

водника возрастает. Соответствующие примеси называются *допорами*. Они поставляют электроны в зону проводимости и увеличивают проводимость полупроводника. Если же добавочные уровни находятся вблизи края валентной зоны, то электроны из валентной зоны получают возможность переходить на эти уровни. В валентной зоне образуются дырки. Проводимость полупроводника также увеличивается. Она называется *дырочной проводимостью*, а соответствующая примесь — *акцептором*.

8. Проводимость полупроводников сильно увеличивается с повышением температуры. В чистых полупроводниках увеличение интенсивности теплового движения электронов облегчает вероятность перехода их через энергетическую щель из валентной зоны в зону проводимости. При наличии примесей также возрастает вероятность переходов электронов с примесных уровней в зону проводимости или переходов электронов из валентной зоны на те же примесные уровни. Все эти процессы ведут к повышению в полупроводнике концентрации носителей тока: электронов и дырок. С этим и связано увеличение проводимости полупроводников с повышением температуры.

Иначе ведут себя металлы. Концентрация электронов в них почти не зависит от температуры. Проводимость определяется главным образом *длиной свободного пробега* электрона. Длина свободного пробега от части ограничивается примесями решетки. Соответствующая часть проводимости не зависит от температуры. В бесконечной идеальной кристаллической решетке, лишенной всяких примесей и дефектов, плоская волна де Броиля, соответствующая движению электрона, распространялась бы *без затухания и рассеяния*. Проводимость такого кристалла была бы *бесконечно велика*. В действительности свободный пробег электрона ограничен размерами кристалла (ср. с § 57, пункт 4), а также тепловыми флуктуациями и дефектами кристаллической решетки. Они возрастают с температурой, уменьшая длину свободного пробега электрона. В результате *проводимость чистых металлов уменьшается с повышением температуры*. (Здесь мы исключили из рассмотрения сверхпроводники.)

§ 59. Зонная структура и волны Блоха

1. Зонную структуру энергетического спектра кристалла можно получить также из уравнения Шредингера для стационарных состояний. Однако точное уравнение Шредингера для кристалла в целом решить и исследовать невозможно из-за громадного числа частиц (электронов и атомных ядер) в кристалле. Это уравнение необходимо предварительно упростить. При таком упрощении считается, что состояние кристалла можно приближенно описать не полной волновой функцией, зависящей от координат всех электронов и атомных ядер, а *одночастичными*

ми волновыми функциями каждого электрона. Каждая из таких волновых функций зависит уже только от координат *одного* электрона, который находится в силовом поле, создаваемом атомными ядрами и остальными электронами кристалла. Ядра ввиду их массивности считаются при этом неподвижными, а электроны как бы «размазаны» по всему кристаллу. Таким путем многочастичное волновое уравнение Шредингера заменяется одиночастичным для каждого электрона.

Необходимо отметить, что потенциальное силовое поле, в котором находится рассматриваемый электрон, не задано, а само зависит от состояний электронов. Такое поле называется *самосогласованным*. Согласование состоит в том, что, с одной стороны, одночастичные волновые функции отдельных электронов формируются самосогласованным полем; с другой стороны, самосогласованное поле само зависит от вида одночастичных волновых функций электронов. Метод самосогласованного поля находит свое оправдание в том, что большинство результатов, к которым он приводит, согласуются с опытом. Это в свою очередь связано не с явным видом самосогласованного поля, а главным образом с его *пространственной периодичностью*, определяемой периодичностью самой кристаллической решетки.

Необходимо заметить также, что волновые функции достаточно ввести не для всех, а только для внешних, т. е. *валентных электронов*, сравнительно слабо связанных с атомами решетки. Остальные электроны можно считать прочно связанными с атомными ядрами. Получается модель решетки из положительно заряженных ионов, которые рассматриваются неподвижными. Пространственно периодическое самосогласованное поле создается такими ионами и плавающими между ними валентными электронами.

2. В такой постановке рассмотрим задачу о виде стационарных одночастичных волновых функций электрона в кристалле и структуре энергетического спектра электрона, предполагая, что внешних силовых полей нет, а сама решетка простирается бесконечно во все стороны. Во избежание математических усложнений ограничимся рассмотрением *одномерного кристалла* (т. е. бесконечной прямолинейной цепочки одинаковых атомов, находящихся на постоянном расстоянии a друг от друга). Уравнение Шредингера для стационарных состояний в этом случае имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = \mathcal{E}\psi, \quad (59.1)$$

или

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa^2(x, \psi) = 0, \quad (59.2)$$

где введено обозначение

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - U). \quad (59.3)$$

Это — линейное дифференциальное уравнение второго порядка с периодически меняющимися коэффициентами, поскольку из-за отсутствия внешнего поля $\kappa^2(x+a) = \kappa^2(x)$ для любого x . Оно называется *уравнением Хилла* (частный случай *уравнения Матьё*).

Исследуем общий вид решений уравнения Хилла, используя периодичность функции $\kappa^2(x)$. В силу этой периодичности

$$\frac{d^2\psi(x+a)}{dx^2} + \kappa^2(x+a)\psi(x+a) = \frac{d^2\psi(x+a)}{dx^2} + \kappa^2(x)\psi(x+a).$$

Отсюда видно, что если функция $\psi(x)$ есть решение уравнения Хилла, то функция $\psi(x+a)$ будет также решением того же уравнения. Если $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ — какие-либо два произвольных линейно независимых решения уравнения Хилла, то общее решение его может быть представлено в виде

$$\psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x),$$

где c_1 и c_2 — произвольные постоянные.

Докажем теперь, что среди решений уравнения Хилла существует такое решение $\Phi(x)$, что для любого x $\Phi(x+a) = \lambda\Phi(x)$, где λ — постоянная. Если такое решение существует, то его, разумеется, также можно представить в виде

$$\Phi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x).$$

Для упрощения вычислений выберем линейно независимые решения $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ так, чтобы они удовлетворяли условиям

$$\psi_1(0) = 1, \quad \psi'_1(0) = 0;$$

$$\psi_2(0) = 0, \quad \psi'_2(0) = 1.$$

(В этом случае говорят, что функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ образуют *фундаментальную систему решений*.) Тогда при $x = 0$ требования $\Phi(x+a) = \lambda\Phi(x)$ и $\Phi'(x+a) = \lambda\Phi'(x)$ запишутся в виде

$$c_1\psi_1(a) + c_2\psi_2(a) = \lambda c_1,$$

$$c_1\psi'_1(a) + c_2\psi'_2(a) = \lambda c_2,$$

или

$$[\psi_1(a) - \lambda]c_1 + \psi_2(a)c_2 = 0,$$

$$\psi'_1(a)c_1 + [\psi'_2(a) - \lambda]c_2 = 0.$$

Для совместности этих линейных однородных уравнений (относительно c_1 и c_2) необходимо и достаточно, чтобы выполнялось

условие

$$\begin{vmatrix} \psi_1(a) - \lambda & \psi_2(a) \\ \psi'_1(a) & \psi'_2(a) - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (59.4)$$

или

$$\lambda^2 - [\psi_1(a) + \psi'_2(a)]\lambda + [\psi_1(a)\psi'_2(a) - \psi'_1(a)\psi_2(a)] = 0.$$

Путем дифференцирования с учетом уравнения (59.2) нетрудно убедиться, что

$$\frac{d}{dx} [\psi_1(x)\psi'_2(x) - \psi'_1(x)\psi_2(x)] = 0.$$

Следовательно, функция, стоящая в квадратных скобках, постоянна. Ее значение найдется, если положить $x = 0$. Тогда она обратится в 1. Такое же значение эта функция будет иметь и при $x = a$. Введем, далее, обозначение

$$\psi_1(a) + \psi'_2(a) = 2L.$$

Величина L , разумеется, постоянна, поскольку используется однозначно определенное (фундаментальное) решение уравнения Хилла (59.2). Она называется *постоянной Ляпунова* (1857—1918). Ее значение определяется функцией χ , т. е. в конце концов параметром \mathcal{E} . Теперь для определения λ получается квадратное уравнение

$$\lambda^2 - 2L\lambda + 1 = 0. \quad (59.5)$$

Из него найдем два значения λ :

$$\lambda_{1,2} = L \pm \sqrt{L^2 - 1}. \quad (59.6)$$

Тем самым определится не одно, а даже *два* решения уравнения (59.2): $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$, обладающие требуемым свойством. (Случай равных корней мы исследовать не будем — он может быть рассмотрен предельным переходом $\lambda_1 \rightarrow \lambda_2$.) Решения $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$ линейно независимы, и их удобно выбрать для представления общего решения в виде

$$\psi = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x). \quad (59.7)$$

Сами решения $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$, конечно, не могут быть найдены, пока функция $\chi^2(x)$ (т. е. в конце концов самосогласованное поле U) неизвестна, а параметр \mathcal{E} не фиксирован. Но это не мешает оперировать функциями $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$ для установления общих свойств решений уравнения Хилла (59.2). А интересующие нас свойства таких решений существенно зависят от величины постоянной Ляпунова L .

3. Допустим сначала, что постоянная L по модулю больше единицы: $|L| > 1$. Тогда оба корня λ_1 и λ_2 вещественны и по модулю один больше, а другой меньше единицы, так как $\lambda_1\lambda_2 = -1$. Поэтому из уравнения $\Phi(x+a) = \lambda\Phi(x)$ следует, что при $x \rightarrow +\infty$ одна из функций $\Phi_1(x)$ или $\Phi_2(x)$ неограниченно

возрастает, а при $x \rightarrow -\infty$ неограниченно возрастает другая. В силу этого при $|L| > 1$ ни одно из решений $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$, а следовательно, и произвольная линейная комбинация их с постоянными коэффициентами (59.7), не может быть волновой функцией электрона в кристалле. Это означает, что в кристалле не существует состояний с энергией \mathcal{E} , для которых $|L| > 1$. Такие энергии образуют запрещенные энергетические зоны.

Если же $|L| < 1$, то можно положить $L = \cos ka$, где k — постоянная. Тогда

$$\lambda_{1,2} = \cos ka \pm i \sin ka = e^{\pm ika}.$$

Следовательно,

$$\Phi_{1,2}(x + a) = e^{\pm ika} \Phi_{1,2}(x), \quad (59.7a)$$

т. е. при изменении x на a модуль функции $\Phi(x)$ не изменяется. Меняется только ее фаза. Обе функции $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$, а также их произвольная линейная комбинация с постоянными коэффициентами могут быть решениями уравнения Шредингера (59.1). Поэтому возможны только такие значения энергии \mathcal{E} , для которых модуль постоянной Ляпунова меньше единицы. Они образуют разрешенные энергетические зоны кристалла.

Как и в предыдущем параграфе, мы пришли к зонной структуре энергетического спектра электрона в кристалле. В пределах каждой зоны энергия электрона меняется непрерывно. Это, конечно, связано с предположением о безграничности цепочки. Если бы цепочка была ограничена, то на ее концах должны были бы выполняться определенные граничные условия, которые бы и превратили непрерывный спектр зоны в ряд более или менее тесно расположенных линий. Для пояснения изложенного полезно рассмотреть модельную задачу I, приводимую в конце этого параграфа.

4. Волновые функции $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$ могут быть представлены в виде

$$\Phi_{1,2}(x) = e^{\pm ikx} P_{1,2}(x).$$

Очевидно, с одной стороны,

$$\Phi_{1,2}(x + a) = e^{\pm ik(x+a)} P_{1,2}(x + a).$$

С другой стороны, ввиду (59.7a),

$$\Phi_{1,2}(x + a) = e^{\pm ika} \Phi_{1,2}(x) = e^{\pm ik(x+a)} P_{1,2}(x).$$

Следовательно,

$$P_{1,2}(x + a) = P_{1,2}(x), \quad (59.8)$$

т. е. обе функции $P_1(x)$ и $P_2(x)$ периодичны с периодом a .

Если еще учесть временной множитель $e^{-i\omega t}$, то в отсутствие внешних силовых полей возможные полные волновые функции

в кристалле можно представить в виде

$$\begin{aligned}\Psi_1(x, t) &= P_1(x) e^{-i(\omega t - kx)}, \\ \Psi_2(x, t) &= P_2(x) e^{-i(\omega t + kx)}.\end{aligned}\quad (59.9)$$

Эти волны описывают «свободное движение» электрона в кристалле, когда все действующие на него силы ограничены взаимодействиями с ионами кристаллической решетки и остальными электронами, а внешних силовых полей нет. Они называются *волнами Блоха* (р. 1905). В отличие от плоских волн де Бройля, распространяющихся в свободном пространстве, в волнах Блоха величины $P_1(x)$ и $P_2(x)$ не постоянны, а *пространственно модулированы*, т. е. периодически меняются вдоль цепочки с периодом a . Из-за такой пространственной модуляции при свободном распространении Ψ -волн в кристалле величину $\hbar k$ называют *квазимпульсом электрона*, тогда как при движении электрона в свободном пространстве такая величина есть просто импульс. В трехмерных кристаллах плоская волна Блоха имеет тот же вид, что и (59.9). Только $P(x)$ заменяется на функцию $P(\mathbf{r})$, обладающую той же пространственной периодичностью, что и сама решетка, а волновое число k — на волновой вектор \mathbf{k} , которому соответствует *квазимпульс* $\hbar \mathbf{k}$.

5. Выбором постоянной Ляпунова, а с ней и квазимпульса $\hbar \mathbf{k}$ определяется (с точностью до постоянного множителя) волновая функция Блоха. Следовательно, определяется и энергия электрона \mathcal{E} , которая входит в стационарное уравнение Шредингера в качестве постоянного параметра. Таким образом, в пределах каждой зоны допустимые значения энергии электрона могут быть представлены как функции квазимпульса:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(p). \quad (59.10)$$

Отсюда получается

$$\omega = \omega(k), \quad (59.11)$$

так как $\mathcal{E} = \hbar\omega$. Оба эти соотношения называются *законами дисперсии* электронных волн или электрона в кристалле. Законами дисперсии описывается взаимодействие рассматриваемого электрона с ионами кристаллической решетки и со всеми остальными электронами (заряд которых «размазан» в пространстве).

В плоской волне Блоха

$$\Psi(x, t) = P(x) e^{i(kx - \omega t)} \quad (59.12)$$

волновое число k определено не однозначно. Но причина этого иная, чем в случае акустической волны в кристаллической решетке, где неоднозначность связана с *дискретностью значений, которые может принимать координата x* (см. § 56). В волне же Блоха координата x меняется *непрерывно*. Зато «амплитуда»

волны $P(x)$ является функцией x . Можно всегда изменить постоянную k и функцию $P(x)$ так, чтобы при этом волновая функция (59.12) осталась неизменной. С этой целью достаточно сделать замену

$$k = k' + 2\pi p/a, \quad P'(x) = P(x) e^{i2\pi px/a},$$

где p — произвольное целое число. Тогда (59.12) преобразуется в

$$\Psi(x, t) = P'(x) e^{i(k'x - \omega t)},$$

т. е. в волну с другой периодически меняющейся амплитудой $P'(x)$ и другим волновым числом k' . От такого преобразования физически ничего не изменится.

Пользуясь указанной неоднозначностью, при рассмотрении движения электрона в какой-либо зоне волновое число k (волновой вектор \mathbf{k}) можно выбрать так, чтобы его модуль принял *наименьшее значение* из всех возможных. Особый интерес представляет случай, когда $k \ll 2\pi/a$, а «амплитуда» $P(x)$ содержит постоянное слагаемое, значительно превосходящее все остальные слагаемые, быстро меняющиеся в пространстве. (Это, как будет видно из дальнейшего, имеет место при движении электрона, энергия которого находится вблизи одной из границ зоны.) В этом случае функция Ψ станет волной постоянной амплитуды, на которую накладывается мелкая рябь, периодически повторяющаяся на каждом периоде решетки. При рассмотрении усредненного движения электрона от такой ряби можно отвлечься, т. е. оперировать с электронной волной уже постоянной амплитуды, получающейся из $P(x)$ путем пространственного усреднения. Длина такой усредненной волны $\Lambda \equiv 2\pi/k$ предполагается очень большой по сравнению с периодом решетки a . Можно построить пакет таких усредненных волн в узкой области Δk . Тогда скорость *усредненного движения* электрона будет равна *групповой скорости*

$$v = d\mathcal{E}/dp. \quad (59.13)$$

6. Выделим какую-либо разрешенную зону и рассмотрим соотношения вблизи ее границ, за которыми следуют запрещенные зоны. На нижней границе зоны энергия \mathcal{E} минимальна, а на верхней максимальна. Значит, производная $d\mathcal{E}/dp$, а с ней и усредненная скорость электрона на обеих границах зоны, обращается в нуль. Поэтому вблизи границы каждой зоны разложение \mathcal{E} по степеням $p = \hbar k$ может начаться только с квадратичного члена. Если энергию отсчитывать от края зоны, а квазимпульсы в местах максимума или минимума считать равными нулю, то получится

$$\mathcal{E} = p^2/2m_{\text{эф}}, \quad (59.14)$$

где

$$\frac{1}{m_{\text{эф}}} = \left(\frac{d^2\mathcal{E}}{dp^2} \right)_{p=0}. \quad (59.15)$$

Величина $m_{\text{эф}}$ называется *эффективной массой электрона*. Она, как правило, не совпадает с настоящей массой электрона m_e . На нижней границе зоны (минимум \mathcal{E}) эффективная масса $m_{\text{эф}}$ *положительна*, тогда как на верхней границе (максимум \mathcal{E}) она *отрицательна* (рис. 105). В трехмерной кристаллической решетке роль величины $1/m_{\text{эф}}$ играет тензор $d^2\mathcal{E}/dr_i dr_j$, но сущность явлений, связанных с понятием эффективной массы, можно уяснить на одномерной модели, где масса $m_{\text{эф}}$ является скаляром.

Связь между энергией электрона и его квазимпульсом вблизи границы зоны формально имеет такой же вид, что и связь между энергией и импульсом свободной частицы. Это и дает основание в рассматриваемом случае называть величину $m_{\text{эф}}$ эффективной массой, а квазимпульс p во многих руководствах называют просто импульсом. Специфика усредненного движения электрона в периодической кристаллической решетке вблизи границы зоны заключается, однако, в том, что эффективная масса электрона может быть и положительной, и отрицательной. В силу этого *вблизи нижней границы зоны векторы v и p направлены одинаково, а вблизи верхней — противоположно*, как это видно из формулы (59.13) и рис. 105.

7. До сих пор предполагалось, что внешнего силового поля нет. Наложим теперь на кристалл слабое постоянное электрическое поле. Оно в принципе несколько сместит энергетические уровни в кристалле. Но так как эти уровни практически непрерывны, то никакого изменения в положении уровней внутри зоны не произойдет. Могут только слегка сместиться границы самой зоны. Но в слабых полях этот эффект совсем не заметен и ни в чем не проявляется. Наложенное электрическое поле может, однако, вызвать изменения в заполнении энергетических уровней электронами. Это может произойти только тогда, когда по крайней мере некоторые энергетические уровни зоны *заполнены не целиком, а частично*. Согласно принципу Паули на одном уровне может находиться не более двух электронов, спины которых направлены противоположно. Если зона заполнена целиком, то электроны могут только обмениваться состояниями, что в силу их тождественности физически ни в чем не прояв-

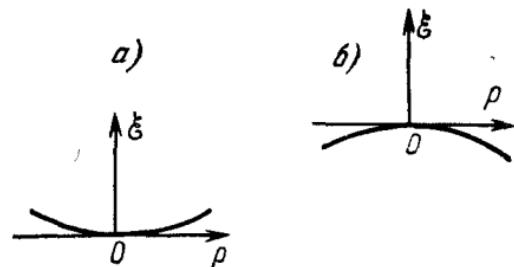


Рис. 105

ляется. Никакие движения электронов, связанные с их переходами из одного состояния в другое, невозможны. В этом случае при наложении электрического поля в кристалле и не возникнет электрического тока.

В состоянии равновесия при отсутствии внешнего поля в частично заполненной зоне будут заполнены электронами все *наиболее низкие* энергетические уровни. На каждом из них будут находиться два электрона с противоположно направленными спинами. При наложении электрического поля начнутся *переходы* из занятых состояний в свободные и *возникнет электрический ток*. Скорость усредненного движения электрона при этом определяется выражением (59.13). Влияние кристалла на движение электрона уже учтено дисперсионной формулой (59.10). Но на электрон в электрическом поле E действует еще внешняя сила $F = -eE$. Изменение энергии электрона за время dt под действием этой силы будет $d\mathcal{E} = Fv dt$. Но в силу (59.10) $d\mathcal{E} = (d\mathcal{E}/dp) dp = v dp$. Приравнивая оба выражения, получаем $dp = F dt$, т. е.

$$dp/dt = F. \quad (59.16)$$

Та же формула получается и в трехмерном случае. Только скаляры p и F следует заменить векторами ρ и F . Получится формула, вполне соответствующая классической. Дифференцирование же соотношения (59.13) по времени дает $\dot{v} = -(d^2\mathcal{E}/dp^2)(dp/dt)$, или на основании формул (59.15) и (59.16)

$$m_{\text{эф}}\dot{v} = F. \quad (59.17)$$

8. Рассмотрим специально случай, когда электроны заполняют *почти всю зону*. В этом случае ток связан с наличием свободных состояний вблизи верхней границы зоны (рис. 105, б), так что эффективная масса электрона отрицательна. Тогда согласно (59.17) ускорение электрона \dot{v} направлено против действующей силы $F = eE$, т. е. по полю E ($e < 0$). Электрон ведет себя как *отрицательно заряженная частица, но с отрицательной массой* $m_{\text{эф}}$. Но в точности так же будет вести себя и *воображаемая частица, у которой масса и заряд положительны*. Какие знаки приписать массе и заряду воображаемой частицы — не имеет значения. Существенно только, чтобы они были одинаковы. Но электрон с положительным зарядом и положительной массой ведет себя в точности так же, как «дырка», введенная в предыдущем параграфе. А так как число электронов, которые принимают участие в электрическом токе, в точности равно числу вакантных мест (дырок) в зоне, то *носителями тока формально могут считаться дырки*. Тем самым становится понятным, почему коэффициент Холла, например, может иметь не только отрицательный знак, но и положительный (см. т. III, § 98).

9. Заметим в заключение, что в идеальной кристаллической решетке с неподвижными ионами плоская волна Блоха распространялась бы *без затухания*. Электрическое сопротивление кристалла в таком случае было бы равно нулю. Тепловые колебания, дефекты и примеси приводят к рассеянию электронных волн, т. е. ограничивают длины свободного пробега электрона, с чем и связано возникновение электрического сопротивления.

ЗАДАЧИ

1. Рассмотреть одномерную прямолинейную бесконечную кристаллическую решетку, моделируя потенциальную энергию $U(x)$ ступенчатой функцией, изображенной на рис. 106. Найти разрешенные и запрещенные зоны для такой цепочки, задав значения a и U , характерные для атомных размеров.

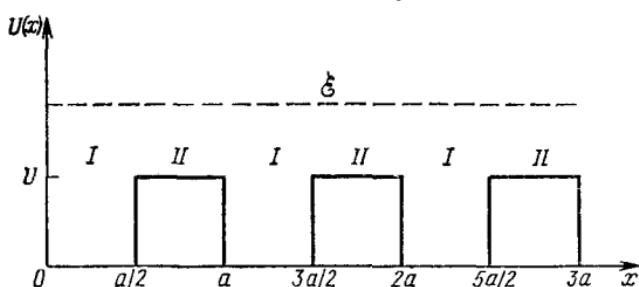


Рис. 106

Решение. На участках I примем потенциальную энергию равной нулю, а на участках II — постоянному значению U . Стационарное уравнение Шредингера с постоянной энергией \mathcal{E} на участках I будет

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa_1^2 \psi = 0, \quad (59.18)$$

а на участках II

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa_2^2 \psi = 0, \quad (59.19)$$

где κ_1 и κ_2 — постоянные:

$$\kappa_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E}, \quad \kappa_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - U).$$

Будем сначала предполагать, что $\mathcal{E} > 0$ и $\mathcal{E} - U > 0$. Тогда κ_1 и κ_2 будут вещественными. Без нарушения общности их можно считать положительными. В интервале $(0, a/2)$ система фундаментальных решений представится функциями

$$\psi_1 = \cos \kappa_1 x, \quad \psi_2 = \frac{1}{\kappa_1} \sin \kappa_1 x.$$

Найдем теперь эти функции в интервале $(a/2, a)$. В этом интервале представим первую функцию в виде

$$\psi_1 = A \cos \kappa_2 (x - a/2) + B \sin \kappa_2 (x - a/2).$$

Неизвестные коэффициенты A и B найдутся из условий непрерывности функции $\psi_1(x)$ и ее производной $\psi'_1(x)$ на границе интервала $x = a/2$. Таким

путем получаем, что в интервале $(a/2, a)$

$$\psi_1(x) = \cos \frac{\kappa_1 a}{2} \cos \kappa_2(x - a/2) - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \sin \frac{\kappa_1 a}{2} \sin \kappa_2(x - a/2).$$

Аналогично находим, что в том же интервале

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\kappa_1} \sin \frac{\kappa_1 a}{2} \cos \kappa_2(x - a/2) + \frac{1}{\kappa_2} \cos \frac{\kappa_1 a}{2} \sin \kappa_2(x - a/2).$$

Для постоянной Ляпунова получается

$$L = \frac{1}{2} [\psi_1(a) + \psi_2'(a)] = \cos \frac{\kappa_1 a}{2} \cos \frac{\kappa_2 a}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2} + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right) \sin \frac{\kappa_1 a}{2} \sin \frac{\kappa_2 a}{2} \quad (59.20)$$

В случае, когда $\mathcal{E} > 0$, но $\mathcal{E} - U < 0$, изменим обозначения, заменив прежнее κ_2 на мнимую величину $i\kappa_2$, т. е. положим $\kappa_2^2 = 2m(U - \mathcal{E})/\hbar^2$. Тригонометрические функции от мнимого аргумента следует заменить на гиперболические функции. Тогда формула (59.20) преобразуется:

$$L = \cos \frac{\kappa_1 a}{2} \operatorname{ch} \frac{\kappa_2 a}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2} - \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right) \sin \frac{\kappa_1 a}{2} \operatorname{sh} \frac{\kappa_2 a}{2}. \quad (59.21)$$

Наконец, когда $\mathcal{E} < 0$ и $\mathcal{E} - U < 0$, надо сделать вторую замену $\kappa_1 \rightarrow i\kappa_1$ (т. е. положить $\kappa_1^2 = -2m\mathcal{E}/\hbar^2$). Тогда

$$L = \operatorname{ch} \frac{\kappa_1 a}{2} \operatorname{ch} \frac{\kappa_2 a}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2} + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right) \operatorname{sh} \frac{\kappa_1 a}{2} \operatorname{sh} \frac{\kappa_2 a}{2}. \quad (59.22)$$

Формулы (59.20) — (59.22) имеют довольно сложный вид. Их исследование удобно проводить только графически на примерах. Приведем численный при-

мер, полагая ориентировочно $a = 2 \cdot 10^{-8}$ см, $U = 5$ эВ. Соответствующая кривая для $L = L(\mathcal{E})$ приведена на рис. 107. На заштрихованных участках величина $|L|$ меньше единицы. Эти участки в нашей модели являются разрешенными зонами. Светлые участки, где $|L| > 1$, соответствуют запрещенным зонам.

2. Полюсы батареи соединены кристаллом, зона проводимости которого почти доверху заполнена электронами. В таком случае эффективная масса электрона отрицательна, и он движется через кристалл с ускоре-

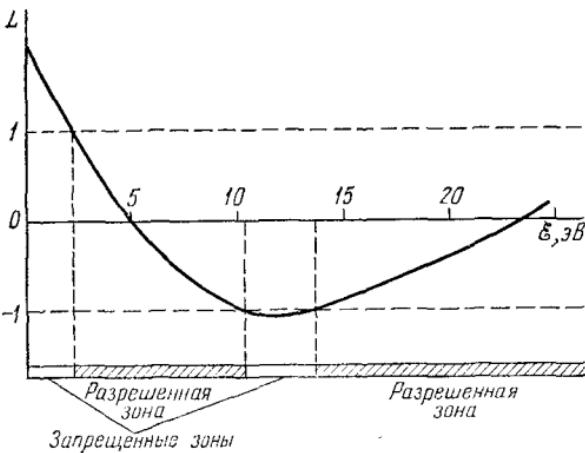


Рис. 107

нием в направлении электрического поля. Туда же будет направлена и средняя скорость электрона, так как до наложения поля средняя скорость была равна нулю. Иными словами, электрон движется через кристалл от анода к катоду. Следовательно, внутри батареи движение электрона происходит от катода к аноду, а ток внутри батареи в соответствии с принятым соглашением течет в противоположном направлении — от анода к катоду. Но такой ток заряжает батарею, а это противоречит закону сохранения энергии. Разрешить этот парадокс.

Решение. Все дело в том, что в этом рассуждении не учтено перераспределение электронов по возможным состояниям зоны при наложении электрического поля. На рис. 108 изображен участок дисперсионной кривой для рассматриваемого кристалла. При отсутствии внешнего поля пунктирная горизонтальная прямая AB отсекает от этой кривой верхнюю часть, не заполненную электронами. В заполненных же частях столько же электронов движется направо, сколько и налево. Поэтому ток через кристалл не идет. При наложении электрического поля на электрон начинает действовать сила $F = eE$, направленная противоположно E , так как заряд электрона отрицательный.

Для конкретности примем, что поле направлено налево, а следовательно, сила направо. В соответствии с (59.16) импульсы электронов справа по абсолютной величине должны увеличиваться а слева уменьшаться. Это значит, что конец B незаполненного участка дисперсионной кривой должен опускаться, переходя в B' , а конец A подниматься, переходя в A' . Скорость электронов направлена против p , т. е. на нашем рисунке в левой половине направо, а в правой налево. Но в левой половине электронов больше, чем в правой. Поэтому через кристалл поток электронов будет идти слева направо, т. е. в направлении действующей силы F (или против поля E). Такой ток будет разряжать, а не заряжать батарею.

Аналогичное рассуждение можно провести и в том случае, когда электронами заполнена небольшая нижняя часть зоны проводимости.

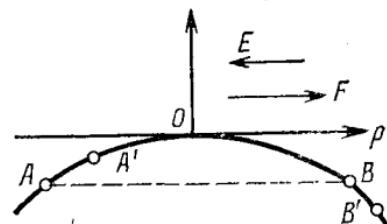


Рис. 108

§ 60. Сверхтекучесть. Опытные факты

1. Кристаллизация (затвердевание) вещества происходит под действием сил притяжения между атомами (молекулами). Ей препятствует беспорядочное движение этих частиц. С классической точки зрения это движение только тепловое и полностью прекращается при абсолютном нуле температур. Поэтому с этой точки зрения при приближении к абсолютному нулю всякое вещество в конце концов должно перейти в твердое состояние. Не совсем так обстоит дело с точки зрения квантовой механики. Помимо теплового движения атомы совершают *нулевые колебания*, не прекращающиеся и при температуре абсолютного нуля. Их частота ω (а с ней и нулевая энергия $\hbar\omega/2$) тем больше, чем меньше масса атома ($\omega \sim 1/\sqrt{m}$). Если силы притяжения между атомами недостаточны, чтобы противостоять нулевым колебаниям, то даже при температуре абсолютного нуля тело не перейдет в твердое состояние, а останется жидким, если только давление не очень велико. Именно так обстоит дело с гелием. Причина этого двоякая. Во-первых, из всех инертных газов массы атомов гелия минимальны. Во-вторых, инертные газы имеют замкнутые (застроенные) наружные оболочки, характеризующиеся сферической симметрией. Такова и единственная K -оболочка атома гелия, состоящая всего из двух электронов. Из-за этого силы притяжения между атомами не относительно слабы, а плотность жидкого гелия мала (при температуре