

# Глава 5

## Основные типы твердых тел

### 5.1 Электронные состояния в кристаллах

Предполагается, что уже знакомы:

Схема заполнения электронных оболочек атомов

Задача о частице в потенциальной яме

Уравнение Шредингера

Кратность вырождения

Статистика Ферми-Дирака

Принцип (запрет) Пули.

Напомнить:

Схема энергетических уровней атома H и атома Li.

Рассмотрим систему  $N$  изолированных друг от друга атомов. Они имеют электронные оболочки с числом уровней  $g_n$  на каждой  $n$ -ой оболочке.

Когда атомы сближаются при образовании твердого тела, то:

- Электронные оболочки атомов начинают перекрываться. Взаимодействие между ними является возмущением первоначальных атомных уровней энергии. Это возмущение

нарушает изначальную симметрию состояний в изолированных атомах и вследствие этого уровни энергии расщепляются. В результате, изначальное сильно вырожденный атомный уровень энергии превращается в большое число близко расположенных уровней энергии в твердом теле (энергетическая зона).

- Одновременно с этим “расплыванием” уровни энергии в среднем смещаются вниз, поскольку образование конденсированного состояния энергетически выгодно.
- Больше всего возмущены электроны оболочек наиболее удаленных от ядра (т.е. валентные электроны), так как они ближе всего к соседним атомам.
- Равновесное состояние решетки должно соответствовать минимуму энергии. Дальнейшее сближение должно быть невыгодно, т.е. энергия должна расти.
- Электронные состояния в твердом теле должны непрерывно деформироваться, но их число должно оставаться тем же, что и число состояний в исходной системе изолированных атомов. Следовательно, в  $s$ -полосе должно быть  $2N$  уровней (по 2 электрона на атом), в  $p$ -полосе -  $6N$  (6 электронов на атом), в  $d$ -полосе  $10N$  и т.д.

Эти все обстоятельства отражены на схематической диаграмме Рис. 5.1.

Вопросы для проверки:

В чем причина отталкивания атомов при сжатии твердого тела?

В чем причина подвижности валентных электронов в металле?

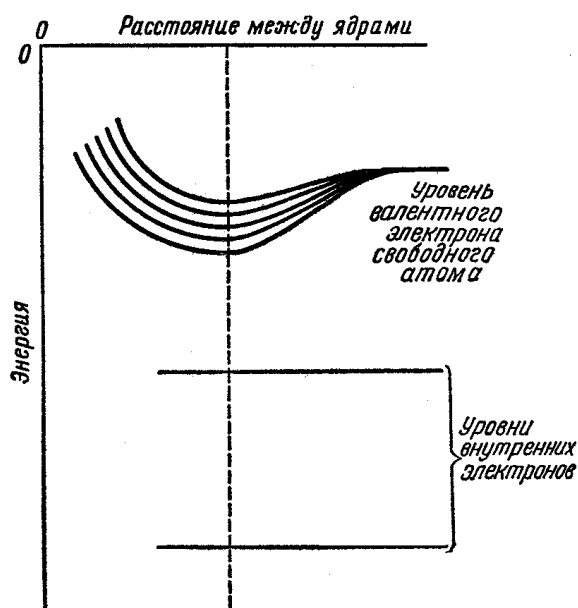


Рис. 5.1: Энергия электронов на разных энергетических уровнях в зависимости от расстояния между атомами (от газа свободных атомов до твердого тела)

Вследствие перекрыwania волновых функций происходит быстрый переход электрона от атома к атому. Этому процессу соответствует трансляционный импульс и кинетическая энергия. Полная энергия  $E_{\text{tot}}$

$$E_{\text{tot}} \approx E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}}$$

происходит из уровней энергии электрона на атомной орбите  $E_{\text{atomic}}$  в свободном атоме, но конечно, им не соответствует, поскольку волновые функции электрона деформированы.

Вопрос для проверки:

$E_{\text{pot}}$  больше или меньше  $E_{\text{atomic}}$  ?

### Плотность состояний и энергия Ферми

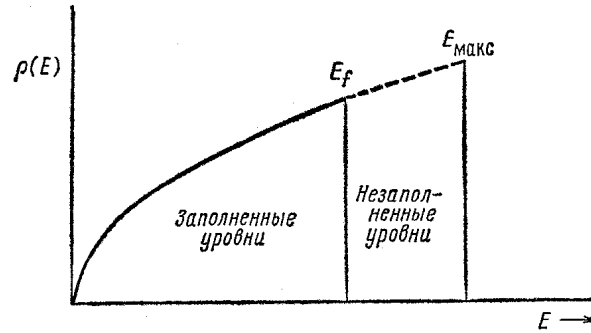


Рис. 5.2: Зависимость плотности состояний от энергии

#### Рентгеновская фотоэмиссия. (XRF – X-ray fluorescence).

Поверхность твердого тела (или газ) бомбардируется электронами высокой энергии,  $\gamma$ -излучением или жестким рентгеновским излучением. Падающий электрон выбивает с орбиты атома один из внутренних электронов. Образовавшуюся вакансию занимает один из электронов с более удаленных оболочек (см. Рис. 5.1). При этом переходе происходит испускание характеристического рентгеновского излучения.

Пусть, например, выбивается  $1s$ -электрон, как изображено на Рис. 5.4. Образовавшуюся вакансию занимает один из электронов с более удаленных оболочек, например  $2p$  – см. Рис. 5.4.

В изображенном случае длина волны излучения  $2p \rightarrow 1s \approx 12000 \text{ \AA}$  соответствует переходу в решетке с энергией  $1 \text{ эВ}$ . Эмиссия характеристического «вторичного» (или флуоресценции) рентгеновского излучения широко используется для элементного и химического анализа.

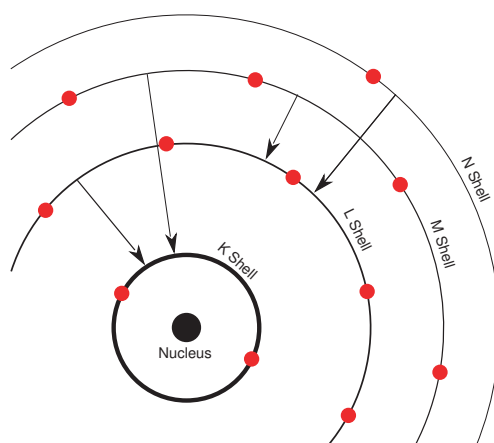


Рис. 5.3: Схема переходов с испусканием характеристического излучения

## 5.2 Металлические кристаллы

Na, Al, Cu, Ag, Au, Zn, Sn, In и т.д.

### 5.2.1 Ионные кристаллы

NaCl, MgO, LiF и т.д.

### 5.2.2 Ковалентные кристаллы

C, Si, Ge, GaSb и т.д.

### 5.2.3 Молекулярные кристаллы

Ar, Kr, Xe, нафталин, антрацен, тетрацен, пентацен, рубрен и т.д.

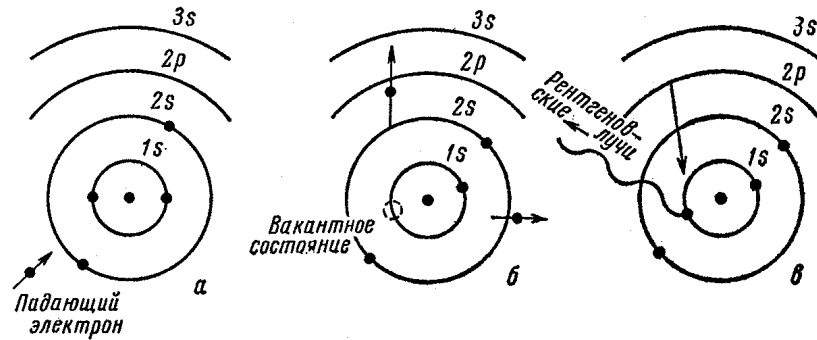


Рис. 5.4: Схема испускания рентгеновского излучения при переходе электрона между внутренними оболочками в Na (твердом или газообразном)

### 5.3 Решетка Браве

Р.Б. это бесконечная периодическая структура, образованная всеми точками с радиус-векторами

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (5.1)$$

где векторы  $\mathbf{a}_i$ , называемые основными векторами решетки не лежат в одной плоскости, а  $n_i$  – все возможные целые числа.

Для всякой заданной кристаллической решетки выбор векторов  $\mathbf{a}_i$  неоднозначен.

#### 5.3.1 Примитивная ячейка

Примитивная ячейка или примитивная элементарная ячейка – это такой объем решетки, который генерирует всю пространственную решетку при всех трансляциях на вектора линейные комбинации  $\mathbf{a}_i$ , причем заполняет все пространство, не оставляет свободных мест и нигде не перекрывается дважды. Не существует однозначного способа выбора примитивной ячейки.

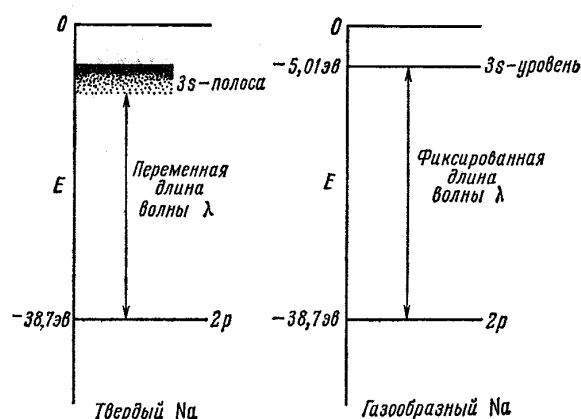


Рис. 5.5: Мягкое рентгеновское излучение при переходе  $3s \rightarrow 2p$  в кристалле Na и в парах Na

Примитивная ячейка должна содержать только один узел решетки (если пренебречь поверхностью). Поэтому  $nv = 1$ , а  $v = 1/n$ , где  $n$  - число атомов в единице объема, а  $v$  - объем примитивной ячейки. Объем не зависит от выбора примитивной ячейки.

### 5.3.2 Примитивная ячейка Вигнера-Зейтца

Наиболее употребительным способом выбора примитивной ячейки, которая сохраняет симметрию решетки является ячейка Вигнера-Зейтца. Она строится следующим образом. Выбирается один из узлов в качестве центра ячейки В-З, затем проводятся линии соединяющие данный узел с соседними узлами. Затем каждая соединительная линия делится пополам и перпендикулярно ей проводится линия - грань ячейки и т.д. Пример построение ячейки Вигнера-Зейтца показан на Рисунке [5.3.2.](#) 5.8.

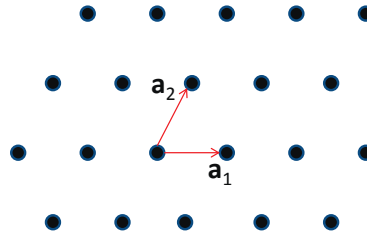


Рис. 5.6: Пример двумерной кристаллической решетки Браве и двух ее основных векторов  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ , линейная комбинация которых позволяет сгенерировать любой вектор решетки.

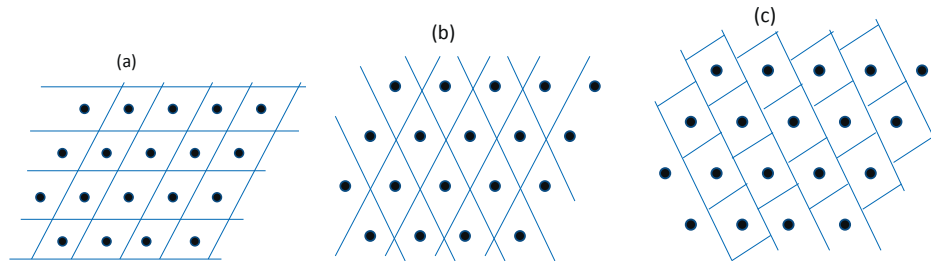


Рис. 5.7: Примеры возможных способов выбора примитивной ячейки для двумерной решетки.

## 5.4 Уравнение Шредингера для электрона в периодическом потенциале

Мы рассматривали классическую систему невзаимодействующих электронов, которые не ощущали периодического потенциала решетки. Такая система является газом свободных электронов. В квазиклассическом приближении, электронные волны в идеальном кристалле претерпевают отражение от периодических атомных плоскостей и интерферируют, Ионы решетки расположены в строгом порядке, определяемом решет-



#### 5.4. Уравнение Шредингера для электрона в периодическом потенциале <sup>9</sup>

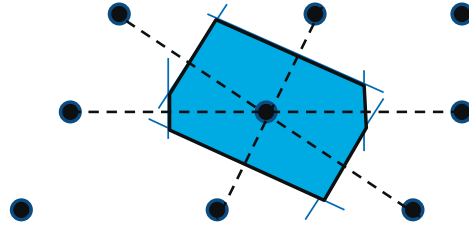


Рис. 5.8: Пример ячейки Вигнера-Зейтца для двумерной решетки Браве.

кой Браве. Следовательно, потенциал взаимодействия также обладает периодичностью решетки Браве:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}), \quad (5.2)$$

где  $\mathbf{R}$  - любой из векторов решетки Браве.

Уравнение Шредингера для электрона в периодической решетке

$$H\Psi = \left[ -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \Psi = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (5.3)$$

где потенциал обладает свойством (5.2). Одним из основных следствий периодичности потенциала является теорема Блоха.

##### 5.4.1 Теорема Блоха (1928г.):

Собственные волновые функции  $\Psi$  одноэлектронного гамильтониана

$$H = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + U(\mathbf{r}), \quad (5.4)$$

где  $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$ , при всех  $\mathbf{R}$ , принадлежащих решетке Браве, могут быть выбраны в форме плоской волны, умноженной на функцию с периодичностью решетки Браве, т.е.

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})u_{nk}(\mathbf{r}), \quad (5.5)$$

где

$$u_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (5.6)$$

для всех  $\mathbf{R}$ , принадлежащих решетке Браве. Здесь  $n$  - номер зоны, появление которого связано с тем, что для данного  $\mathbf{k}$  имеется множество решений. В иной записи теорема Блоха имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R})\Psi(\mathbf{r}), \quad (5.7)$$

что вытекает из (5.5) и (5.6).

#### 5.4.2 Обобщенное граничное условие Борна-Кармана для периодического потенциала

Вместо макроскопического “ящика” с размерами  $L$  для периодических граничных условий Борна-Кармана в теории Зоммерфельда, выбираем “ящик” соразмерный элементарной ячейке соответствующей решетке Браве. Такое граничное условие является естественным обобщением граничных условий Борна-Кармана для периодического потенциала. Запишем его в виде

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r} + N_i\mathbf{a}_i) = \Psi_{nk}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.8)$$

Здесь  $\mathbf{a}_i$  - тройка основных векторов, а все  $N_i$  - целые числа достигающие величин порядка  $N^{1/3}$ , где  $N = N_1N_2N_3$  - полное число элементарных ячеек в кристалле. Как и в теории Зоммерфельда, мы предполагаем, что объемные свойства кристалла не зависят от выбора граничных условий, которые поэтому могут быть выбраны из соображений удобства вычислений. Применяя к граничным условиям теорему Блоха, находим

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r} + N_i\mathbf{a}_i) = \exp(iN_i\mathbf{k}\mathbf{a}_i)\Psi_{nk}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.9)$$

#### 5.4. Уравнение Шредингера для электрона в периодическом потенциале 11

Соотношение (5.9) для произвольных  $N_i$  может выполняться только при условии

$$\exp(iN_i\mathbf{k}\mathbf{a}_i) = 1, \quad \text{где } i = 1, 2, 3, \quad \text{т.е. } N_i\mathbf{k}\mathbf{a}_i = 2\pi m_i, \quad (5.10)$$

где  $m_i$  -целые числа. Представим  $\mathbf{k}$  в виде разложения по базису векторов  $\mathbf{b}_j$  обратной решетки

$$\mathbf{k} = \sum_{j=1,2,3} x_j \mathbf{b}_j, \quad (5.11)$$

где  $j$  – действительные числа,  $\mathbf{b}_j\mathbf{a}_i = 2\pi\delta_{ij}$ .

Тогда из (5.10) и (5.11) получим  $x_j = m_j/N_j$  и разрешенный блоховский волновой вектор должен иметь следующий общий вид

$$\mathbf{k} = \sum_{j=1,2,3} (m_j/N_j)\mathbf{b}_j. \quad (5.12)$$

Из (5.12) следует, что объем  $\Delta\mathbf{k}$  в  $\mathbf{k}$ -пространстве, приходящийся на одно разрешенное значение  $\mathbf{k}$ , равен объему параллелепипеда с ребрами  $\mathbf{b}_j/N_j$ :

$$\Delta\mathbf{k} = \frac{\mathbf{b}_1}{N_1} [(\mathbf{b}_2/N_2) \times (\mathbf{b}_3/N_3)] = \frac{1}{N} \mathbf{b}_1(\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3). \quad (5.13)$$

Следовательно,  $N = \mathbf{b}_1(\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)/\Delta\mathbf{k}$  есть число разрешенных волновых векторов в 1-й элементарной ячейке обратной решетки, т.е. в 1-й зоне Бриллюэна. Поскольку  $\mathbf{b}_1(\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)$  есть объем элементарной ячейки обратной решетки, ф-ла (5.13) означает, что число разрешенных волновых векторов, содержащихся в одной элементарной ячейке обратной решетки, равно числу ячеек в кристалле. Объем элементарной ячейки обратной решетки равен  $(2\pi)^3/v$ , где  $v = V/N$  - объем элементарной ячейки прямой решетки. Следовательно, формулу

(5.13) можно записать в виде:

$$\Delta \mathbf{k} = (2\pi)^3/V. \quad (5.14)$$

Это совпадает с результатом, полученным в теории Зоммерфельда. Заметим, что для системы любой размерности  $d$ ,  $\Delta \mathbf{k} = (2\pi)^d/V$ .

## 5.5 Зоны Бриллюэна и энергетические зоны

Как следует из теоремы Блоха, изменение вектора  $\mathbf{k}$  на вектор обратной решетки не приводит к изменению состояния, чем он отличается от аналогичной величины в модели свободных электронов. Поэтому вектор  $\mathbf{k}$  называют не волновым, а *квазиволновым* вектором. Поскольку вектор  $\mathbf{k}$  определен с точностью до векторов обратной решетки, то обычно за “начальный” вектор принимают вектор находящийся ближе других к началу координат  $\mathbf{k}$ -пространства.

Область  $-\mathbf{b}_i/2 < \mathbf{k} < \mathbf{b}_i/2$  называют 1-й зоной Бриллюэна (или просто зоной Бриллюэна – з.Б.). В качестве примера на рис. 5.5 приведена 1-я ВЗ для ГЦК решетки. Легко видеть, что по построению ВЗ является ячейкой Вигнера-Зейтца для обратной решетки. Область между границей 1-й ВЗ и многогранником, определяемым плоскостями, пересекающими пополам радиус-векторы узлов обратной решетки, следующего порядка близости к началу координат в  $\mathbf{k}$ -пространстве, называется 2-й ВЗ и т.д.

Некоторые особые точки в  $k$ -пространстве имеют высокую симметрию и им присвоены буквенные обозначения. Так для всех 3х основных структур, ПК, ОЦК и ГЦК,  $\Gamma$  - центр зоны, в ГЦК  $W$  - вершины граней,  $L$  и  $X$  –центры соответственно

шестиугольных и квадратных граней, - середина двух касающихся шестиугольных граней,  $U$  - середина ребра, по которому касаются шестиугольные и квадратные грани и т.д. В приведенной схеме энергетических зон, центральная точка зоны Бриллюэна обычно обозначается буквой  $\Gamma$ . Для ГЦК-решетки Бравэ (рис. 5.5а.) точкой  $L$  обозначают центр шестиугольной грани усеченного октаэдра 1-й зоны Бриллюэна, соответствующей ОЦК-решетке в  $\pi$ -пространстве, точкой  $\pi$  - центр квадратной грани. Некоторые другие точки показаны на рис. 5.5.

### 5.5.1 Энергетические зоны в “пустой” решетке

Для описания общего вида зонной структуры вещества часто бывает вполне достаточно воспользоваться приближением “пустой” решетки, т.е. решетки потенциал взаимодействия в которой пренебрежимо мал,  $U(r) = 0$ . При этом уже сам факт присутствия периодичности решетки приводит к образованию зонной структуры в энергетическом спектре электронов. Уравнение Шредингера для электрона в “пустой” периодической решетке из (5.3)

$$-(\hbar^2/2m)\nabla^2\Psi = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (5.15)$$

Решением этого уравнения, очевидно, являются плоские волны, волновой вектор которых может быть представлен в виде суммы вектора обратной решетки  $\mathbf{G}$  и вектора  $\mathbf{k}$ , лежащего в первой зоне Бриллюэна. Волновая функция может быть записана в блоховской форме (5.16)

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = u_{nk}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (5.16)$$

где  $u_{nk}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r})$ . Вектор  $\mathbf{G}$  играет здесь роль индекса

зоны  $n$ . Собственное значение энергии выражается формулой

$$E_n(\mathbf{k}) = (\hbar^2/2m)(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2. \quad (5.17)$$

Из (5.15) также видно, что это же решение будет справедливо в случае постоянного потенциала  $U_0$ . Энергия электронов в этом случае будет

$$E_n(\mathbf{k}) = U_0 + (\hbar^2/2m)(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2. \quad (5.18)$$

Рассмотрим зонную структуру ГЦК решетки в приближении “пустой” решетки. Обратной решеткой для ГЦК решетки Браве является ОЦК решетка, ячейка Вигнера-Зейтца, т.е. зона Бриллюэна, которой является “усеченный октаэдр” (рис. 5.5). Энергия  $E_n(\mathbf{k})$  наимизшей зоны соответствует  $\mathbf{G} = 0$  в центре ВЗ- точка  $\Gamma \equiv (0, 0, 0)$ . Это состояние, как и вся 1-я ВЗ, невырождено. Учитывая структуру векторов  $G$  обратной решетки, для ГЦК решетки, легко увидеть, что второй энергетический уровень при  $k = 0$  равен  $\hbar^2 \mathbf{G}^2/2m$ , причем  $G = (2\pi/a)(+1, +1, +1)$ . Этот уровень вырожден восьмикратно, т.е. восемь плоских волн

$$\Psi_{nk}(x, y, z) = \exp[2\pi i/a(+x + y + z)] \quad (5.19)$$

имеют одинаковую энергию.

## 5.6 Приближение сильной связи

## 5.7 Приближение слабой связи. “Почти свободные электроны”

В приближении слабого периодического потенциала (“почти свободные электроны”, NFE) состояние электронов подвержено лишь слабому возмущающему воздействию со стороны ионов.

Приближение (NFE) дает достаточно хорошее описание, в частности, зонной структуры металлов с внешними s- и p-оболочками (металлы I-IV групп). Эти элементы называют металлами с почти свободными электронами. Два фактора лежат в основе приближения NFE:

Электроны проводимости не могут скапливаться в области достаточно сильного потенциала остовов вследствие принципа Паули.

Электроны проводимости оказывают дополнительную (к электронам остова) экранировку взаимодействия.

Для простоты мы рассмотрим одномерную модель. В качестве нулевого приближения мы используем плоскую волну (учитывая периодические граничные условия)

$$\frac{1}{\sqrt{L}}e^{(ikx)}, \quad (5.20)$$

с энергией  $\varepsilon^{(0)}(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ .

разложим слабый периодический потенциал в ряд Фурье по векторам обратной решетки:

$$V(x) = \sum_n V_n e^{(i2\pi n x/a)}, \quad (5.21)$$

где

$$V_n(k, k') = \frac{1}{L} \int dx V(x) e^{-i(k-k')x} = V_n \delta\left(k - k' - \frac{2\pi n}{a}\right) \quad (5.22)$$

Первая поправка по теории возмущений  $\varepsilon^{(1)} = V_0$  дает только несущественный сдвиг энергии. Поправка второго порядка

$$\varepsilon^{(2)}(k) = \sum_{n \neq 0} \frac{|V_n|^2}{\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}(k - 2\pi n/a)} \quad (5.23)$$

Это выражение применимо пока оно мало по сравнению с поправкой первого порядка  $V_0$ . Когда знаменатель стремится к нулю, т.е. вблизи Брэгговских плоскостей ВЗ, состояния почти вырождены, это выражение расходится и надо использовать теорию возмущений для вырожденных состояний.

Предположим, что функции  $i$  где  $i = 1; 2$  отвечают состояниям 1; 2. Выберем волновые функции в виде их суперпозиции:

$$\Psi = A_1\psi_1 + A_2\psi_2 \quad (5.24)$$

Подставив в УрШ получим

$$A_1(\varepsilon_1 - \varepsilon)\psi_1 + V(A_1\psi_1 + A_2\psi_2) + A_2(\varepsilon_2 - \varepsilon)\psi_2 = 0. \quad (5.25)$$

Умножим это уравнение вначале на  $\psi_1^*$ , а затем на  $\psi_2^*$ . Интегрируя по  $x$  получим

$$\begin{aligned} (\varepsilon_1 - \varepsilon + V_0)A_1 + V_n A_2 &= 0 \\ V_n^* A_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon + V_0)A_2 &= 0 \end{aligned} \quad (5.26)$$

В результате, получаем квадратичное уравнение по  $\varepsilon$

$$\varepsilon^2 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\varepsilon + \varepsilon_1\varepsilon_2 - |V_n|^2 = 0, \quad (5.27)$$

решение которого

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2}{4} + |V_n|^2} \quad (5.28)$$

В результате, энергия имеет разрыв величиной  $2|V_n|$  вблизи точки  $k = \pm n\pi/a$ , как показано на рисунке

Энергетический спектр периодичен по  $k$  в импульсном пространстве, поэтому зачастую спектр приводят к первой зоне Бриллюэна путем вычитания из  $k$  соответствующего вектора обратной решетки. Спектр, приведенный таким образом к первой ВЗ изображен на панели (b). Амплитуда потенциала определяет расщеплению уровней.



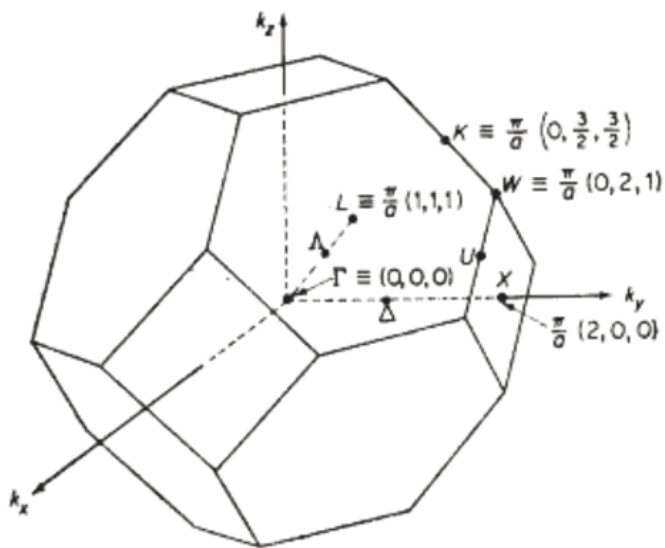
## 5.8 Поверхность Ферми

### 5.8.1 Построение поверхности Ферми

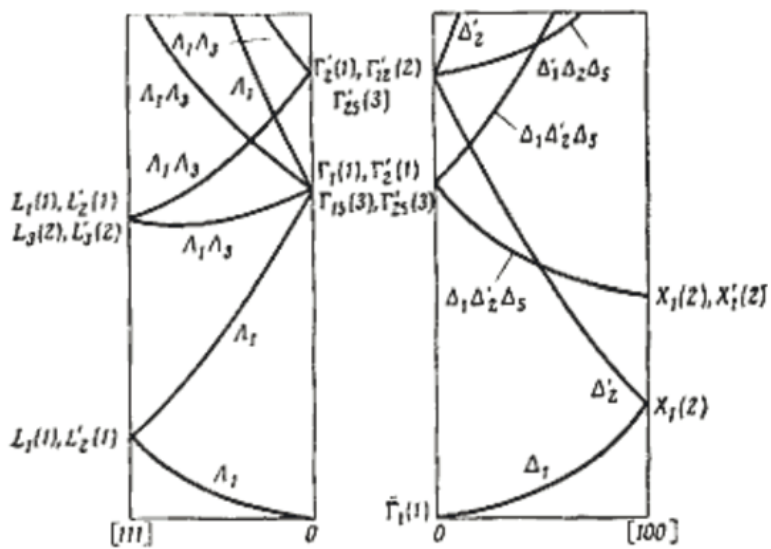
В модели свободных электронов Зоммерфельда энергия Ферми (1.26)  $E_F = (\hbar k_F)^2/2m$ , где для 3-мерного случая  $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3} = (3\pi^2/\Omega_0)^{1/3}$ , и  $\Omega_0$  - объем, приходящийся на один атом. В случае если на элементарную ячейку приходится 1 электрон, то поверхность Ферми имеет объем вдвое меньше чем зона Бриллюэна и не пересекает ее границ. Интерференция отраженных электронных волн периодическим потенциалом решетки почти не искажает ПФ и она не отличается от сферы. Вообще, многие электронные свойства кристалла зависят от соотношения размеров Ферми-поверхности и 1-й зоны Бриллюэна.

Рассмотрим построение зонной структуры на примере кристалла Рb с ГЦК структурой. Вычисляем радиус Ферми-сферы содержащей  $Z = 4$  электрона на атом и в этом случае  $\Omega_0 = a^3/4$  и  $k_F = (12\pi^2 4/a^3)^{1/3} = 1.24(2\pi/a)$ . Как видно, полученное значение  $k_F$  больше радиуса сферы, вписанной в соответствующую данному случаю зону Бриллюэна с радиусом  $k_{Bril} = (2\pi/a)$ . Это приводит к тому, что ПФ имеет сложную конфигурацию, проникая во 2-ю и 3-ю зоны Бриллюэна. Построив сферы радиусом  $k_{Bril}$  с центром в каждом из соседних узлов обратной решетки, как это сделано на рис. 2.4 для двух сечений (100) (а) (110) (б) з.Б., можно представить заполнение 2-й з.Б. в схеме приведенных зон как перекрытие з.Б. соседней сферой Ферми, 3-й ВЗ двумя соседними сферами Ферми (см. детали в Анималу, Гл.5, § 2 и ААК § 6, у Ашкрофта и Мермина, у Киттеля).

**5.8.2 Эффективная масса****5.8.3 Приближение эффективной массы****5.8.4 Скорость электронов****5.8.5 Заполнение зон**



а)



б)

Рис. 5.9: Первая зона Бриллюэна (а) и 1я энергетическая зона в ней (б) для ГЦК решетки.

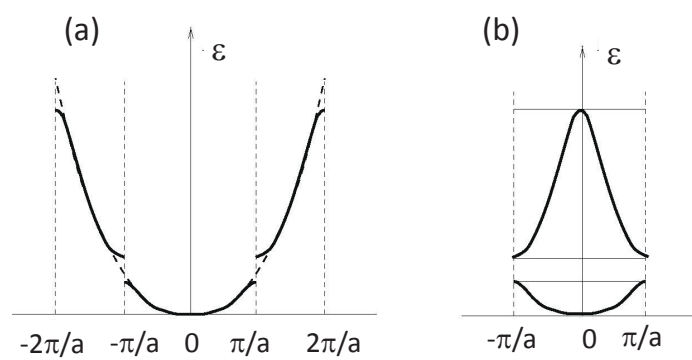


Рис. 5.10: Энергетический спектр в слабом потенциале в приближении NFE: (а) в расширенной схеме зон, (б) в спектре сведенном к первой зоне Бриллюэна.

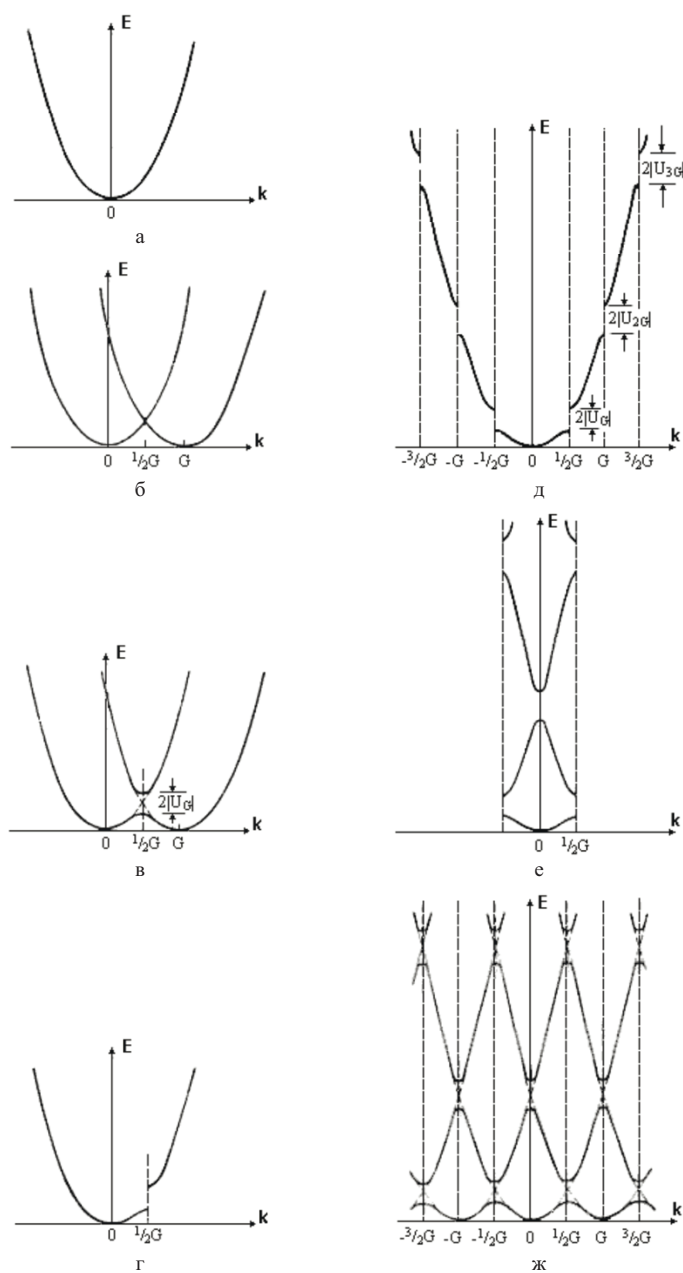


Рис. 5.11: Периодическая зависимость ветвей спектра в схеме расширения зон и в 1й зоне Бриллюэна. Ращепление зон.

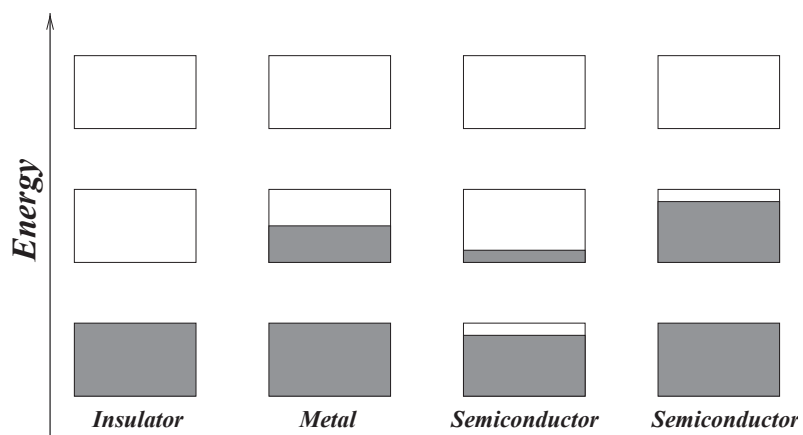


Рис. 5.12: Схематическое изображение заполнения зон.

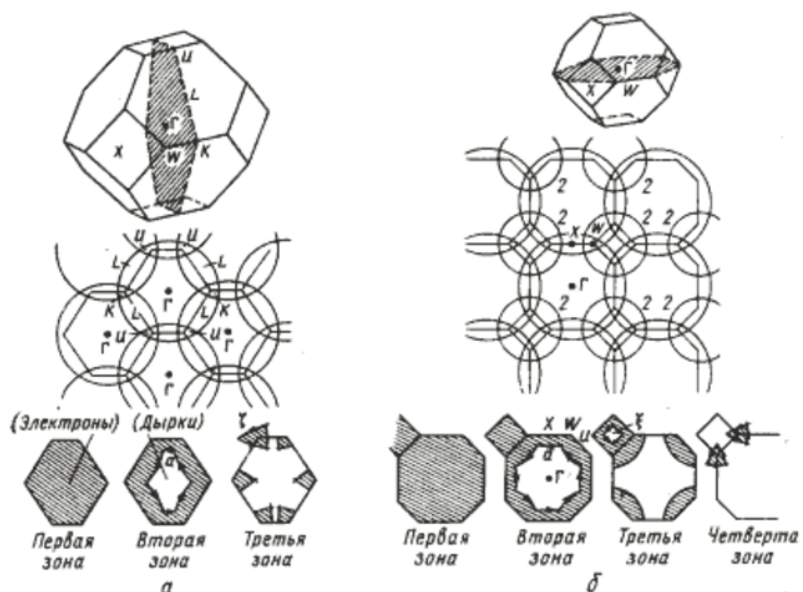


Рис. 2.4. Построение поверхности Ферми для кристалла Рв для сечений (100) и (110) з.Б., проходящих через точки ГУК а) и ГХW б), соответственно

Рис. 5.13: Рв