**38 ЭЛЕМЕНТЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА.**

**Темы нет в билетах, но можно почитать.**

Основные предположения зонной теории.

1. При описании движения электронов атомные ядра, ввиду их большой массы, рассматриваются как неподвижные источники поля, действующего на электроны.

2. Расположение ядер в пространстве считается точно периодическим: они размещаются в узлах идеальной решетки данного кристалла. Математически это выражается в том, что для любого кристалла можно указать три не лежащих в одной плоскости основных вектора , что весь кристалл можно представить как последовательное повторение построенного на них параллелепипеда, называемого элементарной ячейкой данного кристалла.

3. Система электронов, взаимодействующих с атомными ядрами и друг с другом по закону Кулона, заменяется системой независимых электронов, движущихся в потенциальном поле, которое складывается из поля атомных ядер и эффективного поля, приближенно описывающего взаимодействие между электронами.

В рамках этих предположений, поведение отдельного электрона описывается стационарным УШ

В силу периодичности кристаллической решетки потенциальная энергия электрона ) должна быть периодической функцией относительно сдвигов на вектор решетки (:

.

Периодичность потенциальной энергии приводит к важному свойству решений УШ. Теорема Блоха утверждает, что наиболее общее решение УШ с периодическим потенциалом имеет вид:

где – периодическая функция с периодом решетки:

Подстановка этого выражения в УШ приводит к уравнению для :

Это уравнение на собственные значения оператора, стоящего слева. Оператор зависит от векторного параметра . Каждому значению будет соответствовать набор собственных значений энергии и собственных функций . Индекс нумерует эти собственные значения, расположенные в возрастающем порядке. Пусть при фиксированном вектор пробегает все возможные значения (достаточно первую зону Бриллюэна). Тогда значения энергии непрерывно заполняют некоторый промежуток на оси энергии от некоторого минимального значения до некоторого максимального значения . Этот промежуток носит название энергетической зоны – разрешенной зоны. Спектр энергии в каждой из зон непрерывный. Число различных зон равно числу значений, принимаемых индексом *q.* По этой причине его называют номером зоны или зонным индексом. Если две соседние зоны, отвечающие , не пересекаются и не соприкасаются, то промежуток энергии между ними образует на оси энергии запрещенную зону. Таким образом, рассмотренная схема описания, сводящая многоэлектронную задачу к одноэлектронной, приводит к выводу о зонном характере энергетического спектра в идеальном кристалле. Это обстоятельство и определило ее название – зонная теория.

Итак, в предположении кристалла, заполняющего все пространство (требование инвариантности кристалла относительно сдвигов на вектор решетки ), спектр энергии состоит из чередующихся разрешенных и запрещенных зон. Каждая разрешенная зона дает сплошной спектр энергии.

В целях упрощения, рассмотрим одномерный идеальный кристалл бесконечной длины – прямолинейную цепочку одинаковых атомов, находящихся на одинаковом расстоянии *a*. Тогда заменяем на *k*, на Решение УШ, согласно теореме Блоха запишется в виде

Это же состояние можно записать используя волновое число

Набор обратных длин решетки

является одномерным вариантом трехмерной обратной решетки.

Подстановкой убеждаемся

Функция

в силу определения , как и является периодической с тем же периодом. Таким образом, для данного состояния выбор *k* неоднозначен. Волновое число *k* определяется с точность до слагаемого . Для однозначного выбора можно потребовать, чтобы

Этот интервал совпадает с зоной Бриллюэна нашей одномерной системы.

В действительности кристаллы имеют конечные размеры. В целях упрощения, рассмотрим одномерный идеальный кристалл конечной длины – прямолинейную цепочку *N* одинаковых атомов, находящихся на одинаковом расстоянии *a*. Чтобы произвести подсчет состояний и не вводить каких-либо физических эффектов, связанных с границами кристалла, применим циклические граничные условия или условия Борна-Кармана. Предположим, что кристалл состоит из *N* ячеек, которые соединены так, что образуют замкнутую окружность. В таком кристалле отсутствуют границы. Пси-функция должна удовлетворять условию цикличности

которое обеспечивает непрерывность ее в точке соединения. По теореме Блоха

Здесь - целое число. Отсюда находим возможные значения волнового числа

с учетом области изменения

получаем, что число различных значений равно . Волновое число квантуется. Соответственно этому квантуется и энергия, причем число уровней энергии в разрешенной зоне равно – числу атомов в кристалле. Этот результат справедлив и для трехмерных кристаллов конечных размеров: разрешенная зона состоит из близко расположенных энергетических уровней.