

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

§ 55. Электрон в периодическом поле

Электронные оболочки атомов в кристалле сильно взаимодействуют друг с другом, в результате чего уже нельзя говорить об уровнях энергии отдельных атомов, а лишь об уровнях для совокупности электронных оболочек всех атомов тела в целом. Характер электронного энергетического спектра различен для разных типов твердых тел. В качестве предварительного шага для изучения этих спектров необходимо, однако, рассмотреть более формальную задачу о поведении отдельного электрона во внешнем пространственно-периодическом электрическом поле, которое служит моделью кристаллической решетки. Этому посвящены §§ 55—60.

Периодичность поля означает, что оно не меняется при параллельном переносе на любой вектор вида $\mathbf{a} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ (где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — основные периоды решетки; n_1, n_2, n_3 — целые числа):

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r}). \quad (55,1)$$

Поэтому и уравнение Шредингера, описывающее движение электрона в таком поле, инвариантно относительно любого преобразования $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$. Отсюда следует, что если $\psi(\mathbf{r})$ есть волновая функция некоторого стационарного состояния, то $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ тоже есть решение уравнения Шредингера, описывающее то же самое состояние электрона. Это означает, что обе функции должны совпадать с точностью до постоянного множителя: $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \text{const} \cdot \psi(\mathbf{r})$. Очевидно, что const должна быть равна по модулю единице; в противном случае при неограниченном повторении смещения на \mathbf{a} (или на $-\mathbf{a}$) волновая функция стремилась бы к бесконечности. Общий вид функции, обладающей таким свойством, следующий:

$$\psi_{sk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{sk}(\mathbf{r}), \quad (55,2)$$

где \mathbf{k} — произвольный (вещественный) постоянный вектор, а u_{sk} — периодическая функция

$$u_{sk}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{sk}(\mathbf{r}). \quad (55,3)$$

Этот результат был впервые получен *Ф. Блохом* (*F. Bloch*, 1929); волновые функции вида (55,2) называют *функциями Блоха*, и в этой связи об электроны в периодическом поле часто говорят как о блоховском электроны.

При заданном значении \mathbf{k} уравнение Шредингера имеет, вообще говоря, бесконечный ряд различных решений, отвечающих бесконечному ряду различных дискретных значений энергии электрона $\epsilon(\mathbf{k})$; индекс s в $\psi_{s\mathbf{k}}$ нумерует эти решения. Такой же индекс (номер *энергетической зоны*) надо приписать и различным ветвям функции $\epsilon = \epsilon_s(\mathbf{k})$ — закону дисперсии электрона в периодическом поле. В каждой зоне энергия пробегает значения в некотором конечном интервале.

Для различных зон эти интервалы разделены «энергетическими щелями» или же частично перекрываются; в последнем случае в области перекрытия каждому значению энергии отвечают различные (в каждой зоне) значения \mathbf{k} . Геометрически это означает, что изоэнергетические поверхности, отвечающие двум перекрывающимся зонам s и s' , находятся в различных областях \mathbf{k} -пространства. Формально перекрытие зон означает вырождение — различные состояния обладают одинаковой энергией, но поскольку этим состояниям отвечают различные значения \mathbf{k} , то это не приводит к каким-либо особенностям в спектре. От общего случая перекрытия надо отличать пересечение зон, когда значения $\epsilon_s(\mathbf{k})$ и $\epsilon_{s'}(\mathbf{k})$ совпадают в одних и тех же точках \mathbf{k} (изоэнергетические поверхности пересекаются). Обычно под вырождением понимают только такой случай; пересечение приводит к появлению определенных особенностей в спектре.

Все функции $\psi_{s\mathbf{k}}$ с различными s или \mathbf{k} , разумеется, взаимно ортогональны. В частности, из ортогональности $\psi_{s\mathbf{k}}$ с различными s и одинаковыми \mathbf{k} следует ортогональность функций $u_{s\mathbf{k}}$. При этом ввиду их периодичности достаточно производить интегрирование по объему v одной элементарной ячейки решетки; при соответствующей нормировке

$$\int u_{s'\mathbf{k}}^* u_{s\mathbf{k}} dv = \delta_{ss'}. \quad (55,4)$$

Смысл вектора \mathbf{k} состоит в том, что определяет поведение волновой функции при трансляциях: преобразование $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ умножает ее на $e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}$,

$$\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} \psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (55,5)$$

Отсюда сразу следует, что величина \mathbf{k} по самому своему определению неоднозначна: значения, отличающиеся на любой вектор \mathbf{b} обратной решетки, приводят к одинаковому поведению волновой функции (множитель $\exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{b})\mathbf{a}\} = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a})$). Другими словами, такие значения \mathbf{k} физически эквивалентны; они соответствуют одному и тому же состоянию электрона, т. е. одной

и той же волновой функции. Можно сказать, что функции $\psi_{\mathbf{s}\mathbf{k}}$ периодичны (в обратной решетке) относительно индекса \mathbf{k} :

$$\psi_{\mathbf{s}, \mathbf{k} + \mathbf{b}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{s}\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (55,6)$$

Периодична также и энергия:

$$\varepsilon_{\mathbf{s}}(\mathbf{k} + \mathbf{b}) = \varepsilon_{\mathbf{s}}(\mathbf{k}). \quad (55,7)$$

Функции (55,2) обнаруживают определенное сходство с волновыми функциями свободного электрона — плоскими волнами $\psi = \text{const} \cdot \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar)$; при этом роль сохраняющегося импульса играет постоянный вектор $\hbar\mathbf{k}$. Мы снова (как и для фонона — см. V § 71) приходим к понятию о *квазиимпульсе* электрона в периодическом поле. Подчеркнем, что истинного сохраняющегося импульса в этом случае вообще нет, так как во внешнем поле закон сохранения импульса не имеет места. Замечательно, однако, что в периодическом поле электрон тем не менее характеризуется некоторым постоянным вектором.

В стационарном состоянии с заданным квазиимпульсом $\hbar\mathbf{k}$ истинный импульс может иметь, с различными вероятностями, бесконечное число значений вида $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{b})$. Это следует из того, что разложение периодической в пространстве функции в ряд Фурье содержит члены вида $e^{i\mathbf{b}\mathbf{r}}$:

$$u_{\mathbf{s}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} a_{\mathbf{s}, \mathbf{k} + \mathbf{b}} e^{i\mathbf{b}\mathbf{r}},$$

и потому разложение волновой функции (55,2) на плоские волны

$$\psi_{\mathbf{s}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} a_{\mathbf{s}, \mathbf{k} + \mathbf{b}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{b})\mathbf{r}}. \quad (55,8)$$

Тот факт, что коэффициенты разложения зависят только от сумм $\mathbf{k} + \mathbf{b}$, выражает собой свойство периодичности в обратной решетке (55,6). Подчеркнем, что этот факт, как и свойство (55,6), не есть дополнительное условие, налагаемое на волновую функцию, а является автоматическим следствием периодичности поля $U(\mathbf{r})$.

Все физически различные значения вектора \mathbf{k} лежат в одной элементарной ячейке обратной решетки. «Объем» этой ячейки равен $(2\pi)^3/v$, где v — объем элементарной ячейки самой решетки кристалла. С другой стороны, объем $\mathbf{k}/2\pi$ -пространства определяет число соответствующих ему состояний (приходящихся на единичный объем тела). Таким образом, число таких состояний, заключенных в каждой энергетической зоне, равно $1/v$, т. е. числу элементарных ячеек в единице объема кристалла.

Помимо своей периодичности в \mathbf{k} -пространстве функции $\varepsilon_{\mathbf{s}}(\mathbf{k})$ обладают также и симметрией по отношению к поворотам и отражениям, отвечающим симметрии направлений (кристалличе-

скому классу) решетки. При этом, независимо от наличия или отсутствия центра симметрии в данном кристаллическом классе, всегда

$$\varepsilon_s(-\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{k}). \quad (55,9)$$

Это свойство — следствие симметрии относительно обращения времени. Действительно, в силу этой симметрии, если $\psi_{s\mathbf{k}}$ — волновая функция стационарного состояния электрона, то и комплексно-сопряженная функция $\psi_{s\mathbf{k}}^*$ описывает некоторое состояние с той же энергией. Но $\psi_{s\mathbf{k}}^*$ умножается при трансляциях на $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}}$, т. е. ей отвечает квазиимпульс $-\mathbf{k}^1$.

Рассмотрим, далее, два электрона в периодическом поле. Рассматривая их вместе как одну систему с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, мы найдем, что при параллельном переносе эта функция должна умножиться на множитель вида $e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}$, где \mathbf{k} можно назвать квазиимпульсом системы. С другой стороны, на больших расстояниях между электронами $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ сводится к произведению волновых функций отдельных электронов и при трансляции умножится на $e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{a}}e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{a}}$. Из требования совпадения обоих видов записи этого множителя находим, что

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{b}. \quad (55,10)$$

В частности, отсюда следует, что при столкновении двух электронов, движущихся в периодическом поле, сумма их квазиимпульсов сохраняется с точностью до вектора обратной решетки:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 + \mathbf{b}. \quad (55,11)$$

Дальнейшая аналогия между импульсом и истинным импульсом выясняется при определении средней скорости электрона. Вычисление ее требует знания оператора скорости $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{r}}$ в \mathbf{k} -представлении. Операторы в этом представлении действуют на коэффициенты $c_{s\mathbf{k}}$ разложения произвольной волновой функции по собственным функциям $\psi_{s\mathbf{k}}$:

$$\psi = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \psi_{s\mathbf{k}} d^3k. \quad (55,12)$$

Найдем сначала оператор $\hat{\mathbf{r}}$. Имеем тождественно

$$\mathbf{r}\psi = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \mathbf{r}\psi_{s\mathbf{k}} d^3k = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \left(-i \frac{\partial \psi_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + ie^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\partial u_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right) d^3k.$$

¹⁾ При наличии перекрытия зон из этих рассуждений следует, строго говоря, лишь что $\varepsilon_s(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{s'}(\mathbf{k})$, где s и s' — номера каких-либо зон. Равенства (55,9) можно, однако, всегда добиться путем надлежащего определения номеров различных ветвей функции $\varepsilon(\mathbf{k})$.

В первом члене производим интегрирование по частям, а во втором разложим периодическую (как и сама u_{sk}) функцию $\partial u_{sk}/\partial \mathbf{k}$ по системе взаимно ортогональных функций u_{sk} с тем же \mathbf{k} :

$$\frac{\partial u_{sk}}{\partial \mathbf{k}} = -i \sum_{s'} \langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle u_{s'\mathbf{k}}, \quad (55,13)$$

где $\langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle$ — постоянные коэффициенты. Тогда получим

$$\begin{aligned} \mathbf{r}\psi &= \sum_s \int i\psi_{sk} \frac{\partial c_{sk}}{\partial \mathbf{k}} d^3k + \sum_{ss'} \int c_{sk} \langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle \psi_{s'\mathbf{k}} d^3k = \\ &= \sum_s \int \left\{ i \frac{\partial c_{sk}}{\partial \mathbf{k}} + \sum_{s'} \langle s'\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s\mathbf{k} \rangle c_{s'\mathbf{k}} \right\} \psi_{sk} d^3k. \end{aligned}$$

С другой стороны, по определению оператора $\hat{\mathbf{r}}$, должно быть

$$\mathbf{r}\psi = \sum_s \int (\hat{\mathbf{r}}c_{sk}) \psi_{sk} d^3k.$$

Сравнив с полученным выражением, находим

$$\hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \hat{\Omega}, \quad (55,14)$$

где оператор (эрмитов) $\hat{\Omega}$ задается своей матрицей $\langle s'\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s\mathbf{k} \rangle$. Существенно, что эта матрица диагональна по индексу \mathbf{k} , и поэтому оператор $\hat{\Omega}$ коммутативен с оператором $\hat{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{k}$.

Оператор скорости получается, по общим правилам, путем коммутирования оператора $\hat{\mathbf{r}}$ с гамильтонианом электрона. В \mathbf{k} -представлении гамильтониан \hat{H} является диагональной по \mathbf{k} и номерам зон s матрицей с элементами $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ ¹⁾. Оператор же $\partial/\partial \mathbf{k}$, действующий только на переменную \mathbf{k} , диагонален по номерам s . Поэтому в выражении

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}\hat{H}) = -\frac{1}{\hbar} \left(\hat{H} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \hat{H} \right) + \hat{\Omega}$$

первый член является диагональной матрицей с элементами

$$-\frac{1}{\hbar} \left(\varepsilon_s(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \varepsilon_s(\mathbf{k}) \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}.$$

Матричные же элементы $\hat{\Omega}$ связаны с матричными элементами $\hat{\Omega}$ соотношением

$$\langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle = \frac{i}{\hbar} [\varepsilon_s(\mathbf{k}) - \varepsilon_{s'}(\mathbf{k})] \langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle;$$

¹⁾ Точнее, надо говорить о $\mathbf{k}s$ -представлении. Напомним, что волновые функции в этом представлении, $c_{s\mathbf{k}}$, не вполне произвольны — они должны быть периодичны по \mathbf{k} .

это выражение обращается в нуль при $s = s'$, т. е. $\hat{\Omega}$ не имеет элементов, диагональных по номеру зоны. Таким образом, окончательно находим для матричных элементов скорости электрона

$$\langle sk | v | sk \rangle = \frac{\partial \epsilon_s(k)}{\hbar \partial k}, \quad \langle sk | v | s'k \rangle = \langle sk | \hat{\Omega} | s'k \rangle \quad (s \neq s'). \quad (55,15)$$

Диагональные элементы этой матрицы представляют собой средние значения скорости в соответствующих состояниях. Эти значения, следовательно, как функции квазиимпульса даются выражением

$$\bar{v}_s = \frac{\partial \epsilon_s(k)}{\hbar \partial k}, \quad (55,16)$$

полностью аналогичным обычному классическому соотношению.

До сих пор мы вели изложение, отвлекаясь от наличия у электронов спина. В пренебрежении релятивистскими эффектами (спин-орбитальным взаимодействием) учет спина приводит просто к двукратному вырождению каждого уровня энергии с заданным значением квазиимпульса k — по двум значениям проекции спина на какое-либо фиксированное направление в пространстве. С учетом же спин-орбитального взаимодействия ситуация различна в зависимости от того, имеет ли или нет кристаллическая решетка центр инверсии.

Спин-орбитальное взаимодействие для электрона в периодическом поле описывается оператором

$$\hat{H}_{st} = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} [\sigma \nabla U] \nabla, \quad (55,17)$$

где σ — матрица Паули (см. IV § 33). Волновые функции, на которые действует этот оператор, — спиноры первого ранга $\psi_{sk\alpha}$, где α — спинорный индекс. Согласно теореме Крамерса (см. III § 60), относящейся к любому (в том числе периодическому) электрическому полю, комплексно-сопряженные спиноры $\psi_{sk\alpha}$ и $\psi_{sk\alpha}^*$ всегда описывают два различных состояния с одной и той же энергией. Поскольку в то же время функция $\psi_{sk\alpha}^*$ отвечает квазиимпульсу $-k$, то мы снова (теперь уже и с учетом спин-орбитального взаимодействия) приходим к соотношению типа (55,9):

$$\epsilon_{s\sigma}(-k) = \epsilon_{s\sigma'}(k), \quad (55,18)$$

где индексы σ и σ' отличают два различных (обращенных по времени) спиновых состояния ¹⁾.

¹⁾ С учетом спин-орбитального взаимодействия оператор проекции спина уже не коммутативен с гамильтонианом, так что эта проекция не сохраняется и спиновые состояния не могут, строго говоря, характеризоваться этим числом.

Равенство (55,18) не означает, конечно, вырождения в том смысле, о котором говорилось выше, поскольку энергии в обеих сторонах равенства относятся к различным значениям k . Но если решетка обладает центром инверсии, то состояния с k и $-k$ имеют одинаковую энергию. Тогда мы приходим к равенству $\varepsilon_{s\sigma}(k) = \varepsilon_{s\sigma}(-k)$, снова означающему двукратное вырождение каждого уровня с заданным квазиимпульсом.

Наряду с вырождением, связанным с симметрией относительно обращения времени, для электрона в периодическом поле может существовать также и вырождение, обязанное пространственной симметрии решетки. Этим вопросам посвящен ниже § 68.

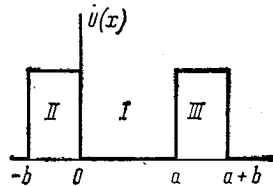


Рис. 10.

Задачи

1. Найти закон дисперсии для одномерного движения электрона в периодическом поле, изображенном на рис. 10 (*R. Kronig, W. G. Penney, 1930*).

Решение. Волновая функция в области ямы I ($0 < x < a$) имеет вид

$$\psi = c_1 e^{i\kappa_1 x} + c_2 e^{-i\kappa_1 x}, \quad \kappa_1 = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar}, \quad (1)$$

а в области барьера II ($-b < x < 0$):

$$\psi = c_3 e^{i\kappa_2 x} + c_4 e^{-i\kappa_2 x}, \quad \kappa_2 = \sqrt{2m(\varepsilon - U_0)/\hbar}. \quad (2)$$

В области следующего барьера III волновая функция должна отличаться от (2) лишь фазовым множителем $e^{ik(a+b)}$ ($a+b$ — период поля):

$$\psi = e^{ik(a+b)} (c_3 e^{i\kappa_2(x-a-b)} + c_4 e^{-i\kappa_2(x-a-b)}). \quad (3)$$

Условия непрерывности ψ и ψ' в точках $x=0$ и $x=a$ дают четыре уравнения для c_1, \dots, c_4 ; условие совместности этих уравнений приводит к дисперсионному уравнению

$$\cos k(a+b) = \cos \kappa_1 a \cdot \cos \kappa_2 b - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_2}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right) \sin \kappa_1 a \cdot \sin \kappa_2 b, \quad (4)$$

определяющему в неявном виде искомую зависимость $\varepsilon(k)$. При $\varepsilon < U_0$ величина κ_2 мнима, и тогда уравнение надо записать в виде

$$\cos k(a+b) = \cos \kappa_1 a \cdot \operatorname{ch} |\kappa_2 b| + \frac{1}{2} \left(\frac{|\kappa_2|}{\kappa_1} - \frac{\kappa_1}{|\kappa_2|} \right) \sin \kappa_1 a \cdot \operatorname{sh} |\kappa_2 b|. \quad (5)$$

Если в (5) перейти к пределу $U_0 \rightarrow \infty$, $b \rightarrow 0$ при $U_0 b = \text{const} \equiv Pa$ получим дисперсионное уравнение

$$\cos ka = \cos \kappa_1 a + \frac{Pma^2 \sin \kappa_1 a}{\hbar^2 \kappa_1 a}. \quad (6)$$

Оно решает задачу об уровнях энергии в периодическом поле, составленном из δ -функциональных пиков:

$$U(x) = aP \sum_n \delta(x - an).$$

На рис. 11 дано графическое построение, иллюстрирующее распределение корней уравнения (6). Здесь изображена правая сторона уравнения как функция от $k_1 a$; когда она пробегает значения между ± 1 , корни уравнения пробегают значения в интервалах, указанных жирными отрезками на оси абсцисс.

2. Найти закон дисперсии для одномерного движения частицы в слабом периодическом поле $U(x)$.

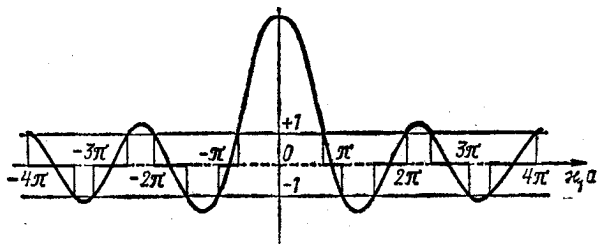


Рис. 11.

Решение. Рассматривая поле как малое возмущение, исходим из нулевого приближения, в котором частица совершает свободное движение, описываемое плоской волной

$$\psi^{(0)}(x) = (Na)^{-1/2} e^{ikx}$$

(нормировка на 1 частицу на длине Na ; a — период поля); энергия частицы $\varepsilon^{(0)} = \hbar^2 k^2 / 2m$. Представим периодическую функцию $U(x)$ в виде ряда Фурье

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n e^{2\pi i n x / a}.$$

Матричные элементы этого поля по отношению к плоским волнам отличны от нуля только для переходов между состояниями с волновыми векторами k и $k' = k + 2\pi n/a$ и в этих случаях равны $U_{k'k} = U_n$.

В первом приближении теории возмущений поправка к энергии дается диагональным матричным элементом $\varepsilon^{(1)} = U_{kk} = U_0$, т. е. не зависящей от k постоянной, лишь смещающей начало отсчета энергий. Исключение составляют, однако, уровни энергии в окрестности значений $k = \pi n/a$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$). В этих точках k отличается лишь знаком от значения $k' = k - 2\pi n/a$, так что энергии $\varepsilon^{(0)}(k)$ и $\varepsilon^{(0)}(k')$ совпадают. В окрестности этих значений, следовательно, отличны от нуля матричные элементы для переходов между состояниями с близкими энергиями, и для определения поправки должен быть использован метод теории возмущений, относящийся к случаю близких собственных значений (см. III § 79). Ответ дается формулой III (79,4), согласно которой в данном случае

$$\begin{aligned} \varepsilon_n(k) &= \frac{1}{2} [\varepsilon^{(0)}(k) + \varepsilon^{(0)}(k - K_n)] \pm \\ &\pm \left\{ \frac{1}{4} [\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}(k - K_n)]^2 + |U_n|^2 \right\}^{1/2}, \end{aligned}$$

где $K_n = 2\pi n/a$, а аддитивная постоянная U_0 опущена; выбор знака перед корнем определяется требованием, чтобы вдали от значения $k = \pm K_n/2$ функция $\varepsilon(k)$ переходила бы в $\varepsilon^{(0)}(k)$; знаки + и — относятся соответственно к областям $|k| > |K_n/2|$ и $|k| < |K_n/2|$. В самих точках $k = \pm K_n/2$ функция $\varepsilon(k)$

испытывает скачок, равный $2|U_n|$. На рис. 12, *a* энергия $\varepsilon(k)$ изображена как функция переменной k , пробегающей значения от $-\infty$ до ∞ . Если же привести значения k (квазиимпульса) к интервалу между $\pm \pi/a$, то мы придем к рис. 12, *б*, где изображены две первые энергетические зоны.

Обратим внимание на то, что зоны на рис. 12 (как и на рис. 11) не перекрываются. Это общее свойство одномерного движения в периодическом поле. Каждый уровень энергии двукратно вырожден (по знаку k), а большая кратность вырождения при одномерном движении вообще невозможна. Отметим также, что в одномерном случае границы каждой зоны (минимальные и максимальные значения $\varepsilon(k)$) соответствуют значениям $k=0$ и $k=\pi/a$. Дело в том, что волновые функции, соответствующие энергиям в запрещенном интервале, умножаются при смещении на период a на некоторый вещественный множитель (в силу чего и возрастают неограниченно на бесконечности). Волновые же функции в разрешенных интервалах энергии при таком переносе умножаются на $e^{ik a}$. На границе между запрещенным и разрешенным интервалами этот множитель, следовательно, должен быть одновременно вещественным и равным по модулю единице, откуда и следует равенство ka нулю или π .

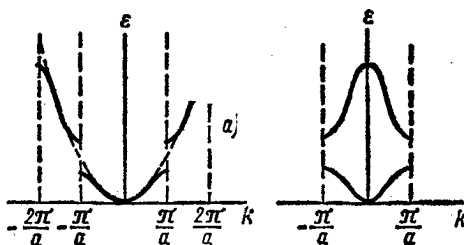


Рис. 12.

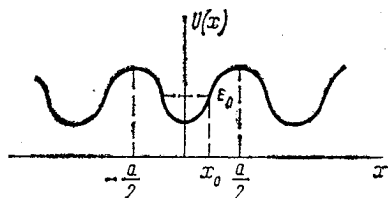


Рис. 13.

в двойной яме (III § 50, задача 3). Пусть $\psi_0(x)$ — нормированная волновая функция, описывающая движение (с некоторой энергией ε_0 , рис. 13) в одной из ям, т. е. экспоненциально затухающая в обе стороны от границ этой ямы; эта функция вещественна и может быть четной или нечетной по переменной x . Правильная же волновая функция нулевого приближения для движения частицы в периодическом поле представляет собой сумму

$$\psi_k(x) = C \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik a n} \psi_0(x - a n), \quad (1)$$

где C — нормировочная постоянная (при сдвиге $x \rightarrow x + a$ эта функция умножается, как и следовало, на $e^{ik a}$).

Пишем уравнения Шредингера

$$\psi_k'' + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon(k) - U(x)] \psi_0 = 0, \quad \psi_0'' + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon_0 - U(x)] \psi_0 = 0,$$

умножаем первое на ψ_0 , второе на ψ_k , вычитаем почленно и интегрируем по dx в пределах от $-a/2$ до $a/2$ (рис. 13). Замечаем, что поскольку

произведения $\psi_0(x)\psi_0(x-an)$ с $n \neq 0$ исчезающе малы везде, то

$$\int_{-a/2}^{a/2} \psi_k(x)\psi_0(x) dx \approx C.$$

Находим

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2mC} [\psi_0' \psi_k - \psi_0 \psi_k'] \Big|_{-a/2}^{a/2}.$$

При $x = a/2$ в сумме (1) должны быть сохранены лишь члены с $n=0$ и $n=1$, причем $\psi_0(-a/2) = \pm \psi_0(a/2)$ в зависимости от четности или нечетности функции $\psi_0(x)$:

$$\psi_k(a/2) = C\psi_0(a/2)(1 \pm e^{ik\alpha}),$$

$$\psi_k'(a/2) = C\psi_0'(a/2)(1 \mp e^{ik\alpha});$$

аналогичным образом, при $x = -a/2$ должны быть сохранены лишь члены с $n=0$ и $n=-1$. В результате получим

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_0 = \pm \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0\left(\frac{a}{2}\right) \psi_0'\left(\frac{a}{2}\right) \cos ka.$$

Сюда надо подставить значения

$$\psi_0\left(\frac{a}{2}\right) = \left[\frac{m\omega}{2\pi\rho(a/2)} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{a/2} |p(x)| dx \right],$$

$$\psi_0'\left(\frac{a}{2}\right) = \frac{\rho(a/2)}{\hbar} \psi_0\left(\frac{a}{2}\right),$$

где ω — классическая частота колебаний частицы в яме; x_0 — точка поворота, отвечающая энергии ε_0 . Окончательно:

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_0 = \pm \frac{\hbar\omega}{\pi} \sqrt{D} \cos ka, \quad D = \exp \left[-\frac{4}{\hbar} \int_{x_0}^{a/2} |p(x)| dx \right].$$

Таким образом, каждый уровень энергии ε_0 , отвечающий движению частицы в изолированной яме, расширяется в узкую полосу (зону) с шириной $2\hbar\omega D^{1/2}/\pi$, определяемой коэффициентом проницаемости D потенциального барьера, разделяющего две ямы.

§ 56. Влияние внешнего поля на движение электрона в решетке

Рассмотрим движение электрона при наложении на решетку постоянного магнитного поля \mathbf{H} . Если исходить из гамильтониана электрона в периодическом поле $U(\mathbf{r})$ в координатном представлении:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad (56,1)$$

(где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ — оператор истинного импульса), то введение