

СРЕДНИЙ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ В КРИСТАЛЛЕ ¹

Теория состояния электронов в кристалле в своих применениях к вопросам электронной дифракции, металлической проводимости (зависимость от температуры, от внешнего магнитного поля) и пр. пользуется положением, что потенциал пространственной решетки обладает трехмерной периодичностью в колебаниях около некоторого среднего значения. В настоящее время относительно этого среднего значения потенциала принято предполагать, что, во-первых, оно является специфической константой вещества и, во-вторых, может быть непосредственно вычислено из распределения зарядов внутри решетки.

Автором статьи показано, что оба эти положения не оправданы.

Для вычисления потенциала надо подсчитать значения $\int E dl$ (где E — напряженность электрического поля) от бесконечности до точки наблюдения. Путь интегрирования должен проходить по поверхности кристалла, и потенциал зависит поэтому от значений поля на поверхности. Нельзя допускать (хотя бы из-за поляризуемости структурных единиц), что условия на поверхности определяются полем внутри кристаллической решетки. Таким образом, влияние поверхностных условий на значение потенциала решетки есть особая проблема динамики кристаллической решетки.*

Правильно выбранная структурная единица ограниченного кристалла (для безграничного кристалла, как известно, могут быть выбраны структурные единицы самой разнообразной симметрии) должна обладать зарядом, равным нулю, а в кристалле с центром симметрии должна, кроме того, обладать дипольным моментом, равным нулю. Структурная единица всегда обладает квадрупольным моментом, шесть компонент которого образуют симметричный тензор

$$Q_{ik} = \int_V x_i x_k \rho \, dv,$$

где v — объем структурной единицы, ρ — электронная плотность и x_i и x_k — координаты, начало которых несущественно.

Можно показать, что среднее значение потенциала в пограничном слое, нормаль к которому имеет направление n , отличается от среднего значения потенциала вне слоя на $-2\pi \frac{Q_{nn}}{v}$. Среднее значение потенциала (с микроскопической точки зрения) есть макроскопический потенциал. Поэтому тот же факт можно выразить словами: на поверхности кристалла потенциал испытывает скачок, или, иначе, на поверхности кристалла находится двойной слой с моментом $\frac{1}{2} \frac{Q_{nn}}{v}$. Можно также показать, что на ребрах кристалла должны находиться линейные заряды.

Очевидно, что при наличии двойных слоев на поверхностях и линейных зарядов макроскопический потенциал, или, иначе говоря, среднее значение микроскопического потенциала, не может быть постоянным.

Однако, возможны специальные случаи, когда среднее значение потенциала внутри решетки постоянно. В случае кубического кристалла тензор обладает сферической симметрией, и все Q_{nn} равны между собой. Поверхность кристалла соответствует замкнутому однородному двойному слою; как известно, в электростатике внутри этой системы потенциал постояен. Приближенно то же самое справедливо для игольчатого кристалла, вытянутого в направлении оси симметрии. В этом случае тензор Q_{ik} обладает осевой симметрией, и компоненты его, которые играют роль, равны между собой. Наконец, среднее значение потенциала решетки будет постоянно, если кристалл построен из нейтральных атомов, обладающих сферической симметрией. Искажение решетки у краев (дополнительная поляризуемость поверхностных атомов) этим расчетом не учитывается, значение же этого фактора весьма значительно. У проводящих кристаллов движение зарядов обеспечивает постоянство среднего значения потенциала. Однако, совершенно непонятно, на каком основании можно считать, что это среднее значение не зависит от величины и ориентировки граней кристалла.

Экспериментальные факты в этой области еще очень скудны и не помогают в разрешении указанных трудностей.

А. Китайгородский, Москва

ЛИТЕРАТУРА

1. M. v. Laue, Naturwiss., 28, 516, 1940; Z. Krist., 103, 1940.