

Т.е. мы можем выбрать оси в \vec{k} -пространстве
такие, что

$$m_{ij}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_3} \end{pmatrix}, \text{ т.е. } \delta\epsilon = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{q_1^2}{m_1} + \frac{q_2^2}{m_2} + \frac{q_3^2}{m_3} \right)$$

В диагональном виде этот тензор может быть
записан как:

$$m_{ij}^{-1} = \delta_{ij} \left(\frac{1}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle \vec{r}_i \rangle_{nn'}|^2}{\epsilon_n(\vec{k}_0) - \epsilon_{n'}(\vec{k}_0)} \right) \quad (*)$$

$m_1 = m_2 = m_3$ - для кубической кристаллов если $\vec{k}_0 = 0$

Отсюда можно заключить, что существует
четыре возможности поведения зонного спектра
вблизи Γ, \vec{k}_0 :

- 1) $m_1 < 0, m_2 < 0, m_3 < 0$ - максимум зоны. или "поболок"
- 2) $m_1 < 0, m_2 < 0, m_3 > 0$ - седловая точка.
- 3) $m_1 < 0, m_2 > 0, m_3 > 0$ - седловая точка.
- 4) $m_1 > 0, m_2 > 0, m_3 > 0$ - минимум зоны. или "дно"

Морс (1938г.) показал, что если $\epsilon(\vec{k})$ - периодическая
функция волнового вектора \vec{k} в обратном пространстве,
то количество особых точек различного типа
в зоне Бриллюэна не независимо. Обозначим
число особых точек типа i) через N_i . Тогда
согласно Морсу в 3-м мерном случае между
числами N_i должны иметь следующие соотноше-
ния:

$$\begin{cases} N_1 \geq 1 \\ N_2 - N_1 \geq 2 \\ N_3 - N_2 + N_1 \geq 1 \\ N_4 - N_3 + N_2 - N_1 = 0 \end{cases}$$

Отсюда следует, что
минимальный набор крити-
ческих точек в одной зоне
состоит из 1 максимума, 1 мини-
мума и 3-х седловых точек
каждого типа 2) и 3).

Из выражения (*) следует, что эффективная масса блоховского электрона отличается от массы свободного электрона m .

Это отличие связано с действием кристаллического потенциала на движение электрона. Можно сказать, такнее, что отличие обусловлено "взаимодействием" различных зон. Это "взаимодействие" определяется величинами зазоров между зонами и величиной матричного элемента $(\hat{P})_{n,n'}$. Чем ближе зоны по энергии, тем больший вклад вносит их "взаимодействие". Эффективные массы у двух близко расположенных краёв зон, находящихся в точке \vec{K}_0 , в основном определяются "взаимодействием" только между этими зонами. Влиянием других зон можно пренебречь из-за больших энергетических знаменателей. Тогда имеем следующие уравнения для эффективных масс этих зон:

$$\begin{cases} \frac{1}{m_{1i}} = \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2} \frac{|\langle \hat{P}_i \rangle_{12}|^2}{(E_1 - E_2)} & \text{и учесть} \\ \frac{1}{m_{2i}} = \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2} \frac{|\langle \hat{P}_i \rangle_{21}|^2}{(E_2 - E_1)} & E_1 > E_2 \text{ в} \\ & \text{точке } \vec{K} = \vec{K}_0, \end{cases}$$

Тогда

1. $m_{1i} > 0$ и $m_{1i} < m$, т.е. точка $\vec{K} = \vec{K}_0$.

соответствует минимуму зоны 1, и эффективные массы в этой зоне меньше массы свободного электрона.

2. Поскольку $|(\hat{p}_i)_{12}| = |(\hat{p}_i)_{21}|$, то, сложив эти два уравнения, получим

$$\frac{1}{m_{1i}} + \frac{1}{m_{2i}} = \frac{2}{m}$$

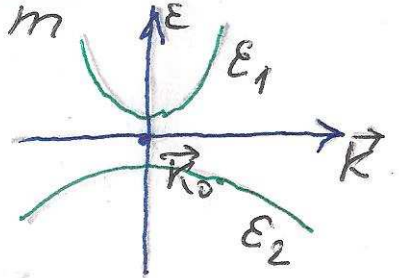
тогда возможны два случая:

а) $m_{1i} < \frac{m}{2}$, то $m_{2i} < 0$ и $|m_{2i}| > m_{1i}$.

Действительно, если взять $m_{1i} = \frac{m}{\delta_i}$,

где $\delta_i > 2$, то $\frac{1}{m_{2i}} = \frac{(2-\delta_i)}{m} = -\frac{|\delta_i-2|}{m} < 0$ и

$$|m_{2i}| = \frac{m}{|\delta_i-2|} > \frac{m}{\delta_i} = m_{1i}$$

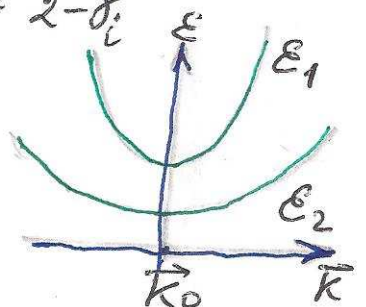


б) $\frac{m}{2} < m_{1i} < m$

тогда, положив $m_{1i} = \frac{m}{\delta_i}$, где $1 < \delta_i < 2$,

получим $\frac{1}{m_{2i}} = \frac{2-\delta_i}{m} > 0$, и $m_{2i} = \frac{m}{2-\delta_i} > m$

Таким образом, эффективная масса может быть как меньше, так и больше массы свободного электрона.



Оценим ^{эффективную} массу Блоховского электрона в зоне проводимости

$$\frac{m}{m_{\text{эф}}} = 1 + \frac{2 \frac{\hbar^2}{a_\delta^2}}{m \Delta E} = 1 + \frac{2 \hbar^2}{m a_\delta^2 \Delta E},$$

где $\langle \hat{p} \rangle_{n,n} \sim \frac{\hbar}{a_\delta}$, a_δ - Борковский радиус.

тогда $\frac{\hbar^2}{m a_\delta^2} \approx Ry = 13,6 \text{ эВ}$, и т.к. $\Delta E \approx 0,5 \text{ эВ}$ (в полупроводниках)

то $m_{\text{эф}} \approx \frac{m}{20} = 0,05m$, что и имеет место в типичных полупроводниках.