

вида [ср. (ч. I.19.6)].

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E(\mathbf{k}) & V(\mathbf{K}_m) \\ V(-\mathbf{K}_m) & \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{K}_m)^2}{2m} - E(\mathbf{k}) \end{vmatrix} = 0. \quad (1.32)$$

На поверхности [определяемой условием $k^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{K}_m)^2$] E испытывает скачок на величину $E_G = 2|V(\mathbf{K}_m)|^2$.

Этот результат был выведен в ч. I, § 19 для одномерного случая. В модели Пенна трехмерный изотропный случай рассматривается так: в качестве «зоны Бриллюэна» рассматривают сферу радиуса k_F и считают справедливым детерминантное уравнение (1.32) для каждого направления $\mathbf{k}$. Тогда $\mathbf{K}_m$ заменяется на $2\mathbf{k}_F(\mathbf{k}/k)$. Энергия становится функцией только k . Разрешая детерминант, получаем

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + k'^2) \pm \left[\frac{\hbar^4}{4m^2} (k^2 - k'^2)^2 + E_G \right]^{1/2} \right\}, \quad (1.33)$$

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \left(1 - \frac{2k_F}{k} \right).$$

Эта «зонная структура» иллюстрируется на рис. 7. Соответствующие волновые функции, согласно (ч. I.19.2), строятся из двух членов (плоских волн с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{K}_m$):

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha_{\pm}^2}} [\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \alpha_{\pm} \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})], \quad (1.34)$$

$$\alpha_{\pm} = \frac{E_G/2}{E_{\pm} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}}.$$

Формулы (1.33) и (1.34) можно использовать для оценки (1.31). В качестве приближенного решения находим в предельном случае $q \rightarrow 0$

$$\epsilon(0) = 1 + \left(\frac{\hbar \omega_p}{E_G} \right)^2 A, \quad A = 1 - \frac{E_G}{4E_F} + \frac{1}{3} \left(\frac{E_G}{4E_F} \right)^2 \approx 1, \quad (1.35)$$

где ω_p — введенная ранее плазменная частота: $\omega_p = (4\pi n e^2 / m)^{1/2}$.

Для фурье-образа потенциала и, тем самым, для самого потенциала, имеем

$$\lim_{q \rightarrow 0} V(q) = - \frac{4\pi Z e^2}{V_g \epsilon(0) q^2}, \quad \text{или} \quad V(r) = - \frac{Z e^2}{\epsilon(0) r} \quad \text{для больших } r. \quad (1.36)$$

Это — потенциал иона с эффективным зарядом $Ze/\epsilon(0)$.