

туры в идеальном кристалле, вызывают и рассеяние в жидкости. Физически вполне естественно, что этот же структурный фактор должен входить в расчет сопротивления. Он получен в конечном счете из экспериментов по рассеянию нейтронов или рентгеновских лучей в той же системе, которой мы интересуемся при рассеянии электронов.

Может показаться удивительным, что сопротивление жидкого металла оказывается ненамного больше, чем сопротивление идеального кристалла вблизи температуры плавления. Кривая, характеризующая изменение структурного фактора (см. фиг. 67), имеет первый максимум вблизи волнового вектора $2k_F$, отвечающего верхнему пределу интегрирования при расчете вероятности рассеяния. Однако формфактор в этой же области проходит через нуль, так что подынтегральное выражение остается достаточно малым.

К сожалению, расчет сопротивления оказывается весьма чувствительным к точной форме кривой структурного фактора и к положению нуля формфактора. Из-за этого во многих случаях не удавалось надежно предсказать наблюдаемое сопротивление жидких металлов¹⁾. С другой стороны, ясно, что нет противоречия между измеряемым сопротивлением и тем, которое получается, если принять, что описанная здесь картина верна. А поэтому нет ничего загадочного и в том, что сопротивление жидких металлов имеет довольно небольшую величину.

ЗАДАЧИ

1. Рассмотрите одномерный кристалл с шестью одинаковыми элементарными ячейками, каждая длиной a , и найдите его зону Бриллюэна. (Используйте периодические граничные условия.)

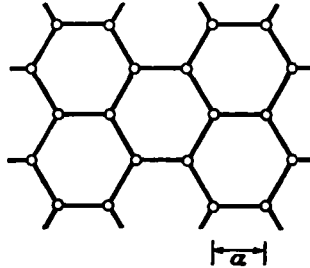
Предположите теперь, что кристаллический потенциал достаточно мал, так что энергию каждого состояния можно приближенно считать чисто кинетической. Нарисуйте зависимость энергии от волнового вектора в зоне Бриллюэна для первых 12 состояний. Какова блоховская функция u_k для каждого из этих состояний?

Пусть теперь каждая ячейка содержит один атом, который может двигаться только в одном направлении. Предположив, что частоты нормальных мод выражаются в виде произведения волнового вектора на скорость звука (дебаевское приближение), изобразите частоты всех мод как функции волнового вектора в зоне Бриллюэна.

2. Постройте примитивную решетку и зону Бриллюэна для двумерной структуры, образованной правильными шестигульниками, как показано

¹⁾ Сравнение с экспериментом и обсуждение расчета можно найти в работе [21]. Расчет для меди, в котором используется формфактор, следующий из теории псевдопотенциалов для переходных металлов (см. фиг. 65), приводится в работе [49].

ниже. Можно ввести также 3-й вектор элементарной трансляции, нормальной к плоскости фигуры.



3. Может ли вырождение за счет симметрии возникнуть в точке W двумерной квадратной решетке, как показано на фиг. 22, б?

4. Рассмотрим систему энергетических зон, описываемую выражением

$$E_k = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2 \Delta}{m^*} + \Delta^2};$$

в этой системе все состояния с положительной энергией свободны, а все состояния с отрицательной энергией заняты.

а. В нулевой момент времени в систему добавляется электрон с $k_x = k_0$, $k_y = k_z = 0$ и налагается поле $\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_y = 0$, $\mathcal{E}_z = \mathcal{E}$. Найдите ток как функцию времени. Каково его предельное значение при t , стремящемся к бесконечности? (Постарайтесь найти более точное решение, чем то, которое получается, если считать зону параболической.)

б. В момент времени $t = 0$ электрон с тем же k , что и в случае «а», удаляется из нижней зоны. Найдите ток как функцию времени при том же приложенном поле.

5. Рассмотрим одномерный кристалл с параметром решетки a и энергии электрона

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right).$$

а. Изобразите энергетическую зону.

б. Найдите эффективную массу для дна и вершины зоны, разложив E до второго порядка по отклонению k от этих точек.

в. Определите эффективную инертную массу электрона из уравнения

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{m_i} F,$$

где F — приложенная сила. Нарисуйте зависимость m_i от k .

г. Найдите эффективную массу, если скорость характеризуется выражением

$$v = \frac{1}{m_0} \hbar k,$$

и изобразите ее графически. (Эта эффективная масса входит в выражение для проводимости.)

д. Напомним, что число состояний на единицу длины кристалла в интервале волновых векторов dk есть $dk/2\pi$. Выразите плотность состояний на единицу энергии через k и массу m_d , определяемую по плотности состоя-

ний. (Формула должна давать правильное выражение для свободных электронов в одном измерении, если подставить m вместо m_d .)

Связана ли масса m_d с массами, определенными выше?

6. Представьте себе, что для простой кубической структуры (с ребром куба a) энергетическая зона имеет вид

$$E_{\mathbf{k}} = -E_0 (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a).$$

Пусть, начиная с момента $t = 0$, на покоящийся электрон ($\mathbf{k} = 0$) начинает действовать однородное, постоянное во времени электрическое поле \mathcal{E} .

а. Найдите траекторию в реальном пространстве. Ее можно определить, задавая $x(t)$, $y(t)$ и $z(t)$.

б. Изобразите траекторию для случая, когда поле \mathcal{E} приложено в направлении [120].

7. Модель Кроннга — Пенни. Рассмотрим одномерный кристалл с притягивающими потенциалами в виде дельта-функций с периодом a :

$$V(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \sum_n \delta(x - na);$$

Δ определяет «силу» дельта-функции и имеет размерность L^{-1} . Легко показать, что эти потенциалы приводят к разрыву производной волновой функции в точках, где обращается в нуль аргумент δ -функции. Таким образом, сшивка волновой функции в точке $x = 0$ дает

$$\psi(0^+) = \psi(0^-),$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{0^+} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{0^-} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi(0) \Delta.$$



Решения в области между двумя любыми δ -функциями имеют, конечно, вид

$$\psi = Ae^{\mu x} + Be^{-\mu x},$$

где μ может быть действительным или мнимым числом ($E = -\hbar^2 \mu^2 / 2m$), а A и B могут изменяться от ячейки к ячейке.

а. Напишите два уравнения для A , B и μ , которые следуют из условия сшивки в одной ячейке для состояний с приведенным волновым вектором k .

б. Разрешив их относительно B/A , получите уравнение для μ . (Построив графически обе части этого уравнения как функций μ (или E), можно найти собственные значения.)

в. С помощью функций $\text{ch } \mu a$ и $\text{sh } \mu a$ можно записать это уравнение в простом виде для состояний с $k = 0$ или с k , находящимся на границе зоны. Получите такие уравнения, покажите, что их решения действительны (для $E < 0$) или мнимы, $\mu = i\nu$ (для $E > 0$), и найдите все решения для случая $\Delta = 0$.

г. Проследите на графике, как смещаются энергии, если Δ медленно нарастает от нуля; нарисуйте зоны для $\Delta = 0$ и для малых Δ .

8. Рассмотрим модель Кроннга — Пенни из задачи 7.

а. Получите связанные состояния и их энергии для изолированных атомов (т. е. $a \rightarrow \infty$).

б. Используя метод ячеек, выведите уравнения, из которых можно найти в кристалле энергию E_0 для наимизшего состояния с $k = 0$.

в. Найдите соответствующее значение энергии, когда $a = 1$, $\Delta = 1$, и сравните его со значением для изолированного атома.

г. Найдите основной член в энергии из задачи «б» для малых и больших a .

д. Если энергия остальных состояний есть

$$E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

и на атом приходится один электрон, то средняя энергия на электрон равна

$$E_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{12a^3}.$$

Используя выражение для E_0 в случае малых a , найдите равновесный параметр решетки a . (То есть параметр решетки, который минимизирует энергию. Мы считаем, что вся энергия связана только с электронами.)

9. Если в модели Кронига — Пенни положить $\Delta = 20$ и $a = 1$, то решениями задачи станут с хорошей точностью связанные состояния свободного атома. Рассматривая их как состояния «сердцевины», постройте ОРВ для волнового вектора π/a . Каковы действительная и мнимая части этой функции? Плоские волны (или ОРВ) не обязательно брать нормированными, но внутренние состояния, конечно, должны быть нормированными.

10. Вычислите ОРВ формфактор для следующей модели лития. Литий имеет «сердцевину», состоящую из двух $1s$ -электронов. Их волновые функции приближенно равны

$$|c\rangle = \left(\frac{\mu^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\mu r}.$$

Считайте, что потенциал имеет вид

$$v(r) = -\frac{e^2 e^{-\alpha r}}{r}.$$

а. Найдите выражение для ОРВ формфактора в виде

$$\langle k+q | w | k \rangle = \langle k+q | v | k \rangle + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \langle k | v | k \rangle - E_c \right) \langle k+q | c \rangle \langle c | k \rangle.$$

Мы уже отмечали, что электроны в состоянии $|k\rangle$ с данным спином связываются только с состояниями «сердцевины», обладающими тем же спином. Абсолютная величина как $k+q$, так и k равна фермиевскому волновому вектору. Заметим, что

$$\int e^{ik \cdot r} f(r) d\tau = \int_0^\infty \frac{\sin kr}{kr} f(r) 4\pi r^2 dr.$$

б. Для численных расчетов удобно взять атомные единицы $\hbar = m = e = 1$. Тогда расстояния измеряются в боровских радиусах ($0,529 \text{ \AA}$), массы — в единицах электронной массы, а энергии — в атомных единицах энергии (1 ат. ед. = 2 ридберг = $27,2 \text{ эВ}$). Для лития $\Omega_0 = 140$ ат. ед. = 140 (боровский радиус)³. Приняв $\mu = 2,5$ ат. ед.⁻¹, $E_c = -2,8$ ат. ед. и $\alpha = 0,5$ ат. ед.⁻¹, изобразите схематически формфактор как функцию q/k_F в интервале $0 \leq q \leq 2k_F$. Для сравнения постройте также график функции $\langle k+q | v | k \rangle$. Параметры выбраны такими, чтобы получался разумный результат; при этом

$$E_c \neq \langle \psi_c | -\left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}\right) + v | \psi_c \rangle.$$

11. Прделайте заново расчеты задачи 6, б, рассматривая зоны в приближении почти свободных электронов; при этом псевдопотенциал можно учесть в дифракционном приближении, т. е.

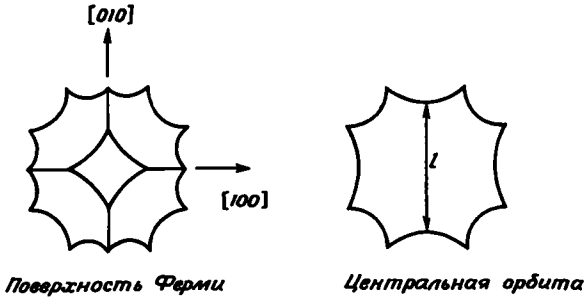
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

в первой зоне, в которой все время остаются электроны.

12. а. В приближении почти свободных электронов рассмотрите двумерный металл с двумя электронами (по одному для каждого спина) на атом, имеющий кристаллическую структуру, найденную в задаче 2. Постройте ферми-поверхность (точнее, ферми-линию) и укажите, в какой зоне каждая ее часть.

б. Какова циклотронная масса для каждого участка ферми-линии? Поле H , конечно, перпендикулярно плоскости фнгуры.

13. Каков размер l орбиты в реальном пространстве для алюминия в поле 100 Гс? Ребро куба решетки алюминия $a = 4,04 \text{ \AA}$.



14. Считая, что ферми-поверхность имеет форму цилиндра с диаметром $k_d = 1 \text{ \AA}^{-1}$, выполните следующие задания.

а. Оцените зависимость периода осцилляций де Гааза — ван Альфена $\delta(1/H)$ (который равен расстоянию по оси $1/H$ между двумя соседними пиками восприимчивости) от угла между магнитным полем и осью цилиндра.

б. Изобразите циклотронную массу на ферми-поверхности как функцию этого угла, приняв, что

$$E = \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m},$$

где k_p — компонента волнового вектора, перпендикулярная оси цилиндра.

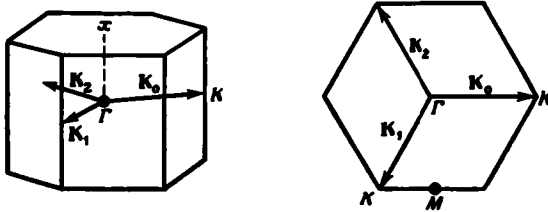
15. Бериллий обладает гексагональной плотно упакованной решеткой с параметрами $c = 6,79$ ат. ед., $a = 4,31$ ат. ед. (боровских радиусов). Он имеет два электрона проводимости на атом. Ферми-поверхность бериллия в одноволновом приближении ОРВ образует чечевицеобразные сегменты вокруг точки $k = 2\pi/c$ в схеме расширенных зон.

а. Используя одноволновое ОРВ приближение, вычислите периоды осцилляций де Гааза — ван Альфена $\delta(1/H)$ (и расстояние по оси H между двумя соседними пиками восприимчивости, когда $H = 10^4$ Гс) для поля, направленного вдоль оси c , и поля, лежащего в базисной плоскости.

б. Вычислите циклотронные массы в этих полях.

в. Взяв соответствующее значение ОРВ формфактора равным 0,05 ат. ед., оцените в двухволновом ОРВ приближении изменение площади поперечного сечения для центральной области плоскости, перпендикулярной оси c . Считайте, что энергия Ферми не меняется по сравнению со случаем свободных электронов.

16. Рассмотрите низколежащие зоны в гексагональной структуре вблизи центра некоторого ребра K зоны Бриллюэна, как показано на фигуре.



Обратите внимание на 3-кратное вырождение зон свободных электронов в этой точке. Волновые векторы соответствующих плоских волн суть K_0, K_1, K_2 . Вблизи $k = K_0$ три плоские волны $k_i = K_i + \kappa$ связаны малым действительным матричным элементом псевдопотенциала

$$W = \langle k_0 | W | k_1 \rangle = \langle k_1 | W | k_2 \rangle = \langle k_2 | W | k_0 \rangle.$$

Всеми остальными матричными элементами пренебрегните и считайте, что кинетическая энергия приближенно равна

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_i^2 \approx \frac{\hbar^2}{2m} (K_i^2 + 2K_i \cdot \kappa).$$

Найдите 3×3 -матрицу гамильтониана и зоны вдоль направления ΓK вблизи точки K . Этот расчет можно существенно упростить, заметив, что если выбрать подходящие линейные комбинации $|k_1\rangle$ и $|k_2\rangle$, то группа вектора k будет содержать симметрию отражения. Соответствующее преобразование матрицы гамильтониана сводит секулярное уравнение к уравнению второй степени.

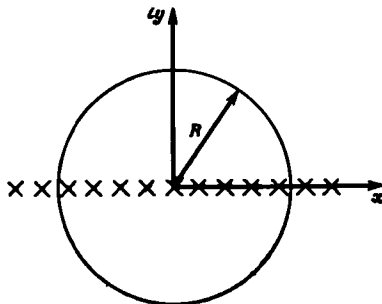
Найдите зоны для малых положительных и отрицательных κ , если $W > 0$. Заметим, что $\kappa \cdot K_0 > 0$ соответствует линии KM в приведенной зоне Бриллюэна.

17. Рассмотрите модель Кронига — Пенни из задачи 7. Волновая функция самого низколежащего состояния дается приближенно выражением

$$\psi^{(0)} = \sqrt{\frac{\Delta}{2N}} \sum_n e^{-\Delta |x - an|/2}, \quad E = -\frac{\Delta^2}{8} \text{ ат. ед.}$$

Волновые функции состояния для $k = 0$ в более высокнх зонах могут быть четными или нечетными относительно положения каждого атома. Нечетные имеют вид

$$\psi_m \sim \sin \frac{2\pi x}{a} m \quad \text{для } m = 1, 2, \dots$$



Вычислите приближенно эффективную массу в нижней зоне с помощью $k \cdot p$ -метода, учитывая только первый член, и оцените допущенную ошибку, рассматривая второй. [Заметим, что получающиеся суммы можно вычислить с помощью контурного интегрирования (по показанному круговому контуру).

Для нахождения $\sum_{-\infty}^{\infty} f(n)$ рассмотрим

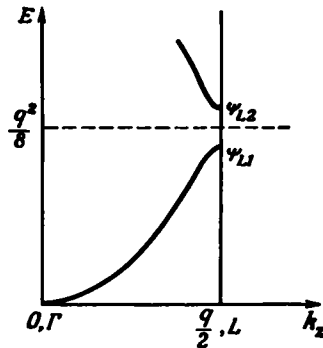
$$\int \frac{f(z) dz}{1 - e^{2\pi iz}}.$$

Затем следует взять вычеты в точках, где переменная z равна целому действительному числу, и в полюсах $f(z)$. При $R \rightarrow \infty$ интеграл по контуру обращается в нуль.]

18. Рассмотрим энергетические зоны, показанные ниже. Пусть L есть центр грани зоны, для которой $k = q/2$. Тогда

$$\psi_{L1} = \sqrt{\frac{2}{\Omega}} \cos\left(\frac{qz}{2}\right), \quad \psi_{L2} = \sqrt{\frac{2}{\Omega}} \sin\left(\frac{qz}{2}\right).$$

(Мы выбрали ось z вдоль направления q .) Энергия, отвечающая ψ_{L1} , в атомных единицах есть $q^2/8 - \Delta$, а отвечающая ψ_{L2} есть $q^2/8 + \Delta$. Постройте все компоненты тензора эффективной массы $(m/m^*)_ij$ для нижней зоны в точке L , используя $k \cdot p$ -метод и учитывая только взаимодействие между двумя зонами. Для этого потребуются сформулировать метод для случая, когда точки лежат вблизи $k = q/2$, так же как это было сделано для точек вблизи $k = 0$.



19. Постройте в приближении сильной связи для s -состояний зоны в случае структуры из задачи 2. Здесь метод придется модифицировать, так как элементарная ячейка содержит два атома. Возьмем снова

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \psi_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j}$$

и вычислим

$$\frac{\langle \psi_k | H | \psi_k \rangle}{\langle \psi_k | \psi_k \rangle},$$

пренебрегая трехцентровыми интегралами и учитывая перекрытия только ближайших соседей. (Заметим, что принятый вид волновой функции не следует из симметрии, как это было в случае одного атома на элементарную ячейку, но является довольно разумным предположением.)

20. Рассчитайте и изобразите зоны в приближении сильной связи вдоль направления [100] для p -состояний в простой кубической решетке. Учтите интегралы перекрытия только для ближайших соседей. Введите столько интегралов перекрытия, сколько нужно (но не более того), считайте значение каждого из них параметром и определите их знаки.

21. Модельная задача для полярона. Построим сначала классический гамильтониан для электрона в деформируемой одномерной решетке. Электрон в зоне проводимости характеризуется гамильтонианом

$$H = \frac{p^2}{2m}.$$

Решетка может поляризоваться, и эта поляризация описывается одной координатой X . (В реальном кристалле поляризация описывается многими координатами, которые, как мы увидим, являются нормальными координатами упруго связанных атомов.) Упругая энергия решетки равна $\frac{1}{2}\kappa X^2$, а ее кинетическая энергия есть

$$\frac{M}{2} \dot{X}^2 = \frac{1}{2M} P^2,$$

где M имеет размерность массы, а P — импульс, сопряженный координате X , т. е. $P = M\dot{X}$. Наконец, деформация решетки сдвигает энергетический уровень электрона на величину, пропорциональную X ; кроме того, мы в нашей модели предположим, что этот сдвиг пропорционален также импульсу электрона p , и зададим соответствующий член гамильтониана в виде $\Omega p X$. Этот член характеризует связь между электроном и поляризацией решетки. (В реальном кристалле член взаимодействия также пропорционален координате X , но зависит от положения электрона, а не от его импульса.)

При квантовомеханическом рассмотрении система описывается волновой функцией $\psi(x, X)$, удовлетворяющей уравнению Шредингера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\kappa}{2} X^2 + \Omega p X \right) \psi(x, X) = E \psi(x, X).$$

В отсутствие взаимодействия ($\Omega = 0$) функция $\psi(x, X)$ факторизуется в виде

$$\frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\hbar k x} \varphi_n(X),$$

где L — нормировочная длина, а φ_n — волновые функции гармонического осциллятора. Собственные значения суть

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

где

$$\omega = \left(\frac{\kappa}{M} \right)^{1/2}$$

и n — целое число.

а. Найдите собственные функции и собственные значения, когда $\Omega \neq 0$. (Здесь возможна аналогичная факторизация.)

б. Какова эффективная масса полярона?

22. Рассмотрите зону проводимости и валентную зону, заданные в виде

$$E = \pm \sqrt{\hbar^2 \frac{k^2 \Delta}{m} + \Delta^2},$$

где

$$k = |k_x^2 + k_y^2 + k_z^2|^{1/2} \quad \text{и} \quad \Delta = 1 \text{ эВ.}$$

Продолжая волновой вектор в комплексную плоскость, найдите коэффициент затухания μ (для волновых функций, пропорциональных $e^{-\mu z}$) как функцию энергии в запрещенной зоне.

Оцените энергию связи для донорного уровня, используя приближение эффективной массы и считая диэлектрическую проницаемость равной 16.

Оцените величину электрического поля, необходимого для ионизации этого уровня при нулевой температуре (т. е. такое поле, в котором энергия диполя порядка энергии связи).

23. Рассмотрим резонансные состояния при $l = 0$ для сферически симметричного контактного потенциала типа потенциала твердых шаров:

$$V(r) = \beta \delta(r - r_0).$$

Амплитуда волновой функции для $r > r_0$ определяется нормировкой в большом объеме.

а. В случае, когда $\beta \gg k$, покажите, что амплитуда при $r < r_0$ мала для всех состояний, кроме тех, которым отвечают дискретные резонансные уровни. Выражения для бесселевых функций можно найти в работе [45].

б. Найдите и прокомментируйте приближенные величины фазовых сдвигов вдали от резонанса.

в. Опишите состояние системы в случае, когда для рассматриваемого k отношение β/k стремится к $+\infty$.

24. Рассмотрим сферически симметричный потенциал, который принимает при $r = r_0$ бесконечно большое положительное значение (потенциал твердой сердцевины) и в поле которого находится газ незаряженных электронов.

а. Найдите фазы для состояний с $l = 0$.

б. Приняв для плотности электронного газа значение, равное соответствующей плотности электронов проводимости в натрии, а в качестве r_0 — радиус сферы Вигнера — Зейтца (4 ат. ед. в случае натрия), найдите, сколько электронов в s -состояниях притягивается, а сколько отталкивается из этой области.

в. Принимая для фриделевских осцилляций асимптотическое выражение, найдите, как отличается плотность s -электронов в точке $2r_0$ от невозможного значения плотности.

25. Рассмотрим полупроводник, который содержит в единице объема N электронов и зону проводимости которого можно описать с помощью эффективной массы m^* (невыврожденный газ или бозе-газ или ферми-газ). а. Применяя правило сумм Фриделя, найдите число электронов, локализованных в области вблизи сферически симметричного потенциала (не все интегралы здесь берутся).

б. Вычислите сдвиги фаз в борновском приближении для потенциала

$$V = \beta \delta(r).$$

Помня, что

$$\int \delta(r) f(r) d^3r = f(0),$$

выразите число локализованных электронов через β , T и N .

26. Рассмотрим систему электронов в приближении эффективной массы

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

Пусть донорный потенциал имеет вид

$$-\frac{e^2}{r\epsilon} e^{-\mu r},$$

а электронные волновые функции можно считать плоскими волнами. Вычислите время релаксации

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k' (1 - \cos \theta) P_{kk'}.$$

Заметим, что τ фактически зависит от k . Обратите внимание на поведение результата, когда $\mu \rightarrow 0$. Эта трудность возникает из-за дальнедействующего характера кулоновского потенциала.

Получите основной член в разложении по k/μ (при больших μ) и рассчитайте численно поперечное сечение рассеяния σ :

$$\frac{\hbar k}{m^*} \tau \sigma = \Omega = \text{объем системы.}$$

Для тепловой энергии ($E = 1/40$ эВ) принять: $m^*/m = 1$, $\epsilon = 16$, $\mu = (0,1/0,529) \text{ \AA}^{-1}$ ($= 0,1$ ат. ед.) и $\Omega = 1 \text{ см}^3$. Не все константы необходимы.

27. Рассмотрите простой кубический металл с одним электроном проводимости на атом. Будем аппроксимировать псевдопотенциал δ -функцией:

$$\omega(r) = \Omega_0 \beta \delta(r),$$

тогда

$$\langle k+q | \omega | k \rangle = \beta,$$

где β — константа.

а. Введите в кристалл одну вакансию и определите матричный элемент

$$\langle k+q | W | k \rangle.$$

б. Для электрона на поверхности Ферми вычислите время релаксации τ , учитывая рассеяние в нулевом порядке.

в. Время релаксации τ электрона на ферми-поверхности вблизи грани зоны Бриллюэна может заметно изменяться при учете членов более высоких порядков. Пусть гранью зоны является плоскость, делящая пополам вектор обратной решетки $q_0 = 2\pi/a [100]$. Рассмотрим состояние $|k\rangle$ на поверхности Ферми, когда $k \parallel q_0$. Вычислите изменение вероятности рассеяния, вызванное членом второго порядка, для которого волновой вектор промежуточного состояния

$$k'' = k - q_0.$$

Этот член является преобладающим. Определите множитель, характеризующий зависимость τ от β/E_F . Считайте, что ферми-поверхность остается сферической.

28. Уравнение с псевдопотенциалом для переходного металла в атомных единицах имеет вид

$$-\frac{\nabla^2}{2} |\varphi\rangle + W |\varphi\rangle - \sum_d \frac{\Delta |d\rangle \langle d| \Delta |\varphi\rangle}{E_d - E} = E |\varphi\rangle.$$

а. Пусть q — наименьший вектор обратной решетки. Постройте двух-волновое ОРВ приближение для состояний вблизи $k = q/2$, полагая

$$\langle k | W | k \rangle = \bar{W} \quad \text{и} \quad \langle k - q | W | k \rangle = \langle k | W | k - q \rangle = W$$

(обе величины не зависят от k) и считая $\Delta = 0$. Вычислите собственные значения при $k = 0$ и $k = q/2$.

б. Считая, наоборот, что

$$W = \bar{W} = 0 \quad \text{и} \quad \Delta \neq 0,$$

прикиньте, какими должны быть зоны (для этого опять приближенно определите собственные значения при $k = 0$ и $k = q/2$). Прделав это, примите, что E_d лежит между значениями 0 и $1/2 (q/2)^2$ и

$$\left| \frac{1}{2} \left(\frac{q}{2} \right)^2 - E_d \right| \gg \left| \left\langle d \mid \Delta \mid \frac{q}{2} \right\rangle \right|, \quad E_d \gg \left| \left\langle d \mid \Delta \mid \frac{q}{2} \right\rangle \right|.$$

Заметим, что если проекция момента количества движения d -состояний квантуется вдоль направления k , то в сумме по d исчезающим является лишь член с $m = 0$, и для этого члена

$$\langle d \mid \Delta \mid k \rangle = \langle k \mid \Delta \mid d \rangle \approx \Delta_0 k^2,$$

где Δ_0 — константа. Оба вывода следуют из разложения $|k\rangle$ по сферическим гармоникам и сферическим функциям Бесселя и асимптотического поведения последних при малых k .

Особенно интересно найти положение уровней s - и p -типа относительно минимума зоны в точке $q/2$. В меди эти уровни значительно точнее находятся по схеме, изложенной в задаче «б», где в качестве подгоночного параметра используется Δ_0 , чем по схеме, изложенной в задаче «а», где подгоночным параметром считается W .

2§. Рассмотрим s -зону в жидком изоляторе с помощью метода сильной связи. Найдите среднюю энергию состояний, описываемых волновыми функциями

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \psi(|r - r_j|),$$

сохраняя только двухцентровые интегралы (для всех соседей).

Принимая, что при больших r функция ψ убывает как $e^{-\mu r}$, а v сильно локализовано, можно написать

$$\int \psi^*(r - r_i) v(r - r_j) \psi(r - r_i) d\tau = -\lambda_1 e^{-2\mu |r_i - r_j|} \quad \text{для } i \neq j$$

и

$$\int \psi^*(r - r_i) v(r - r_i) \psi(r - r_j) d\tau = -\lambda_2 e^{-\mu |r_i - r_j|} \quad \text{для } i = j,$$

где λ_1 и λ_2 — положительные константы. Учет перекрытий от всех соседей можно провести, принимая, что вероятность найти соседний атом на расстоянии r , отнесенная к единице объема, есть

$$P(r) = \frac{1}{\Omega_0} \left(1 - \frac{\sin ar}{ar} \right),$$

где a^{-1} — константа порядка среднего межатомного расстояния, т. е.

$$\left\langle \sum_j f(r_i - r_j) \right\rangle = 4\pi \int P(R) f(R) R^2 dR.$$

В предельных случаях больших и малых k изобразите вид функции $E(k)$. (Заметьте, что результат хорошо определен для всех k , но имеет четкий смысл лишь при $k/a \ll 1$.)

30. Выведите уравнение (2.87) для $G_{\pm}(r, r'; \hbar\omega)$ и проверьте, что (2.88) действительно является его решением. Чтобы перейти от нормировки на конечный объем, которую мы до сих пор использовали, к более удобной здесь нормировке на δ -функцию, разложим $f(t)$ в интервале $0 < t < T$ с периодическими граничными условиями:

$$f(t) = \sum_{\omega} g(\omega) e^{-i\omega t},$$

где

$$\omega = \frac{2\pi n}{T}.$$

Тогда

$$g(\omega) = \frac{1}{T} \int e^{+i\omega t} f(t) dt$$

и

$$\int e^{-i(\omega-\omega')t} dt = T\delta_{\omega\omega'}.$$

Если устремить T к бесконечности и заменить \sum_{ω} на $(T/2\pi) \int d\omega$, то можно написать

$$Tg(\omega) = G(\omega),$$

тогда

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega G(\omega) e^{-i\omega t},$$

$$G(\omega) = \int e^{i\omega t} f(t) dt$$

и

$$\int e^{-i(\omega-\omega')t} dt = 2\pi\delta(\omega-\omega').$$

Последнее необходимо, чтобы выполнялось соотношение

$$\sum T\delta_{\omega\omega'} = \frac{T}{2\pi} \int d\omega [2\pi\delta(\omega-\omega')].$$

Эта формула не так полезна, если подынтегральное выражение содержит θ -функцию.

31. Выведите снова функцию Грина $G(k_b, k_a)$ для двухуровневой системы, положив, однако,

$$\langle k_a | W | k_a \rangle = \langle k_b | W | k_b \rangle \neq 0$$

и вычислив $\sum(k, E)$ во всех порядках по W .

Результирующую сумму $\sum(k, E)$ можно использовать для получения простого и разумного результата для $G(k_b, k_b)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Seitz F.*, *Modern Theory of Solids*, New York, 1940. (Имеется перевод: *Зейтц Ф.*, *Современная теория твердого тела*, М.—Л., 1949.)
2. *Slater J. C.*, *Phys. Rev.*, **81**, 385 (1951).

3. *Kohn W., Sham L. J.*, Phys. Rev., **140**, A1133 (1965).
4. *Koortmans T.*, Physica, **1**, 104 (1933).
5. *Kittel C.*, Quantum Theory of Solids, New York, 1963. (Имеется перевод: *Куммель Ч.*, Квантовая теория твердых тел, изд-во «Наука», 1967.)
6. *Herman F., Kortum R. L., Kuglin C. D., Van Dyke J. P.*, в книге «Methods of Computational Physics», eds. Alder B., Fernbach S., Rotenberg M., vol. 8, New York, 1968.
7. *Chodorow M.*, Phys. Rev., **55**, 675 (1939).
8. *Segall B.*, Phys. Rev., **125**, 109 (1962).
9. *Burdick G. A.*, Phys. Rev., **129**, 138 (1963).
10. *Slater J. C.*, Phys. Rev., **165**, 655, 658 (1968).
11. *Friedel J.*, Phil. Mag., **43**, 153 (1952).
12. *Wigner E., Seitz F.*, Phys. Rev., **43**, 804 (1933); **46**, 509 (1934).
13. *Altmann S. L., Bradley C. J.*, Proc. Phys. Soc., **86**, 519 (1965).
14. *Altmann S. L., Davies B. L., Hartford A. R.*, Journ. Phys., C **1** (2), 1633 (1968).
15. *Herring C.*, Phys. Rev., **57**, 1169 (1940).
16. *Loucks T. L.*, The Augmented Plane Wave Method, New York, 1967.
17. *Slater J. C.*, Phys. Rev., **51**, 846 (1937).
18. *Ham F. S., Segall B.*, Phys. Rev., **124**, 1786 (1961).
19. *Bouckaert L. P., Smoluchowski R., Wigner E. P.*, Phys. Rev., **50**, 58 (1936).
20. *Tinkham M.*, Group Theory and Quantum Mechanics, New York, 1964.
21. *Harrison W. A.*, Pseudopotentials in the Theory of Metals, New York, 1966. (Имеется перевод: *Харрисон У.*, Псевдопотенциалы в теории металлов, изд-во «Мир», 1968.)
22. *Shaw R. W., Jr.*, Phys. Rev., **174**, 769 (1968).
23. *Heine V., Abarenkov I. V.*, Phil. Mag., **9**, 451 (1964).
24. «The Fermi Surface», eds. Harrison W. A., Webb M. B., New York, 1960.
25. *Mercouroff W.*, La Surface de Fermi des Métaux, Paris, 1967.
26. *Segall B.*, Phys. Rev., **124**, 1797 (1961).
27. *Herman F., Kortum R. L., Kuglin C. D., Shay J. L.*, в книге «II—VI Semiconducting Compounds», ed. Thomas D. G., 1967 International Conference, New York, 1967.
28. *Harrison W. A.*, Phys. Rev., **131**, 2433 (1963).
29. *Nicholas J. F.*, Proc. Phys. Soc., **84**, 953 (1951).
30. *Kamm G. N., Bohm H. V.*, Phys. Rev., **131**, 111 (1963).
31. *Joseph A. S., Gordon W. L.*, Phys. Rev., **126**, 489 (1962).
32. *Mendelssohn K.*, Cryophysics, New York, 1960, p. 178.
33. *Daunt J. G.*, в книге «Progress in Low Temperature Physics», Amsterdam, 1955.
34. *Langer J. C.*, Phys. Rev., **120**, 714 (1960); **124**, 1003 (1961).
35. *Prange R. E., Kadanoff L. P.*, Phys. Rev., **134**, 566 (1964).
36. *Phillips J. C., Kleinman L.*, Phys. Rev., **116**, 287 (1959).
37. *Kane E. O.*, Journ. Phys. Chem. Solids, **1**, 249 (1956).
38. *Harrison W. A.*, Phys. Rev., **110**, 14 (1958); **123**, 85 (1961).
39. *Kurtin S., McGill T. C., Mead C. A.*, Phys. Rev. Lett., **22**, 1433 (1969).
40. *Mott N. F., Allgaier R. S.*, Phys. Status Solidi, **21**, 343 (1967).
41. *Knox R. S.*, Theory of Excitons, Academic, New York, 1963. (Имеется перевод: *Нокс Р. С.*, Теория экситонов, изд-во «Мир», 1966.)
42. *Jerome D., Rice T. M., Kohn W.*, Phys. Rev., **158**, 462 (1967).
43. *Weinreich G.*, Solids, Elementary Theory for Advanced Students, New York, 1965.
44. *Fritzsche H.*, Phys. Rev., **125**, 1560 (1962).
45. *Schiff L. I.*, Quantum Mechanics, New York, 1949. (Имеется перевод: *Шифф Л.*, Квантовая механика, ИЛ, 1957.)
46. *Shaw R. W., Harrison W. A.*, Phys. Rev., **163**, 604 (1967).
47. *Messiah A.*, Quantum Mechanics, New York, 1965.

48. *Allotey F. K.*, Phys. Rev., 157, 467 (1967).
49. *Harrison W. A.*, Phys. Rev., 181, 1036 (1969).
50. *Deegan R. A., Twose W. D.*, Phys. Rev., 164, 993 (1967).
51. *Saffren M.*, в книге «The Fermi Surface», eds. Harrison W. A., Webb M. B., New York, 1960.
52. *Hodges L., Ehrenreich H.*, Phys. Rev. Lett., 16, 203 (1965).
53. *Mueller F. M.* Phys. Rev., 153, 659 (1967).
54. *Heine V.*, Phys. Rev., 153, 673 (1967).
55. «The Properties of Liquid Metals», eds. Adams P. D., Davies H. A., Epstein S. G., London, 1967.
56. *Shaw R. W., Smith N.*, Phys. Rev., 178, 985 (1969).
57. *Edwards S. F.*, Proc. Roy. Soc., A267, 518 (1962).
58. *Kubo R.*, Lectures in Theoretical Physics, vol. 1, New York, 1959.
59. *Mathews J., Walker R. L.*, Mathematical Methods of Physics, New York, 1964.
60. *Gamertsfelder C.*, Journ. Chem. Phys., 9, 450 (1941).
- 61*. *Хейне В.*, Теория групп в квантовой механике, ИЛ, 1963.
- 62*. Solid State Physics, ed. Ehrenzich H., Seitz F., Turnbull D., Vol. 24, New York, 1970. (Готовится перевод: Хейне В., Козн М. Уэйр Д., Теория псевдопотенциала, изд-во «Мир», 1973.)
- 63*. *Хуанг К.*, Статистическая механика, изд-во «Мир», 1966.
- 64*. *Harrison W. A.*, Physics Today, 22, № 10, 23 (1969).
- 65*. *Хейне В.*, УФН, 91, вып. 3, 527 (1967).
- 66*. *Animalu A. O. E.*, Proc. Roy. Soc., A294, 376 (1966).
- 67*. *Лифшиц И. М., Каганов М. И.*, УФН, вып. 3, 419 (1959); 78, вып. 3, 411 (1962); 87, 389 (1965).
- 68*. *Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И.*, Электронная теория металлов, изд-во «Наука», 1971.
- 69*. *Агранович В. М.*, Теория экситонов, изд-во «Наука», 1968.
- 70*. *Давыдов А. С.*, Экситоны, изд-во «Наука», 1969.
- 71*. *Келдыш Л. В., Копаев Ю. В.*, ФТТ, 6, 2791 (1964).
- 72*. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.*, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.
- 73*. *Хейне В.* в книге: «Физика металлов. I. Электроны», под ред. Дж. Займана, изд-во «Мир», 1972.
- 74*. *Гантмахер В. Ф.*, ЖЭТФ, 43, 345 (1962).
- 75*. «Физика простых жидкостей» под ред. Г. Темперли, Дж. Роулинсона, Дж. Рашбрука, изд-во «Мир», 1971.