Френеля (чётные зоны — непрозрачные), то действие всех выделенных (прозрачных) зон сложится и амплитуда колебаний в точке наблюдения возрастёт в $2k$ раз; то же получится, если прозрачными будут чётные зоны, но фаза суммарной волны будет иметь противоположный знак. Если на стеклянную пластинку вместо непрозрачного слоя нанести прозрачный слой, вызывающий сдвиг фазы на $\lambda/2$, то интенсивность света в точке наблюдения возрастёт в $4k$ раз. Т. о., З. п. увеличивает освещённость в точке наблюдения подобно собирательной (положительной) линзе. Но хроматич. аберрация такой системы приблизительно в 20 раз больше, чем у линз из стекла типа «крон».

Примером З. п. может служить *голограмма* точечного источника; особенностью голограммы как З. п. является то, что переход от тёмного поля к светлому осуществляется не скачком, а плавно, приблизительно по синусоидальному закону. Аналогичные устройства могут быть созданы и в диапазоне радиоволн, где благодаря значительно бо́льшим длинам волн реализация описанного принципа упрощается и оказывается возможным создание направленных излучателей типа зонных антенн. *Л. Н. Капорский.*

ЗО́ННАЯ ТЕО́РИЯ — один из осн. разделов квантовой теории *твёрдых тел*. З. т. описывает движение электронов в кристаллах и является основой совр. теории *металлов*, *полупроводников* и *диэлектриков* [1—4].

Электронные зоны в идеальном кристалле. Из-за близкого расположения атомов в кристаллах происходит перекрытие волновых ф-ций электронов соседних атомов или молекул. В результате из каждого дискретного энергетич. уровня атома или молекулы образуется энергетич. зона и электроны, находящиеся на этих уровнях, приобретают способность свободно перемещаться по кристаллу.

Особенность кристалла, отличающая его от аморфных тел и жидкостей, — периодичность в расположении атомов, т. е. наличие трансляц. симметрии. Из-за трансляц. симметрии волновая ф-ция электрона в кристалле $\psi(\boldsymbol{r})$ в точках с пространств. координатами $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}$ ($\boldsymbol{a}$ — вектор решётки) отличается лишь фазовым множителем:

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \exp(i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}), \qquad (1)$$

где $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$. Здесь $\boldsymbol{k}$ — волновой вектор электрона (см. *Блоха теорема*, *Блоховские электроны*). Квазиимпульс $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ электрона является аналогом импульса свободного электрона, а величина $\lambda=2\pi/k$ — аналог длины волны де Бройля. Энергия электрона $\mathscr{E}(\boldsymbol{k})$ — периодич. ф-ция в $\boldsymbol{k}$-пространстве:

$$\mathscr{E}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{g}) = \mathscr{E}(\boldsymbol{k}), \qquad (2)$$

где $\boldsymbol{g}$ — любой из целочисленных векторов *обратной решётки*, построенной на базисных векторах $\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \boldsymbol{g}_3$, связанных с векторами прямой решётки $\boldsymbol{a}_i$ соотношениями: $\boldsymbol{g}_1=2\pi[\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{a}_3]/\Omega$ и т. д. Здесь $\Omega=\boldsymbol{a}_1[\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{a}_3]$ — объём *элементарной ячейки* кристалла. В качестве элементарной ячейки обратной решётки выбирают первую *Бриллюэна зону* (ЗБ). Объём ЗБ равен $\boldsymbol{g}_1[\boldsymbol{g}_2\boldsymbol{g}_3]=(2\pi)^3/\Omega$, а число электронных состояний в ЗБ (без учёта вырождения по спину) равно числу элементарных ячеек в объёме кристалла V, т. е. V/Ω. Т. о., плотность состояний в $\boldsymbol{k}$-пространстве не зависит от $\boldsymbol{k}$ и равна:

$$\rho(\boldsymbol{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}. \qquad (3)$$

Состояние электрона в кристалле $\psi_{\mu\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ с энергией $\mathscr{E}_\mu(\boldsymbol{k})$ характеризуется непрерывным квантовым числом $\boldsymbol{k}$ и номером энергетич. зоны или номером ветви μ спектра, если зона включает неск. ветвей. Предполагается, что $\boldsymbol{k}$ лежит в пределах первой ЗБ (схема приведённых зон, рис. 1, *а*). Генетически каждая из ветвей μ связана с определ. уровнем атомов, составляющих кристалл. Число ветвей, образующихся из каждого атомного уровня, равно произведению степени вырождения этого уровня на число эквивалентных атомов в элементарной ячейке, т. е. атомов, меняющихся местами при преобразованиях симметрии, входящих в группу симметрии кристалла. В $\boldsymbol{k}$-пространстве существуют точки, в к-рых неск. состояний $\psi_{\mu\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ с определ. $\boldsymbol{k}$ имеют одну и ту же энергию, т. е.

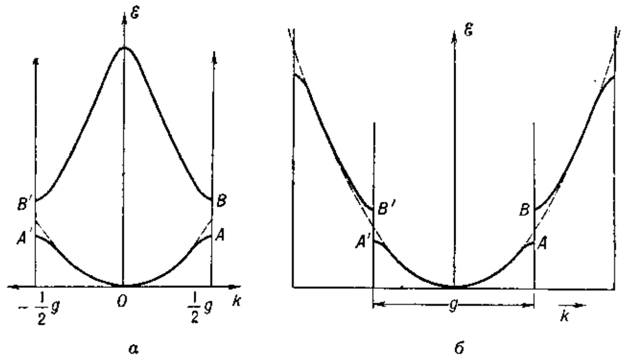

Рис. 1. Спектр электрона $\mathscr{E}(\boldsymbol{k})$ в приближении слабой связи (2 ветви): *а* — схема приведённых зон; *б* — схема расширенных зон.

соответствующие ветви спектра касаются или пересекаются. Существование и положение этих точек (вырожденные точки), как правило, обусловлено пространств. группой *симметрии кристалла*, а также требованиями, накладываемыми условием инвариантности к инверсии времени. Такое вырождение может возникать не только в изолированных точках ЗБ, но и на осях симметрии и её гранях. Пример вырождения, связанного с инвариантностью к инверсии времени, — двукратное спиновое вырождение, к-рое в кристаллах с центром инверсии имеет место во всех точках ЗБ. Т. к. инверсия времени K обращает и направление $\boldsymbol{k}$, и направление спина электрона, а пространств. инверсия I, обращая направление $\boldsymbol{k}$, не влияет на спин, то в таких кристаллах ф-ции $\psi_{\boldsymbol{k}}$ и $KI\psi_{\boldsymbol{k}}$, отвечающие одному и тому же значению $\mathscr{E}$ и $\boldsymbol{k}$, соответствуют разным спиновым состояниям. В кристаллах без центра инверсии спиновое вырождение может иметь место лишь в отд. точках, на осях симметрии и гранях ЗБ, для к-рых либо $\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{g}$, либо имеется операция симметрии, обращающая $\boldsymbol{k}$ в $-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{g}$. В остальных точках ЗБ инвариантность к инверсии времени требует лишь выполнения общего условия $\mathscr{E}(\boldsymbol{k})=\mathscr{E}(-\boldsymbol{k})$ [5].

Наряду с вырождением, обусловленным условиями симметрии, пересечение ветвей спектра в изолированных точках может быть и случайным. При наличии точек вырождения одному и тому же интервалу энергий могут соответствовать неск. ветвей спектра (т. н. вырожденная зона). Как правило, вырожденные зоны возникают из вырожденных состояний изолированного атома. Наряду с этим в кристалле могут перекрываться и ветви, произошедшие из разных атомных уровней. Такое перекрытие может не сопровождаться возникновением точек вырождения.

Интервалы энергий, в к-рые попадают одна или неск. ветвей спектра, наз. разрешёнными зонами, интервалы, в к-рые ни одна из ветвей не попадает, — запрещёнными зонами. Иногда каждой из ветвей спектра $\mathscr{E}_\mu(\boldsymbol{k})$, соответствующих разным разрешённым зонам, сопоставляют свою μ-ю ЗБ, рассматривая спектр электронов во всём $\boldsymbol{k}$-пространстве. Такая схема, наз. схемой расширенных зон (рис. 1, *б*), удобна при описании почти свободных электронов, т. к. при этом сохраняется соответствие между волновым вектором электрона в кристалле и волновым вектором свободного электрона.

Поскольку свойство периодичности энергетич. спектра в $\boldsymbol{k}$-пространстве — следствие только трансляц. симметрии, то (2) справедливо и для всех др. элементарных