

равен V_0 . Поверхность, таким образом, представляет резкий переход между строгой периодической решеткой и вакуумом.

Сделаем, кроме того, следующие допущения.

а) Мы рассматриваем потенциал решетки как слабое возмущение, используя, таким образом, приближение почти свободных электронов (ч. I, § 19).

б) Мы сводим проблему к одномерной модели: периодический потенциал $V(z) = V(z + na)$ для $z < 0$ (a — постоянная решетки), $V(z) = V_0$ для $z > 0$.

Сначала мы решаем уравнение Шредингера для одномерной задачи

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \psi(z) = E\psi(z) \quad (2.119)$$

отдельно для $z > 0$ и $z < 0$ и затем «сшиваем» решения при $z = 0$ (условие непрерывности решений и их производных).

Вакууму физически соответствуют только решения уравнения Шредингера, убывающие с возрастанием z :

$$\psi = a \exp \left[-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) z} \right]. \quad (2.120)$$

Чтобы получить решения для периодической цепочки, мы используем исходные уравнения из ч. I, § 19. Зонная структура показана в ч. I на рис. 22. Важнейшие детали, кроме того, показаны на

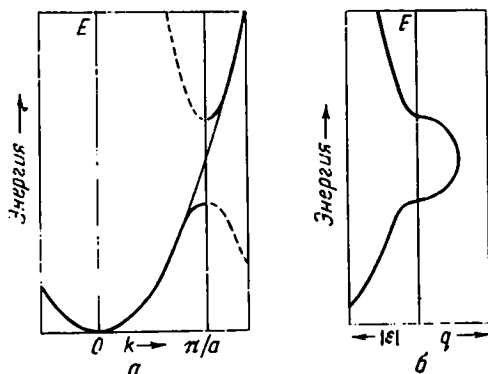


Рис. 34. Участок зонной структуры для одномерного периодического потенциала с постоянной решетки a в приближении почти свободных электронов (a). В энергетической щели между двумя зонами могут появиться решения с комплексным k (b).

рис. 34, a . Первая зона Бриллюэна простирается от $k = -\pi/a$ до $+\pi/a$. Парабола $E(k)$ для свободных электронов искажена вблизи поверхности зоны Бриллюэна: зоны разделяются возникающей энергетической щелью.

Из выражения (ч. I.19.2) мы получаем в окрестности $k = +\pi/a$:

$$\psi(k, z) = \alpha \exp(ikz) + \beta \exp \left[i \left(k - \frac{2\pi}{a} \right) z \right]. \quad (2.121)$$