

В. К. ПЕТЕРСОН

К ВОПРОСУ О ВЛИЯНИИ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПОЛЯ КРИСТАЛЛА НА ЭНЕРГИЮ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ

Производится теоретическая оценка влияния поля кристалла на энергию взаимодействия электронов проводимости.

Рассматривается влияние периодического поля кристалла (т. е. поля ядер и внутренних электронов) на энергию взаимодействия электронов проводимости. Предполагается, что электроны проводимости образуют ферми-газ малой плотности, находящийся в своем основном состоянии. Температура полагается равной нулю. Эффект поляризации кристалла электронами проводимости, приводящей к модификации потенциала взаимодействия, учитывается с помощью диэлектрической постоянной ϵ . При этом предполагается, что анизотропия поляризации либо отсутствует (кубическая симметрия), либо она достаточно мала ($\Delta\epsilon \ll \epsilon$) и ее в первом приближении можно не учитывать.

Взаимодействие электронов проводимости друг с другом рассматривается по теории возмущений. Рассмотрение ограничивается первым порядком относительно $\frac{e^2}{\epsilon}$, что справедливо для сильно легированных

полупроводников [1] (для германия, например, при $\frac{N'}{V} > 10^{19} \text{ см}^{-3}$, где

N' — число электронов проводимости, V — объем кристалла).

Рассмотрим кристалл с одним электроном в зоне проводимости. Поведение этого электрона можно описывать эффективным волновым уравнением с массовым оператором

$$\{E(\vec{k}) - H_0 - M\} \chi_{\vec{k}s} = 0, \quad (1)$$

где $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{x})$, $U(\vec{x})$ — периодическое поле ядер кристалла,

M — массовый оператор, описывающий взаимодействие электрона проводимости в состоянии \vec{k} , s (s — проекция спина) со всеми остальными электронами кристалла. Будем считать, что M не зависит от s и что $M(\vec{x}, \vec{z}) = M^*(\vec{z}, \vec{x})$.

Далее,

$$\chi_{\vec{k}s} = \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \chi_s(\sigma),$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} u_{\vec{k}}(\vec{x}), \quad (2)$$

где $u_{\vec{k}}(\vec{x})$ — периодическая функция, $\chi_s(\sigma)$ — обычные спиновые функции.

$E(\vec{k})$ — энергия одночастичного возбуждения плюс химический потенциал, т. е.

$$E(\vec{k}) = E(N+1, \vec{k}) - E(N, 0),$$

где $|N+1, \vec{k}\rangle$ получается из основного N -частичного состояния $|N, 0\rangle$ добавлением одного электрона проводимости.

Уравнение (1) предполагает, что система имеет заряд, равный заряду электрона проводимости. Для нейтрализации этого заряда необходимо предположить существование положительного заряда в виде примеси (или дырки). Тогда уравнение (1) будет в силе, если не учитывать взаимодействия между электроном проводимости и примесью (или дыркой). В общем виде уравнения, описывающие элементарные возбуждения в виде квазичастиц и дырок, были получены в работах [2, 3].

Рассмотрим кристалл, в который в виде примеси внесены N' положительных зарядов, создающих неперриодическое поле $W(\vec{x})$. В этом случае в силу нейтральности в кристалле будет N' электронов проводимости. Электрон проводимости в некотором состоянии \vec{k}, s (это состояние уже не является состоянием с определенным квазиимпульсом) будет описываться эффективным волновым уравнением

$$\{E'(\vec{k}) - H_0 - W(\vec{x}) - M'\} \chi_{\vec{k}s}' = 0.$$

Здесь $\chi_{\vec{k}s}' = \psi_{\vec{k}}'(\vec{x}) \chi_s(\sigma)$, но $\psi_{\vec{k}}'$ уже не имеет вида блоховских функций (2); M' — массовый оператор, описывающий взаимодействие выделенного электрона со всеми остальными (как с электронами проводимости, так и с внутренними электронами кристалла).

$$E'(\vec{k}) = E(N+N', 0) - E(N+N'-1, \vec{k}),$$

где $E(N+N'-1, \vec{k})$ — энергия состояния с дыркой в зоне проводимости, которое получается удалением электрона проводимости с квантовыми числами \vec{k}, s из основного $N+N'$ частичного состояния.

Рассмотрим разность энергий $E'(\vec{k}) - E(\vec{k})$ в первом порядке теории возмущений по $W + \Delta M$ ($\Delta M = M' - M$):

$$E'(\vec{k}) - E(\vec{k}) = \sum_{\sigma} \int_V d^3x \bar{\chi}_{\vec{k}s} (W + \Delta M) \chi_{\vec{k}s}.$$

Разобьем ΔM на две части $\Delta M = M_1 + M_2$. Определим M_1 как изменение массового оператора, рассчитанное по теории возмущений в первом порядке относительно e^2

$$M_1(\vec{x}, \sigma; \vec{y}\sigma') = \int_V d^3z \frac{e^2}{|\vec{x}-\vec{z}|} \sum_{\vec{k}'s'} \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{z}) \psi_{\vec{k}'}(\vec{z}) \delta(\vec{x}-\vec{y}) \delta_{\sigma\sigma'} - \\ - \frac{e^2}{|\vec{x}-\vec{y}|} \sum_{\vec{k}'s'} \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{y}) \psi_{\vec{k}'}(\vec{x}) \bar{\chi}_{s'}(\sigma') \chi_{s'}(\sigma).$$

M_1 не учитывает эффекта поляризации кристалла электронами проводимости и примесью. Этот эффект мы феноменологически учтем вторым членом M_2 , который представим в виде некоторого интегрального уравнения

$$M_2 = \int d^3y \frac{\delta M_2}{\delta(W + \Delta M)} (W + \Delta M). \quad (3)$$

Возможность введения статической диэлектрической постоянной связана с тем, что интегральный оператор в (3) в какой-то мере можно заменить просто числом $-4\pi\epsilon$, т. е. положить

$$M_2 = -4\pi\epsilon (W + \Delta M). \quad (4)$$

В этом случае имеем

$$W + \Delta M = \frac{1}{\epsilon} (W + M_1), \quad (5)$$

где $\epsilon = 1 + 4\pi\epsilon$.

Соотношение (5) означает, что в приближении (4) поляризацию можно учесть феноменологически заменой $e^2 \rightarrow \frac{e^2}{\epsilon}$, где ϵ имеет смысл статической диэлектрической постоянной [4].

В настоящей работе рассматривается лишь та часть $E'(\vec{k}) - E(\vec{k})$, которая обусловлена взаимодействием электронов проводимости.

В первом порядке теории возмущений имеем следующее выражение для среднего значения энергии взаимодействия электрона проводимости в состоянии \vec{k}, s со всеми другими электронами проводимости (постоянный фон исключается, так как согласно условию нейтральности такой же фон, но другого знака содержится во второй части $E'(\vec{k}) - E(\vec{k})$, обусловленной взаимодействием электрона проводимости с примесью)

$$\Delta E(\vec{k}) = \frac{e^2}{\epsilon} \int_V d^3x d^3z \frac{1}{|\vec{x}-\vec{z}|} \sum_{\vec{k}'s'} \left\{ u_{\vec{k}'}^*(\vec{z}) u_{\vec{k}'}(\vec{z}) u_{\vec{k}}^*(\vec{x}) u_{\vec{k}}(\vec{x}) - \frac{1}{V^2} \right\} - \\ - \frac{e^2}{\epsilon} \int_V d^3x d^3z \sum_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}'-\vec{k})(\vec{x}-\vec{z})} u_{\vec{k}'}^*(\vec{z}) u_{\vec{k}}(\vec{z}) u_{\vec{k}}^*(\vec{x}) u_{\vec{k}'}(\vec{x}). \quad (6)$$

В необменном члене суммирование проводится по всем занятым состояниям зоны проводимости ($\Sigma = N'$). В обменной части суммирование проводится лишь по занятым состояниям с проекцией спина, равной s .

Произведем преобразование Фурье

$$\frac{1}{|\vec{x}-\vec{z}|} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int d^3K \frac{1}{K^2} e^{i\vec{K}(\vec{x}-\vec{z})}, \quad (7)$$

$$u_{\vec{k}'}^*(\vec{x}) u_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{g}} B_{\vec{g}}^{\vec{k}'\vec{k}} e^{i\vec{g}\vec{x}}. \quad (8)$$

Так как $u_{\vec{k}}(\vec{x})$ периодическая функция, то \vec{g} принимает лишь дискретные значения, образуя обратную решетку ($\vec{g}\vec{a}_i = 2\pi n_i$, \vec{a}_i один из основных трансляционных векторов, n_i — целое число).

Учитывая, что

$$\frac{1}{V} \int d^3x e^{i(\vec{g}-\vec{g}')\vec{x}} = \delta_{\vec{g}\vec{g}'}, \quad (9)$$

получим для $B_{\vec{g}}^{\vec{k}'\vec{k}}$:

$$B_{\vec{g}}^{\vec{k}'\vec{k}} = \int d^3x u_{\vec{k}'}^*(\vec{x}) u_{\vec{k}}(\vec{x}) e^{-i\vec{g}\vec{x}}. \quad (10)$$

Условие нормировки означает, что $B_0^{\vec{k}\vec{k}} = 1$.

Для достаточно большого объема кристалла

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{i(\vec{g}-\vec{K})\vec{x}} = \delta(\vec{g}-\vec{K}). \quad (11)$$

Подставляя (7) и (8) в (6), учитывая (9), (11) и условие нормировки, получим

$$\begin{aligned} \Delta E(\vec{k}) = & -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}'} \frac{|B_0^{\vec{k}'\vec{k}}|^2}{(\vec{k}'-\vec{k})^2} + \\ & + \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \sum_{\vec{g} \neq 0} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}'} \left\{ \sum_{s'} \frac{B_{-\vec{g}}^{\vec{k}\vec{k}} B_{\vec{g}}^{\vec{k}'\vec{k}'}}{g^2} - \frac{|B_{\vec{g}}^{\vec{k}'\vec{k}}|^2}{(\vec{g}+\vec{k}-\vec{k}')^2} \right\}. \quad (12) \end{aligned}$$

При $U(\vec{x}) = 0$ и $M = 0$, имеем $B_{\vec{g}}^{\vec{k}'\vec{k}} = \delta_{\vec{g}0}$, т. е. в (12) остается лишь первый член с $B_0^{\vec{k}'\vec{k}} = 1$.

Предположим, что в первой зоне Бриллюэна имеется t симметрично расположенных точек \vec{k}_λ , в которых $E(\vec{k})$ достигает минимума. Мы рассматриваем случай, в котором электроны проводимости заполняют небольшие области зоны Бриллюэна вблизи этих точек, так как полагаем $\frac{N'}{N} \ll 1$. Обозначим эти области G_λ . Пусть \vec{k} лежит вблизи \vec{k}_0 , т. е. $\vec{k} \in G_0$, тогда как \vec{k}' может находиться вблизи любой точки \vec{k}_λ ($\lambda = 0, \dots, t-1$). Условие малости G_λ означает, что

$$|\vec{k} - \vec{k}_0| \ll g_{\min} \neq 0, \quad (13)$$

$$|\vec{k} - \vec{k}_\lambda| \ll g_{\min} \quad \text{для } \vec{k}' \in G_\lambda,$$

так как g_{\min} порядка размеров зоны Бриллюэна.

Кроме того, будем считать, что размеры G_λ малы по сравнению с расстояниями между различными \vec{k}_λ , т. е., что

$$\begin{aligned} |\vec{k} - \vec{k}_0| &\ll |\vec{k}_0 - \vec{k}_\lambda| \quad (\lambda \neq 0), \\ |\vec{k}' - \vec{k}_\lambda| &\ll |\vec{k}_\lambda - \vec{k}_\mu| \quad (\vec{k}' \in G_\lambda, \mu \neq \lambda). \end{aligned} \quad (14)$$

Условия (13) и (14) приводят к тому, что для оценки влияния периодического поля кристалла на $\Delta E(\vec{k})$, в выражении (12) достаточно учитывать зависимость от \vec{k}' и \vec{k} только в первом члене и то лишь при суммировании по $\vec{k}' \in G_0$. Во всех других случаях можно положить $\vec{k}' = \vec{k}_\lambda$ и $\vec{k} = \vec{k}_0$, так как разложение в ряд по $\vec{k} - \vec{k}_0$ и $\vec{k}' - \vec{k}_\lambda$ ($\vec{k}' \in G_\lambda$) приводит к членам более высокого порядка малости.

Рассмотрим $|B_0^{\vec{k}'\vec{k}}|^2$ ($\vec{k}' \in G_0$) по теории возмущений относительно $\vec{k} - \vec{k}_0$ и $\vec{k}' - \vec{k}_0$, учитывая квадратичные члены.

Для этой цели введем систему периодических ортонормированных функций $v_n(\vec{x})$ с помощью уравнения

$$\left\{ H_0 + \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 - i \frac{\hbar^2}{m} \vec{k}_0 \nabla + e^{i\vec{k}_0 \vec{x}} M e^{i\vec{k}_0 \vec{x}} \right\} v_n = E_n v_n. \quad (15)$$

При $n=0$ уравнение (15) переходит в уравнение для $u_{\vec{k}_0}$, получающееся из (1), т. е. $v_0 = u_{\vec{k}_0}$ и $E_0 = E(\vec{k}_0)$.

Систему функций v_n можно использовать как базис для разложения $u_{\vec{k}}$

$$u_{\vec{k}} = \sum_n A_n^{\vec{k}} v_n.$$

Введем возмущающий оператор $Q(\vec{k}, \vec{k}_0) = L(\vec{k}) - L(\vec{k}_0)$, где

$$L(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - i \frac{\hbar^2}{m} \vec{k} \nabla + e^{-i\vec{k} \vec{x}} M e^{i\vec{k} \vec{x}}. \quad (16)$$

В линейном приближении по $Q(\vec{k}, \vec{k}_0)$ (при отсутствии вырождения) имеем следующее выражение для $A_n^{\vec{k}}$ ($n \neq 0$):

$$A_n^{\vec{k}} = \frac{\int d^3x v_n^* Q(\vec{k}, \vec{k}_0) v_0}{E_0 - E_n}. \quad (17)$$

Кроме того, из условия нормировки (в квадратичном приближении):

$$A_0^{\vec{k}} = 1 - \frac{1}{2} \sum_{n \neq 0} A_n^{k^*} A_n^{\vec{k}}. \quad (18)$$

Используя (18) получим $B_0^{\vec{k}'\vec{k}}$, выраженное через $A_n^{\vec{k}}$ ($n \neq 0$):

$$B_0^{\vec{k}'\vec{k}} = \sum_n A_n^{\vec{k}'} A_n^{\vec{k}} = 1 - \frac{1}{2} \sum_{n \neq 0} \{ A_n^{k^*} A_n^{\vec{k}} - 2A_n^{\vec{k}'} A_n^{\vec{k}} + A_n^{\vec{k}'} A_n^{\vec{k}} \}. \quad (19)$$

Умножая (19) на комплексно сопряженное выражение, оставляя лишь квадратичные члены и используя (17), получим

$$|B_0^{\vec{k}'\vec{k}}|^2 = 1 - \sum_{n \neq 0} |A_n^{\vec{k}'} - A_n^{\vec{k}}|^2. \quad (20)$$

Причем для $A_n^{\vec{k}'} - A_n^{\vec{k}}$ согласно (16) и (17) имеем выражение

$$A_n^{\vec{k}'} - A_n^{\vec{k}} = \frac{\int d^3x v_n^* Q(\vec{k}', \vec{k}) v_0}{E_0 - E_n}.$$

Для оценки выражения (20) сравним его с выражением для тензора обратной эффективной массы электрона проводимости (в случае, когда имеется лишь один электрон проводимости). Во втором порядке теории возмущений имеем

$$E(\vec{k}) - E(\vec{k}_0) = \int d^3x v_0^* Q(\vec{k}, \vec{k}_0) v_0 + \sum_{n \neq 0} \frac{|\int d^3x v_0^* Q(\vec{k}, \vec{k}_0) v_n|^2}{E_0 - E_n}.$$

Вследствие стационарного характера энергии возмущения относительно вариации волновой функции имеет место соотношение

$$\int d^3x v_0^* \frac{\partial Q(\vec{k}, \vec{k}_0)}{\partial k_i} v_0 = \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_i}.$$

Производные вычисляются в точке $\vec{k} = \vec{k}_0$, поэтому $\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_i} = 0$. В квадратичном по $k_i - k_{0i}$ приближении получаем

$$\int d^3x v_0^* Q(\vec{k}, \vec{k}_0) v_0 = \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d^3x v_0^* \frac{\partial^2 Q(\vec{k}, \vec{k}_0)}{\partial k_i \partial k_j} v_0 (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}). \quad (21)$$

Рассмотрим матричный элемент

$$\begin{aligned} \int d^3x v_n^* Q(\vec{k}, \vec{k}_0) v_0 &= \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k_0^2) \delta_{n0} - i \frac{\hbar^2}{m} (\vec{k} - \vec{k}_0) \int d^3x v_n^* \vec{\nabla} v_0 + \\ &+ \int d^3x v_n^* e^{-i\vec{k}\vec{x}} M(\vec{k}) e^{i\vec{k}_0\vec{x}} v_0 - \int d^3x v_n^* e^{i\vec{k}_0\vec{x}} M(\vec{k}_0) e^{i\vec{k}\vec{x}} v_0. \end{aligned}$$

Здесь $n=0, \pm 1 \dots$ В массовом операторе M указана явно зависимость от квантового числа \vec{k} . При разложении рассматриваемого матричного элемента в ряд по $\vec{k} - \vec{k}_0$ не учитывать высокие степени можно лишь в том случае, если при вычислении действия оператора M можно ограничиться интегрированием по области Γ , определяемой условием

$$|(\vec{k} - \vec{k}_0)(\vec{x} - \vec{z})| \ll 1. \quad (22)$$

Так как $\vec{k} \in G_0$, то (22) можно свести к условию: $|\vec{x} - \vec{z}| \ll \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}$ (при $\frac{N'}{V} = 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $|\vec{x} - \vec{z}| \ll 10\Omega^{1/3}$, где Ω — объем элементарной ячейки). При выполнении условия (22) можно произвести разложение

$$e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0)(\vec{x} - \vec{z})} = 1 - i(\vec{k} - \vec{k}_0)(\vec{x} - \vec{z}) + \dots$$

В этом случае получим

$$\int_V d^3x v_n^* e^{-i\vec{k}\vec{x}} M(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}} v_0 =$$

$$= \int_{\Gamma} d^3x d^3z v_n^*(x) M(\vec{k}; \vec{x}, \vec{z}) e^{-i\vec{k}_0(\vec{x}-\vec{z})} \{1 - i(\vec{k} - \vec{k}_0)(\vec{x} - \vec{z}) + \dots\} v_0(\vec{z}).$$

Полагая, кроме того, что

$$M(\vec{k}) = M(\vec{k}_0) + \frac{\partial M}{\partial \vec{k}} (\vec{k} - \vec{k}_0) + \dots$$

можно разложить в ряд, приходим к тому, что $Q(\vec{k}, \vec{k}_0)$ можно представить в виде

$$Q(\vec{k}, \vec{k}_0) = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k_0^2) + \frac{\hbar}{m} (\vec{k} - \vec{k}_0) \vec{P}(\vec{k}, \vec{k}_0).$$

$\vec{P}(\vec{k}, \vec{k}_0)$ определяется разложением в ряд оператора $e^{-i\vec{k}\vec{x}} M(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}}$ по степеням $\vec{k} - \vec{k}_0$

$$\vec{P}(\vec{k}, \vec{k}_0) = -i\hbar \nabla + i \frac{m}{\hbar} e^{-i\vec{k}_0\vec{x}} \left\{ M(\vec{k}_0) \vec{x} - \vec{x} M(\vec{k}_0) - \right.$$

$$\left. - i \frac{\partial M(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} + \dots \right\} e^{i\vec{k}_0\vec{x}}.$$

При вычислении матричных элементов ($n \neq 0$)

$$\int d^3x v_n^* Q(\vec{k}, \vec{k}_0) v_0 = (\vec{k} - \vec{k}_0) \frac{\hbar}{m} \int d^3x v_n^* \vec{P}(\vec{k}, \vec{k}_0) v_0$$

можно ограничиться нулевым членом разложения $\vec{P}(\vec{k}, \vec{k}_0)$, тогда как при вычислении матричного элемента

$$\int d^3x v_0^* Q(\vec{k}, \vec{k}_0) v_0$$

согласно (21) нужно учитывать линейные члены $\vec{P}(\vec{k}, \vec{k}_0)$

$$\int d^3x v_0^* Q(\vec{k}, \vec{k}_0) v_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 +$$

$$+ \frac{\hbar}{2m} \sum_{ij}^3 (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) \int v_0^* \left(\frac{\partial P_i}{\partial k_j} + \frac{\partial P_j}{\partial k_i} \right) v_0 d^3x.$$

Таким образом, для эффективной обратной массы имеем выражение

$$m_{ij}^{-1} - m^{-1} \delta_{ij} = \frac{2}{m^2} \sum_{n \neq 0} \frac{\text{Re} \left\{ \int d^3x v_0^* P_i(\vec{k}_0, \vec{k}_0) v_n \int d^3x v_n^* P_j(\vec{k}_0, \vec{k}_0) v_0 \right\}}{E_0 - E_n} +$$

$$+ \frac{1}{\hbar m} \int d^3x v_0^* \left(\frac{\partial P_i}{\partial k_j} + \frac{\partial P_j}{\partial k_i} \right) v_0. \quad (23)$$

Аналогично выражение (20) можно записать

$$|B_0^{\vec{k}'\vec{k}}|^2 = 1 - \sum_{ij}^3 C_{ij} (k'_i - k_i) (k'_j - k_j), \quad (24)$$

где

$$C_{ij} = \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{n \neq 0} \frac{\text{Re} \left\{ \int d^3x v_0^* P_i(\vec{k}_0, \vec{k}_0) v_n \int d^3x v_n^* P_j(\vec{k}_0, \vec{k}_0) v_0 \right\}}{(E_0 - E_n)^2}.$$

В дальнейшем будем предполагать, что система координат выбрана так, что C_{ij} имеет диагональный вид (m_{ij} при этом, вообще говоря, не будет диагональным).

Рассмотрим случай, когда

$$|E_0 - E_{-1}| \ll |E_0 - E_n|, \quad (n \neq 0, -1),$$

тогда в (23) при суммировании по n окажется наиболее существенным член с $n = -1$. Положим

$$m_{ii}^{-1} - m^{-1} = q_i \frac{2}{m^2} \frac{|\int d^3x v_0^* P_i v_{-1}|^2}{E_0 - E_{-1}}. \quad (25)$$

При высказанном предположении (а также при условии, что интеграл, содержащий $\frac{\partial P_i}{\partial k_j}$, дает несущественный вклад) q_i будет порядка единицы.

Аналогичным образом

$$C_i \equiv C_{ii} = \lambda_i \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{|\int d^3x v_0^* P_i v_{-1}|^2}{(E_0 - E_{-1})^2}, \quad (26)$$

где λ_i — также порядка единицы.

Сравнивая выражения (25) и (26), получим

$$C_i = \frac{1}{k_B^2} \cdot \frac{\lambda_i}{q_i} \cdot \frac{\Delta E_i}{\Delta E} \left(1 - \frac{m_{ii}}{m}\right),$$

где

$$k_B = \frac{\pi}{\Omega^{1/3}}, \quad \Delta E_i = \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m_{ii}}, \quad \Delta E = E_0 - E_{-1}.$$

Вернемся к обсуждению формулы (12).

Будем считать заполнение состояний электронами проводимости симметричным относительно проекций спина, тогда суммирование по s' в (12) просто удваивает соответствующий член.

Суммирование по $\vec{k}' \in G_\lambda$ выражений, не зависящих от \vec{k}' , дает множитель $\frac{N'}{2t}$, равный числу электронов проводимости с данной проекцией спина, квазиимпульсы которых близки к \vec{k}_λ . Суммирование выражений, зависящих от $\vec{k}' \in G_0$, заменим интегрированием по объему, ограниченному частью поверхности Ферми, которая вблизи \vec{k}_0 имеет вид эллипсоида:

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}' \in G_0} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{G_0} d^3 k'.$$

Подставляя (24) в (12) и учитывая сказанное выше относительно замены $\vec{k}' \rightarrow \vec{k}_\lambda$ и $\vec{k} \rightarrow \vec{k}_0$, получим

$$\begin{aligned} \Delta E(\vec{k}) = & \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \left\{ -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{G_0} \frac{d^3 k'}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} + \sum_{i=1}^3 C_i \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{G_0} \frac{k'_i - k_i}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} d^3 k' + \right. \\ & + \frac{N'}{2Vt} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{|B_{\vec{q}k_0}^{\vec{k}_0 \vec{k}}|^2}{g^2} + \frac{N'}{Vt} \sum_{\lambda=1}^{i-1} \sum_{\vec{g} \neq 0} \frac{B_{-\vec{g}k_0}^{\vec{k}_0 \vec{k}_\lambda} B_{\vec{g}k_0}^{\vec{k}_\lambda \vec{k}_\lambda}}{g^2} - \\ & \left. - \frac{N'}{2Vt} \sum_{\lambda} \sum_{\vec{g}} \frac{|B_{\vec{g}k_0}^{\vec{k}_\lambda k_0}|^2}{(g + k_0 - k_\lambda)^2} \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Последние два члена в (27) отсутствуют, если имеется единственный (или наиболее глубокий) минимум в центре первой зоны Бриллюэна.

Первый член в (27) соответствует приближению плоских волн. Внешнее поле кристалла в первом порядке по $\frac{e^2}{\varepsilon}$ сказывается при этом лишь на области интегрирования и на значении диэлектрической постоянной.

Второй член в (27) при $C_1 = C_2 = C_3$ дает не зависящий от \vec{k} вклад, равный

$$\frac{4\pi e^2}{\varepsilon} C_1 \frac{N'}{2iV}.$$

Из соображений симметрии ясно, что случай $C_1 = C_2 = C_3$ реализуется в кристаллах с кубической решеткой, если минимум расположен в центре зоны Бриллюэна. Однако если минимум расположен не в центре зоны Бриллюэна, то даже для кубической структуры три значения C_i не совпадают.

Рассмотрим случай, когда $C_1 = C_2 \neq C_3$, тогда второй член (27) дает вклад

$$\frac{4\pi e^2}{\varepsilon} C_1 \frac{N'}{2iV} + \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} (C_3 - C_1) \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{G_0} \frac{(k'_3 - k_3)^2}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} d^3 k'. \quad (28)$$

G_0 в (28) имеет форму эллипсоида. Если G_0 не сильно отличается от шара (разность осей много меньше средней оси), а \vec{k} расположено недалеко к поверхности Ферми, то для оценки интеграла в (28) можно провести интегрирование по шару, объем которого равен объему эллипсоида G_0 . Радиус такого шара равен

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N'}{iV} \right)^{1/3}. \text{ В этом случае получим } (q = |\vec{k} - \vec{k}_0|)$$

$$\int_{|\vec{k}' - \vec{k}_0| \leq k_F} \frac{d^3 k'}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} \frac{(k'_3 - k_3)^2}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} = \frac{4\pi}{3} k_F^3 \cos^2 \alpha + \frac{\pi}{3} \left\{ \frac{1}{8q^3} (k_F^2 - q^2)^3 \ln \left| \frac{k_F + q}{k_F - q} \right| - \right.$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{4} \frac{k_F^5}{q^2} - \frac{2}{3} k_F^3 - \frac{1}{2} q^2 k_F \} (3 \cos^2 \alpha - 1) = \\
 & = \frac{4\pi}{9} k_F^3 + \frac{\pi}{60} k_F q^2 (3 \cos^2 \alpha - 1) + \dots
 \end{aligned}$$

Здесь α — угол между \vec{k} и осью x_3 .

Для сравнения рассмотрим G_0 объема $\frac{4\pi}{3} k_F^3$ в форме вытянутого эллипсоида вращения, у которого большая ось в τ раз больше поперечного диаметра. В этом случае для $\vec{k} = \vec{k}_0$ получим

$$\int_{G_0} d^3 k' \frac{(k'_3 - k_{03})}{(\vec{k}' - \vec{k}_0)^2} = \frac{4\pi}{3} k_F^3 \tau^2 \frac{1}{\tau^2 - 1} \left(1 - \frac{\arctg \sqrt{\tau^2 - 1}}{\sqrt{\tau^2 - 1}} \right).$$

Отношение вкладов, даваемых вторым и первым членами (27), характеризуется величиной $C_i k_F^2$.

$$C_i k_F^2 = \frac{k_F^2}{k_B^2} \frac{\lambda_i}{q_i} \frac{\Delta E_i}{\Delta E} \left(1 - \frac{m_{ii}}{m} \right), \quad \frac{k_F^2}{k_B^2} = \left(\frac{3N'\Omega}{\pi t V} \right)^{2/3}.$$

При $\frac{N'}{V} = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\frac{k_F^2}{k_B^2} \approx \left(\frac{3}{\pi t} \right)^{2/3} \cdot 4 \cdot 10^{-3}$. Если $\frac{\lambda_i}{q_i} \frac{\Delta E_i}{\Delta E}$ не слишком велико (например, меньше 10), то $C_i k_F^2 \ll 1$.

Для оценки остальных членов (27) удобно изменить нормировку функций $u_{\vec{k}}$, заменяя $u_{\vec{k}} \rightarrow \frac{1}{N^{1/2}} u_{\vec{k}}$, с одновременной заменой области интегрирования $V \rightarrow \Omega$ в (10) (при этом $B_{\vec{g}}^{\vec{k}'\vec{k}}$ не изменится) и воспользоваться соотношением

$$\sum_{\vec{g}} B_{-\vec{g}}^{\vec{k}_\lambda \vec{k}_\mu} B_{\vec{g}}^{\vec{k}_\nu \vec{k}_\rho} = \Omega \int d^3 x u_{\vec{k}_\lambda}^* u_{\vec{k}_\mu} u_{\vec{k}_\nu} u_{\vec{k}_\rho}.$$

Так, для третьего члена получим

$$\frac{N'}{2Vt} \sum_{\vec{g} \neq 0} \frac{|B_{\vec{g}}^{\vec{k}_0 \vec{k}_0}|^2}{g^2} < \frac{N'}{2Vt} \frac{1}{g_{\min}} \left(\Omega \int d^3 x |u_{\vec{k}_0}|^4 - 1 \right).$$

Интеграл $\Omega \int d^3 x |u|^4$ может иметь значение много больше единицы в том случае, если $u(\vec{x})$ дает конечный вклад в нормировочный интеграл $\int_{\Omega} d^3 x |u|^2 = 1$ при интегрировании по малой области ω ($\omega \ll \Omega$).

Пусть, например, $|u(\vec{x})|^2$ существенно отличается от нуля при $\vec{x} \in \omega$ и приблизительно равно нулю в остальных точках, тогда

$$\int_{\omega} d^3 x |u(\vec{x})|^2 \approx 1,$$

что дает для среднего по ω значения $|u|^2$ величину порядка $\frac{1}{\omega}$. При этом $\Omega \int_{\Omega} d^3x |u(\vec{x})|^4 \approx \frac{\Omega}{\omega}$, т. е. может стать много больше единицы.

Будем считать, что такие острые максимумы $u_{\vec{k}_0}$ не имеют места, т. е. будем полагать, что

$$\Omega \int_{\Omega} d^3x |u_{\vec{k}_0}(\vec{x})|^4 < 10,$$

тогда третий член будет мал за счет малого параметра

$$\frac{k_F^2}{g_{\min}} \approx k_F^2 \Omega^{2/3} = \left(\frac{3\pi^2}{t} \frac{N'\Omega}{V} \right)^{2/3} \ll 1.$$

Аналогичные высказывания можно сделать и относительно остальных двух членов (27).

Подводя итог, можно сказать, что в первом порядке теорий возмущений при концентрации электронов проводимости $10^{19} \div 10^{20} \text{ см}^{-3}$ учет блоховских функций при высказанных предположениях дает несущественную поправку к энергии взаимодействия электронов проводимости друг с другом (т. е. к среднему значению соответствующей части массового оператора).

В заключение выражаю благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за постановку задачи и помощь в выполнении работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л. «Физика твердого тела», 4, 2660, 1962.
2. Бонч-Бруевич В. Л. ЖЭТФ, 25, 417, 1953.
3. Бонч-Бруевич В. Л. «Научные записки Львовского государственного университета», 33, вып. 1 (6), 1953.
4. Kohn W. Phys. Rev., 110, 857, 1958.

Поступила в редакцию
14. 7 1964 г.

Кафедра
общей физики для физиков