Eðlisfræði þéttefnis I:

Borðaskipan í þéttefni

Kafli 7

Jón Tómas Guðmundsson

tumi@hi.is

8. vika haust 2017

Inngangur

- Sú nálgun sem gerð var með einnar rafeindar nálguninni og með því að gera ráð fyrir óendanlegum mættisbrunn er of mikil einföldun
- Það að gera ráð fyrir gasi frjálsra rafeinda er ekki nothæft til að útskýra ljós og rafeiginleika hálfleiðara
- Við höfum notað þetta líkan til að gefa innsýn í varmrýmd, varmaleiðni, rafleiðni o. s. frv.
- Einnar rafeindar nálgunin getur ekki skilið á milli málma, hálfmálma, hálfleiðara og einangrara

Inngangur

- Rafviðnám í hreinum málmi getur verið 10^{-10} Ωcm við 1 K
- Rafviðnám góðs einangrara getur verið 10^{22} Ωcm, þetta eru 32 stærðargráður
- Við munum sjá að rafeindum í kristöllum er raðað á orkuborða sem eru aðskildir með svæðum í orku þar sem engar rafeindabrautir geta verið
- Þessi bönnuðu svæði eru nefndar orkugeilar (e. band gaps)
- Kristallurinn hegðar sér sem einangrari ef leyfðir borðar eru annað hvort fylltir eða tómir – engar rafeindir geta því ferðast í rafsviði
- Kristallurinn er málmur ef einn eða fleiri borðar eru fylltir að hluta
- Kristallurinn er hálfleiðari ef einn eða tveir borðar eru rétt svo fylltir eða rétt aðeins tómir

Almenn samhverfu skilyrði

- Við þurfum nú að leysa Schrödinger jöfnuna fyrir rafeind þar sem mættið er lotubundið

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

  þar sem

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{r}_n)$$

  og

$$\mathbf{r}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

  þar sem $\mathbf{r}_n$ er hliðrunarvigur

- Mættið $V(\mathbf{r})$ hefur sömu lotu og grindin og má rita það sem Fourier röð

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} \exp(j\mathbf{G}\cdot\mathbf{r})$$

Almenn samhverfu skilyrði

- Hér er $\mathbf{G}$ er grindarvigur nykurgrindarinnar

$$\mathbf{G} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3$$

  þar sem h, k, l eru heiltölur

- Í einni vídd

$$\mathbf{G} \longrightarrow G = \frac{h2\pi}{a}$$

- Lýsa má bylgjufallinu sem planbylgju

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} \exp\left(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right)$$

Almenn samhverfu skilyrði

- Þessari planbylgju er stungið inn í Schrödinger jöfnuna

$$\sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \exp\left(j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right) + \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{G}} \exp\left(j(\mathbf{k}' + \mathbf{G})\cdot\mathbf{r}\right)$$

$$= E \sum_{k} C_k \exp\left(j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right)$$

og með því að umrita vísa

$$\sum_{\mathbf{k}} \exp\left(j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right) \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \right] = 0$$

Almenn samhverfu skilyrði

- Þar sem þetta gildir fyrir alla vigra $\mathbf{r}$ verður það sem er innan hornklofans að vera

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0$$

  sem er í rauninni Schrödinger jafnan í nykurrúminu

- Þetta leiðir til N kerfa af jöfnum (N grindareiningar) þar sem hver lausn er samantekt planbylgna þar sem bylgjuvigurinn $\mathbf{k}$ munar aðeins gildinu á $\mathbf{G}$

Almenn samhverfu skilyrði

- Eigingildin E eru því

$$E_{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k})$$

og tilsvarandi bylgjufall er

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \exp\left(j(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}\right)$$

eða

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \exp\left(-j\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}\right) \exp\left(j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp\left(j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right)$$

þar sem fallið $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ er Fourier röð yfir nykurgrindarpunktana $\mathbf{G}$ og því lotu grindarinnar

Almenn samhverfu skilyrði

- Bylgjuvigurinn **k** fyrir lotubundin jaðarskilyrði getur tekið gildin

$$k_x = 0, \pm\frac{2\pi}{L}, \pm\frac{4\pi}{L}, \ldots, \pm\frac{2\pi n_x}{L}$$

$$k_y = 0, \pm\frac{2\pi}{L}, \pm\frac{4\pi}{L}, \ldots, \pm\frac{2\pi n_y}{L}$$

$$k_z = 0, \pm\frac{2\pi}{L}, \pm\frac{4\pi}{L}, \ldots, \pm\frac{2\pi n_z}{L}$$

Almenn samhverfu skilyrði

- Rita má lausn Schrödinger jöfnunnar sem

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp{(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$$

  með mótunarfallinu

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_n)$$

  sem hefur lotu kristallsins, þetta er þekkt sem **Bloch fall**

- Lota kristallsins hefur fleiri afleiðingar og við endurnefnum nykurgrindarvigurinn

$$\mathbf{G}'' = \mathbf{G}' - \mathbf{G}$$

Almenn samhverfu skilyrði

- Þá fæst

$$\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}'} C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \exp\left(-j\mathbf{G}' \cdot \mathbf{r}\right) \exp\left(j(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r})\right)$$

$$= \left(\sum_{\mathbf{G}''} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}''} \exp\left(-j\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{r}\right)\right) \exp\left(j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

- Þetta segir

$$\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

þannig að Bloch bylgjuföll þar sem munar einum nykurvigri eru eins

Almenn samhverfu skilyrði

- Schrödingerjafnan er

$$\mathcal{H}\psi_{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}$$

og ef hliðrað eru um $\mathbf{G}$ þá er

$$\mathcal{H}\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = E(\mathbf{k}+\mathbf{G})\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$$

með

$$\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

fæst

$$\mathcal{H}\psi_{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k}+\mathbf{G})\psi_{\mathbf{k}}$$

þannig að við sjáum

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}+\mathbf{G})$$

Almenn samhverfu skilyrði

- Orkueigingildin $E(\mathbf{k})$ eru lotubundin föll af bylgjuvigri Bloch bylgnanna
- **Setning Bloch**. Rafeind í lotubundnu mætti hefur eiginástönd á forminu

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\alpha}(\mathbf{r}) = \exp(j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})u_{\mathbf{k}}^{\alpha}(\mathbf{r})$$

  þar sem fallið $u_{\mathbf{k}}^{\alpha}(\mathbf{r})$ er lotubundið í einingargrindum og $\mathbf{k}$ (skriðþunga kristalls) má velja innan fyrsta Brillion svæðis

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin

- Í frjálsra rafeinda líkaninu voru leyfðu orkugildin dreifð nánast samfellt frá núlli upp í óendanlegt og

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

þar sem fyrir lotubundin jaðarskilyrði

$$k_x, k_y, k_z = 0, \pm\frac{2\pi}{L}, \pm\frac{4\pi}{L}, \ldots$$

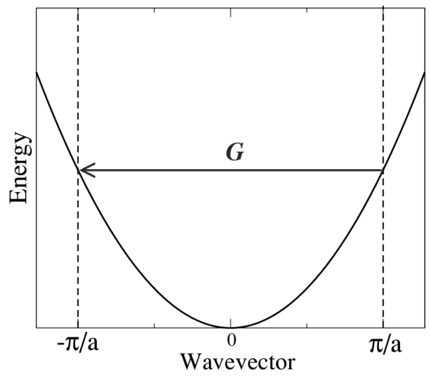
og bylgjufjöllin eru

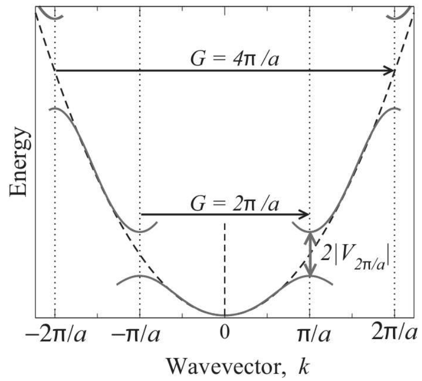
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$$

sem lýsa bylgju sem ber skriðþungann $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin

- Við vitum að Braggspeglun er einkennandi fyrir bylgjuútbreiðslu í kristöllum
- Braggspeglun rafeindabylgju er ástæðan fyrir orkugeil (e. band gap)
- Þessi orkugeil ákvarðar hvort þéttefni er einangrari eða hálfleiðar
- Skoðum línulegt þéttefni með grindarfasta a





Frá Simon (2013)

- Til vinstri sjáum við orku frjálsra rafeinda og til hægri nánast frjálsar rafeindir með orkugeil við $k = \pm\pi/a$

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin

- Bragg skilyrðið

$$(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = k^2$$

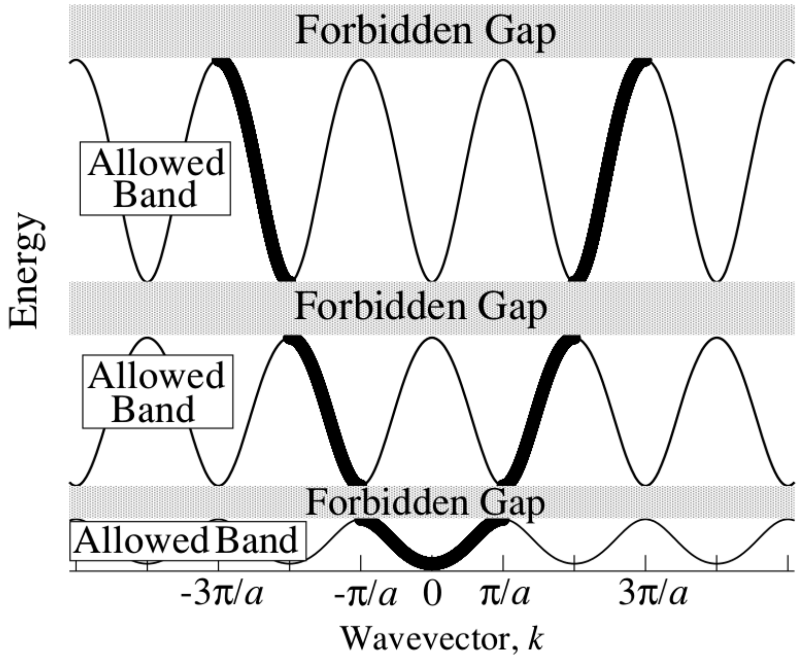
  sem í einni vídd er

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

  þar sem $G = 2\pi n/a$ er nykurgrindarvigur og n er heil tala

- Fyrstu speglanirnar og fyrsta orkugeilin kemur fram við $k = \pm\pi/a$
- Svæðið í $\mathbf{k}$-rúminu milli $-\pi/a$ og π/a er fyrsta Brilloun svæðið
- Aðrar orkugeilar koma fram fyrir önnur gildi á heiltölum n

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin



Frá Simon (2013)

- Tvístrunarsambandið í nánast frjálsa rafeindalíkaninu
- Forboðnu svæðin eru þar sem engin eiginástönd finnast

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin

- Bylgjuföllin við $k = \pm\pi/a$ eru ekki bylgjurnar $\exp(j\pi x/a)$ eða $\exp(-j\pi x/a)$ sem lýsa frjálsum rafeindum
- Við þessi gildi á k samanstanda bylgjuföllin af bylgjum sem ferðast jafnt til hægri og vinstri, við höfum því standbylgju – hún fer því ekkert
- Það geta komið fram tvær ólíkar standbylgjur

$$\psi(+) = \exp\left(\frac{j\pi x}{a}\right) + \exp\left(\frac{-j\pi x}{a}\right) = 2\cos\left(\frac{-j\pi x}{a}\right)$$

og

$$\psi(-) = \exp\left(\frac{j\pi x}{a}\right) - \exp\left(\frac{-j\pi x}{a}\right) = 2j\sin\left(\frac{-j\pi x}{a}\right)$$

og + eða - segir til um hvort þær skipta um formerki þegar $-x$ er stungið inn fyrir x

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin

- Þessar tvær standbylgjur $\psi(+)$ og $\psi(-)$ safna upp rafeindum á mismunandi svæðum og hafa því ólíka stöðuorku
  - Þetta veldur orkugeilinni
- Líkindaþéttleiki agnar er

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2$$

  svo fyrir bylgju sem ferðast $\exp(jkx)$ þá er

$$\exp(jkx) \exp(-jkx) = 1$$

  svo að hleðsluþéttleiki er fastur
- Hleðsluþéttleiki er hins vegar ekki fasti fyrir línulega samantekt planbylgna

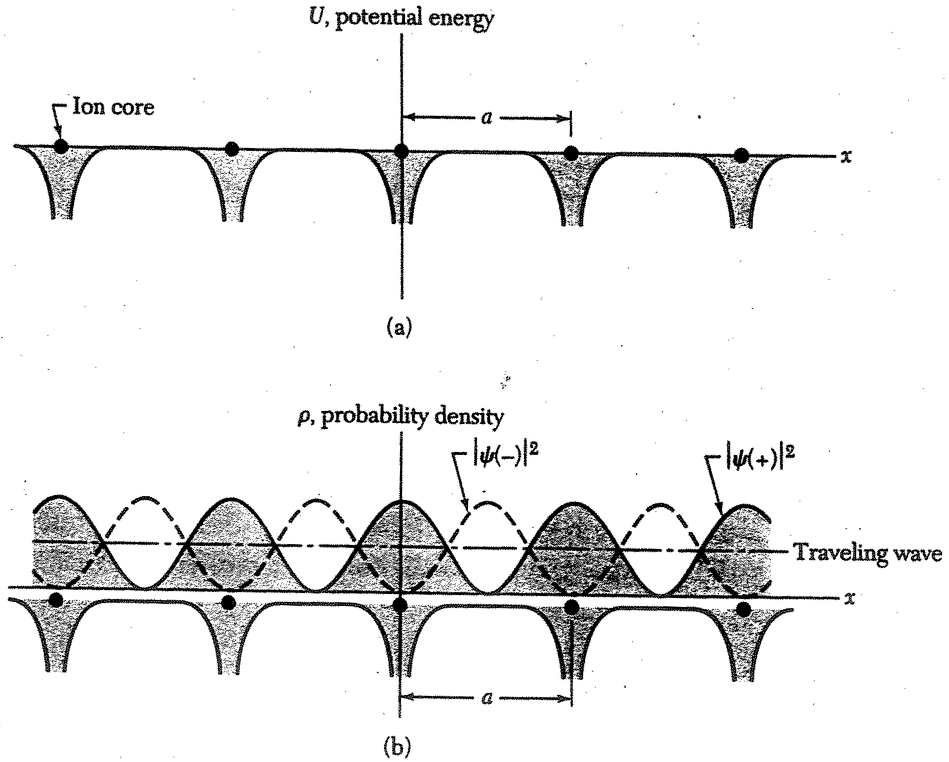
Nánast frjálsra rafeinda nálgunin

- Þannig er
$$\rho(+) = |\psi(+)|^2 \propto \cos^2 \frac{\pi x}{a}$$
sem safnar upp rafeindum (neikvæð hleðsla) við jákvæðar jónir sem eru staðsettar við $x = 0, a, 2a, \ldots,$ þar semstöðuorkan er lægst

- Fyrir hina standbylgjuna er
$$\rho(-) = |\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \frac{\pi x}{a}$$

- Þetta leiðir til þess að rafeindirnar safnast upp á milli jónakjarnanna

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin



Frá Kittel (1986)

- Rafstöðuorka leiðnirafeinda í sviðinu frá jónakjörnum í línulegri grind

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin

- Stöðuorka $\rho(+)$ er lægri en fyrir bylgju sem ferðast en stöðuorka $\rho(-)$ er hærri
- Það myndast því orkugeil af breidd E_{g} þar sem fyrir orku $\rho(-)$ og $\rho(+)$ munar E_{g}
- Bylgjuföllin við jaðar Brilloun svæðisins $k = \pi/a$ taka gildin

$$\sqrt{2}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

og

$$\sqrt{2}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

ef normað er yfir línuna

Nánast frjálsra rafeinda nálgunin

- Stöðuorka rafeindar í kristallinum við x er

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

þannig að orkumunur milli standbylgnanna tveggja er

$$E_{\mathrm{g}} = \int_0^1 U(x)\left[|\psi(+)|^2 - |\psi(-)|^2\right]$$

$$= 2\int dx U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\left(\cos^2\frac{2\pi x}{a} - \sin^2\frac{2\pi x}{a}\right)$$

þannig að orkugeilin er jöfn Fourierþætti kristallsmættisins

Bloch föll

- Felix Bloch sýndi að lausnir Schrödinger jöfnunnar í lotubundnu mætti verði að hafa formið

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \cdot \exp\left(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right) \qquad (**)$$

þar sem $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ inniheldur lotu kristallagrindarinnar

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T})$$

- Bylgjufall einnar rafeindar er nefnt Bloch fall
- Gerum ráð fyrir N eins grindarpunktum á hring af lengd Na
- Stöðuorkan er lotubundin í a með

$$U(x) = U(x + sa)$$

þar sem s er heiltala

Bloch föll

- Vegna samhverfu hringsins verður lausn bylgjujöfnunnar að uppfylla

$$\psi(x+a) = C\psi(x) \qquad\qquad (*)$$

þar sem C er fasti

- Þar með ef farið er heilan hring

$$\psi(x+Na) = \psi(x) = C^N\psi(x)$$

þar sem $\psi(x)$ er eingilt fall

- Þar með er C gefið með

$$C = \exp\left(\frac{j2\pi s}{N}\right)$$

með $s = 0, 1, 2, \ldots, N-1$

Bloch föll

- Við sjáum þá að

$$\psi(x) = u_{\mathbf{k}}(x) \exp\left(\frac{j2\pi s x}{Na}\right)$$

  uppfyllir (*) ef $u_{\mathbf{k}}(x)$ hefur lotuna a

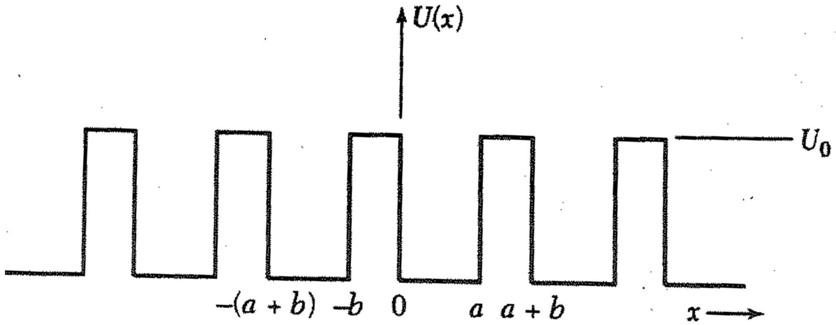
- Ef $k = 2\pi s/Na$ þá er (**) uppfyllt

Kronig-Penney líkanið

- Lotubundið mætti sem leysa má bylgjujöfnuna fyrir er fylki af brunnum
- Bylgjujafnan er

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + u(x)\psi = \mathcal{E}\psi$$

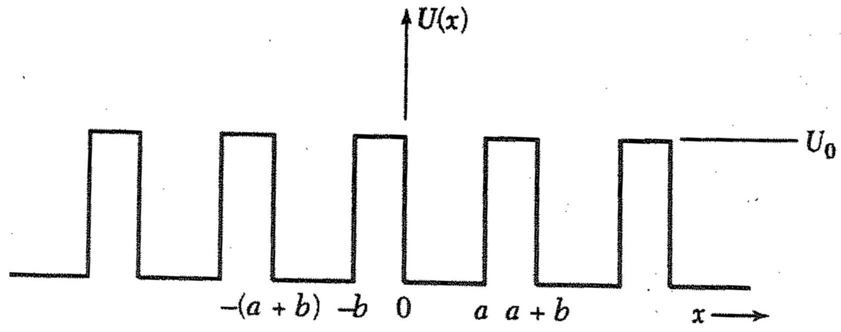
þar sem $u(x)$ er stöðuorkan og $\mathcal{E}$ er eigingildi orkunnar



Frá Kittel (1986)

- Lotubundinn mættisbrunnur sem innleiddur var af Kronig og Penney

Kronig-Penney líkanið



Frá Kittel (1986)

- Á bilinu $0 < x < a$ þar sem $u = 0$ er eiginfallið línuleg samantekt

$$\psi = A \exp(jKx) + B \exp(-jKx)$$

á planbylgju sem ferðast til hægri og vinstri með orku

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

Kronig-Penney líkanið

- Á bilinu $-b < x < 0$ innan þröskuldsins er lausnin

$$\psi = C \exp{(Qx)} + B \exp{(-Qx)}$$

með

$$U_0 - E = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m}$$

- Til að fá heildarlausn verður að líta til Bloch fallsins

- Lausnin á bilinu $a < x < a + b$ verður tengjast lausninni á bilinu $-b < x < 0$ samkvæmt Bloch

$$\psi(a < x < a + b) = \psi(-b < x < 0) \exp{(jk(a + b))}$$

sem skilgreinir bylgjuvigurinn k, sem merkir lausnina

Kronig-Penney líkanið

- Fastarnir A, B, C og D eru valdir þ.a. ψ og $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$ séu samfelld við $x = 0$ og $x = a$
- Þetta eru dæmigerð jaðarskilyrði fyrir kassalaga mættisbrunn í skammtafræði
- Við $x = 0$

$$A + B = C + D$$

og

$$jK(A - B) = Q(C - D)$$

- Við $x = a$, er

$$A \exp(jKa) + B \exp(-jKa)$$
$$= [C \exp(Qb) + B \exp(-Qb)] \exp(jk(a + b))$$

Kronig-Penney líkanið

- Einnig

$$jK\left[A\exp\left(jKa\right) - B\exp\left(-jKa\right)\right]$$
$$= Q\left[C\exp\left(Qb\right) - D\exp\left(-Qb\right)\right]\exp\left(jk(a+b)\right)$$

- Þessar jöfnur hafa bara lausn ef ákveðan er núll það er ef

$$\left[\frac{Q^2 - K^2}{2QK}\right]\sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a+b)$$

sem er ekki auðvelt að finna

Kronig-Penney líkanið

- Það má einfalda líkanið með því að lýsa mættinu sem lotubundnu delta falli og látum $b \longrightarrow 0$ og $U_0 \longrightarrow \infty$ þannig að

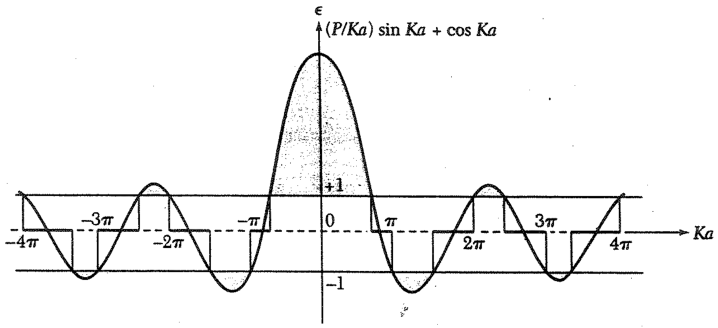
$$\lim_{\substack{b \to 0 \\ U_0 \to \infty}} \frac{Q^2 ab}{2} \longrightarrow P$$

  sem er endanleg stærð

- Þá er $Q \gg K$ og $Qb \ll 1$ og

$$\frac{P}{Ka} \sin Ka + \cos Ka = \cos ka$$

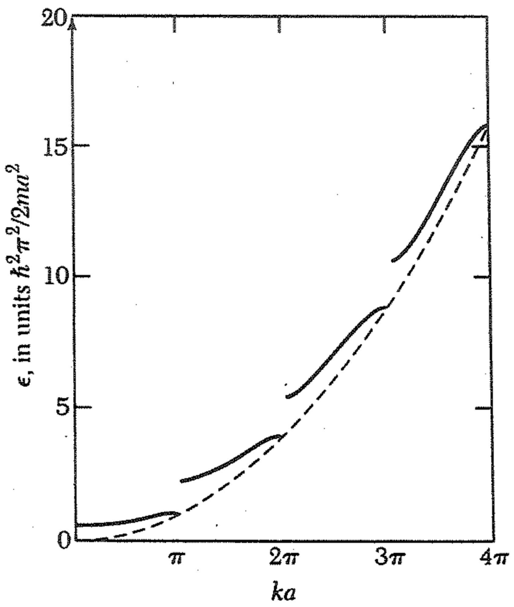
Kronig-Penney líkanið



Frá Kittel (1986)

- Graf af fallinu
$$\frac{P}{Ka}\sin Ka + \cos Ka$$
fyrir $P = 3\pi/2$.
- Leyfð gildi á orkunni eru þar sem $Ka = (2mE/\hbar^2)^{1/2}a$ þegar fallið liggur á milli ± 1.
- Fyrir önnur gildi á orkunni ferðast engar bylgjur og orkugeil myndast í orkurófið.

Kronig-Penney líkanið



Frá Kittel (1986)

- Orka sem fall af bylgjutölu fyrir Kronig-Penney mættið, með $P = 3\pi/2$.

$\Longrightarrow$ Dæmi 7.1.

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Nú skoðum við bylgjujöfnu fyrir almennt mætti, fyrir almennt k
- Setjum $U(x)$ sem stöðuorku rafeindar í línulegri grind með grindarfasta a
- Við vitum að stöðuorkan er óbreytt við grindarhliðrun

$$U(x) = U(x + a)$$

- Slíkt má rita sem Fourier röð fyrir stöðuorkuna sem

$$U(x) = \sum_G U_G \exp(jGx)$$

- Gildi stuðlanna U_G fyrir raunverulegt kristallsmætti fellur hratt með aukinni stærð á G
- Fyrir einfallt Coulomb mætti fellur U_G sem $1/G^2$

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Stöðuorkan $U(x)$ skal vera raungilt fall

$$U(x) = \sum_{G>0} U_G \left[\exp(jGx) + \exp(-jGx)\right] = 2\sum_{G>0} U_G \cos Gx$$

- Til einföldunar höfum við gert ráð fyrir að kristallurinn sé samhverfur um $x = 0$ og að $U_0 = 0$

- Bylgjujafnan

$$\mathcal{H}\psi = \mathcal{E}\psi$$

er þá

$$\left(\frac{1}{2m}p^2 + U(x)\right)\psi(x) = \left(\frac{1}{2m}p^2 + \sum_G U_G \exp(jGx)\right)\psi(x) = \mathcal{E}\psi(x)$$

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Þessi jafna er rituð í einnar rafeindar nálguninni þar sem brautin $\psi(x)$ lýsir hreyfingu einnar rafeindar í mætti sem stafar af jónakjörnum og meðal mætti frá öllum öðrum leiðnirafeindum

- Bylgjuföllin $\psi(x)$ má tákna sem Fourier röð sem er summa yfir öll gildi á bylgjuvigrum sem eru leyfð af randskilyrðum

$$\psi = \sum_k C(k) \exp(jkx) \qquad (*)$$

  þar sem k er rauntala

- Gildin k hafa formið $2\pi n/L$ sem uppfylla lotubundnu randskilyrðin, n er heil tala jákvæð eða neikvæð

- Við gerum ekki ráð fyrir, og það er almennt ekki raunin, að $\psi(x)$ sé lotubundið í grindarfastanum a

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Vörpunareiginleikar $\psi(x)$ eru ákvarðaðir af setningu Bloch
- Til að leysa bylgjujöfnuna stingum við (*) inn í hana þannig að hreyfiorkuliðurinn verði

$$\frac{1}{2m}p^2\psi(x) = \frac{1}{2m}\left(-j\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_k k^2 C(k)\exp(jkx)$$

og stöðuorkuliðurinn er

$$\left(\sum_G U_G \exp(jGx)\right)\psi(x) = \sum_G\sum_k U_G \exp(jGx)\, C(k)\exp(jkx)$$

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Bylgjujafnan er þá

$$\sum_k \frac{\hbar^2}{2m} k^2 C(k) \exp\left(jkx\right) + \sum_G \sum_k U_G C(k) \exp\left(j(k+G)x\right)$$
$$= \mathcal{E} \sum_k C(k) \exp\left(jkx\right)$$

- Sérhver Fourier þáttur verður að hafa sama stuðul sitt hvoru megin við jafnaðarmerkið

$$(\lambda_k - \mathcal{E}) C(k) + \sum_G U_G C(k-G) = 0 \qquad (***)$$

þar sem

$$\lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Þetta leiðir til óendanlegs fjölda á $C(k-G)$ sem ákvarða þarf
- Í raun er nægjanlegt að skoða 2 – 4 tilfelli
- Þegar C-in hafa verið ákvörðuð með (***) þá er bylgjufallið

$$\psi_k(x) = \sum_G C(k-G)\exp\left(j(k-G)x\right)$$

sem má umrita

$$\psi_k(x) = \left(\sum_G C(k-G)\exp\left(-jGx\right)\right)\exp\left(jkx\right) = \exp\left(jkx\right)u_k(x)$$

þar sem skilgreiningin

$$u_k(x) = \sum_G C(k-G)\exp\left(-jGx\right)$$

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Hér er $u_k(x)$ er Fourier röð yfir nykurgrindarvigra og er óbreytanlegt með grindarfærslu T svo að

$$u_k(x) = u_k(x+T)$$

sem er fundið

$$u_k(x+T) = \sum C(k-G)\exp\left(-jG(x+T)\right)$$

$$= \exp\left(-jGT\right)\underbrace{\left[\sum C(k-G)\exp\left(-jGx\right)\right]}_{u_k(x)} = \underbrace{\exp\left(-jGT\right)}_{=1} u_k(x)$$

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Við getum séð að jafna (***) er höfuðjafnan (e. central equation)

$$(\lambda_k - \mathcal{E})C(k) + \sum_G U_G(k - G) = 0$$

  sem er mengi af jöfnum, sem eru jafn margar og stuðlarnir C

- Látum g tákna stysta G og stöðuorkan $U(x)$ innihaldi bara Fourierstuðulinn $U_g = U_{-g}$ sem við táknum með U

Bylgjujöfnur rafeinda í lotubundnu mætti

- Þá er

$$\begin{pmatrix} \lambda_{k-2g}-\mathcal{E} & U & 0 & 0 & 0 \\ U & \lambda_{k-2g}-\mathcal{E} & U & 0 & 0 \\ 0 & U & \lambda_{k-2g}-\mathcal{E} & U & 0 \\ 0 & 0 & U & \lambda_{k-2g}-\mathcal{E} & U \\ 0 & 0 & 0 & U & \lambda_{k-2g}-\mathcal{E} \end{pmatrix}$$

- Lausn ákveðunnar gefur orkueigingildin $\mathcal{E}_{nk}$

Nálgun fyrir tóma grind

- Raunverulegar broðamyndir eru yfirleitt sýndar sem orka sem fall af bylgjutölu í fyrsta Brilloin svæðinu
- Þeir bylgjuvigrar sem eru utan fyrsta BZ eru fluttir þangað með því að draga frá viðeigandi nykurgrindarvigur
- Alltaf má finna slíka ummyndun
- Við finnum $\mathbf{G}$ þannig að $\mathbf{k}'$ í fyrsta BZ uppfyllir

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

þar sem $\mathbf{k}$ er ótakmarkað og er sannur bylgjuvigur frjálsrar rafeindar í tómri grind

Nálgun fyrir tóma grind

- Ef við sleppum ' í $\mathbf{k}'$ þá er orka frjálsrar rafeindar

$$\mathcal{E}(k_x, k_y, k_z) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} (k + G)^2 \right)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x + G_x)^2 + (k_y + G_y)^2 + (k_z + G_z)^2 \right]$$

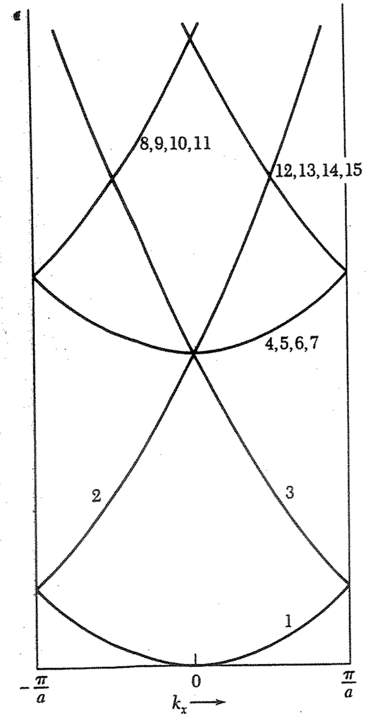
  þar sem $\mathbf{k}$ er í fyrsta BZ og $\mathbf{G}$ hleypur yfir tilsvarandi nykurgrindar punkta

- Lítum á dæmi, lægstu borða frjálsra rafeinda í einfaldri teningsgrind
- Sýnum orku sem fall af $\mathbf{k}$ í [100]-stefnuna
- Til einföldunar setjum við $\hbar^2/2m = 1$

Nálgun fyrir tóma grind

Borði	$Ga/2\pi$	$\mathcal{E}(000)$	$\mathcal{E}(k_x00)$
1	000	0	k_x^2
$2, 3$	$100, \bar{1}00$	$(2\pi/a)^2$	$(k_x \pm 2\pi/a)^2$
$4, 5, 6, 7$	$010, 0\bar{1}0$	$(2\pi/a)^2$	$k_x^2 \pm (2\pi/a)^2$
	$001, 00\bar{1}$		
$8, 9, 10, 11$	$110, 1\bar{1}0$	$2(2\pi/a)^2$	$(k_x + 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
	$101, 10\bar{1}$		
$12, 13, 14, 15$	$\bar{1}10, \bar{1}01$	$2(2\pi/a)^2$	$(k_x - 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
	$\bar{1}10, \bar{1}0\bar{1}$		
$16, 17, 18, 19$	$011, 0\bar{1}1$	$2(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + 2(2\pi/a)^2$
	$011, 0\bar{1}\bar{1}$		

Nálgun fyrir tóma grind



Frá Kittel (1986)

- Lægstu orkuborðar fyrir tóma einfalda teningsgrind.

Nálganir nærri mörkum

- Gerum ráð fyrir að Fourier stuðlarnir U_G mættisorkunnar séu litlir í samanburði við hreyfiorku rafeindanna við svæðisskilin
- Fyrst gerum við ráð fyrir bylgjuvigri sem er nákvæmlega á svæðaskilunum $\frac{1}{2}G$ eða $\frac{\pi}{a}$ þá er

$$k^2 = \left(\frac{1}{2}G\right)^2$$

$$(k-G)^2 = \left(\frac{1}{2}G - G\right)^2 = \left(\frac{1}{2}G\right)^2$$

svo að við svæðaskilin er

$$k = \pm\frac{1}{2}G$$

Nálganir nærri mörkum

- Við getum því ritað höfuðjöfnuna fyrir $k = \frac{1}{2}G$ og $\lambda \equiv \hbar^2 \left(\frac{1}{2}G\right)^2 /2m$ sem
$$(\lambda - \mathcal{E})C\left(\frac{1}{2}G\right) + UC\left(-\frac{1}{2}G\right) = 0$$
og
$$(\lambda - \mathcal{E})C\left(-\frac{1}{2}G\right) + UC\left(\frac{1}{2}G\right) = 0$$
- Þessar jöfnur hafa lausnir ef $\mathcal{E}$ uppfyllir
$$\begin{vmatrix} \lambda - \mathcal{E} & U \\ U & \lambda - \mathcal{E} \end{vmatrix}$$

Nálganir nærri mörkum

- Þar með er
$$(\lambda - \mathcal{E})^2 = U^2$$
og
$$\mathcal{E} = \lambda \pm U = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{2}G\right)^2 \pm U$$
sem hefur tvær rætur, önnur með orku sem er lægri en hreyfiorka rafeindar sem nemur U og hin hærri

- Þar með hefur stöðuorkumunur
$$2U \cos Gx$$
leitt til orkugeilar $2U$ við svæðaskilin

$\Longrightarrow$ Dæmi 7.2.

Nálganir nærri mörkum

- Hlutfall stuðlanna C má finna

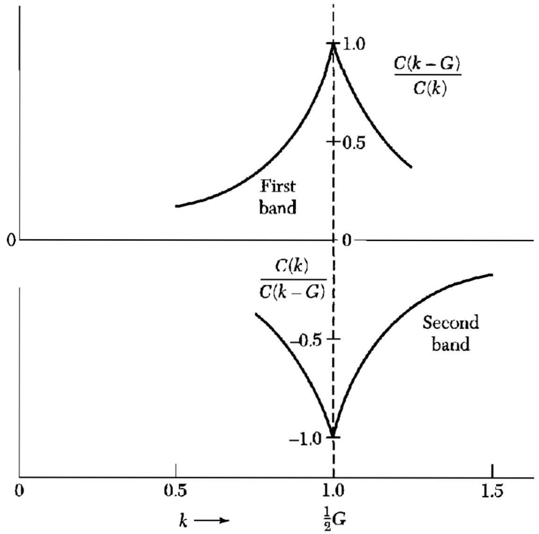
$$\frac{C\left(-\frac{1}{2}G\right)}{C\left(\frac{1}{2}G\right)} = \frac{\mathcal{E}-\lambda}{U} \pm 1$$

- Fourier liðurinn á $\psi(x)$ við svæðamörkin hefur tvær lausnir

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{jGx}{2}\right) \pm \exp\left(-\frac{jGx}{2}\right)$$

- Önnur lausnin gefur bylgjufall á botni orkugeilarinnar og hin á toppi hennar

Nálganir nærri mörkum



Frá Kittel (1986)

- Hlutfall stuðlanna í

$$\psi(x) = C(k)\exp(jkx) + C(k-G)\exp(j(k-G)x)$$

nálægt mörkum Brillouin svæðisins

Nálganir nærri mörkum

- Við finnum nú brautir með bylgjuvigur **k** nálægt svæðaskilum $\frac{1}{2}G$,

$$\psi(x) = C(k)\exp(jkx) + C(k-G)\exp(j(k-G)x)$$

og jöfnurnar sem þarf að leysa

$$(\lambda_k - \mathcal{E})C(k) + UC(k-G) = 0$$

$$(\lambda_{k-G} - \mathcal{E})C(k-G) + UC(k) = 0$$

þar sem

$$\lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Nálganir nærri mörkum

- Þessar jöfnur hafa lausn þegar orkan uppfyllir

$$\begin{vmatrix} \lambda_k - \mathcal{E} & U \\ U & \lambda_{k-G} - \mathcal{E} \end{vmatrix} = 0$$

- Þetta svarar til

$$\mathcal{E}^2 - \mathcal{E}(\lambda_{k-G} + \lambda_k) + \lambda_{k-G}\lambda_k - U^2 = 0$$

og hefur tvær lausnir

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}(\lambda_{k-G} + \lambda_k) \pm \left[\frac{1}{4}(\lambda_{k-G} + \lambda_k)^2 + U^2\right]^{1/2}$$

Nálganir nærri mörkum

- Ritum

$$\tilde{K} \equiv k - \frac{1}{2}G$$

svo að

$$\mathcal{E}_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{1}{2}G^2 - \tilde{K}^2\right) \pm \left[4\lambda\left(\frac{\hbar^2\tilde{K}^2}{2m}\right)\right]^{1/2}$$

$$\approx \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{1}{2}G^2 - \tilde{K}^2\right) \pm U\left[1 + 2\left(\frac{\lambda}{U^2}\right)\left(\frac{\hbar^2\tilde{K}^2}{2m}\right)\right]$$

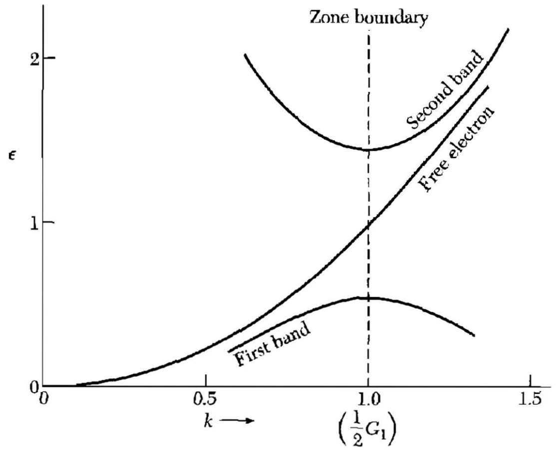
þegar

$$\frac{\hbar^2 G\tilde{K}^2}{2m} \ll |U|$$

Nálganir nærri mörkum

- Lausnin er þá

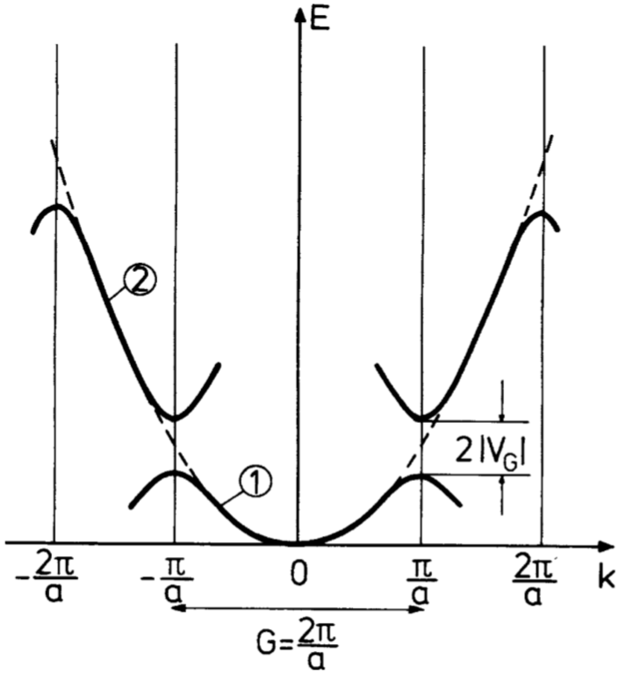
$$\mathcal{E}_k(\pm) = \mathcal{E}(\pm) + \frac{\hbar^2 \tilde{K}^2}{2m}\left(1 \pm \frac{2\lambda}{U}\right)$$



Frá Kittel (1986)

- Lausnin í nágrenni við mörk fyrsta Brillouin svæðisins. Hér er $U = -0.45$, $G = 2$ og $\hbar^2/2m = 1$. Til samanburðar er dreginn ferillinn fyrir frjálsa rafeind

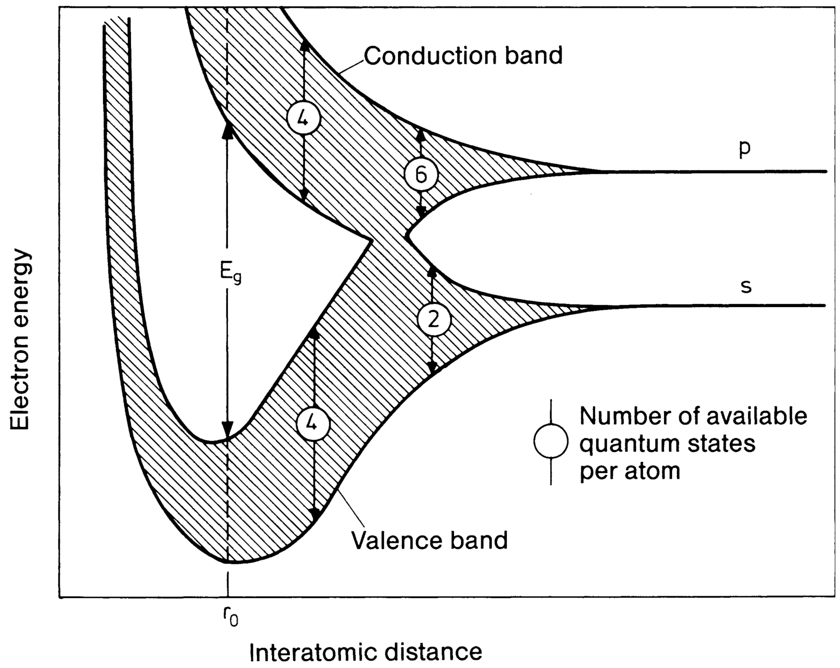
Nálganir nærri mörkum



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Klofnun orkufleygbogans fyrir frjálsa rafeind við mörk fyrsta Brillouin svæðisins $\mathbf{k} = \pm\pi/a$ í einni vídd

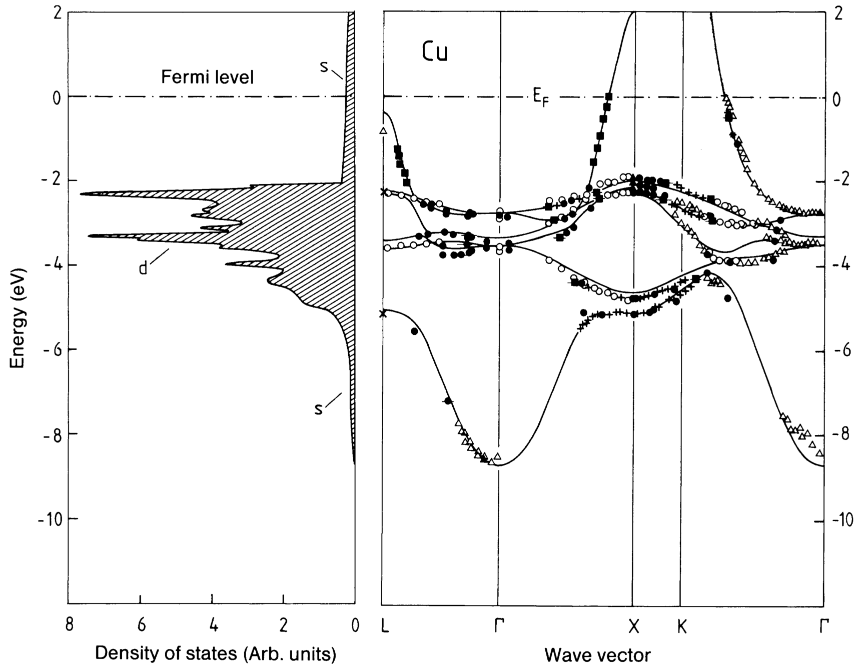
Raunverulegir orkuborðar



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Orkuborðar sem fall af fjarlægð milli atóma fyrir demant, Si eða Ge.

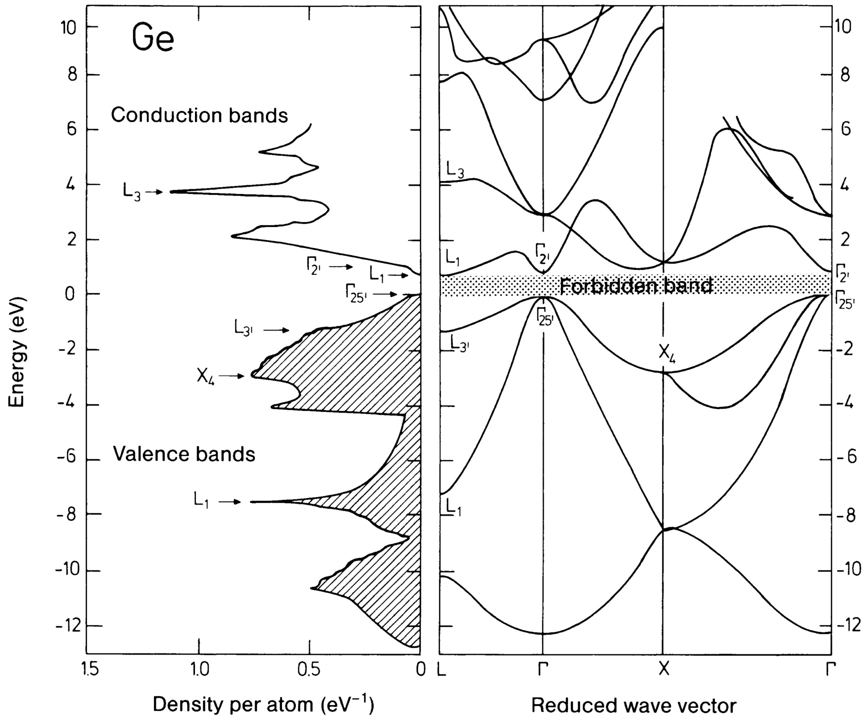
Raunverulegir orkuborðar



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Orkuborðar í kopar kristalli.

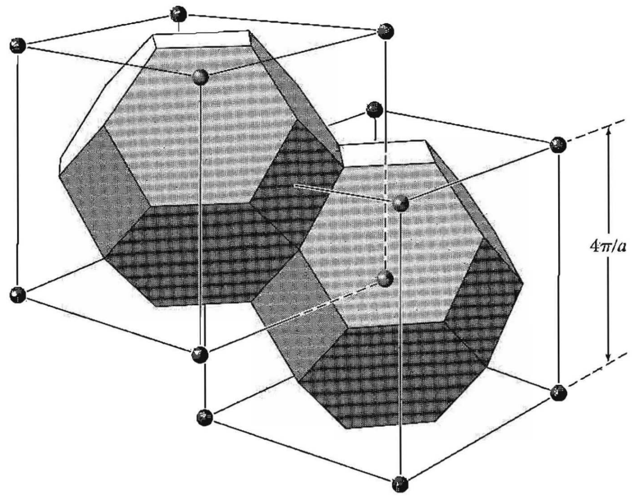
Raunverulegir orkuborðar



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Orkuborðar í german kristalli.

Brillouin svæði fcc kristalls



Frá Kittel (1986)

- Fyrsta Brillouin svæði fcc kristalls
- Nykurgrindin er bcc

$\Longrightarrow$ Dæmi 7.3.

Frekari upplýsingar

- Þessi kafli er að mestu byggður á kafla 7 hjá Kittel (1986) og kafla 15 hjá Simon (2013). Sambærileg umfjöllun er í kafla 7 hjá Ibach and Lüth (2009). Frumheimildin fyrir Bloch föll er Bloch (1929). Frumheimildin fyrir Kronig–Penney líkaninu er de L. Kronig and Penney (1931).

Heimildir

Bloch, F. (1929). Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeitschrift für Physik 52*(7), 555–600.

de L. Kronig, R. and W. G. Penney (1931). Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the Royal Society A 130*(814), 499–513.

Ibach, H. and H. Lüth (2009). *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science* (4 ed.). Berlin Heidelberg: Springer Verlag.

Kittel, C. (1986). *Introduction to Solid State Physics* (6 ed.). New York: John Wiley & Sons.

Simon, S. H. (2013). *The Oxford Solid State Basics*. Oxford: Oxford University Press.