

совпадал с экспериментальным, определённым в отд. точках ЗБ, а энергия атомных состояний $\psi_a(\mathbf{r})$ определяется из эксперим. значений потенциалов ионизации атомов или ионов [12].

$k-p$ -метод и метод инвариантов. Электрич. и многие др. свойства полупроводников и полуметаллов, в к-рых число свободных носителей заряда мало, определяются лишь спектром вблизи точек экстремума, т. е. у «потолка» валентной зоны и «дна» зоны проводимости. Возможное положение экстремумов, число эквивалентных экстремумов и вид спектров вблизи них зависят от симметрии кристалла. Для расчёта спектра вблизи данного экстремума k_0 используется либо теория возмущений ($k-p$ -метод), в к-ром волновая ф-ция электрона в рассматриваемой зоне в точках $k \neq k_0$ раскладывается по волновым ф-циям всех др. зон в точке k_0 , либо метод инвариантов, позволяющий непосредственно учесть требования, накладываемые симметрией кристалла [5, 10]. При этом константы, определяющие спектр, находятся из сравнения с эксперим. данными.

Для зон, не вырожденных в точке k_0 , поверхность пост. энергии вблизи неё — эллипсоиды и спектр определяется тензором эффективной массы:

$$m_{\alpha\beta}^{-1} = \hbar^{-2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}. \quad (11)$$

В системе координат, связанных с гл. осями эллипсоида, этот тензор имеет в общем случае 3 компоненты $m_{\alpha\beta}^{-1} = \delta_{\alpha\beta}/m_{\alpha\alpha}$ и

$$\mathcal{E}(k') = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2m_{\alpha\alpha}}, \quad (12)$$

где $k' = k - k_0$. Для электронов вблизи потолка валентной зоны $m_{\alpha\alpha}^n$ отрицательны, для дырок $m_{\alpha\alpha}^d = -m_{\alpha\alpha}^n$ положительны. Если зона вблизи k_0 вырождена, то спектр имеет более сложный вид и определяется из решения секулярного ур-ния, порядок к-рого задаётся кратностью вырождения. Аналогичные уравнения используют и для одноврем. описания близко расположенных зон, напр. в узкозонных полупроводниках, что даёт возможность учесть непараболичность спектра, т. е. отступление от закона (12) с увеличением k .

Движение электронов во внешних полях. В металлах движение электронов в электрич. E и магн. H полях определяется квазиклассич. ур-ниями:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\mathbf{v}H], \quad \text{где } \mathbf{v} = \nabla_p \mathcal{E}(\mathbf{p}). \quad (13)$$

Из (13) следует, что при движении в поле H сохраняются (составляющая импульса, параллельная H) p_z и полная энергия электрона $\mathcal{E}(\mathbf{p})$. Поэтому электрон на поверхности Ферми в магн. поле движется по траектории, представляющей собой её сечение плоскостью $p_z = \text{const}$. Для закрытых поверхностей эти сечения замкнуты, для открытых они могут быть замкнутыми и разомкнутыми в зависимости от ориентации H . Для замкнутых траекторий период обращения электрона:

$$T = \frac{2\pi m^*}{eH}, \quad m^* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S(p_z, \mathcal{E})}{\partial \mathcal{E}}. \quad (14)$$

Здесь S — площадь, ограниченная траекторией электрона в плоскости $p_z = \text{const}$, величина $\omega_c = 1/T$ наз. циклотронной частотой, а m^* — циклотронной эфф. массой. При движении по замкнутым траекториям в сильном магн. поле происходит квантование орбит. Расстояние между возникающими Ландау уровнями равно $\hbar\omega_c$. Определив зависимость $\omega_c(p_z)$ или площади $S(\mathcal{E}_F, p_z)$ от ориентации H , можно восстановить форму поверхности Ферми.

В полупроводниках и диэлектриках с невырожденными зонами движение носителей также описывается квазиклассич. ур-нием (13).

Квантовая теория, использующая Шрёдингера уравнение для спектра, задаваемого ур-нием (12), приводит

к тому же выражению для $\hbar\omega_c$, что и ф-ла (14). В случае вырожденных или близких зон в полупроводниках, а также вблизи точек пересечения поверхностей Ферми в металлах квазиклассич. приближение (13) неприменимо и спектр электронов или дырок в электрич. и магн. полях определяется системой связанных ур-ний Шрёдингера, число к-рых определяется кратностью вырождения. В этих случаях уровни Ландау оказываются неэквидистантными. Отступление от квазиклассики для близко расположенных ветвей спектра можно описывать как туннелирование электронов с одной траектории Ландау на другую (см. Пробой магнитный).

Границы применимости зонной теории. З. т. исходит из предположений: а) потенциал кристаллич. решётки строго периодичен; б) взаимодействие между свободными электронами может быть сведено к одноэлектронному самосогласованному потенциалу, а оставшаяся часть рассмотрена методом теории возмущений; в) взаимодействие с фононами слабое и может быть рассмотрено по теории возмущений (см. Электронно-фононное взаимодействие).

В неупорядоченных системах условие а) не выполняется. Однако т. к. размытие атомных уровней связано с перекрытием волновых ф-ций соседних атомов, то и в неупорядоченных средах, в т. ч. в жидкостях, образуются разрешённые зоны и квазизапрещённые, с резко пониженной плотностью состояний. В неупорядоченных средах имеются два типа состояний электрона — локализованные и делокализованные. Локализация, связанная с разупорядочением решётки, наз. андерсеновской, а граничная энергия между локализованными и делокализованными состояниями — уровнем локализации. Если уровень Ферми в металле или сильно легированном полупроводнике проходит выше уровня локализации, то их проводимость носит металлич. характер (см. Аморфные металлы). В обратном случае проводимость осуществляется путём активированных перескоков между локализованными состояниями или тепловым забросом электронов выше уровня локализации.

Условие б) хорошо выполняется в полупроводниках и диэлектриках с малым числом свободных электронов, когда взаимодействие между ними мало и может быть учтено как электрон-электронное рассеяние. В металлах, где число свободных электронов велико, взаимодействие с осн. массой электронов учитывается самосогласованным одноэлектронным потенциалом. Взаимодействие с электронами, находящимися в тонком слое вблизи поверхности Ферми, может быть учтено в рамках теории ферми-жидкости, в к-рой в качестве элементарных возмущений рассматриваются заряд. квазичастицы — фермионы, описывающие самосогласованное движение всей системы электронов. Электрон-электронное взаимодействие приводит, как правило, лишь к перенормировке спектра. Исключение составляют кристаллы с узкими зонами, где энергия отталкивания двух электронов на одном узле превышает ширину зоны. Если в таких кристаллах число электронов равно числу атомов, они являются диэлектриками, даже если число мест в зоне (с учётом спина) больше числа атомов. При изменении ширины разрешённой зоны в результате сближения атомов происходит переход к металлич. проводимости (переход Мотта).

Наряду с возбуждениями фермиевского типа в многоэлектронной системе в результате электрон-электронного взаимодействия возникают возбуждения — бозоны, не связанные с переносом заряда (плазмоны, спиновые волны). В этих колебаниях могут участвовать электроны и частично заполненных, и полностью заполненных зон. В полупроводниках и диэлектриках в результате взаимодействия электрона зоны проводимости и дырки валентной зоны образуются связанные состояния Ванье — Мотта экситоны. В молекулярных кристаллах и диэлектриках возбуждённые состоя-