (4.12). Возьмем комплексное сопряжение (4.12) и заменим $\vec{k}$ на $-\vec{k}$

$$H^*(-\vec{k})U^*_{-\vec{k}}(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{i\hbar^2}{m}(\vec{k},\nabla) + \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2 + V(\vec{r})\right]U^*_{-\vec{k}}(\vec{r}) = \qquad (4.14)$$
$$= E(-\vec{k})U^*_{-\vec{k}}(\vec{r}).$$

Сравнивая (4.12) и (4.14), можно заключить, что

$$E_n(\vec{k}) = E_{n'}(-\vec{k}),$$
$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = U^*_{n'-\vec{k}}(\vec{r}), \qquad (4.15)$$
$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \Psi^*_{n'-\vec{k}}(\vec{r}).$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Свойства (4.15) отражают симметрию гамильтониана относительно инверсии времени. Можно показать, что для независящего от спина кристаллического потенциала всегда можно выбрать $n = n'$.

Наличие точечной симметрии кристалла также приводит к некоторым соотношениям для волновых функций и зонных энергий. Введем оператор $T(g)$, соответствующий элементу g из точечной группы кристалла

$$T(g) f(\vec{r}) = f(g^{-1}\vec{r}). \tag{4.16}$$

Запишем уравнение (4.12) для переменной

$$H(\vec{k}, \hat{g}^{-1}\vec{r}) U_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{g^{-1}\vec{r}} - \frac{i\hbar^2}{m}(\vec{k}, \nabla_{g^{-1}\vec{r}}) + \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2 + \right.$$

$$\left. + V(g^{-1}\vec{r})\right] U_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\vec{r}} - \frac{i\hbar^2}{m}(g\vec{k}, \nabla_{\vec{r}}) + \frac{\hbar^2}{2m}(g\vec{k})^2 + \right.$$

$$\left. + V(g^{-1}\vec{r})\right] U_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r}) = H(g\vec{k}, \vec{r}) U_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r}) =$$

$$= E(\vec{k}) U_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r}).$$

Следовательно,

$$T(g) U_{\vec{k}}(\vec{r}) = U_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r}) = U_{g\vec{k}}(\vec{r}), \tag{4.17}$$

$$\Psi_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r}) = \Psi_{g\vec{k}}(\vec{r}), \qquad E(g\vec{k}) = E(\vec{k}). \tag{4.18}$$

Если $g\vec{k} = \vec{k} + \vec{K}_\ell$, т.е. если g – преобразование из группы волнового вектора $\vec{k}$, то из (4.17) следует

$$T(g) U_{r\alpha\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\alpha'} \mathcal{D}^r(g)_{\alpha\alpha'} U_{r\alpha'\vec{k}}(\vec{r}), \tag{4.19}$$

где $\mathcal{D}^r(g)_{\alpha\alpha'}$ – матрица r-го неприводимого представления группы волнового вектора $\vec{k}$. Следовательно, для данных $\vec{k}$ зонные волновые функции являются базисными функциями неприводимых представлений группы волнового вектора $\vec{k}$, и зонный индекс n для таких $\vec{k}$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

должен указывать соответствующее неприводимое представление и номер строки в нем.

Оператор $H(\vec{k})$ является непрерывной функцией параметра $\vec{k}$, поэтому в пределах данной энергетической зоны $E_n(\vec{k})$ и $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ непрерывные функции от $\vec{k}$, т.е.

$$\lim_{x \to 0} E_n(\vec{k}+x) = E_n(\vec{k}),$$
$$\lim_{x \to 0} \Psi_{n\vec{k}+x}(\vec{r}) = \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \qquad (4.20)$$

При изучении различных физических явлений в кристаллах представляет интерес определить точки нулевого наклона, т.е. значения $\vec{k}$, для которых

$$\nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) = 0. \qquad (4.21)$$

Ясно, что (4.21) выполняется в экстремальных точках энергетической зоны. Кроме того, из соотношений (4.13) и (4.15) следует, что точками нулевого наклона всегда являются $\vec{k}=0$ и $\vec{k} = \frac{1}{2}\vec{K}_\ell$.

Рассмотрим вопрос о нормировке волновых функций. В соответствии с правилами нормировки волновых функций непрерывного спектра

$$\int_\infty \Psi^*_{n'\vec{k}'}(\vec{r})\, \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})(d\vec{r}) = \delta(\vec{k}-\vec{k}')\,\delta_{nn'}. \qquad (4.22)$$

Для решения (4.12) надо иметь условия нормировки для $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$. Разложим $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$ в ряд Фурье

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_\ell U_{n\vec{k}\ell}\, e^{i\vec{K}_\ell \vec{r}}. \qquad (4.23)$$

Подставляя (4.23) в (4.22), учитывая, что $\vec{k}$ и $\vec{k}'$ лежат в зоне Бриллюэна и используя (1.19), получим

$$\int_\infty \Psi^*_{n'\vec{k}'}(\vec{r})\, \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})(d\vec{r}) = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}') \sum_\ell U_{n\vec{k}\ell}\, U^*_{n'\vec{k}\ell}. \qquad (4.24)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

з (4.23) и (I.I8) следует

$$\int_{(v_a)} U^*_{n'k}(\vec{r})\,U_{nk}(\vec{r})\,(d\vec{r}) = v_a \sum_{\ell} U_{nk\ell}\,U^*_{n'k\ell}. \qquad (4.25)$$

спользуем (4.22),(4.24) и (4.25) и получим условие нормировки для $U_{nk}(\vec{r})$

$$\int_{(v_a)} U^*_{n'k}(\vec{r})\,U_{nk}(\vec{r})\,(d\vec{r}) = (2\pi)^{-3} v_a\,\delta_{nn'}. \qquad (4.26)$$

4.4. ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА

При рассмотрении многих явлений представляет интерес поведение нкции $E_n(\vec{k})$ вблизи экстремальных точек $\vec{k}_0$.

Разложение в ряд Тейлора вблизи $\vec{k}_0$ имеет вид

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \frac{1}{2}\hbar^2 \sum_{\alpha\beta} m^{*-1}_{\alpha\beta}\,(k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}), \qquad (4.27)$$

е

$$m^{*-1}_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\,\frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial k_\alpha\,\partial k_\beta}\bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \qquad (4.28)$$

омпоненты тензора обратной эффективной массы.

Разложение (4.27) справедливо, если функция $E_n(\vec{k})$ аналитиче- в точке $\vec{k}_0$, т.е. если в $\vec{k}_0$ нет касания различных энер- ических зон.

Компоненты $m^{*-1}_{\alpha\beta}$ в главных осях

$$m^{*-1}_{\alpha} = m^{*-1}_{\alpha\alpha} = \frac{1}{\hbar^2}\,\frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial k_\alpha^2}\bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_0}, \qquad (4.29)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

m_α^* - эффективная масса. Если все три компоненты m_α^* равны, тогда вводят скалярную эффективную массу $m^* = m_\alpha^*$. Из определения (4.28) ясно, что $m_\alpha^* > 0$ для $\vec{k}_0$, в которых достигается $\min E_n(\vec{k})$, и $m_\alpha^* < 0$, если $E_n(\vec{k}_0)$ - максимальное значение энергии в данной зоне.

Выражение (4.28) мало пригодно для вычислений эффективной массы, поскольку численное дифференцирование может привести к большим ошибкам. Получим другую формулу для эффективной массы, не содержащую этого недостатка.

Из (4.I2) следует соотношение

$$H(\vec{k}) = H(\vec{k}_0) + W(\vec{k}, \vec{k}_0), \qquad (4.30)$$

где W - имеет вид

$$W(\vec{k}, \vec{k}_0) = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}^2 - \vec{k}_0^2) - \frac{i\hbar^2}{m}(\vec{k} - \vec{k}_0)\nabla. \qquad (4.3I)$$

Предположим, что решение (4.I2) при $\vec{k} = \vec{k}_0$ известно. Для решения (4.I2) при других значениях $\vec{k}$ необходимо найти матричные элементы $W_{n'n}$

$$W_{n'n} = \int_{(v_a)} U^+_{n'\vec{k}_0}(\vec{r})\, W(\vec{k}, \vec{k}_0)\, U_{n\vec{k}_0}(\vec{r})\,(d\vec{r}). \qquad (4.32)$$

Простые вычисления показывают, что

$$W_{n'n} = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m}\sum_\gamma (k_\gamma - k_{0\gamma})\, P_{n'n\gamma}, \qquad (4.33)$$

где матричные элементы оператора импульса $P_{n'n\gamma}$ имеют вид

$$P_{n'n\gamma} = \frac{(2\pi)^3}{v_a}\int_{(v_a)} \psi^*_{n'\vec{k}_0}(\vec{r})\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\gamma}\right)\psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r})\,(d\vec{r}). \qquad (4.34)$$

При решении (4.I2) для $\vec{k}$, близких к $\vec{k}_0$, можно использовать теорию возмущений. Предположим, что энергия $E_n(\vec{k}_0)$ невырождена. Тогда, применяя стандартные формулы теории возмущений с точностью до членов второго порядка по $\vec{k} - \vec{k}_0$, получим

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$E_n(\vec{K}) = E_n(\vec{K}_0) + \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{K}-\vec{K}_0)^2 + \frac{\hbar}{m}\sum_\gamma (K_\gamma - K_{0\gamma}) P_{nn\gamma} +$$

$$+ \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{n'\neq n} \frac{\sum_{\beta\gamma}(K_\gamma - K_{0\gamma})(K_\beta - K_{0\beta}) P_{nn'\gamma} P_{n'n\beta}}{E_n(\vec{K}_0) - E_{n'}(\vec{K}_0)}. \qquad (4.35)$$

Продифференцируем (4.35)

$$\frac{\partial E_n(\vec{K})}{\partial K_\alpha} = \frac{\hbar^2}{m}(K_\alpha - K_{0\alpha}) + \frac{\hbar}{m} P_{nn\alpha} +$$

$$+ \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{n'\neq n,\gamma} \frac{(K_\beta - K_{0\beta})[P_{nn'\alpha} P_{n'n\gamma} + P_{n'n\alpha} P_{nn'\gamma}]}{E_n(\vec{K}_0) - E_{n'}(\vec{K}_0)}; \qquad (4.36)$$

$$\frac{\partial^2 E_n(\vec{K})}{\partial K_\alpha \partial K_\beta} = \frac{\hbar^2}{m}\delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{n'\neq n} \frac{P_{nn'\alpha} P_{n'n\beta} + P_{n'n\alpha} P_{nn'\beta}}{E_n(\vec{K}_0) - E_{n'}(\vec{K}_0)}. \qquad (4.37)$$

Из (4.28) и (4.37) следует формула

$$m^{*-1}_{\alpha\beta} = \frac{1}{m}\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{m^2}\sum_{n'\neq n} \frac{P_{nn'\alpha} P_{n'n\beta} + P_{n'n\alpha} P_{nn'\beta}}{E_n(\vec{K}_0) - E_{n'}(\vec{K}_0)}. \qquad (4.38)$$

Равенство (4.38) называется правилом сумм для эффективных масс, иногда его называют правилом f-сумм.

Полагая в (4.36) $\vec{K} = \vec{K}_0$, получим полезную формулу

$$\nabla_{\vec{K}} E_n(\vec{K}) = -\frac{i\hbar^2 (kR)^3}{m V_a}\int_{(V_a)} \psi^*_{n\vec{K}}(\vec{r})\,\nabla\,\psi_{n\vec{K}}(\vec{r})\,(d\vec{r}). \qquad (4.39)$$

Последнее соотношение позволяет определять точки нулевого наклона (4.21), используя симметрию функций $\psi_{n\vec{K}}(\vec{r})$.

Если состояние с энергией $E_n(\vec{K}_0)$ вырождено, то для получения зависимости $E_n(\vec{K})$ надо использовать теорию возмущений для вырожденных состояний.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

При этом зависимость энергии от $\vec{k}$ будет более сложной и содержать неаналитические члены.

4.5. ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Как и в задаче о колебаниях кристаллической решетки, при изучении зонного спектра удобно рассматривать кристалл, состоящий из конечного числа элементарных ячеек, и затем делать предельный переход к бесконечному кристаллу. Как уже отмечалось в (4.2), для достаточно большого кристалла конкретный выбор граничных условий несуществен. Удобно выбирать граничные условия, которые не нарушают трансляционную симметрию (4.7), так как при этом остается справедливой теорема Блоха.

Граничные условия, удовлетворяющие данному требованию, – это так называемые периодические граничные условия, или условия Борна-Кармана

$$\Psi(\vec{r} + 2N_\alpha \vec{a}_\alpha) = \Psi(\vec{r}), \qquad (4.40)$$

где N_α – большие целые числа, $\alpha = 1, 2, 3$

Условие (4.40) означает, что все пространство заполнено физически эквивалентными **кристаллическими блоками**, имеющими форму параллелепипеда, объемом $N v_a$, где $N = 8 N_1 N_2 N_3$ – число элементарных ячеек в блоке. Из (4.10) и (4.40) следует

$$2N_\alpha \vec{k} \vec{a}_\alpha = 2\pi n_\alpha, \qquad (4.41)$$

где n_α – целые числа.

Представляя $\vec{k}$ в виде

$$\vec{k} = \sum_\alpha k_\alpha \vec{B}_\alpha, \qquad (4.42)$$

получим

$$k_\alpha = \frac{n_\alpha}{2N_\alpha}. \qquad (4.43)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Для $\vec{k}$, лежащих в зоне Бриллюэна, $|k_\alpha| \le 1/2$, поэтому

$$-N_\alpha < n_\alpha \le N_\alpha. \qquad (4.44)$$

Таким образом, периодические граничные условия приводят к дискретным значениям волнового вектора $\vec{k}$. Число различных неэквивалентных $\vec{k}$ равно N, т.е. числу элементарных ячеек в кристаллическом блоке. Вычислим расстояние между соседними значениями $\vec{k}$ - Δk_α и объем ΔK, приходящийся на одно значение $\vec{k}$

$$\Delta k_\alpha = \frac{n_\alpha + 1}{2N_\alpha} - \frac{n_\alpha}{2N_\alpha} = \frac{1}{2N_\alpha} \sim \left(\frac{1}{N}\right)^{1/3}; \qquad (4.45)$$

$$\Delta K = \left| \left(\Delta k_1 \vec{b}_1, [\Delta k_2 \vec{b}_2 \times \Delta k_3 \vec{b}_3]\right) \right| = \frac{v_a}{N} = \frac{(2\pi)^3}{V}, \qquad (4.46)$$

где $V = N v_a$ - объем кристалла.

Из (4.45) и (4.46) видно, что при увеличении размера блока Δk_α и ΔK стремятся к нулю, т.е. можно считать, что $\vec{k}$ изменяется непрерывно. Отметим, что рассмотренный во второй главе дискретный набор равнораспределенных по зоне Бриллюэна векторов $\vec{k}$ мог бы быть получен введением периодических граничных условий в задаче о колебаниях решетки.

Переход от суммирования по дискретным значениям $\vec{k}$ к интегрированию осуществляется с помощью формулы (1.21).

В соответствии с правилами нормировки волновых функций дискретного спектра волновые функции, удовлетворяющие граничным условиям (4.40), нормированы следующим образом:

$$\int_{(Nv_a)} \Psi^*_{n'\vec{k}'}(\vec{r})\, \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})\, (d\vec{r}) = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\, \delta_{nn'}, \qquad (4.47)$$

где $\vec{k}$ - дискретный набор, определяемый (4.42)-(4.44).

Из (4.47) следует условие нормировки для функций $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$

$$\int_{(v_a)} U^*_{n'\vec{k}}(\vec{r}) U_{n\vec{k}}(\vec{r})\, (d\vec{r}) = \frac{1}{N}\, \delta_{nn'}; \qquad (4.48)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Из сравнения (4.48) и (4.26) видно, что $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$, нормированные условием (4.48), в $V^{1/2}(2\pi)^{-3/2}$ раз меньше, чем $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$, удовлетворяющие условию нормировки (4.26).

4.6. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

Введение счетного множества векторов $\vec{k}$ позволяет вычислить такую важную величину, как плотность состояний $n(E)$. По определению, $n(E)dE$ - это число состояний с энергиями от E до $E+dE$ в единице объема кристалла (для каждой проекции спина).

$$n(E)dE = \frac{N(E+dE)-N(E)}{V} = \frac{1}{V}\frac{dN(E)}{dE}dE, \qquad (4.49)$$

где $N(E)$ - число состояний с энергиями, меньшими чем E. Очевидно, что

$$N(E) = \sum_{n,\vec{k}} \int_{-\infty}^{E} \delta\left(x - E_n(\vec{k})\right)dx. \qquad (4.50)$$

Из (4.49) и (4.50) следует

$$n(E) = \frac{1}{V}\sum_{n,\vec{k}} \delta\left(E - E_n(\vec{k})\right). \qquad (4.51)$$

Переходя в (4.51) от суммирования по $\vec{k}$ к интегрированию, в соответствии с (I.2I) получим

$$n(E) = \frac{1}{(2\pi)^3}\sum_{n} \int_{(V_0)} (d\vec{k})\,\delta\left(E - E_n(\vec{k})\right) \qquad (4.52)$$

или, используя свойства δ-функции,

$$n(E) = \frac{1}{(2\pi)^3}\sum_{n} \int_{(S)} \frac{dS}{\left|\nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})\right|}. \qquad (4.53)$$

Интегрирование в (4.53) ведется по изоэнергетической поверхности $E_n(\vec{k}) = E$.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Вычислим плотность состояний для энергетической зоны, описываемой скалярной эффективной массой,

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*}(\vec{k}-\vec{k}_0)^2.$$

Изоэнергетическая поверхность для такой зоны – это сфера с центром в точке $\vec{k}_0$

$$(\vec{k}-\vec{k}_0)^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2}\left(E - E_n(\vec{k}_0)\right).$$

Простые вычисления показывают, что

$$n(E) = \begin{cases} \dfrac{|m^*|}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m^*\left(E-E_n(\vec{k}_0)\right)}, & \text{если } E>E_n(\vec{k}_0),\ m^*>0 \\ & \text{или} \\ & E<E_n(\vec{k}_0),\ m^*<0, \\ 0, & \text{если } E>E_n(\vec{k}_0),\ m^*<0 \\ & \text{или} \\ & E<E_n(\vec{k}_0),\ m^*>0. \end{cases} \qquad (4.54)$$

4.7. КЛАССИФИКАЦИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПО ЗОННОМУ СПЕКТРУ

Как уже отмечалось в п.4.3, соседние энергетические зоны могут либо перекрываться, либо касаться, либо быть разделенными запрещенной зоной. Характер взаимного расположения зон и число электронов в элементарной ячейке определяют электрические и многие другие физические свойства кристаллов. Рассмотрим вопрос о заполнении энергетических зон. В п.4.5 мы установили, что число различных неэквивалентных $\vec{k}$ равно N – числу элементарных ячеек в кристалле. Следовательно, в энергетической зоне $2N$ различных состояний (множитель 2 из-за спина электрона). Таким образом, согласно принципу Паули, в энергетической зоне может быть размещено не более $2N$ электронов или по 2 электрона на одну элементарную ячейку. Если на элементарную ячейку приходится P электронов, то они могут занять $P/2$ энергетических зон.

При наложении электрического поля энергетическая зона, в которой нет электронов, не вносит, конечно, никакого вклада в проводимость. То же самое можно сказать о полностью заполненной зоне, отделенной от верхней запрещенной зоной. Действительно, под действием поля электроны должны повысить энергию, т.е. за-

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

нять более высокий энергетический уровень, но в полностью заполненной зоне такой переход запрещен принципом Паули. Следовательно, электрический ток могут проводить только кристаллы, в которых имеется не **полностью заполненная зона.** Такие вещества называются металлами. Очевидно, что если на элементарную ячейку приходится нечетное число электронов, то данный кристалл – металл. Диэлектрики – это вещества, в которых верхняя заполненная зона отделена от незаполненной запрещенной зоной шириной более 3 эВ. Все энергетические зоны, лежащие ниже цели, отделяющей заполненные зоны от пустых, называются валентными зонами, выше – зонами проводимости. Полупроводники имеют такую же структуру энергетических зон, как и диэлектрики, но ширина запрещенной зоны в полупроводниках менее 3 эВ. Ясно, что в диэлектриках и полупроводниках элементарная ячейка должна содержать четное число электронов. Однако обратное утверждение верно не всегда. Твердое тело может быть металлом, даже если в элементарной ячейке имеется четное число электронов. Это возможно, если в окрестности энергии Ферми имеются перекрывающиеся зоны. Полуметаллы занимают промежуточное положение между полупроводниками и металлами. В полуметаллах верхняя валентная зона касается нижней зоны проводимости.

Все сказанное выше о проводимости твердых тел относится к идеальным кристаллам при $T = 0$. При $T \neq 0$, в соответствии с распределением Ферми-Дирака, у электрона имеется ненулевая вероятность иметь любую энергию, в частности, электрон в диэлектрике или полупроводнике может находиться в зоне проводимости. Наличие примесей и других дефектов в идеальном кристалле, как правило (см.[7-4]), приводит к уровням энергии в запрещенной зоне, что также меняет проводимость. Кроме того, достаточно сильное электрическое поле (если получаемая электроном энергия больше ширины запрещенной зоны) приводит к электрическому току в диэлектрике даже при $T = 0$ (пробой диэлектрика).

4.8. ЗОННАЯ СТРУКТУРА КОВАЛЕНТНЫХ И ИОННО-КОВАЛЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Зонная структура твердого тела зависит от многих факторов,

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

наиболее существенными из которых являются: химический состав вещества и его кристаллическая структура, в том числе зависящая от внешних условий величина постоянной решетки. Существуют различные методы расчета зонного спектра. При известном кристаллическом потенциале они отличаются друг от друга в основном выбором системы функций, по которой ведется разложение волновой функции. Имеются также различные методики для определения кристаллического потенциала. Общим для всех методов расчета является разделение электронов на валентные и электроны ионного остова. К остовным электронам обычно относят электроны полностью заполненных внутренних оболочек. Экспериментальные данные и квантово-механические расчеты показывают, что состояния остовных электронов практически не изменяются при переходе от свободного атома к твердому телу. Эти обстоятельства приводят к тому, что энергетические зоны, соответствующие остовным электронам, имеют незначительную ширину и не перекрываются с зонами валентных электронов. Следовательно, остовные зоны всегда заполнены и не вносят никакого вклада в проводимость. Состояния валентных электронов могут существенно измениться при образовании кристалла, и именно они определяют электрические свойства твердых тел.

Методы расчета зонной структуры можно разделить на две большие группы: расчеты из первых принципов и эмпирические расчеты. При использовании последних матричные элементы зонного гамильтониана задаются в виде некоторых параметрических формул; параметры теории выбираются из условия наилучшего совпадения теоретических и экспериментальных данных. Методы расчета энергетического зонного спектра изложены во многих учебниках и монографиях, и мы на них останавливаться не будем (см., например, [1,2,5]).

Для иллюстрации приведем результаты для некоторых ковалентных и ионно-ковалентных кристаллов. Кристаллическая структура этих полупроводников приведена в I главе. На рис.4.I изображены валентные зоны и несколько нижних зон проводимости германия для $\vec{k}$, изменяющихся вдоль направлений Δ и Λ (см.рис.I.I и табл.I.I). Германий – элемент IУ группы таблицы Менделеева, поэтому имеет 4 валентных электрона. В элементарной ячейке – 2 атома, поэтому на элементарную ячейку приходится 8 валентных электронов. Эти электроны заполняют 4 валентные зоны, отделенные от зон проводимости запрещенной зоной $\sim 0{,}8$ эВ. Германий – типичный полупроводник. На рис.4.I приведены стандартные обозначения неприводимых

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

представлений, по которым преобразуются волновые функции соответствующих состояний. Дно зоны проводимости находится в точке L (уровень L_1). Эффективная масса в этой точке $m_x^* = m_y^* = 1{,}59m$ и $m_z^* = 0{,}08m$. Эффективная масса для наинизшего уровня зоны проводимости в точке Γ (состояние Γ_2') изотропна и равна $0{,}041m$.

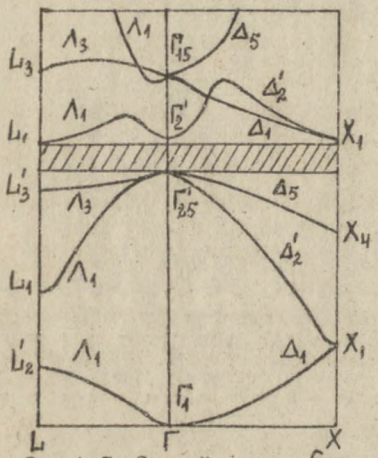


Рис.4.1. Зонный спектр Ge вдоль линий Δ и Λ. Заштрихована запрещенная зона энергий

Валентная зона состоит из 4-х зон (зоны симметрии Λ_3 и Δ_5 двукратно вырождены). Ширина валентной зоны 15 эВ. Вершиной валентной зоны является трехкратно вырожденный (без учета спина) уровень симметрии Γ_{25}'. Если учесть спин-орбитальное взаимодействие, то спиновое вырождение частично снимается. Например, шестикратно вырожденное с учетом спина состояние Γ_{25}' расщепляется на четырехкратно и двухкратно вырожденные; величина спин-орбитального расщепления для этого состояния $\sim 0{,}3$ эВ.

Похожую зонную структуру имеют и ионно-ковалентные кристаллы, образованные из атомов 3 и 5 групп (A^3B^5) и 2 и 6 групп (A^2B^6) со структурой типа сфалерита. В элементарной ячейке этих кристаллов два атома и 8 валентных электронов, заполняющих четыре валентных зоны. Как и германий и кремний, эти соединения являются полупроводниками. На рис.4.2 приведен зонный спектр арсенида галлия. Дно зоны проводимости $GaAs$ находится в точке Γ (уровень симметрии Γ_1). Эффективная масса на дне зоны проводимости изотропна, $m^* = 0{,}072\,m$. Ширина запрещенной зоны $GaAs$ ~1,5 эВ. Так же, как и в германии, вершина валентной зоны находится в точке Γ и тоже трехкратно (без учета спина) вырождена (уровень симметрии Γ_{15}). В отличие от германия, в валентной зоне арсенида галлия имеется так называемая ионная щель шириной $\sim 3{,}6$ эВ, отделяющая нижнюю валентную зону от остальных трех (зоны

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

симметрии Λ_3 и Δ_5 двухкратно вырождены). Полная ширина валентной зоны арсенида галлия порядка 13,2 эВ.

Почти полное совпадение зонных структур Ge и $GaAs$ неслучайно. Ga, Ge, As находятся в четвертом периоде Периодической системы Д.И.Менделеева. Практически одинаковы постоянные решетки a этих кристаллов. По этим причинам два атома Ge в элементарной ячейке дают почти такой же вклад в кристаллический потенциал, как и пара атомов Ga, As. Точнее, кристаллический потенциал в Ge симметричен при инверсии координат относительно точки, находящейся на середине линии, соединяющей атомы "0" и "4" на рис.I.I, а потенциал в $GaAs$ имеет небольшую антисимметричную относительно такого преобразования добавку. $GaAs$ - кристаллохимический аналог Ge.

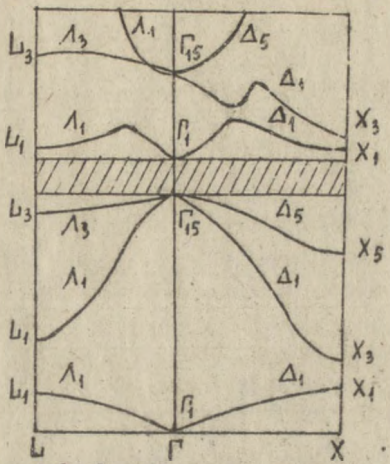


Рис.4.2. Зонный спектр арсенида галлия вдоль направлений Δ и Λ. Заштрихована запрещенная зона энергий

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

5. МЕТОД ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА

5.I. ФУНКЦИИ ВАНЬЕ

При решении задачи о движении электрона в кристалле при наличии внешних полей удобно использовать так называемые **функции** Ванье. Определим их следующим образом. Как следует из (4.I3), блоховские функции $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ - периодические в $\vec{k}$ -пространстве, и их можно разложить в ряд Фурье

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell} e^{i\vec{k}\vec{R}_\ell} \varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell), \qquad (5.I)$$

где коэффициенты разложения $\varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell)$ и называются функциями Ванье.

Выразим функции Ванье через блоховские функции. Для этого умножим (5.I) на $exp(-i\vec{k}\vec{R}_{\ell'})$ и просуммируем по $\vec{k}$. Используя (I.22), получим

$$\varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_\ell} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \qquad (5.2)$$

Разложения (5.I) и (5.2) являются точными для изолированных энергетических зон. Для касающихся и пересекающихся зон вычисление функций Ванье - более сложная задача.

Из (4.47) и (I.22) следует соотношение ортогональности для функций Ванье

$$\int_{(NVa)} (d\vec{r})\, \varphi^*_{n'}(\vec{r}-\vec{R}_{\ell'})\, \varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell) = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}. \qquad (5.3)$$

Подставляя (4.II) в (5.I), получим

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell} e^{i\vec{k}(\vec{R}_\ell-\vec{r})} \varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell). \qquad (5.4)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Из опыта численных расчетов известно, что периодическая часть блоховской волновой функции $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$ слабо зависит от $\vec{k}$, т.е. является плавной функцией волнового вектора $\vec{k}$. Следовательно, в разложении (5.4) коэффициенты $\varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell)$ для больших $|\vec{r}-\vec{R}_\ell|$ должны быть малы. Таким образом, функция Ванье $\varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell)$ локализована (и достаточно сильно) вблизи $\vec{R}_\ell$. Как видно из (5.2), функция Ванье есть суперпозиция блоховских функций с различными $\vec{k}$, и поэтому не может быть собственной функцией зонного гамильтониана. Получим уравнение, которому удовлетворяет функция Ванье

а Блох.ф

$$H\varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_\ell} E_n(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})=$$

$$=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_\ell} E_n(\vec{k})\sum_{\ell_1} e^{i\vec{k}\vec{R}_{\ell_1}}\varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_{\ell_1})$$

или

$$H\varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_\ell)=\sum_{\ell_1} E_{n\,\ell-\ell_1}\varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_{\ell_1}), \qquad (5.5)$$

где

$$E_{n\ell}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} E_n(\vec{k})e^{-i\vec{k}\vec{R}_\ell}=\frac{v_a}{(2\pi)^3}\int_{(v_1)}(d\vec{k})E_n(\vec{k})e^{-i\vec{k}\vec{R}_\ell}. \qquad (5.6)$$

Поскольку $E_n(\vec{k})$ - периодическая функция в $\vec{k}$-пространстве, (см.(4.13)), то $E_{n\ell}$, определяемые (5.6), - фурье-коэффициенты, и для зонных энергий справедливо разложение

$$E_n(\vec{k})=\sum_{\ell} E_{n\ell}\, e^{i\vec{k}\vec{R}_\ell}. \qquad (5.7)$$

Систему уравнений (5.5), в принципе, можно использовать для вычисления зонного спектра вместо решения уравнения Шредингера, и при некоторых обстоятельствах такой подход оказывается предпочтительным.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

5.2. УРАВНЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА ВО ВНЕШНЕМ МЕДЛЕННО МЕНЯЮЩЕМСЯ ПОЛЕ

Предположим, что на электрон в твердом теле, кроме **периодического** кристаллического потенциала $V(\vec{r})$, действует внешнее поле $W(\vec{r})$, причем функция $W(\vec{r})$ плавная, т.е. $W(\vec{r})$ несущественно меняется на расстоянии, **равном постоянной решетки.**

Уравнение Шредингера имеет вид

$$[H(\vec{r}) + W(\vec{r})]\Phi(\vec{r}) = E\,\Phi(\vec{r}), \qquad (5.8)$$

где $H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$ – зонный гамильтониан.

Волновую функцию $\Phi(\vec{r})$ будем искать в виде разложения

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n\ell} B_n(\vec{R}_\ell)\,\varphi_n(\vec{r} - \vec{R}_\ell). \qquad (5.9)$$

Подставляя (5.9) в (5.8), умножая обе части уравнения на $\varphi^*_{n'}(\vec{r} - \vec{R}_{\ell'})$, интегрируя по $\vec{r}$ и используя (5.5), получим

$$\sum_{n\ell} B_n(\vec{R}_\ell)\Big\{\int_{(v)} (d\vec{r})\,\varphi^*_{n'}(\vec{r} - \vec{R}_{\ell'})\Big[\sum_{\ell_1} E_{n\,\ell-\ell_1}\,\varphi_n(\vec{r} - \vec{R}_{\ell_1}) + \qquad (5.10)$$

$$+ W(\vec{r})\,\varphi_n(\vec{r} - \vec{R}_\ell) - E\,\varphi_n(\vec{r} - \vec{R}_\ell)\Big]\Big\}.$$

Поскольку функция $W(\vec{r})$ – плавная, а функции Ванье сильно меняются на расстоянии постоянной решетки, то, учитывая соотношение ортогональности (5.3), получим

$$\int_{(v)} (d\vec{r})\,\varphi^*_{n'}(\vec{r} - \vec{R}_{\ell'})\,W(\vec{r})\,\varphi_n(\vec{r} - \vec{R}_\ell) \approx W(\vec{R}_\ell)\,\delta_{nn'}\,\delta_{\ell\ell'}. \qquad (5.11)$$

Используя в (5.10) (5.3) и (5.11), найдем уравнение для определения коэффициентов

$$\sum_{\ell'} E_{n\,\ell-\ell'}\,B_n(\vec{R}_{\ell'}) + W(\vec{R}_\ell)\,B_n(\vec{R}_\ell) - E\,B_n(\vec{R}_\ell). \qquad (5.12)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Преобразуем (5.12) к более удобному виду. Перейдем к суммированию по $\ell_1 = \ell' - \ell$ и используем известное соотношение для оператора сдвига на вектор $\vec{a}$

$$f(\vec{r}+\vec{a}) = e^{(\vec{a},\nabla)} f(\vec{r}). \qquad (5.13)$$

Последнее соотношение можно легко проверить разложением в ряд Тейлора обеих частей равенства. В результате вместо (5.12) получим

$$\sum_{\ell_1} E_{n\ell_1} e^{(\vec{R}_{\ell_1},\nabla)} B_n(\vec{R}_\ell) + W(\vec{R}_\ell) B_n(\vec{R}_\ell) = E B_n(\vec{R}_\ell) \qquad (5.14)$$

или

$$\left[E_n(-i\nabla) + W(\vec{R}_\ell) \right] B_n(\vec{R}_\ell) = E B_n(\vec{R}_\ell), \qquad (5.15)$$

где в соответствии с (5.7)

$$E_n(-i\nabla) = \sum_{\ell_1} E_{n\ell_1} e^{(\vec{R}_{\ell_1},\nabla)}. \qquad (5.16)$$

$E_n(-i\nabla)$ - оператор, полученный заменой в функции $E_n(\vec{k})$ вектора $\vec{k}$ на оператор $-i\nabla$.

Из уравнения (5.15) находятся коэффициенты разложения $B_n(\vec{R}_\ell)$, определяющие волновую функцию электрона (5.9) во внешнем медленно меняющемся поле $W(\vec{r})$.

Сделаем дальнейшие упрощения. Как видно из (5.11), (5.14) и (5.15), **поле $W(\vec{r})$ не приводит к межзонным переходам.** В этом случае суммирование по n в (5.9) можно опустить, и энергия E будет близка к энергии блоховского состояния $E_n(\vec{k}_0)$. Решение (5.15) при таких приближениях будем искать в виде

$$B_n(\vec{R}_\ell) = e^{i\vec{k}_0\vec{R}_\ell} f_n(\vec{R}_\ell). \qquad (5.17)$$

Подставляя (5.17) в (5.15) и используя (5.13) и (5.16), получим

$$\left[E_n(\vec{k}_0 - i\nabla) + W(\vec{R}_\ell) \right] f_n(\vec{R}_\ell) = E f_n(\vec{R}_\ell). \qquad (5.18)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Вместо разностного уравнения (5.18) удобнее решать дифференциальное уравнение

$$\left[E_n\left(\vec{k}_0 - i\nabla\right) + W(\vec{r})\right] f_n(\vec{r}) = E f_n(\vec{r}), \qquad (5.19)$$

где $f_n(\vec{r})\big|_{\vec{r}=\vec{R}_e} = f_n(\vec{R}_e)$.

Ясно, что для $W(\vec{r})$, удовлетворяющих сформулированным условиям, функция $f_n(\vec{r})$ - плавная.

Подставляя (5.17) в (5.9), получим, что волновая функция электрона имеет вид

$$\Phi_{n\vec{k}_0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{e}} f_n(\vec{R}_e) e^{i\vec{k}_0\vec{R}_e} \varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_e) \approx$$

$$\approx \frac{1}{\sqrt{N}} f_n(\vec{r}) \sum_{\vec{e}} e^{i\vec{k}_0\vec{R}_e} \varphi_n(\vec{r}-\vec{R}_e) = f_n(\vec{r}) \Psi_{n\vec{k}_0}(\vec{r}) \qquad (5.20)$$

Таким образом, волновая функция электрона во внешнем медленно меняющемся поле, не вызывающем межзонных переходов, имеет вид произведения блоховской функции на медленно меняющуюся функцию. Из (5.20) ясно, что $f_n(\vec{r})$ - огибающая волновой функции. Уравнение для огибающей (5.19) называется уравнением **эффективного гамильтониана.**

Если $\vec{k}_0$ - экстремальная точка для зоны $E_n(\vec{k})$, то, используя (4.27) и (4.28), получим

$$\left[-\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2m_\alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} + W(\vec{r})\right] f_n(\vec{r}) = \left[E - E_n(\vec{k}_0)\right] f_n(\vec{r}) \qquad (5.21)$$

или для скалярной эффективной массы

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + W(\vec{r})\right] f_n(\vec{r}) = \left[E - E_n(\vec{k}_0)\right] f_n(\vec{r}). \qquad (5.22)$$

Уравнения для огибающей (5.21) и (5.22) являются уравнениями Шредингера для частицы, масса которой равна эффективной массе в точке $\vec{k}_0$. Энергия такой частицы отсчитывается от экстремальной энергии $E_n(\vec{k}_0)$. Все эффекты кристаллического

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

потенциала сводятся к замене массы электрона на его эффективную массу, которая в общем случае может быть неизотропной и отрицательной. Напомним, что уравнения (5.21) и (5.22) справедливы только для энергий, близких к $E_n(\vec{k}_0)$.

5.3. ЭЛЕКТРОНЫ И ДЫРКИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Рассмотрим движение кристаллического электрона в постоянном электрическом поле $\vec{E}$.

$$W(\vec{r}) = -e(\vec{E},\vec{r}).$$

Если $E_n(\vec{k}_0)$ - минимальное значение энергии в зоне, то (в приближении скалярной эффективной массы) $m^* > 0$. Уравнение эффективного гамильтониана (5.22) в этом случае - уравнение Шредингера для свободной квазичастицы с отрицательным зарядом $-e$ и положительной массой m_e^* в постоянном электрическом поле. Эти квазичастицы, энергии которых лежат вблизи минимальных значений энергетической зоны (нижней зоны проводимости в полупроводниках или диэлектриках), как и реально существующие частицы, называются электронами. Энергия электронов отсчитывается от дна зоны проводимости $E_c(\vec{k}_0) = E_c$.

Если $E_n(\vec{k}_0)$ - максимальное значение энергии в зоне, то $m^* < 0$. Введем для этого случая положительную величину $m_p^* = -m^*$. Тогда (5.22) можно записать в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_p^*}\nabla^2 + e(\vec{E},\vec{r})\right] f_n(\vec{r}) = \left(E_n(\vec{k}_0) - E\right) f_n(\vec{r}). \quad (5.23)$$

Формально (5.23) - уравнение Шредингера для квазичастицы с положительным зарядом $+e$, положительной массой m_p^* и энергией $E_p = E_n(\vec{k}_0) - E$. Такие квазичастицы называются дырками. Дырки имеют энергию вблизи максимальных значений энергии в электронной энергетической зоне, например вблизи вершины валентной зоны E_v .

Покажем, что понятие дырок можно использовать при рассмотрении среднего (в квантово-механическом смысле) значения

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

плотности тока электронов. Как известно из квантовой механики,

$$\langle \vec{j}_{n\vec{k}} \rangle = \frac{ie\hbar}{m} \int_{(v)} (d\vec{r}) \left[\psi^*_{n\vec{k}}(\vec{r}) \nabla \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) - \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \nabla \psi^*_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right]. \quad (5.24)$$

(В этом выражении учтено вырождение по спиновым квантовым числам). Учитывая периодические граничные условия, можно показать, что

$$\langle \vec{j}_{n\vec{k}} \rangle = \frac{2ie\hbar}{m} \int_{(v)} \psi^*_{n\vec{k}}(\vec{r}) \nabla \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) (d\vec{r}). \quad (5.25)$$

Имея в виду различие в нормировке $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ для непрерывных и дискретных $\vec{k}$ (см. п.4.3 и п.4.5), для вычисления (5.25) можно использовать (4.39). В результате получим

$$\langle \vec{j}_{n\vec{k}} \rangle = -\frac{2e}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k}). \quad (5.26)$$

Плотность тока, создаваемого всеми электронами, имеет вид

$$\langle \vec{j} \rangle = \sum_{n\vec{k}} \langle j_{n\vec{k}} \rangle f_{n\vec{k}} = \frac{2e}{\hbar} \sum_{\vec{k}} \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) f_{n\vec{k}}, \quad (5.27)$$

где $f_{n\vec{k}}$ - вероятность заполнения состояния с энергией $E_n(\vec{k})$. При $T = 0$

$$f_{n\vec{k}} = \begin{cases} 1, & \text{если состояние заполнено;} \\ 0, & \text{если состояние не заполнено.} \end{cases}$$

В отсутствие внешних полей вероятность заполнения состояний зависит только от его энергии, но, поскольку $E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$, то $f_{n\vec{k}} = f_{n-\vec{k}}$. Из свойства (4.15) следует, что

$$\nabla_{-\vec{k}} E_n(-\vec{k}) = -\nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k}).$$

Так как в сумму по $\vec{k}$ в (5.27) симметричным образом входят как $\vec{k}$, так и $-\vec{k}$, плотность тока $\langle \vec{j} \rangle$ равна нулю. Таким образом, если на кристалл не наложено внешнее поле, то средний ток равен нулю. При наличии внешнего поля $f_{n\vec{k}} \neq f_{n-\vec{k}}$, так как число электронов, движущихся против поля, больше числа электронов, **движущихся** по полю. В этом случае

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\langle \vec{j} \rangle = \sum_{n\vec{k}} \langle \vec{j}_{n\vec{k}} \rangle f_{n\vec{k}} \neq 0, \qquad (5.28)$$

так как в этом выражении нет симметрии между $\vec{k}$ и $-\vec{k}$. Введем величину $f^p_{n\vec{k}} = 1 - f_{n\vec{k}}$ – вероятность того, что состояние с энергией $E_n(\vec{k})$ не занято электроном. Плотность тока можно представить в виде

$$\langle \vec{j} \rangle = \sum_{n\vec{k}} \langle \vec{j}_{n\vec{k}} \rangle - \sum_{n\vec{k}} \langle \vec{j}_{n\vec{k}} \rangle f^p_{n\vec{k}}. \qquad (5.29)$$

Первое слагаемое в правой части (5.29) равно нулю, так как оно соответствует току, создаваемому электронами полностью заполненной зоны (см.п.4.7). Таким образом,

$$\langle \vec{j} \rangle = \frac{2e}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) f^p_{n\vec{k}}. \qquad (5.30)$$

Ненулевой вклад в сумму по $n\vec{k}$ дают только состояния, не занятые электронами. Таким образом, ток в **не полностью** заполненной электронной зоне можно представить как ток частиц с положительным зарядом $+e$ и с той же скоростью волнового пакета ($\nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})$ пропорционален скорости волнового пакета), что и для электронов. Для того чтобы отождествить эти частицы с дырками, необходимо положить $\vec{k}_p = -\vec{k}$, где $\vec{k}_p$ – волновой вектор дырки, и $E_p = -E$ где E_p – энергия дырки. Ясно, что при этом выполняется необходимое равенство скоростей волновых пакетов

$$\nabla_{\vec{k}_p} E_p(\vec{k}_p) = \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}).$$

Следовательно, дырки – это квазичастицы с зарядом $+e$, положительной массой $m^*_p = -m^*_e$, волновым вектором $\vec{k}_p = -\vec{k}$ и законом дисперсии $E_p(\vec{k}_p) = -E(\vec{k})$. Дырки описывают состояния, **которые не** заполнены электронами. **Представление о дырках** плодотворно используется в теории полупроводников и диэлектриков.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

5.4. ПОЛУКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Как уже отмечалось, уравнение эффективного гамильтониана (5.29) можно рассматривать как уравнение Шредингера для некоторой квазичастицы с волновой функцией $f(\vec{r})$.(В этом пункте мы опускаем зонный индекс n). $f(\vec{r})$ - медленно меняющаяся функция, и в ряде случаев при решении уравнения для огибающей $f(\vec{r})$ можно использовать квазиклассическое приближение.

При переходе к классической механике функция Гамильтона этой квазичастицы ($-i\hbar\nabla \to \vec{P}$) имеет вид

$$H(\vec{P},\vec{r}) = E\left(\frac{\hbar\vec{k}_0+\vec{P}}{\hbar}\right) + W(\vec{r}). \qquad (5.31)$$

Классические уравнения движения записываются следующим образом:

$$\vec{v} = \frac{\partial H(\vec{P},\vec{r})}{\partial \vec{P}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec{P}/\hbar)}{\partial(\vec{P}/\hbar)}; \qquad (5.32)$$

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = -\frac{\partial H(\vec{P},\vec{r})}{\partial \vec{r}} = -\frac{\partial W(\vec{r})}{\partial \vec{r}} = \vec{F}, \qquad (5.33)$$

где $\vec{F}$ - сила, действующая на квазичастицу.

Приближение скалярной эффективной массы дает

$$m^*\vec{v} = \vec{P}, \quad m^*\frac{d\vec{v}}{dt} = 0, \qquad (5.34)$$

то есть получаем обычные уравнения Ньютона для квазичастицы с массой m^*.

В соответствии с принципами квантовой механики классическую скорость можно отождествить со средней квантово-механической скоростью, то есть $\vec{v} = \langle \vec{v}_{nz} \rangle$. (Как видно из (5.32) скорости электрона и квазичастицы равны).

Используя (5.25) и (5.26), получим

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\langle \vec{v}_{n\vec{k}} \rangle = -\frac{i\hbar}{m}\int_{(v)} \psi^*_{n\vec{k}}(\vec{r})\,\nabla\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})\,(d\vec{r}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\vec{k}}E_n(\vec{k}), \qquad (5.35)$$

Из сравнения (5.35) и (5.32) ясно, что классический импульс $\vec{p}$ квазичастицы равен $\hbar\vec{k}$. Как уже отмечалось в главе 3, величина $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ называется квазиимпульсом.

Из уравнения (5.33) получим уравнение, определяющее изменение волнового вектора $\vec{k}$ под действием внешней силы $\vec{F}$,

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F}. \qquad (5.36)$$

Как видно из (5.36), при наличии внешней силы $\vec{F}$ волновой вектор $\vec{k}$ изменяется со временем и не является по этой причине квантовым числом.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

6. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С КОЛЕБАНИЯМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

6.I. ДЕФОРМАЦИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

В рамках адиабатического приближения (2.6) электроны и фононы выступают как невзаимодействующие частицы. Учет неадиабатических членов $\Lambda_{nm}(\vec{R})$ приводит к взаимодействию между ними. Последовательная теория электрон-фононного взаимодействия, состоящая в учете отброшенных в (2.5) членов, наталкивается на существенные математические трудности. Мы будем находить из менее строгих, но оправданных с физической точки зрения представлений.

Обратимся к уравнению теории эффективного гамильтониана

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*} + W(\vec{r}) + \varepsilon_n(0)\right) f(\vec{r}) = E f(\vec{r}). \qquad (6.1)$$

Здесь $\varepsilon_n(0)$-минимум зоны проводимости, $W(\vec{r})$ - медленно меняющееся поле, играющее в наших рассуждениях вспомогательную роль. Пусть по кристаллу распространяется фонон, который в континуальном приближении описывается полем смещений

$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{u}_{\vec{q}}\, e^{i\vec{q}\vec{r}}. \qquad (6.2)$$

Поскольку в континуальном приближении считается $\vec{q} \to 0$ (точнее, $q^{-1} \gg a$, a - постоянная решетки), то длина волны колебания много больше a. Мысленно разобьем кристалл на участки, малые с макроскопической точки зрения, но большие по сравнению с a. Эти участки можно мыслить как маленькие кристаллы, в каждом из которых $\vec{u}$ примерно постоянно. Это в свою очередь можно толковать как изменение постоянной решетки от участка к участку.

Поскольку положение границ энергетических зон зависит от

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

постоянной решетки (см.раздел 4.8), то в каждом из этих участков $\mathcal{E}_n(0)$ несколько отличается, поэтому следует считать, что $\mathcal{E}_n(0)$ зависит от $\vec{r}$

$$\mathcal{E}_n(0,\vec{r}) = \mathcal{E}_n(0) + \{\mathcal{E}_n(0,\vec{r}) - \mathcal{E}_n(0)\} = \mathcal{E}_n(0) + H_{эф}(\vec{r}). \quad (6.3)$$

Уравнение (6.I) при наличии фононного поля следует поэтому записать в виде

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*} + W(\vec{r}) + \mathcal{E}_n(0) + H_{эф}(\vec{r})\right)f(\vec{r}) = Ef(\vec{r}). \quad (6.4)$$

Мы видим, что $H_{эф}(\vec{r})$ играет роль дополнительного внешнего потенциала и может рассматриваться как внешнее поле для электрона, созданное фононами. Потенциал электрон-фононного взаимодействия $H_{эф}(\vec{r})$ является функционалом от поля смещений (6.2)

$$H_{эф}(\vec{r}) = H_{эф}(\vec{r}, [\vec{u}(\vec{r})]). \quad (6.5)$$

При $\vec{u} = 0$ очевидно и $H_{эф} = 0$. Разлагая $H_{эф}$ в функциональный ряд Тейлора и ограничиваясь первым членом разложения, имеем

$$H_{эф} = \sum_{\alpha} \int C_{\alpha}(\vec{r}, \vec{r}')\, u_{\alpha}(\vec{r}')\, d\vec{r}', \quad (6.6)$$

где

$$C_{\alpha}(\vec{r}, \vec{r}') = \left.\frac{\delta H_{эф}(\vec{r})}{\delta u_{\alpha}(\vec{r}')}\right|_{\vec{u}=0} \quad (6.7)$$

– функциональная производная от потенциала $H_{эф}$ по компоненте фононного поля $u_{\alpha}(\vec{r}')$. В континуальном приближении кристалл представляется однородной средой, в которой физические характеристики не должны зависеть от выбора начала координат, поэтому $C_{\alpha}(\vec{r}, \vec{r}') = C_{\alpha}(\vec{r} - \vec{r}')$. Тогда соотношение (6.6) записывается в виде

$$H_{эф} = \sum_{\alpha \vec{q}} C_{\alpha}(\vec{q})\, u_{\vec{q}\alpha}\, e^{-i\vec{q}\vec{r}}. \quad (6.8)$$

Здесь

$$C_{\alpha}(\vec{q}) = \frac{1}{V}\int C_{\alpha}(\vec{r})\, e^{i\vec{q}\vec{r}}\, d\vec{r}. \quad (6.9)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Поскольку $\vec{q}$ предполагается малым, можно разложить $c_\alpha(\vec{q})$ в ряд Тейлора

$$c_\alpha(\vec{q}) = c_\alpha^0 - i\sum_\beta D_{\alpha\beta} q_\beta . \qquad (6.10)$$

В изотропной среде все направления должны быть равноправными, поэтому $D_{\alpha\beta} = D\delta_{\alpha\beta}$. Множитель $(-i)$ введен для удобства.

Для акустических фононов при $\vec{q}=0$ $\vec{u} = const$, т.е. кристалл смещается как целое. При этом постоянная решетки в любой точке одна и та же, следовательно, $H_{эф} = 0$. С другой стороны, согласно (6.8), (6.10) при $q=0$ $H_{эф} = \sum_\alpha c_\alpha^0 u_{0\alpha}$ и обращается в нуль при произвольных $u_{0\alpha}$ только при $c_\alpha^0 = 0$. Итак, для акустических колебаний постоянный член разложения в (6.10) исчезает, следовательно,

$$H_{эф}^{ак} = -iD^{ак}(\vec{q}\cdot\vec{u}_q)e^{-i\vec{q}\vec{r}} = D^{ак}(\nabla\vec{u}(\vec{r})). \qquad (6.11)$$

Потенциал (6.11) носит название деформационного потенциала акустических фононов. D – константа деформационного потенциала.

Для оптических фононов рассуждения, приводящие к результату $c_\alpha^0 = 0$, уже несправедливы. Поэтому для оптических фононов

$$H_{эф}^{опт} = (\vec{c}^{\,0}, \vec{S}(\vec{r})), \qquad (6.12)$$

где $\vec{S}(\vec{r})$ – взаимные смещения подрешеток. Для полярных кристаллов наряду с потенциалом (6.12) возникает электростатический потенциал (2.71), который также можно записать в виде (6.12), считая, что $\vec{c} = \vec{q}(dq)^{-2}$. В приближении деформационного потенциала, как видно из (6.11), (6.12), электроны взаимодействуют только с продольными акустическими и оптическими фононами.

Следует отметить, что изложенная выше простая теория справедлива только в приближении скалярной эффективной массы. Для более сложных законов дисперсии электронов теория существенно усложняется.

Константы деформационного потенциала могут быть в принципе определены из эксперимента.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

6.2. ПОЛЯРОН

Ограничиваясь рамками метода эффективного гамильтониана и теории деформационного потенциала, мы можем записать гамильтониан электрона в фононном поле

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*} + H_\phi + H_{э\phi}. \qquad (6.13)$$

Здесь H_ϕ - гамильтониан решеточной подсистемы (2.35). Найдем волновые функции и энергии электрон-фононной системы, считая $H_{э\phi}$ малым возмущением.

Стандартная теория возмущений дает

$$E(\vec{k},\{n_{\vec{q}x}\}) = E^\circ(\vec{k},\{n_{\vec{q}x}\}) + \sum_{\vec{k}'\{n'_{\vec{q}'x'}\}} \frac{|\langle\Psi^\circ(\vec{k},\{n_{\vec{q}x}\}|H_{э\phi}|\Psi^\circ(\vec{k}',\{n'_{\vec{q}'x'}\})\rangle|^2}{E^\circ(\vec{k}\{n_{\vec{q}x}\}) - E^\circ(\vec{k}',\{n'_{\vec{q}'x'}\})}. \qquad (6.14)$$

Здесь $E^\circ(\vec{k},\{n_{\vec{q}x}\})$, $\Psi^\circ(\vec{k},\{n_{\vec{q}x}\})$ - энергии и волновые функции невзаимодействующей электрон-фононной системы

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*} + H_\phi\right)\Psi^\circ(\vec{k},\{n_{\vec{q}x}\}) = E^\circ(\vec{k},\{n_{\vec{q}x}\})\Psi^\circ(\vec{k},\{n_{\vec{q}x}\}), \qquad (6.15)$$

$$\Psi^\circ(\vec{k}\{n_{\vec{q}x}\}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}\,\chi(\{n_{\vec{q}x}\}),$$

$$E^\circ(\vec{k}\{n_{\vec{q}x}\}) = \frac{\hbar^2k^2}{2m^*} + \sum_{n\vec{q}x}\hbar\omega_{\vec{q}x}\left(n_{\vec{q}x}+\frac{1}{2}\right). \qquad (6.16)$$

Исследуем матричный элемент в формуле (6.14) на примере оптических фононов. Подставляя (6.12) в (6.14), получим

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\langle \Psi^0(\vec{k}\{n_{\vec{q}x}\})|H_{эф}|\Psi^0(\vec{k}'\{n'_{\vec{q}'x'}\})\rangle =$$

$$= \sum_{\vec{q}'',x''} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{q}''x''}\rho_0 V}}\,(\vec{c}\,\vec{h}^{\vec{q}''x})\langle\vec{k}|e^{i\vec{q}''\vec{r}}|\vec{k}'\rangle\langle\chi(\{n_{\vec{q}x}\})|a_{\vec{q}''x''}+ \quad (6.17)$$

$$+ a^+_{-\vec{q}''x''}|\chi(\{n_{\vec{q}'x'}\})\rangle.$$

Здесь

$$\langle\vec{k}|e^{i\vec{q}''\vec{r}}|\vec{k}'\rangle = \frac{1}{V}\int e^{i(\vec{k}'+\vec{q}''-\vec{k})\vec{r}}\,d\vec{r} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'+\vec{q}''}. \quad (6.18)$$

Согласно (2.37),(2.38)

$$\langle\chi(\{n_{\vec{q}x}\})|a_{\vec{q}''x''}|\chi(\{n'_{\vec{q}'x'}\})\rangle = \begin{cases}\sqrt{n_{\vec{q}x}+1} & \text{при } x=x'=x'',\ \vec{q}=\vec{q}'=\vec{q}'',\ n'_{\vec{q}x}=n_{\vec{q}x}+1;\\ 0 & \text{в остальных случаях.}\end{cases}$$

$$\langle\chi(\{n_{\vec{q}x}\})|a^+_{-\vec{q}''x''}|\chi(\{n'_{\vec{q}'x'}\})\rangle = \begin{cases}\sqrt{n_{\vec{q}x}} & \text{при } x=x'=x'',\ \vec{q}=\vec{q}'=-\vec{q}'',\ n'_{\vec{q}x}=n_{\vec{q}x}-1;\\ 0 & \text{в остальных случаях.}\end{cases} \quad (6.19)$$

Тогда (6.17) не равен нулю только, если $x=x'$, $\vec{q}=\vec{q}'$ и переписывается в виде

$$\langle\Psi^0(\vec{k}\{n_{\vec{q}x}\})|H_{эф}|\Psi^0(\vec{k}'\{n'_{\vec{q}'x'}\})\rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{q}x}\rho_0 V}}\,(\vec{c}\,\vec{h}^{\vec{q}x})\begin{cases}\sqrt{n_{\vec{q}x}+1}\;\delta_{\vec{k}',\vec{k}-\vec{q}} & \text{при } n'_{\vec{q}x}=n_{\vec{q}x}+1;\\ \sqrt{n_{\vec{q}x}}\;\delta_{\vec{k}',\vec{k}+\vec{q}} & \text{при } n'_{\vec{q}x}=n_{\vec{q}x}-1.\end{cases} \quad (6.20)$$

Исследуем распространение электрона в решетке в условиях, когда реальные фононы отсутствуют: $n_{\vec{q}x}=0$. Эта ситуация соответствует температуре, равной нулю. Тогда (6.14) перепишется в виде

$$E(\vec{k}\{0\}) = E^0(\vec{k}\{0\}) + \sum_{\vec{q}x}\frac{\frac{\hbar}{h}|(\vec{c}\,\vec{h}^{\vec{q}x})|^2}{2\omega_{\vec{q}x}\rho_0 V\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}-\frac{\hbar^2(\vec{k}-\vec{q})^2}{2m^*}-\hbar\omega_{\vec{q}x}\right)}. \quad (6.21)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Рассмотрим энергетический знаменатель

$$B(\vec{k},\vec{q}) = \frac{\hbar^2(\vec{k}-\vec{q})^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\vec{q}x} - \frac{\hbar^2k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2q^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\vec{q}x} - \frac{\hbar(\vec{k}\vec{q})}{m^*}. \quad (6.22)$$

При малых $\vec{k}$

$$\frac{1}{B(\vec{k}\vec{q})} = \frac{1}{B(0,\vec{q})} - \frac{\hbar^2(\vec{k}\vec{q})}{m^*B^2(0\vec{q})} + \frac{\hbar^4(\vec{k}\vec{q})^2}{m^{*2}B^3(0q)} + \dots . \quad (6.23)$$

Подставляя значение электрон-фононного потенциала для полярного кристалла (2.78), получим

$$\vec{E}(\vec{k}\{0\}) = \frac{\hbar^2k^2}{2\mu^*} - \mathcal{U}, \quad (6.24)$$

где

$$\mathcal{U} = \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\frac{\hbar^2\omega_L e^2}{2\pi}\int_0^{q_{max}}\frac{dq}{B(0q)},$$

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m^*} - \frac{\hbar^3}{m^{*2}}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\frac{\hbar^2\omega_L e^2}{3\cdot 2\pi}\int_0^{q_{max}}\frac{q^2dq}{B^3(0\vec{q})}. \quad (6.25)$$

При получении (6.25) мы воспользовались формулой (I.2I) для перехода от суммирования к интегрированию, заменили зону Бриллюэна сферой с радиусом q_{max}. Вклад от второго члена в (6.23) исчезает ввиду того, что подынтегральная функция антисимметрична.

Выражение (6.24) можно интерпретировать следующим образом: Электрон своим электрическим полем воздействует на положительно заряженные ионы решетки, смещая их из положений равновесия. Образуется потенциальная яма, энергия электрона при этом понижается ($\mathcal{U} > 0$). При своем движении электрон увлекает за собой решеточную поляризацию. Ввиду инерционности решетки весь этот комплекс должен обладать большой массой ($\mu^* > m^*$). Подобное образование - электрон + поляризация решетки - носит название полярона.

Законность формулы (6.24) ограничена областью применимости теории возмущений, т.е. малостью электрон-фононного потенциала $H_{эф}$ (слабая связь). В тех случаях, когда теория возмущений неприменима, необходимо пользоваться другими методами. Однако само представление о поляроне сохраняет свой смысл и в этом случае.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

При высоких температурах, когда числа заполнения фононов велики, тепловое движение ионов должно разрушать поляризационную потенциальную яму, и представление о поляроне, как о стабильной квазичастице, не является оправданным.

6.3. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА КОЛЕБАНИЯХ РЕШЕТКИ

Область применимости формул (6.24) ограничена помимо малости электрон-фононной связи $H_{эф}$ также и величиной энергетического знаменателя в (6.21). Выражение (6.21) заведомо неприменимо при

$$\frac{\hbar q \kappa \cos\theta}{m^*} = \frac{\hbar q^2}{2m^*} + \omega_{qx}. \qquad (6.26)$$

θ - угол между векторами $\vec{\kappa}$ и $\vec{q}$.

Смысл условия (6.26) становится особенно наглядным, если подставить в качестве ω_{qx} частоту акустического фонона $\omega_{qx} = v_{зq}$. Условие (6.26) по виду совпадает тогда с уравнением для порогового значения скорости для черенковского излучения, только не для света, а для звука. Таким образом, теория полярона заведомо неприменима в том случае, когда происходит рождение реальных фононов. Поэтому можно ставить задачу только об изменении состояния электрона при рождении или уничтожении фонона или, как принято говорить, о рассеянии электронов на фононах.

Вероятность перехода из состояния i в состояние j в единичном объеме в единицу времени определяется стандартным образом [6].

$$W_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{ij}|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_j), \qquad (6.27)$$

где H_{ij} определяется выражением (6.20); ε_i, ε_j - энергии. Подставляя его в (6.27), получим

$$W_{\vec{\kappa},\vec{\kappa}\pm\vec{q}} = \frac{\pi}{\rho_0 V} \sum_{\vec{q}} \frac{|(\vec{e}\vec{q})|^2}{\omega_{qx}} \left(n_{qx} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \delta(\varepsilon_{\vec{\kappa}\pm\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{\kappa}} \mp \hbar\omega_{qx}). \qquad (6.28)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Для акустических фононов $\vec{c}$ заменяется, как нетрудно видеть, на $2\vec{q}$, ρ_0 на ρ, ω_{qx} на v_q^x $(\vec{q}\vec{n}^x)\neq 0$ только для продольных колебаний: $\vec{n}^l = \vec{q}/q$,

$$W^{ak}_{\vec{k},\vec{k}\pm\vec{q}} = \frac{\mathcal{D}^2\pi q}{v_l \rho V}\left(n_{lq}+\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2}\right)\delta\left(\frac{\hbar^2q^2}{2m^*}\pm\frac{\hbar^2(\vec{k}\vec{q})}{m^*}\mp\hbar v_{lq}\right). \quad (6.29)$$

В большинстве физически интересных случаев можно считать, что скорость электрона $\frac{\hbar k}{m^*} \gg v_l$ и пренебречь последним членом в аргументе дельта-функции. Это означает, что рассеяние электронов на акустических фононах практически является упругим $\varepsilon_{\vec{k}\pm\vec{q}} \simeq \varepsilon_{\vec{k}}$. Если нас интересует только изменение состояния электрона, то выражение (6.29) следует усреднить по всевозможным состояниям фононной подсистемы. В результате числа заполнения $n_{l\vec{q}}$ заменяются на средние числа заполнения, т.е. на равновесную функцию распределения фононов $\bar{n}_{lq}$. Ввиду бозевского характера статистики фононов

$$\bar{n}_{lq} = n_l(\omega_{ql}) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{ql}}{kT}}-1}. \quad (6.30)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

7. КИНЕТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ

7.I. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ

В данной главе мы будем рассматривать движение электронов под действием внешних полей. Предполагается, что эти возмущающие поля медленно изменяются на расстояниях порядка межатомных. Это дает возможность использовать полуклассическое описание, развитое в гл. 5.

Обратимся к уравнению (5.I9) теории эффективного гамильтониана

$$\left(\mathcal{E}_n(-i\nabla) + W(\vec{r})\right)\Phi = \mathcal{E}\Phi. \qquad (7.I)$$

Потенциал $W(\vec{r})$ медленно изменяется в пространстве. Мысленно разобьем кристалл на области, значительно превышающие объем элементарной ячейки, но достаточно малые по сравнению с размерами кристалла. В каждом таком микрокристалле $W(\vec{r})$ изменяется незначительно и может в его пределах считаться постоянным. Тогда значение $W(\vec{r})$ определит уровень отсчета энергии в данном микрокристалле, и зонная структура в целом сместится на эту величину (рис.7.I).

В этом приближении можно считать, что энергия электрона зависит от пространственной координаты $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\vec{k}\,\vec{r})$, где $\vec{k}$ – волновой вектор; $\vec{r}$ – координата в прямом пространстве. Такая картина изменения энергетических зон в пространстве называется представлением изгиба зон.

Заполнение энергетических уровней электронами происходит в соответствии с принципом Паули. Электроны занимают все нижние уровни вплоть до некоторого максимального по энергии. При этом число заполнения уровня либо нуль, либо единица и не меняется

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

со временем

$$\frac{dn_{\vec{k}}}{dt} = 0. \qquad (7.2)$$

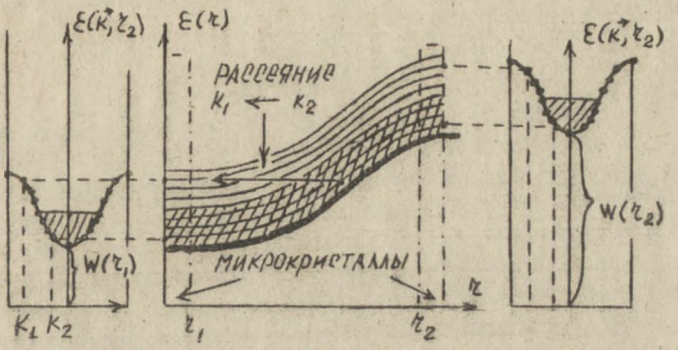


Рис.7.I. Изгиб зон в медленно меняющихся полях. Заштрихованы уровни, занятые электронами в отсутствие быстро меняющихся полей

Так обстояло бы дело, однако лишь в том случае, если бы на электрон действовало только поле $W(\vec{r})$. В кристалле всегда существуют, в принципе, неустранимые быстроменяющиеся во времени и пространстве поля, обусловленные колебаниями решетки, примесями и т.п. Наличие таких полей в уравнении (7.I) не учитывается и может привести к тому, что волновой вектор $\vec{k}$ электрона может измениться скачком. Поэтому число заполнения может стать разным для разных микрокристаллов и изменяется с течением времени. Эти обстоятельства следует учесть, введя зависящее от $\vec{k}$ и времени t число заполнения

$$\frac{dn(\vec{k},\vec{r},t)}{dt} = \left[\frac{\partial n}{\partial t}\right]_{cm}. \qquad (7.3)$$

Член $\left[\frac{\partial n}{\partial t}\right]_{cm}$ описывает изменение числа заполнения за счет быстроменяющихся полей. Удобнее работать не с $n(\vec{k}\vec{r}t)$, а с функцией распределения $f(\vec{k},\vec{r},t)$, связанной с числом заполнения соотношением $n(\vec{k},\vec{r},t) = f(\vec{k},\vec{r},t)\,dV$, где dV -объем микрокристалла, расположенного в точке $\vec{r}$. Полное число электронов в объеме dV равно по определению $2\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} =$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$= 2\sum_k f(\vec{k},\vec{r},t)\,dV$ (двойка учитывает спин). Таким образом, $\rho(\vec{r},t) = 2\sum_k f(\vec{k},\vec{r},t)$ - плотность электронов. $f(\vec{k},\vec{r},t)$ можно интерпретировать как плотность вероятности заполнения k-го уровня в точке $\vec{r}$. Уравнение для $f(\vec{k},\vec{r},t)$ записывается аналогично (7.3)

$$\frac{df(\vec{k},\vec{r},t)}{dt} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm}. \qquad (7.4)$$

$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm}$ описывает изменение f за счет столкновений и носит название интеграла столкновений.

Введение функции распределения для описания неравновесных состояний электрона в кристалле требует одновременного определения координаты и (квази) импульса, т.е. является классическим описанием. Это накладывает определенные условия на характерные масштабы изменения поля $W(\vec{r})$. А именно, для того, чтобы рассматривать энергии электронов с точностью большей, чем характерная тепловая энергия k_0T (T - температура; k_0 - постоянная Больцмана), необходимо, чтобы неопределенность в энергии $\Delta\mathcal{E}$ была $\ll k_0T$. Неопределенность в импульсе определится соотношением $\Delta\mathcal{E} = \Delta k\,\hbar^2k/m^*$, следовательно, $\hbar\Delta k \ll k_0Tm^*/\hbar k$. Из соотношения неопределенностей Гайзенберга неопределенность в координате $\Delta r \gtrsim \hbar k/k_0Tm^*$. Для того чтобы рассматривать электрон (полу) классически, необходимо, чтобы размеры волнового пакета электрона Δr были значительно меньше характерных длин δr, на которых существенно изменяется потенциал внешнего поля $W(\vec{r})$; итак, $\delta r \gg \hbar k/k_0Tm^*$.

Будем полагать эти условия выполненными и обратимся к уравнению (7.4). Учитывая возможную неявную зависимость $f(\vec{k},\vec{r},t)$ от времени через $\vec{k}$ и $\vec{r}$, перепишем (7.4) в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}}\dot{\vec{r}} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}}\dot{\vec{k}} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm}. \qquad (7.5)$$

Точка означает дифференцирование по времени.

Поскольку $\dot{\vec{r}} = \vec{V}$ и $\hbar\dot{\vec{k}} = \vec{F}$ (см. 5.36), где $\vec{V}$ и $\vec{F}$ - соответственно скорость электрона и внешняя сила, то

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{V}\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{1}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial \vec{k}}\vec{F} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm}. \qquad (7.6)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Уравнение (7.6) известно в кинетической теории как уравнение Больцмана.

7.2. СТРУКТУРА ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ

По смыслу своего введения $\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{ст}$ – это изменение числа частиц в состоянии $\vec{k}$ в единице объема прямого пространства в единицу времени. Пусть задана вероятность $W_{\vec{k}\vec{k}'}$ перехода электрона из состояния $\vec{k}$ в состояние $\vec{k}'$ в единицу времени. Из состояния $\vec{k}$ при условии, что оно было занято электроном, в состояние $\vec{k}'$ при условии, что оно было свободно, в единицу времени в единицу объема перейдет $W_{\vec{k}\vec{k}'} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}'})$ частиц. В обратном направлении перейдет $W_{\vec{k}'\vec{k}} f_{\vec{k}'} (1 - f_{\vec{k}})$ частиц. Нас интересует изменение числа частиц в заданном состоянии $\vec{k}$, поэтому необходимо просуммировать по всевозможным конечным состояниям, тогда

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{ст} = \sum_{\vec{k}'} \left[W_{\vec{k}'\vec{k}} f_{\vec{k}'} (1 - f_{\vec{k}}) - W_{\vec{k}\vec{k}'} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}'}) \right] \quad (7.7)$$

Микроскопическая вероятность в квантовой механике обладает свойством $W_{\vec{k}\vec{k}'} = W_{\vec{k}'\vec{k}}$, **если рассеяние является упругим. Тогда**

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{ст} = \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{k}'} (f_{\vec{k}'} - f_{\vec{k}}). \quad (7.8)$$

Рассмотрим некоторые свойства $\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{ст}$. Пусть $f_{\vec{k}} = f(\varepsilon_{\vec{k}})$, где $\varepsilon_{\vec{k}}$ – энергия. Для скалярного закона дисперсии $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ это означает, что $f_{\vec{k}} = f(|\vec{k}|)$. В процессах упругого рассеяния сохраняется энергия $\varepsilon_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}'}$, тогда $f_{\vec{k}} = f_{\vec{k}'}$; как видно из (7.8), в этом случае $\left[\partial f/\partial t\right]_{ст} = 0$. Именно такой зависимостью от $\vec{k}$ обладает равновесная функция распределения электронов по энергиям (распределение Ферми–Дирака)

$$f^0_{\vec{k}} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \zeta}{k_0 T}} + 1} \quad (7.9)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

ζ – химический потенциал, T – температура. В случае малых отклонений от равновесия естественно искать функцию распределения в виде

$$f(\vec{k},\vec{r},t) = f^{\circ}_{\vec{k}} + g(\vec{k},\vec{r},t), \qquad (7.10)$$

где g – малая добавка. Нетрудно видеть, что

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm} = -\sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{k}'}\left(g_{\vec{k}} - g_{\vec{k}'}\right). \qquad (7.11)$$

Часто удобнее в качестве начального приближения выбирать не (7.9), а так называемую локально равновесную функцию распределения $f^{L}(\vec{k}\vec{r})$. Вводится она из следующих соображений: разобьем опять кристалл на участки, малые в макроскопическом масштабе, но значительно превышающие межатомное расстояние. Можно мыслить себе такие условия, при которых в каждом микрокристалле устанавливается равновесие со своими значениями T и ζ. В соседних участках значения T и ζ могут не совпадать, так что $T = T(\vec{r})$ и $\zeta = \zeta(\vec{r})$. О таком неравновесном состоянии кристалла говорят как о локальном равновесии. Локально равновесная функция распределения

$$f^{L}(\vec{k},\vec{r}) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \zeta(\vec{r})}{k_0 T(\vec{r})}} + 1} \qquad (7.12)$$

зависит от $\vec{k}$ только через $\varepsilon_{\vec{k}}$ и для упругих процессов рассеяния обращает интеграл столкновений в нуль. Если искать решение уравнения (7.6) в виде

$$f(\vec{k},\vec{r},t) = f^{L}(\vec{k}\vec{r}) + g(\vec{k},\vec{r},t), \qquad (7.13)$$

мы вновь получаем соотношение (7.11).

7.3. ПРИБЛИЖЕНИЕ ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ

Для ряда приложений полезным является так называемое прибли-

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

жение времени релаксации

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm} = -\frac{f-f^0}{\tau}, \qquad (7.13a)$$

где f^0 – равновесная или квазиравновесная функция распределения; τ – время релаксации. Для выяснения физического смысла величины τ рассмотрим случай отсутствия полей $\vec{F}=0$ и градиентов физических величин $\nabla T = \nabla \zeta = 0$. Тогда уравнение (7.5) сведется к

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f-f^0}{\tau} \qquad (7.14)$$

с решением

$$(f-f^0) = g e^{-t/\tau}. \qquad (7.15)$$

Таким образом, система, выведенная из равновесия на величину g в момент $t=0$ и предоставленная самой себе, приходит в равновесное состояние f^0 (релаксирует) за время τ.

7.4. НЕРАВНОВЕСНАЯ ДОБАВКА К ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

7.4.1. Стационарный случай. Предположим, что в системе, находящейся во внешних полях, устанавливается не зависящее от времени распределение $f(\vec{r}\vec{v}t) = f(\vec{r}\vec{v})$. Условия, при которых эта ситуация реализуется, мы рассмотрим несколько позже.

Будем предполагать наличие в системе изменений химического потенциала и температуры, причем считаем, что эти изменения малы, т.е. малы градиенты $\vec{\nabla}\zeta$ и $\vec{\nabla}T$. В качестве начального приближения к неравновесной функции распределения возьмем локально-равновесную (7.12). Тогда

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \simeq \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right)\left(\vec{\nabla}\zeta - \frac{\zeta-\varepsilon}{T}\vec{\nabla}T\right). \qquad (7.16)$$

Мы пренебрегли пространственной зависимостью g от $\vec{r}$. Условия, при которых это возможно, сформулируем позже. Учитывая, что

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$\frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} = \hbar \vec{v}_{\vec{k}}$, получим из (7.6)

$$\left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right)\vec{v}_{\vec{k}}\left(\nabla\zeta - \vec{F} - \frac{\zeta-\varepsilon}{T}\nabla T\right) + \left(\vec{F}\frac{\partial g}{\partial \vec{k}}\right) = -\frac{g_{\vec{k}}}{\tau}. \qquad (7.17)$$

Рассмотрим вначале систему во внешнем электрическом поле $\vec{F} = -e\vec{E}$, $(-e)$ – заряд частицы (электрона). Будем предполагать g величиной первого порядка малости по величине $\vec{E}$. Тогда в первом приближении можно пренебречь членом $\vec{F}\partial g/\partial \vec{k}$. Заменим в (7.17) $\vec{k}$ на $-\vec{k}$. Поскольку $\vec{v}_{-\vec{k}} = -\vec{v}_{\vec{k}}$, знак левой части изменится на обратный, следовательно, и $g_{\vec{k}} = -g_{-\vec{k}}$. Поэтому $g_{\vec{k}} = (\vec{A}_{\vec{k}}\vec{k})$, где $\vec{A}_{\vec{k}} = \vec{A}_{-\vec{k}}$. Удобно выбрать

$$\vec{A}_{\vec{k}} = \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}\right)\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{k}}). \qquad (7.18)$$

Тогда (7.17) сводится к

$$\vec{v}_{\vec{k}}\left(\nabla\zeta - \vec{F} - \frac{\zeta-\varepsilon}{T}\nabla T\right) = -\frac{(\vec{\chi}\vec{k})}{\tau}. \qquad (7.19)$$

Полагая $\vec{v}_{\vec{k}} = \frac{\hbar\vec{k}}{m^*}$, что справедливо для случая скалярной эффективной массы, а также имея в виду произвольность $\vec{k}$, получим

$$\vec{\chi} = \frac{\hbar\tau}{m^*}\left(\nabla\zeta - \vec{F} - \frac{\zeta-\varepsilon}{T}\nabla T\right). \qquad (7.20)$$

При наличии в системе магнитного поля $\vec{H}$ сила, действующая на квазичастицу, $\vec{F} = -e\vec{E} - \frac{e}{c}[\vec{v}\vec{H}]$, – сила Лоренца. Нетрудно видеть, что при подстановке в (7.19), ввиду $(\vec{v}[\vec{v}\vec{H}]) = 0$, магнитное поле выпадает из рассмотрения. Это явилось следствием того, что мы пренебрегли в (7.17) членом $\partial g/\partial \vec{k}$. Попытаемся учесть его, предполагая, что вид g определяется по-прежнему выражением (7.18) и считая g величиной первого порядка малости по $\vec{E}$ и $\vec{H}$. Тогда

$$\frac{\partial g}{\partial \vec{k}} = -\frac{\partial^2 f^0}{\partial \varepsilon^2}\hbar\vec{v}(\vec{\chi}\vec{k}) - \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\left(\frac{\partial \vec{\chi}}{\partial \varepsilon}\vec{k}\right)\hbar\vec{v} - \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\vec{\chi}. \qquad (7.21)$$

Нетрудно видеть, что с учетом $\left([\vec{v}\vec{H}]\vec{\chi}\right) = \left(\vec{v}[\vec{H}\vec{\chi}]\right)$ уравнение (7.17) перепишется в виде

$$\left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right)\vec{v}\left(\nabla\zeta + e\vec{E} - \frac{\zeta-\varepsilon}{T}\nabla T + \frac{e}{\hbar c}[\vec{H}\vec{\chi}]\right) = -\frac{g}{\tau} \qquad (7.22)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Заметим, что мы вновь пренебрегли членами типа $\vec{F}\cdot\partial g/\partial\vec{\varepsilon}$.

Уравнение (7.20) видоизменяется

$$\dot{\vec{x}} = -\frac{\hbar\tau}{m^*}\left(\vec{p} + \frac{e}{\hbar c}[\vec{H}\vec{x}]\right), \tag{7.23}$$

где

$$\vec{p} = \vec{\nabla}\zeta + e\vec{E} - \frac{\zeta-\varepsilon}{T}\nabla T. \tag{7.24}$$

Решение (7.24) сводится к определению неизвестного вектора из уравнения

$$\vec{x} = \vec{a} + [\vec{b}\vec{x}]. \tag{7.25}$$

Поскольку $(\vec{b}[\vec{b}\vec{x}]) = 0$, то из (7.25) $(\vec{b}\vec{a}) = (\vec{b}\vec{a})$.

Подставляя $\vec{x}$ из (7.25) в векторное произведение, получаем

$$\vec{x} = \vec{a} + [\vec{b}\vec{a}] + [\vec{b}[\vec{b}\vec{x}]]. \tag{7.26}$$

Поскольку $[\vec{b}[\vec{b}\vec{x}]] = \vec{b}(\vec{b}\vec{x}) - \vec{x}b^2$, имеем

$$\vec{x} = \vec{a} + [\vec{b}\vec{a}] + \vec{b}(\vec{b}\vec{a}) - \vec{x}b^2. \tag{7.27}$$

Следовательно,

$$\vec{x} = \frac{\vec{a} + [\vec{b}\vec{a}] + \vec{b}(\vec{b}\vec{a})}{1+b^2}. \tag{7.28}$$

Применив эти рассуждения к (7.23), получим

$$\dot{\vec{x}} = -\frac{\hbar\tau}{m^*}\,\frac{\vec{p} + \frac{e\tau}{cm^*}[\vec{H}\vec{p}] + \frac{e^2\tau^2}{c^2m^{*2}}\vec{H}(\vec{H}\vec{p})}{1 + \frac{e^2\tau^2}{c^2m^{*2}}H^2}. \tag{7.29}$$

7.4.2. Нестационарный случай. Пусть внешняя сила имеет вид

$$\vec{F}(\vec{x},t) = \vec{F}e^{i(\vec{q}\vec{x}-\omega t)}. \tag{7.30}$$

Градиенты температуры и химпотенциала полагаем равными нулю.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Решение для неравновесной добавки ищем в виде

$$g(\vec{k}\vec{r}t) = g(\vec{k}) q_\omega e^{i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)}. \qquad (7.31)$$

Подстановка в уравнение Больцмана дает

$$i(\vec{v}\vec{q})g(\vec{k}) + \frac{\hbar(\vec{F}\vec{k})}{m^*}\frac{\partial f^\circ}{\partial \varepsilon} = \left(i\omega - \frac{1}{\tau}\right)g(\vec{k}). \qquad (7.32)$$

Мы пренебрегаем величиной $\partial g/\partial \vec{k}$, считая ее малой. Из (7.32)

$$g(\vec{k}) = \frac{\hbar\tau(\vec{F}\vec{k})\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)}{m^*\left\{1 - i[\omega - (\vec{v}\vec{q})]\tau\right\}}. \qquad (7.33)$$

Если интерпретировать величину $l = |\vec{v}|\tau$ как среднюю длину свободного пробега электрона между столкновениями, видно, что при $lq \ll 1$ можно пренебречь слагаемым $(\vec{v}\vec{q})\tau$ в знаменателе (7.33), что, очевидно, соответствует пренебрежению пространственной зависимостью $g(\vec{r})$. Следовательно, пространственная зависимость $g(\vec{r})$ несущественна, если длина свободного пробега много меньше длины волны возмущения $2\pi/q$. В этом приближении

$$g(k) = \frac{\hbar\tau(\vec{F}\vec{k})}{m^*(1 - i\omega\tau)}\left(-\frac{\partial f^\circ}{\partial \varepsilon}\right). \qquad (7.34)$$

Нетрудно видеть, что вид неравновесной добавки совпадает с (7.18) (напомним, что $\nabla T = \nabla \xi = 0$) при замене $\vec{\lambda}$ на $\vec{\lambda}(\omega) = \frac{\hbar\tau\vec{F}}{m^*(1 - i\omega\tau)}$. Если $\omega\tau \ll 1$, можно пренебречь и временной зависимостью $g(t)$, опустив второе слагаемое в знаменателе (7.34). Мы видим, что временная зависимость неравновесной добавки несущественна, если характерное время изменения внешней силы $2\pi/\omega$ значительно превышает время релаксации τ.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

7.5. ВЫЧИСЛЕНИЕ ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ

Подставим выражение для g (7.IB) в интеграл столкновений (7.II)

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm} = -\sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k}'}\left(\vec{A}(\varepsilon_k), \vec{k}-\vec{k}'\right). \qquad (7.35)$$

После замены $\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q}$ и перехода от суммирования к интегрированию по формуле (I.2I) получим

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm} = \pm \frac{V}{(2\pi)^3}\int W_{\vec{k},\vec{k}\pm\vec{q}}\left(\vec{A}(\varepsilon), \vec{q}\right) d^3q. \qquad (7.36)$$

Направим ось z сферической системы координат по $\vec{k}$.

Рис.7.2 Система координат для расчета $1/\tau$

Рассмотрим случай изотропного рассеяния, т.е. $W_{\vec{k},\vec{k}\pm\vec{q}}$ не зависит от угла φ. Используем соотношение

$$\cos\alpha = \cos\beta\cos\theta + \sin\beta\sin\theta\sin\varphi. \qquad (7.37)$$

Ввиду $\int_0^{2\pi}\cos\varphi\,d\varphi = 0$ (7.36) перепишется в виде

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm} = \frac{\pm V}{(2\pi)^3}|\vec{A}|\cos\beta \times \times\int W_{\vec{k},\vec{k}\pm\vec{q}}\cos\theta\cdot q\,d^3q. \qquad (7.38)$$

Последнее соотношение, ввиду $(\vec{A}\vec{k}) = |\vec{A}|k\cos\beta$, перепишется в форме

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{cm} = -\frac{\delta\varepsilon}{\tau}, \qquad (7.39)$$

где

$$\frac{1}{\tau} = \mp\frac{V}{(2\pi)^3 k}\int W_{\vec{k},\vec{k}\pm\vec{q}}\cdot q\cos\theta\,d^3q. \qquad (7.40)$$

Таким образом, в случае изотропного упругого рассеяния можно совершенно строго обосновать приближение времени релаксации. Поскольку рассеяние предполагалось упругим еще при выводе (7.II), необходимо, чтобы вероятность рассеяния имела вид

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$W_{\vec{k},\vec{k}\pm\vec{q}} = W(k,q,\cos\theta)\,\delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}\pm\vec{q}}). \qquad (7.41)$$

Для неупругих процессов и анизотропного рассеяния время релаксации ввести, вообще говоря, невозможно.

7.6. ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ ДЛЯ РАССЕЯНИЯ НА АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНАХ

Рассеяние электронов на колебаниях решетки является одним из механизмов, обусловливающих релаксацию. В качестве примера рассмотрим рассеяние на акустических фононах. Согласно (6.29),

$$W^{ak}_{\vec{k},\vec{k}\pm\vec{q}} = \frac{D^2 q}{V_a \rho V}\left(n_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right)\delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\theta}{m^*}\right). \qquad (7.42)$$

Нетрудно видеть, что условия применимости (7.40) выполнены, если принять во внимание, что рассеяние на акустических фононах практически упругое (см. п.6.3). Ограничимся рассмотрением случая достаточно высоких температур, когда число фононов велико $n_{\vec{q}} \gg 1$, в этом случае можно пренебречь слагаемым $\frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}$ в первой скобке. Интегрируя по азимутальному углу, получим

$$\frac{1}{\tau} = \mp \frac{D^2}{4\pi\rho k V_a}\int_0^{\infty} q^3 dq\, n_{\vec{q}} \int_{-\pi}^{\pi} \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos\theta}{m^*}\right)\cos\theta \sin\theta\, d\theta. \qquad (7.43)$$

Опираясь на известные свойства δ-функции, нетрудно увидеть, что интеграл не обращается в нуль только при $q/2k \le 1$. После интегрирования по θ имеем

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* D^2}{4\pi\hbar^2 \rho V_a k^3}\int_0^{2k} n_{\vec{q}}\, q^4 dq. \qquad (7.44)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

в пределе высоких температур, как можно видеть из (6.30),

$$n_{\lambda q} \cong \frac{k_0 T}{\hbar V_z q}. \qquad (7.45)$$

Окончательно получаем

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* \mathcal{D}^2 k_0 T}{\pi \hbar^3 V_z^2 \rho} k = \frac{\sqrt{2}\, m^{*3/2} \mathcal{D}^2 k_0}{\pi \hbar^3 V_z^2 \rho} T \varepsilon^{1/2}. \qquad (7.46)$$

Мы воспользовались соотношением $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$. Таким образом, время релаксации в высокотемпературном пределе

$$\tau = \lambda^{рас} T^{-1} \varepsilon^{-1/2}. \qquad (7.47)$$

В пределе низких температур формула (7.40) неприменима, поскольку рассеяние уже нельзя считать упругим.

7.7. ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ ДЛЯ РАССЕЯНИЯ НА ИОНАХ ПРИМЕСИ

Вероятность рассеяния на ионе с зарядом $\mathcal{Z}$ в борновском приближении есть

$$W_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) \left| \langle \vec{k} | \frac{\mathcal{Z} e^2 e^{-\lambda r}}{r \varepsilon_0} | \vec{k}+\vec{q} \rangle \right|^2. \qquad (7.48)$$

Здесь $|\vec{k}\rangle = V^{-1/2} e^{i\vec{k}\vec{r}}$ - огибающая электронной волновой функции, ε_0 - диэлектрическая проницаемость кристалла. Наличие множителя $e^{\lambda r}$ связано с экранированием иона свободными электронами, λ - так называемый дебаевский параметр экранирования. Матричный элемент $\langle \vec{k} | e^{-\lambda r}/r | \vec{k}+\vec{q} \rangle$ нетрудно вычислить непосредственно

$$\langle \vec{k} | \frac{e^{-\lambda r}}{r} | \vec{k}+\vec{q} \rangle = \frac{1}{V} \int \frac{e^{-\lambda r}}{r} e^{i\vec{q}\vec{r}} d^3 r = \frac{4\pi}{V(q^2+\lambda^2)}. \qquad (7.49)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vtd.lib.tsu.ru

Подставляя (7.49) в выражение для времени релаксации, получим после интегрирования по φ

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{16\pi Z^2 e^4}{\hbar^2 \varepsilon^2 V k} \int_0^{\infty} \frac{q^3 dq}{(q^2+\lambda^2)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^2} + \frac{\hbar^2 q k \cos\theta}{m^2}\right) \cos\theta \sin\theta d\theta. \quad (7.50)$$

Интегрируя по полярному углу θ, получим

$$\frac{1}{\tau} = \frac{8\pi m^2 Z^2 e^4}{\varepsilon^2 \hbar^4 V k^3} \int_0^{2k} \frac{q^3 dq}{(q^2+\lambda^2)^2}. \quad (7.51)$$

Замена $q = 2kx$ приводит к выражению

$$\frac{1}{\tau} = \frac{8\pi m^2 Z^2 e^4}{\varepsilon^2 \hbar^4 V k^3} \int_0^{1} \frac{x^3 dx}{(x^2+\lambda^2/4k^2)^2}. \quad (7.52)$$

Интеграл представляет собой медленно меняющуюся функцию k, поэтому зависимость времени релаксации от k определяется множителем перед интегралом

$$\tau \simeq \lambda^{ион} \varepsilon^{3/2}. \quad (7.53)$$

7.8. СУММАРНОЕ ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ ДЛЯ НЕЗАВИСИМЫХ ПРОЦЕССОВ

В тех случаях, когда рассеяние определяется несколькими различными процессами, которые можно считать независимыми, вероятность суммарного рассеяния определяется сложением вероятностей определенных процессов

$$W_{kk'} = \sum_i W^{(i)}_{kk'}, \quad (7.54)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

где $W_{kk'}^{(i)}$ – вероятности отдельных процессов рассеяния. В соответствии с определением (7.35), для времени релаксации должно быть

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau^{(i)}}, \qquad (7.55)$$

где $\tau^{(i)}$ – времена релаксации для отдельных механизмов рассеяния, если последние можно считать независимыми. В частности, если имеется $N^{ион}$ ионов примеси, то, исходя из результатов предыдущего параграфа и (7.55), обратное время релаксации

$$\frac{1}{\tau_{ион}} \sim \frac{N^{ион}}{Vk^3}, \qquad (7.56)$$

и, следовательно, пропорционально концентрации примесей $N^{ион}/V$. Естественно, что область применимости (7.56) ограничена малыми концентрациями, когда акты рассеяния на отдельных ионах можно считать некоррелированными.

7.9. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

7.9.I. Электропроводность. Исходя из определения функции распределения, плотность тока электронов записывается через функцию распределения $f(\vec{r}\vec{k}t)$ как

$$\vec{j}(\vec{r}t) = -\frac{2e}{V}\sum_k f(\vec{r}\vec{k}t)\vec{V}_{\vec{k}}. \qquad (7.57)$$

Подставив (7.I3), имеем

$$\vec{j} = -\frac{2e}{V}\sum_k g_{\vec{k}}\vec{V}_{\vec{k}}. \qquad (7.58)$$

Заметим, что функция $f^L(\varepsilon_{\vec{k}})\vec{V}_{\vec{k}}$ антисимметрична относительно замены $\vec{k} \to -\vec{k}$, поэтому соответствующее слагаемое в (7.58) выпадает – в состоянии равновесия макроскопические токи отсутствуют. Подставив (7.I8), получим

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\vec{j} = -\frac{2e}{V}\sum_{k}\left(-\frac{\partial f^{1}}{\partial \varepsilon}\right)(\vec{\lambda}\vec{k})\frac{\hbar\vec{k}}{m^{*}}. \qquad (7.59)$$

Рассмотрим случай постоянной температуры в присутствии градиента химического потенциала и электрического поля $\vec{E}$. Тогда

$$\vec{\lambda} = \frac{\hbar\tau}{m^{*}}\left(e\vec{E} + \vec{\nabla}\zeta\right). \qquad (7.60)$$

Ограничимся рассмотрением случая слабого вырождения электронного газа

$$f^{1}(\vec{k}\vec{r}) = e^{\frac{\zeta-\varepsilon_{k}}{k_{0}T}}. \qquad (7.61)$$

Из соотношения $\rho(r,t) = 2\sum_{k} f(\vec{k}\vec{r}t)$ следует

$$\vec{\nabla}\rho \simeq \frac{1}{V}\sum_{k}\vec{\nabla}f^{1}(\vec{k}\vec{r}t) = \frac{\vec{\nabla}\zeta\rho}{k_{0}T}. \qquad (7.62)$$

Мы пренебрегли $\vec{\nabla}g$ как величиной следующего порядка малости по $\vec{\nabla}\zeta$. Подставив в (7.60), получим

$$\vec{\lambda} = -\frac{\hbar\tau e}{m^{*}}\left(\vec{E} + \frac{k_{0}T}{e\rho}\vec{\nabla}\rho\right). \qquad (7.63)$$

Для α -й компоненты вектора плотности тока имеем из (7.59)

$$j_{\alpha} = \sum_{\beta}\sigma_{\alpha\beta}\left(E_{\beta} + \frac{k_{0}T}{e\rho}\frac{\partial P}{\partial x_{\beta}}\right). \qquad (7.64)$$

Здесь

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V}\sum_{k}\frac{2e^{2}\hbar^{2}\tau}{m^{*2}}\left(-\frac{\partial f^{1}}{\partial \varepsilon}\right)k_{\alpha}k_{\beta} \qquad (7.65)$$

– тензор электропроводности. В кристалле кубической симметрии все направления равноправны, поэтому должно быть $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma\delta_{\alpha\beta}$, где $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера.

Тогда

$$\sigma = \frac{1}{3V}\sum_{k}\frac{2e^{2}\hbar^{2}\tau}{m^{*2}}\left(-\frac{\partial f^{1}}{\partial \varepsilon}\right)k^{2} \qquad (7.66)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\vec{j} = \sigma\vec{E} + (-e)(-\mathcal{D})\vec{\nabla}\rho. \qquad (7.67)$$

$\mathcal{D} = \frac{\sigma k_0 T}{e^2 \rho}$ – коэффициент диффузии. Воспользовавшись переходом от суммирования к интегрированию и введя плотность состояний $g(\varepsilon)$ (см. 4.54), получим

$$\sigma = \frac{e^2 \rho}{m^*} \langle \tau \rangle . \qquad (7.68)$$

Здесь угловые скобки означают усреднение

$$\langle a \rangle = \frac{4}{3\rho} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f^4}{\partial \varepsilon}\right) g(\varepsilon)\, \varepsilon\, a(\varepsilon)\, d\varepsilon . \qquad (7.69)$$

ρ – плотность носителей заряда – электронов или дырок.

Предположим вначале, что τ не зависит от ε . Интегрируя по частям, получим

$$-\int_0^\infty \frac{\partial f^4}{\partial \varepsilon} g(\varepsilon)\varepsilon\, d\varepsilon = -f(\varepsilon)\varepsilon g(\varepsilon)\Big|_0^\infty + \int_0^\infty f(\varepsilon)\frac{d(g\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon . \qquad (7.70)$$

Учитывая, что $f(\infty) = 0$, и в случае скалярной эффективной массы $d(g\varepsilon)/d\varepsilon = 3/2\, g(\varepsilon)$, а также

$$\rho = 2\int_0^\infty f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \qquad (7.71)$$

получим

$$\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f^4}{\partial \varepsilon}\right) \varepsilon\, g(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{3\rho}{4} . \qquad (7.72)$$

Отсюда следует, что в этом случае $\langle \tau \rangle = \tau$. Однако, согласно результатам § 7.6, 7.7, τ зависит от энергии $\tau(\varepsilon) = \lambda T^p \varepsilon^q$, где λ – константа. Подстановка $x = \varepsilon / k_0 T$ в (7.69) дает с учетом (7.71)

$$\langle \tau \rangle = T^{p+q} B , \qquad (7.73)$$

где в случае классической статистики (7.61)

$$B = \frac{4\lambda}{3} \int_0^\infty e^{-x} x^{q+1} g(x) dx \Big/ \int_0^\infty e^{-x} g(x) dx . \qquad (7.74)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Выражения (7.68),(7.73) определяют температурную зависимость электропроводности. С использованием (7.47), (7.53, (7.55) получим, что при учете рассеяния на фононах и примеси в невырожденном случае проводимость достаточно сложным образом зависит от температуры

$$\frac{1}{\sigma} \sim \frac{T^{3/2}}{\lambda^{фон}} + \frac{T^{-1/2}}{\lambda^{пов}}. \qquad (7.75)$$

Отметим, что все выводы этого параграфа могут быть повторены для случая переменного электрического поля (7.34),при этом электропроводность оказывается зависящей от частоты

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 \rho}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 - i\omega\tau} \right\rangle. \qquad (7.76)$$

В простейшем случае, когда τ не зависит от энергии,

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}. \qquad (7.77)$$

Здесь σ_0 - статическая электропроводность (7.68).

7.9.2. Термоэлектрический эффект. Рассмотрим ситуацию, когда в кристалле присутствует градиент температуры $\vec{\nabla} T$. В этом случае согласно (7.20)

$$\vec{\chi} = -\frac{\hbar\tau}{m^*}\left(e\vec{E} - \frac{\mathcal{E}-\varepsilon}{T}\vec{\nabla} T\right). \qquad (7.78)$$

Подставив в выражение для тока (7.59), получим

$$\vec{j} = -\frac{\vec{\nabla} T}{T}\frac{e\rho}{m^*}\left\langle(\mathcal{E}-\varepsilon)\tau\right\rangle + \sigma\vec{E}. \qquad (7.79)$$

При разомкнутой цепи $\vec{j}=0$ получим

$$\vec{E} = \frac{\left\langle(\mathcal{E}-\varepsilon)\tau\right\rangle}{T}\vec{\nabla} T \frac{e\rho}{m^*\sigma}. \qquad (7.80)$$

При наличии градиента температуры в образце возникает, таким образом, электрическое поле.

7.9.3. Эффект Холла. Предположим, что в образце кристалла одновременно существуют электрическое $\vec{E}$ и магнитное $\vec{H}$ поля,

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

причем $\vec{E} \perp \vec{H}$. Градиенты $\vec{\nabla} T$ и $\vec{\nabla} \zeta$ считаем отсутствующими. В системе координат с осью z, параллельной $\vec{H}$, имеем из (7.29)

$$\lambda_x = \frac{\hbar \tau e}{m^*} \frac{\left(E_x + \frac{e\tau}{cm^*} E_y E_z\right)}{1 + \frac{e^2\tau^2}{m^{*2}c^2} H^2},$$

$$\lambda_y = \frac{\hbar \tau e}{m^*} \frac{\left(E_y - \frac{e\tau}{cm^*} E_x E_z\right)}{1 + \frac{e^2\tau^2}{m^{*2}c^2} H^2}, \qquad (7.81)$$

$$\lambda_z = 0.$$

Подставим (7.81) в выражение для тока (7.59) и, повторяя рассуждения п.7.9.I, получим

$$j_x = \frac{\rho e^2}{m^*} (a E_x + b E_y),$$

$$j_y = \frac{\rho e^2}{m^*} (a E_y - b E_x), \qquad (7.82)$$

$$j_z = 0,$$

где

$$a = \left\langle \frac{\tau}{1 + \frac{e^2\tau^2}{m^{*2}c^2} H^2} \right\rangle,$$

$$b = \frac{e H_z}{c m^*} \left\langle \frac{\tau^2}{1 + \frac{e^2\tau^2}{m^{*2}c^2} H^2} \right\rangle. \qquad (7.83)$$

При выводе (7.82) мы учли, что члены, содержащие $\kappa_\alpha \kappa_\beta$, при суммировании по $\vec{\kappa}$ должны при $\alpha \neq \beta$ исчезать в силу кубической симметрии.

В экспериментальной ситуации ток поддерживается вдоль одной из осей, например, $j_x = j$, $j_y = 0$. Тогда из (7.82) следует

$$j = \frac{\rho e^2}{m^*} \frac{a^2 + b^2}{a} E_x,$$

$$E_y = \frac{m^*}{\rho e^2} \frac{b}{a^2 + b^2} j.$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

В эксперименте наблюдается возникновение в образце, к которому приложены электрическое поле E_x и магнитное поле H_z, дополнительного электрического поля E_y, перпендикулярного как току j_x (и полю E_x), так и магнитному полю – эффект Холла.

Помимо рассмотренных простых ситуаций возможны различные другие эффекты, связанные с одновременным действием на образец внешних электрических и магнитных полей, градиентов температур.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

8. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

8.1. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ОПТИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД

Система уравнений Максвелла для электромагнитных волн в сплошной среде имеет вид

$$rot\,\vec{E} = \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \qquad div\,\vec{D} = 0,$$
$$rot\,\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \qquad div\,\vec{B} = 0. \tag{8.1}$$

Здесь $\vec{D}, \vec{B}$ - векторы электрической и магнитной индукции, $\vec{E}, \vec{H}$ - напряженности электрического и магнитного полей, $\vec{j}$ - электрический ток, c - скорость света. Связь между индукциями и напряженностями для слабых полей можно считать линейной

$$\vec{D} = \hat{\varepsilon}\vec{E}; \quad \vec{B} = \hat{\mu}\vec{H}; \quad \vec{j} = \hat{\sigma}\vec{E}. \tag{8.2}$$

Здесь диэлектрическая проницаемость $\hat{\varepsilon}$, магнитная проницаемость $\hat{\mu}$, проводимость $\hat{\sigma}$ являются интегральными операторами, например,

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \int \varepsilon(\vec{r},\vec{r}',t-t')\vec{E}(\vec{r}',t')\,d\vec{r}'\,dt'. \tag{8.3}$$

$\vec{r}$ - пространственная переменная, t - время. Если длина световой волны значительно превышает постоянную решетки, что справедливо для света в видимом и инфракрасном диапазоне, то микроскопической неоднородностью кристалла можно пренебречь и считать связь индукций и полей локальной

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \int \varepsilon(t-t')\vec{E}(\vec{r},t')\,dt'. \tag{8.4}$$

Ниже будем считать, что все величины - плоские волны

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\begin{Bmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \\ \vec{\mathcal{D}} \\ \vec{B} \\ \vec{j} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vec{E}_{k\omega} \\ \vec{H}_{k\omega} \\ \vec{\mathcal{D}}_{k\omega} \\ \vec{B}_{k\omega} \\ \vec{j}_{k\omega} \end{Bmatrix} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} . \tag{8.5}$$

Подстановка (8.5) в (8.4) дает

$$\vec{\mathcal{D}}_{k\omega} = \varepsilon(\omega)\vec{E}_{k\omega} , \tag{8.6}$$

где

$$\varepsilon(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int \varepsilon(t) e^{-i\omega t} dt . \tag{8.7}$$

Аналогично

$$\vec{B}_{k\omega} = \mu(\omega)\vec{H}_{k\omega} ; \quad \vec{j}_{k\omega} = \sigma(\omega)\vec{E}_{k\omega} . \tag{8.8}$$

Мы ограничимся рассмотрением немагнитных кристаллов, где $\mu \simeq 1$.

Подставим (8.5) в уравнение Максвелла (8.I) с учетом (8.6), (8.8), получим

$$\begin{aligned} i[\vec{k}\vec{E}] &= \frac{i\omega\vec{H}}{c} ; \qquad (\vec{k}\vec{E}) = 0; \\ i[\vec{k}\vec{H}] &= -\frac{i\omega}{c}\tilde{\varepsilon}(\omega)\vec{E}; \quad (\vec{k}\vec{H}) = 0. \end{aligned} \tag{8.9}$$

Мы воспользовались определениями операций ротора и дивергенции $rot\vec{A} = [\nabla\vec{A}]$; $div\vec{A} = (\nabla\vec{A})$ и ввели обозначение

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon(\omega) + \frac{4\pi i\sigma(\omega)}{\omega} . \tag{8.I0}$$

Для упрощения записи индексы $\vec{k}\omega$ при напряженностях полей опущены.

Решение системы (8.9) осуществляется подстановкой первого из уравнений в последнее и гласит

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\tilde{\varepsilon}(\omega) . \tag{8.II}$$

Величина $\sqrt{\tilde{\varepsilon}(\omega)}$ носит название комплексного показателя преломления света. Выделим в ней вещественную и мнимую части

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\sqrt{\tilde{\varepsilon}(\omega)} = n + i\varkappa . \qquad (8.12)$$

Предположим, что свет распространяется по оси z координатной системы, которая в свою очередь является нормалью к поверхности кристалла

$$\vec{E} = \vec{E}_{z\omega}\, e^{i(kz - \omega t)} . \qquad (8.13)$$

Согласно (8.11) k выражается через комплексный показатель преломления

$$\vec{E} = \vec{E}_{z\omega}\, e^{i\left(\frac{n\omega}{c}z - \omega t\right)} e^{-\frac{\varkappa\omega z}{c}} . \qquad (8.14)$$

Величина $v = \frac{c}{n}$ есть скорость света в кристалле. Амплитуда волны уменьшается в глубь кристалла, т.е. имеет место поглощение света. Поскольку в эксперименте измеряется изменение интенсивности света, которое пропорционально $|\vec{E}|^2$, удобно характеризовать поглощение света величиной

$$\gamma = \frac{2\varkappa\omega}{c} . \qquad (8.15)$$

Отражение света характеризуется величиной [1]

$$R = \left| \frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}} - 1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}} + 1} \right| . \qquad (8.15а)$$

8.2. ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Воспользуемся выражением для комплексной электропроводности, полученным в п.7.9.1, считая для простоты время релаксации не зависящим от энергии,

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} . \qquad (8.16)$$

Тогда

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon(\omega) + \frac{4\pi i\sigma_1}{\omega} - \frac{4\pi\sigma_2}{\omega} = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 , \qquad (8.17)$$

где

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

$$\sigma_1 = \frac{\sigma_0}{(1+\omega^2\tau^2)}; \quad \sigma_2 = \frac{\sigma_0\omega\tau^2}{1+\omega^2\tau^2}. \qquad (8.18)$$

В полупроводниках $\varepsilon(\omega)$ - большая величина, поэтому можно считать $\varepsilon_2 \ll \varepsilon_1$, тогда

$$\sqrt{\tilde{\varepsilon}} = \sqrt{\varepsilon_1}\cdot\sqrt{1+\frac{i\varepsilon_2}{\varepsilon_1}} \approx \sqrt{\varepsilon_1} + \frac{i\varepsilon_2}{2\sqrt{\varepsilon_1}}. \qquad (8.19)$$

Для коэффициента поглощения имеем

$$\gamma = \frac{4\pi\sigma_1}{nc} = \frac{4\pi\rho e^2\tau}{cnm^*(1+\omega^2\tau^2)}. \qquad (8.20)$$

Здесь $n = \sqrt{\varepsilon_1}$. Как видно, коэффициент поглощения пропорционален времени релаксации τ. Это совершенно естественно, поскольку τ характеризует скорость передачи энергии от электронов фононам и примесям. Таким образом, приобретенная от световой волны электронами энергия передается фононам, т.е. переходит, в конечном счете, в тепловую энергию колебаний решетки.

Рассмотрим случай $\omega\tau \gg 1$, тогда для рассматриваемого случая слабого поглощения $\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$ можно считать приближенно

$$\varepsilon_1 = \varepsilon(\omega)\left(1-\frac{4\pi\sigma_0\tau^2}{\varepsilon(\omega)(1+\omega^2\tau^2}\right) \cong \varepsilon(\omega)\left(1-\frac{4\pi\sigma_0}{\varepsilon(\omega)\omega^2}\right). \qquad (8.21)$$

Частотная зависимость $\varepsilon(\omega)$ слаба, считая $\varepsilon(\omega) \cong \varepsilon_0$, имеем

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_0\left(1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right), \qquad (8.22)$$

где $\omega_p^2 = \frac{4\pi\sigma_0}{\varepsilon_0} = \frac{4\pi\rho e^2}{\varepsilon_0 m^*}$ - так называемая плазменная частота.

Нетрудно видеть, что при $\omega^2 < \omega_p^2$ коэффициент отражения, рассчитываемый по формуле (8.15а), $R = 1$, т.е. имеет место полное отражение света. При $\omega^2 > \omega_p^2$ коэффициент отражения меньше единицы и убывает с ростом частоты (рис.8.1).

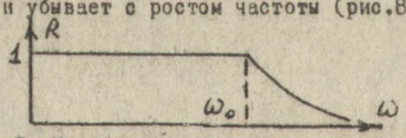


Рис.8.1. Коэффициент отражения света

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

8.3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕТА С КОЛЕБАНИЯМИ РЕШЕТКИ В ПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Воспользуемся выражением для диэлектрической проницаемости в области частот, характерной для решеточных колебаний,

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\Omega^2(\varepsilon_\infty - \varepsilon_0)}{\Omega^2 - \omega^2}. \qquad (8.23)$$

Вкладом от проводимости $\sigma(\omega)$ в этой области можно пренебречь. Уравнение (8.II) перепишется тогда в виде

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_\infty + \frac{\Omega^2(\varepsilon_\infty - \varepsilon_0)\omega^2}{c^2(\Omega^2 - \omega^2)}. \qquad (8.24)$$

Разрешая это биквадратное относительно ω уравнение, получим

$$\omega_{1,2}(k) = \sqrt{\frac{c^2k^2 + \Omega^2\varepsilon_0}{2\varepsilon_\infty} \pm \sqrt{\frac{(c^2k^2 + \Omega^2\varepsilon_0)^2}{4\varepsilon_\infty^2} - \frac{c^2\Omega^2k^2}{\varepsilon_\infty}}}. \qquad (8.25)$$

Мы видим, что закон дисперсии световых колебаний в кристалле отличается от имеющего место в вакууме закона $\omega = ck$ и имеет две ветви, разделяемые запрещенной зоной (рис.8.2).

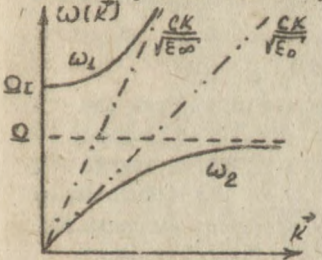


Рис.8.2. Дисперсия поляритонов в полярном кристалле

В пределе $k \to 0$ частота $\omega \to \Omega_1$ - частота продольного фонона, $\omega_2 \to ck/\sqrt{\varepsilon_0}$ - закон дисперсии света в однородной среде с показателем преломления $\sqrt{\varepsilon_0}$. В пределе $k \to \infty$ частота $\omega_1 = ck/\sqrt{\varepsilon_\infty}$ - частота света в среде с показателем преломления $\sqrt{\varepsilon_\infty}$, частота $\omega_2 \to \Omega$ - частота поперечных фононов. Образование "зонной структуры" для световых волн можно представить следующим образом. Если бы свет не взаимодействовал с колебаниями решетки, то на рис.8 I

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

мы имели бы пересекающиеся прямые для частоты света $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon_\infty}$ (штрих-пунктир) и поперечной частоты фононов Ω (штриховая линия). Наличие взаимодействия приводит к снятию вырождения и расщепляет уровни, приводя к образованию закона дисперсии, изображенного сплошными линиями. Отсюда становится ясным, что частоты (8.25) относятся к нормальным колебаниям, представляющим собой смесь электромагнитных волн и поляризационных колебаний решетки. Такие квазичастицы носят название поляритонов.

Наличие "запрещенной зоны" $\Omega_L - \Omega$ означает, что свет с такой частотой не может распространяться в кристалле. Действительно, как нетрудно видеть из (8.23), $\varepsilon(\omega) < 0$ в области между Ω и Ω_L, поэтому коэффициент отражения (18а) для этих частот равен единице, т.е. свет полностью отражается от кристалла (рис.8.3).

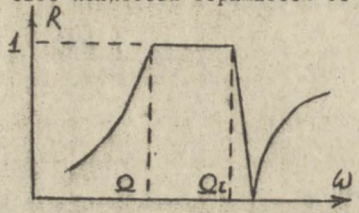


Рис.8.3. Коэффициент отражения света в инфракрасном диапазоне

8.4. ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ (МЕЖДУЗОННОЕ) ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ИЗОЛЯТОРАХ И ПОЛУПРОВОДНИКАХ

8.4.1. Прямые переходы. В этом параграфе мы рассмотрим такие взаимодействия света с кристаллами, при которых поглощение фотонов переводит электроны в более высокие по энергии зонные состояния. При этом будем полагать, что исходное и конечное состояния электронов лежат в разных зонах. Коэффициент поглощения определим как отношение поглощенной энергии в единицу времени к полной энергии световой волны. Можно показать, что такое определение γ совпадает с введенным в п.8.1.

Число поглощенных квантов в единицу времени при переходе электрона из состояния валентной зоны с волновой функцией Ψ_{vk}

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

в состояние в зоне проводимости $\Psi_{c\vec{k}}$ определяется величиной $W^{cv}_{\vec{k}\vec{k}'} f_{v\vec{k}}(1-f_{c\vec{k}'})$, где

$$W^{cv}_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|<\Psi_{c\vec{k}}|W^{int}|\Psi_{v\vec{k}}>\right|^2 \delta(\varepsilon_{c\vec{k}'}-\varepsilon_{v\vec{k}}-\hbar\omega) \quad (8.26)$$

– квантово-механическая вероятность перехода в единицу времени, W^{int} – оператор взаимодействия света с электроном; $\varepsilon_{v\vec{k}}, \varepsilon_{c\vec{k}}$ – зонные энергии электронов; ω – частота фотона, $f_{c\vec{k}}, f_{v\vec{k}}$ – числа заполнения состояний $\Psi_{c\vec{k}}$ и $\Psi_{v\vec{k}}$. Рассмотрим вначале случай перехода из полностью заполненной валентной зоны $f_{v\vec{k}}=1$ в пустую зону проводимости $f_{c\vec{k}}=0$. Тогда $f_{v\vec{k}}(1-f_{c\vec{k}}) = f_{v\vec{k}}-f_{c\vec{k}}=1$. Общая поглощенная энергия в единице объема равна

$$Q_{погл} = \frac{\hbar\omega}{V}\sum_{\vec{k}\vec{k}'} W^{cv}_{\vec{k}\vec{k}'}(f_{v\vec{k}}-f_{c\vec{k}'}). \quad (8.27)$$

V – объем кристалла.

Определим вид W^{int}. Будем исходить из уравнения Шредингера для кристалла в электромагнитном поле с гамильтонианом

$$H = \frac{(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + V_{кр}(\vec{r}). \quad (8.28)$$

Здесь $\vec{p}=-i\hbar\vec{\nabla}$ – оператор импульса; $\vec{A}$ – векторный потенциал электромагнитного поля; m – масса свободного электрона; $V_{кр}(\vec{r})$ – кристаллический потенциал. Раскроем скобки в (8.28) и в калибровке $(\vec{\nabla}\vec{A})=0$ получим

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V_{кр}(\vec{r}) - \frac{e(\vec{A}\vec{p})}{mc} + \frac{e^2A^2}{2mc^2}. \quad (8.29)$$

Поскольку интенсивность света $\sim|\vec{A}|^2$, то для слабых полей $|\vec{A}|^2 \ll |\vec{A}|$, поэтому последним членом пренебрегаем. Первые два слагаемых представляют собой гамильтониан электрона в отсутствие поля, соответственно для оператора возмущения имеем

$$W^{int} = -\frac{e(\vec{A}\vec{p})}{mc}. \quad (8.30)$$

Рассчитаем матричный элемент, входящий в $W_{\vec{k}\vec{k}'}$. Для этого

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Запишем векторный потенциал в виде плоской волны

$$\vec{A} = A_0 \vec{\xi} e^{i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)}. \qquad (8.31)$$

$\vec{\xi}$ – единичный вектор поляризации волны. Представим волновые функции $\Psi_{v\vec{k}}$, $\Psi_{c\vec{k}}$ в блоховском виде

$$\Psi_{n\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}); \quad U_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_e) = U_{n\vec{k}}(\vec{r}). \qquad (8.32)$$

Тогда

$$\langle \Psi_{c\vec{k}'} | e^{i\vec{q}\vec{r}} \hat{\vec{p}} | \Psi_{v\vec{k}} \rangle = \int U^*_{c\vec{k}'}(\vec{r}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \hat{\vec{p}} e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n\vec{k}}(\vec{r}) d^3r. \qquad (8.33)$$

Длина волны света в видимом диапазоне значительно превышает размеры элементарной ячейки кристалла $|\vec{q}| \ll 1/a$. Поэтому можно разложить $e^{i(\vec{q}\vec{r})} = 1 + i(\vec{q}\vec{r}) + \dots$ и ограничиться первым членом

$$\langle \Psi_{c\vec{k}'} | e^{i\vec{q}\vec{r}} \hat{\vec{p}} | \Psi_{v\vec{k}} \rangle \approx \int U^*_{c\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \hat{\vec{p}} e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{v\vec{k}} d^3r. \qquad (8.34)$$

Сделаем подстановку $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{R}_e$, где $\vec{R}_e$ – вектор решетки; с учетом периодичности $U_{c\vec{k}}(r)$, $U_{v\vec{k}}(r)$ получим

$$\langle \Psi_{c\vec{k}'} | e^{i\vec{q}\vec{r}} \hat{\vec{p}} | \Psi_{v\vec{k}} \rangle \approx e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}_e} \int U^*_{c\vec{k}'}(\vec{r}') e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} \hat{\vec{p}} e^{i\vec{k}\vec{r}'} U_{v\vec{k}}(\vec{r}') d\vec{r}' \qquad (8.35)$$

Ввиду произвольности $\vec{R}_e$ мы можем просуммировать по всем $\vec{e}$ и, разделив на N (число ячеек в кристалле), получим

$$\langle \Psi_{c\vec{k}'} | e^{i\vec{q}\vec{r}} \hat{\vec{p}} | \Psi_{v\vec{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{e}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}_e} \int U^*_{c\vec{k}'}(\vec{r}') e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} \hat{\vec{p}} e^{i\vec{k}\vec{r}'} U_{v\vec{k}} d\vec{r}'. \qquad (8.36)$$

Используя соотношение (7.13), имеем

$$W^{cv}_{\vec{k}\vec{k}'} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} |(\vec{p}^{cv}_{\vec{k}} \vec{\xi})|^2 A_0^2 e^2 \delta(\varepsilon_{c\vec{k}} - \varepsilon_{v\vec{k}} - \hbar\omega), \qquad (8.37)$$

$$\vec{p}^{cv}_{\vec{k}} = \int U^*_{c\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{\vec{p}} e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{v\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r}. \qquad (8.38)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Ввиду наличия $\delta_{\vec{k}\vec{k}'}$ электрон переходит из зоны v в зону c в одной точке зоны Бриллюэна $\vec{k} = \vec{k}'$. Такие переходы называются прямыми. Предполагая слабую зависимость $\vec{P}^{cv}_{\vec{k}}$ от $\vec{k}$ (детальные расчеты подтверждают это предположение), разложим $\vec{P}^{cv}_{\vec{k}}$ по $\vec{k}$

$$\vec{P}^{cv}_{\vec{k}} = \vec{P}^{cv}_{0} + \vec{P}^{cv(1)}_{,k} + \dots \qquad (8.39)$$

Ограничиваясь первым членом разложения, получим

$$Q_{погл} = \frac{\hbar\omega}{V} \left|\vec{P}^{cv}_{0}\vec{\varphi}\right|^2 A_0^2 e^2 \sum_{\vec{k}} (f_{v\vec{k}} - f_{c\vec{k}})\,\delta(\varepsilon_{c\vec{k}} - \varepsilon_{v\vec{k}} - \hbar\omega) \qquad (8.40)$$

Электрическое поле $\vec{E}$ световой волны связано с векторным потенциалом соотношением

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = +i\frac{\omega}{c}\vec{A}. \qquad (8.41)$$

Тогда

$$|A_0|^2 = \frac{c^2}{\omega^2}|\vec{E}|^2. \qquad (8.42)$$

Энергия падающей волны $Q_{пад} \sim |\vec{E}|^2$. Тогда

$$\gamma = \frac{Q_{погл}}{Q_{пад}} = a\frac{\left|\vec{P}^{cv}_{c}\vec{\varphi}\right|^2}{\omega} \sum_{\vec{k}} (f_{v\vec{k}} - f_{c\vec{k}})\,\delta(\varepsilon_{c\vec{k}} - \varepsilon_{v\vec{k}} - \hbar\omega) \qquad (8.43)$$

Все возникающие здесь константы включены в a.

Переходя от суммирования к интегрированию по формуле (1.21) для случая скалярных эффективных масс, считая, что валентная зона полностью заполнена $f_v = 1$ и зона проводимости свободна $f_c = 0$; $f_v - f_c = 1$, получим

$$\gamma = \frac{a\left|\vec{P}^{cv}_{0}\vec{\varphi}\right|^2}{\omega} \int \delta\left(\varepsilon_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*_r} - \hbar\omega\right)(d\vec{k}). \qquad (8.44)$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Здесь $\mathcal{E}_g$ – ширина запрещенной зоны $\frac{1}{m_z^2} = \frac{1}{m_c^2} - \frac{1}{m_v^2}$.

Подобный интеграл мы рассматривали при вычислении плотности состояний (4.59). Воспользуемся **полученным там результатом**

$$\gamma \sim \begin{cases} \dfrac{\sqrt{\hbar\omega - \mathcal{E}_g}}{\omega} ; & \hbar\omega > \mathcal{E}_g ; \\ 0 ; & \hbar\omega < \mathcal{E}_g . \end{cases} \qquad (8.45)$$

В том случае, когда первый член разложения в (8.39) обращается в нуль, необходимо учитывать член следующего порядка малости по κ. В этом случае переход называется запрещенным. Для запрещенного перехода, как нетрудно видеть,

$$\gamma = a \frac{|\vec{P}_{cv}^{(1)}\,\vec{\xi}|^2}{\omega} \int \kappa^2 \delta\left(\mathcal{E}_g + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m_z^2} - \hbar\omega\right) d^3k . \qquad (8.46)$$

Путем перехода от интегрирования по $\vec{k}$ к интегрированию по ω, аналогично тому, как это делается в п.4.6, получим

$$\gamma \sim \begin{cases} \dfrac{(\hbar\omega - \mathcal{E}_g)^{3/2}}{\omega} ; & \hbar\omega > \mathcal{E}_g . \\ 0 & \hbar\omega < \mathcal{E}_g . \end{cases} \qquad (8.47)$$

В заключение этого параграфа обратим внимание на изменение знака у коэффициента поглощения в том случае, когда валентная зона свободна $f_{v\vec{k}} = 0$, а зона проводимости заполнена $f_{c\vec{k}} = 1$. Тогда $f_v - f_c = -1$, в соответствии с этим $\gamma < 0$, т.е. интенсивность света возрастает в глубь кристалла, – имеет место усиление вместо поглощения. На этом эффекте основан принцип действия твердотельных усилителей и генераторов света.

8.4.2. Непрямые переходы

Рассмотрим типичную для многих кристаллов зонную структуру, изображенную на рис.8.4. Минимумы зоны проводимости расположены в точках $\vec{k}_0$ и $\vec{k}_0'$. Максимум валентной зоны – в точке $\vec{k}_0$.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

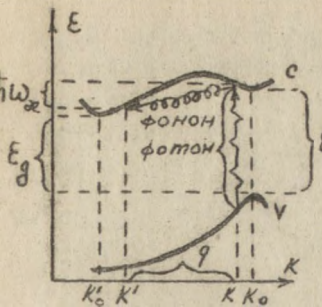


Рис.8.4. Поглощение света с участием фонона (непрямые переходы)

Минимальная ширина запрещенной зоны определяется в этом случае разницей в энергиях минимума $\mathcal{E}_{c\vec{k}_0'}$ и максимума $\mathcal{E}_{v\vec{k}_0}$. Согласно (8.37) переходы под действием света должны осуществляться в одной и той же точке зоны Бриллюэна, т.е. поглощение в соответствии с (8.47) должно начинаться при частоте света $\hbar\omega = \mathcal{E}_0$, которая определяется разницей в энергиях минимума $\mathcal{E}_{c\vec{k}_0}$ и максимума $\mathcal{E}_{v\vec{k}_0}$. Эксперимент показывает, что поглощение начинается при меньших частотах $\hbar\omega = \mathcal{E}_g$. Такое поглощение можно описать, если учесть возможность участия в процессе поглощения наряду с фотоном и электроном третьей частицы, а именно фонона. Процесс поглощения можно представить как двухступенчатый переход: прямой переход (виртуальный) $\mathcal{E}_{v\vec{k}} \to \mathcal{E}_{c\vec{k}}$ с поглощением фотона, затем переход между минимумами $\mathcal{E}_{c\vec{k}} \to \mathcal{E}_{c\vec{k}'}$ с испусканием фонона. Для того чтобы выполнялся закон сохранения импульса, необходимо, чтобы испущенный фонон имел импульс $\vec{k}' - \vec{k}$. Такой переход, в отличие от изучавшегося нами в п.8.4.2, носит название непрямого перехода.

Для вычисления вероятности непрямого перехода в гамильтониане следует учесть взаимодействие электрона со светом и фононами

$$W^{int} = W^{фот} + W^{фон}, \qquad (8.48)$$

где $W^{фот}$ и $W^{фон}$ определяются соответственно выражениями (8.30) и (6.II).

Поскольку процессы первого порядка запрещены правилом отбора (8.37), вероятность перехода определяется вторым порядком теории возмущений

$$W_{v\vec{k}c\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k''n_{x\vec{q}}} \frac{|\langle v\vec{k}|W^{фот}|c\vec{k}''\rangle|^2 \cdot |\langle c\vec{k}''n_{x\vec{q}}|W^{фон}|c\vec{k}'n_{x\vec{q}} + \tfrac{1}{2} \mp \tfrac{1}{2}\rangle|^2}{\times} \qquad (8.49)$$

$$\times\ \delta(\mathcal{E}_{c\vec{k}'} - \mathcal{E}_{v\vec{k}} - \hbar\omega \mp \hbar\omega_{x\vec{q}})\,\delta(\vec{k}'' - \vec{k}' \mp \vec{q}).$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Первая дельта-функция есть выражение закона сохранения энергии при переходе, $\hbar\omega_{x\vec{q}}$ - энергия фонона ветви $x\vec{q}$; вторая дельта-функция - закон сохранения импульса, $\vec{q}$ - импульс фонона. Знаки $\pm$ относятся соответственно к случаям поглощения и испускания фонона. $|c\vec{k}\, n_{x\vec{q}}>$ - функция вида (6.16).

Подставив выражение (8.36) для $\langle v\vec{k}|W^{\varphi on}|c\vec{k}>$ и (6.20) для $\langle c\vec{k}\, n_{x\vec{q}}|W^{\varphi on}|c\vec{k}\pm\vec{q}\;\; n_{x\vec{q}}\mp\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\rangle$, заменяя приближенно $\mathcal{E}_{c\vec{k}} - \mathcal{E}_{v\vec{k}}$ на $\mathcal{E}_0$, пренебрегая зависимостью $\omega_{x\vec{q}}$ от $\vec{q}$ (оптические фононы), получим для коэффициента поглощения с участием оптических фононов

$$\gamma = \sum_x a\,\frac{|\vec{P}_0^{cv}\vec{e}|^2|\vec{C}\vec{l}^{x}|^2}{\omega_{x\vec{q}}(\mathcal{E}_0-\hbar\omega)^2}\left(n_x+\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2}\right)\times$$

$$\times\int d^3k_1\, d^3k_2\,\delta\left(\frac{\hbar^2k_1^2}{2m_c^*}-\frac{\hbar^2k_2^2}{2m_v^*}+\mathcal{E}_g-\hbar\omega\mp\hbar\omega_{x\vec{q}}\right); \qquad (8.50)$$

$$\vec{K}_1=\vec{K}'-\vec{K}_0'\;;\quad \vec{K}_2=\vec{K}-\vec{K}_0.$$

Заменим интегрирование по $\vec{K}_1,\vec{K}_2$ интегрированием по $\mathcal{E}_1=\frac{\hbar^2k_1^2}{2m_c^*}$, $\mathcal{E}_2=-\frac{\hbar^2k_2^2}{2m_v^*}$, по схеме п.4.6 получим

$$\gamma = \sum_x A_x\left(n_x+\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2}\right)\frac{1}{(\mathcal{E}_0-\hbar\omega)^2}\int\sqrt{\mathcal{E}_1\mathcal{E}_2}\,\delta\left(\mathcal{E}_1+\mathcal{E}_2+\mathcal{E}_g-\hbar\omega\mp\hbar\omega_x\right)d\mathcal{E}_1 d\mathcal{E}_2. \qquad (8.51)$$

Всевозможные константы включены нами в A_x . Результат интегрирования с учетом соотношения

$$\int_0^{\mathcal{E}}\sqrt{\mathcal{E}(\mathcal{E}-\mathcal{E})}\,d\mathcal{E}=\frac{\pi}{8}\mathcal{E}^2 \qquad (8.52)$$

имеет вид

$$\gamma=\sum_x\left\{\frac{A_x^{исп}(n_x+1)}{\omega(\mathcal{E}_0-\hbar\omega)^2}(\hbar\omega-\mathcal{E}_g-\hbar\omega_x)^2\Theta(\hbar\omega-\mathcal{E}_g-\hbar\omega_x)+\right. \qquad (8.53)$$

$$\left.+\frac{A_x^{погл}\,n_x}{\omega(\mathcal{E}_0-\hbar\omega)^2}(\hbar\omega-\mathcal{E}_g+\hbar\omega_x)^2\Theta(\hbar\omega-\mathcal{E}_g+\hbar\omega_x)\right\}.$$

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

Здесь $\Theta(x)=1$, $x>0$; $\Theta(x)=0$; $x<0$.

Все константы опять объединены в $A_x^{исп}$ и $A_x^{погл}$, первое слагаемое описывает поглощение света с испусканием фонона, второе слагаемое относится к поглощению, сопровождающемуся поглощением фонона.

Мы видим, что форма кривой частотной зависимости коэффициента поглощения существенно отличается от случая прямого перехода. Заметим, что наличие чисел заполнения фононов N_x , которые согласно (6.30) являются функциями температуры, приводит к существенной температурной зависимости коэффициента поглощения света.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

ЛИТЕРАТУРА

1. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. – М.: Мир, 1974. – 472 с.
2. Харрисон У. Теория твердого тела. – М.: Мир, 1972. – 616 с.
3. Давыдов А.С. Теория твердого тела. – М.: Наука, ФМЛ, 1976. – 639 с.
4. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. – М.: Наука, ФМЛ, 1978. – 615 с.
5. Берсукер И.Б., Полингер В.З. Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах. – М.: Наука, ФМЛ, 1983. – 336 с.
6. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М.: Наука, ФМЛ, 1963. – 748 с.
7. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. – М.: Мир, 1981. – 574 с.
8. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. – М.: Наука, ФМЛ, 1963. – 312 с.
9. Аскрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т.1,2. – М.: Мир, 1979. – 820 с.

Редактор В.Г.Лихачева

ИБ 1976

Подписано в печать 19.10.87г. КЗ 06304.

Формат 60 х 84/1/16 Бумага типографская № 3.
Печать офсетная. Печ.л. 7,3. Усл. печ.л. 6,7. Уч.-изд.л. 6,2
Тираж 300 экз. Заказ № 511. Цена 20 к.

Издательство ТГУ. 634027. Томск, ул. Никитина, 4.

Межвузовская типография ОмПИ.

Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru

1-665229
Digital Library (repository)
of Tomsk State University
http://vital.lib.tsu.ru
Томский государственный университет
Научная библиотека 00249839

ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА