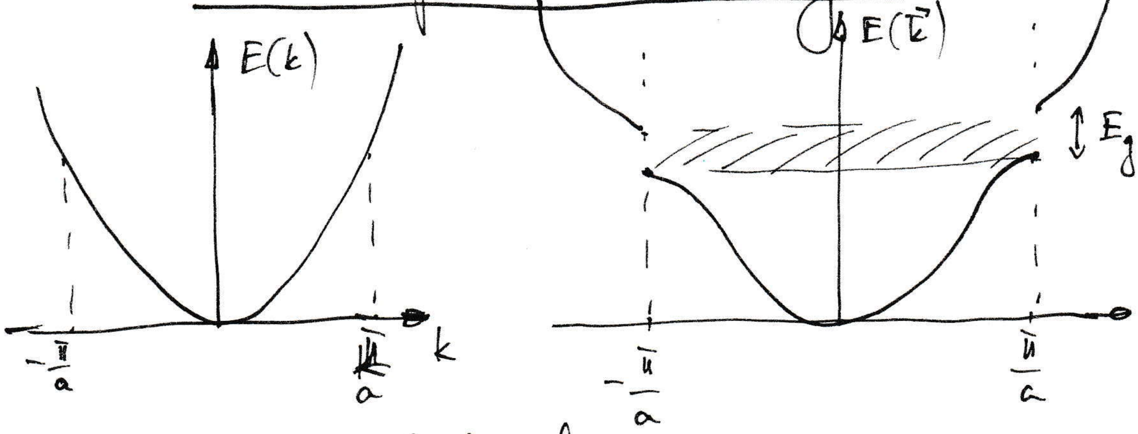
Model prawie swobodnych $\bar{e}$



w modelu $\bar{e}$ swobodnych

$E_k = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ + warunki periodyczne $k_x, k_y, k_z = 0, \pm\frac{2\pi}{L}, \pm\frac{4\pi}{L}$

rozwiązanie $\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ $\quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$

PRZYPOMNIENIE O SIECI ODWROTNEJ !

Warunek Bragga odbicia fali dla 1D $\quad (\vec{k}+\vec{G})^2 = k^2$

$$\boxed{k = \pm\frac{1}{2}G = n\frac{\pi}{a}} \qquad G = \frac{2\pi n}{a}$$

1-sze odbicie $\quad k = \pm\frac{\pi}{a} \qquad k \in \langle -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \rangle$ — I strefa Brillouina

- w tych punktach funkcje falowe NIE SĄ rozwiązaniami falami biegnącymi bo mogą się odbić !
- pojawiają się fale stojące

$\psi(+) = e^{i\frac{\pi x}{a}} + e^{-i\frac{\pi x}{a}}$ $\quad$ oraz $\quad \psi(-) = e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}}$

$\psi(+) = 2\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \qquad \psi(-) = 2i\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$

sumy fal biegnących w lewo $\longleftarrow$ i w prawo $\longrightarrow$

UWAGA: rozkłady gęstości elektronów różne dla $\psi(+)$ i $\psi(-)$

$\longrightarrow$ przyczyna powstawania przerwy

w przypadku $\bar{e}$ swobodnych i fali biegnącej $\quad \psi = \exp(ikx)$

$\psi\psi^* = |\psi|^2 = 1$ (gęstość ładunku STAŁA)

W 3.2 **Sieć odwrotna (przypomnienie) # 1**

Koncentracja elektronów w węzłach sieci

$$n(\vec{r}+\vec{T}) = n(\vec{r}) \qquad \vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

$n_1\ n_2\ n_3$ – liczby całk.

1D

$$n(x) = \sum_p n_p \exp\left(2\pi i \frac{p x}{a}\right)$$ – szereg Fouriera

$\frac{2\pi p}{a}$ – węzeł sieci odwrotnej

a – okres zmian (stała sieci) $n(x+a) = n(x)$

3D

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp(i\vec{G}\cdot\vec{r})$$

$n_{\vec{G}}$ – amplituda rozproszonego promieniowania X.

$$n_{\vec{G}} = \frac{1}{V_c}\int_{\text{komórka}} n(\vec{r})\exp(-i\vec{G}\cdot\vec{r})\,dV$$

odwrócona transformata Fouriera

Jak znaleźć wektory $\vec{G}$ tzw. sieci odwrotnej "reciprocal space"

$$\vec{b}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot\vec{a}_2\times\vec{a}_3}; \quad \vec{b}_2 = 2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot\vec{a}_2\times\vec{a}_3}; \quad \vec{b}_3 = 2\pi\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\vec{a}_1\cdot\vec{a}_2\times\vec{a}_3}$$

wskaźniki zmieniane cyklicznie

$$\vec{b}_i\cdot\vec{a}_i = 2\pi\delta_{ij} \qquad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{dla } i=j \\ 0 & \text{dla } i\neq j \end{cases}$$

Warunek dyfrakcji (rozproszenia na węzłach sieci odw.) można zapisać $\Delta\vec{k} = \vec{G}$ dla rozp. sprężystego $\boxed{k^2 = k'^2}$

$$\vec{k}+\vec{G} = \vec{k}'$$

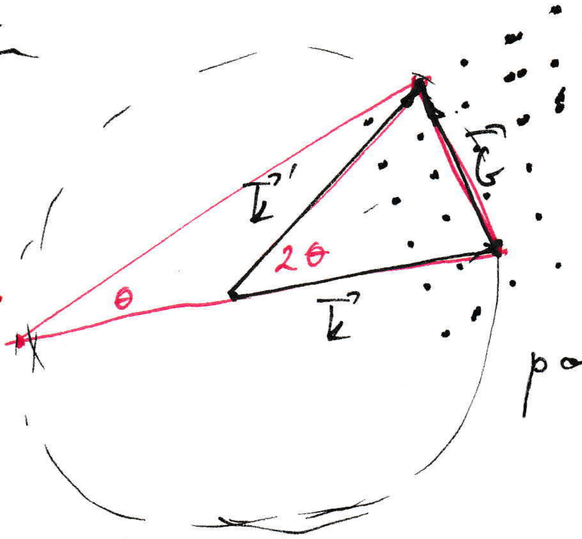
lub $(\vec{k}+\vec{G})^2 = k^2$ lub $2\vec{k}\cdot\vec{G}+G^2 = 0$ lub $2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2$

bo $\vec{G}$ i $-\vec{G}$ w. sieci odwrotnej te same

W 3.3 Sieć odwrotna (~~pr~~ # 2

<u>Konstrukcja Ewalda</u>

odbicie następuje wtedy gdy punkt sieci odwrotnej jest na sferze o prom. $\vec{k}$



<u>odbicie Bragga</u> pod kątem θ

$\vec{k}$ i $\vec{k}'$

połączone wektorem $\vec{G}$

<u>Strefa Brillouina</u> $\mapsto$ <u>Komórka Wignera-Seitza</u> w sieci odwrotnej

$$\vec{k}\cdot\left(\tfrac{1}{2}\vec{G}\right) = \left(\tfrac{1}{2}G\right)^2$$

<u>Przykłady</u>: sieć SC (simple cubic)

sieć prosta

$\vec{a}_1 = a\hat{x}$; $\vec{a}_2 = a\hat{y}$; $\vec{a}_3 = a\hat{z}$

$V = |\vec{a}_1\cdot\vec{a}_2\times\vec{a}_3| = a^3$

sieć odwrotna

$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{x}$; $\vec{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{y}$; $\vec{b}_3 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{z}$

"stała sieci" $= \frac{2\pi}{a}$

Granice strefy Brillouina $\rightarrow$ płaszczyzny prostopadłe do wektorów sieci odwrotnej w <u>połowie ich długości</u>

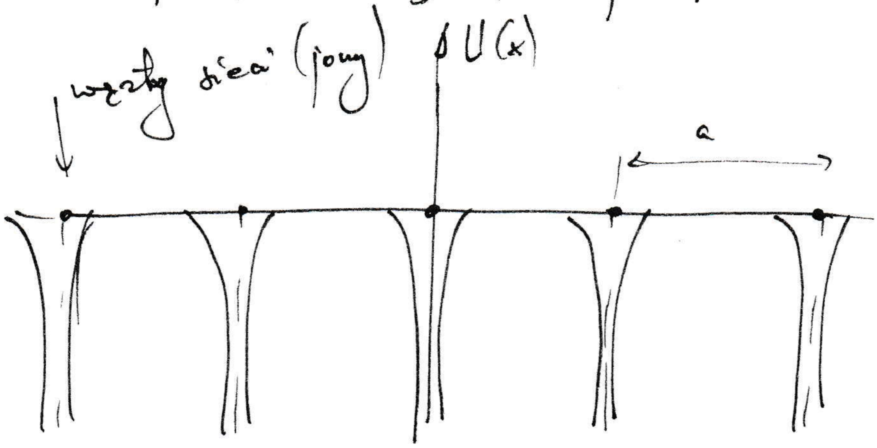
$\pm\frac{1}{2}\vec{b}_1 = \pm\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{x}$ $\qquad \pm\frac{1}{2}\vec{b}_2 = \pm\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{y}$ $\qquad \pm\frac{1}{2}\vec{b}_3 = \pm\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{z}$

BZ (Brillouin zone) $\longrightarrow$ sześcian o krawędzi $\frac{2\pi}{a}$ o objętości $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$.

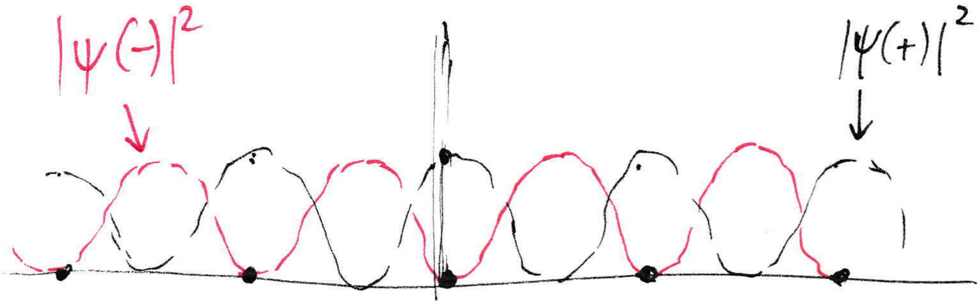
Strefy Brillouina dla bcc i fcc $\longrightarrow$ przy powierzchniach Fermiego!

W 3.4 Model prawie swobodnych ē #2

dla $\psi(+) \longrightarrow \rho(+) = |\psi(+)|^2 \sim \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$



• elektrony gromadzą się przy jonach dodatnich opisane przez $|\psi(+)|^2$



• elektrony zgromadzone pomiędzy jonami opisane przez $|\psi(-)|^2$

$|\psi(-)|^2 \sim \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$

Na granicy strefy Brillouina $k = \pm\frac{\pi}{a}$ mają postać $\sqrt{2}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ oraz $\sqrt{2}\sin\left(\frac{\pi a}{a}\right)$

Energia potencjalna ē w punkcie $\cancel{k=\frac{\pi}{a}}$ x

$$\boxed{U(x) = U_0 \cos\frac{2\pi x}{a}}$$

$\longrightarrow$ prawie swobodne!

Różnica stanów energetycznych w tym punkcie

$$E_g = \int_0^1 U(x)\left\{|\psi(+)|^2 - |\psi(-)|^2\right\}dx = 2\int U_0 \cos\frac{2\pi x}{a}\left(\cos^2\frac{\pi x}{a} - \sin^2\frac{\pi x}{a}\right)dx = U_0$$

E_g jest równa składowej harmonicznej w rozkładzie Fouriera potencjału kryształu.

W 3.5 **Funkcje Blocha** → twierdzenie Blocha

Tw. Rozwiązania równania Sch. dla potencjału period. mają szczególną postać

$$\boxed{\psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})}$$

gdzie funkcja $u_k(\vec{r})$ odznacza się periodycznością kryształu

$$u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}+\vec{T}) \qquad \vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

Funkcje własne (Blochowskie) są iloczynem fali płaskiej $\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$ oraz funkcji $u_k(\vec{r})$ period.

Przypadek niezdegenerowany (czyli dla danej energii E i wektora $\vec{k}$ mamy tylko jedną funkcję $\psi_k(\vec{r})$.

1D

Potencjał $\boxed{U(x) = U(x+sa)}$

okres (stała sieci) a

s — liczba całkowita

szukamy rozwiązania $\boxed{\psi(x+a) = C\psi(x)}$ (*) C – stała

$$\psi(x+Na) = C^N\psi(x) \quad \text{(warunki periodyczne)}$$

czyli $C^N = 1 \Rightarrow C = \exp(i2\pi s/N)$ $s = 0,1,2,\ldots N-1$

stąd $\psi(x) = u_k(x)\exp\left(i2\pi\frac{sx}{Na}\right)$ spełnia (*)

pod warunkiem gdy $u_k(x) = u_k(x+a)$

dla $k = \dfrac{2\pi s}{Na}$ mamy spełnione r. Blocha (*)