

Для «сшивания» решения во внутреннем и внешнем пространствах в нашем распоряжении имеются два свободных параметра — отношение коэффициентов a и c из выражений (2.120) и (2.125) и энергия E . Оба этих параметра определяются условиями непрерывности волновой функции и ее производной при $z = 0$.

Мы получаем, таким образом, следующий результат: в то время как решения уравнения Шредингера (2.119) с действительным k соответствуют обычным решениям для зон, возможны решения для мнимого k , которые убывают с удалением от поверхности. Соответствующие значения энергии, согласно (2.126), лежат в энергетической щели между зонами (рис. 34, б). Одно из этих решений может быть «сшито» с решением для внешнего пространства. Оно представляет собой состояние, в котором электрон локализован в узкой области у поверхности. Это — искомое поверхностное состояние.

Более серьезный анализ показывает, что «сшивание» возможно только для $V > 0$. Таким образом, в этой модели поверхностные состояния могут существовать, но они не обязаны иметь место в каждом случае.

В одномерной модели поверхностное состояние имеет дискретный уровень в энергетической щели. Распространяя эту модель на трехмерный случай, мы можем рассматривать полученные результаты как относящиеся к компоненту k , перпендикулярному поверхности. Для каждого фиксированного значения компонента k , параллельного поверхности, можно ожидать различного положения уровня энергии поверхностного состояния. Таким образом, вместо отдельных уровней получаем энергетические зоны для поверхностных состояний. Поскольку энергетическая щель, в которой должен лежать каждый поверхностный уровень, различна для каждого значения k , зона поверхностных состояний может перекрываться с зонами объемных состояний (рис. 35).

Одномерная модель, рассматриваемая здесь, и ее качественное распространение на трехмерный случай, однако, нереалистичны в некоторых отношениях. Например, поверхность не представляет собой резкого перехода от невозмущенного периодического потенциала к внешнему пространству. Несмотря на это, состояния рассмотренного типа являются возможными для многих поверхностей.

Поправки необходимы главным образом для того, чтобы объяснить три особенности реальной поверхности.

1) В крайнем атомном слое решетки действующие в ней силы направлены только в одну сторону. Это ведет, по крайней мере, к деформации периодического потенциала, который меняет постоянную решетки вблизи поверхности.

2) Свободные валентные связи на поверхности могут соединяться иным способом, чем внутри кристалла, что ведет к появлению сверхструктуры, т. е. к изменению симметрии в поверхностном слое.

3) Поверхность может быть покрыта упорядоченным адсорбированным слоем.