

---

# Fizika trdne snovi

Rešene naloge z vaj

---

Tomaž Rejec

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO ON FIZIKO  
ODDELEK ZA FIZIKO  
2013

Zahvaljujem se študentom četrtil letnikov 2007/08, 2008/09, 2009/10 in 2010/11, ki so rokopise rešitev nalog z vaj preli v računalniško obliko.

# Kazalo

I	Bravaisove mreže	5
II	Sipanje rentgenskih žarkov	31
III	Prosti elektroni	43
IV	Kronig-Penneyev model kristala	61
V	Približek šibkega potenciala	67
VI	Približek tesne vezi	77
VII	Kvaziklasičen približek	91
VIII	Polprevodniki	97
IX	Mrežna nihanja	109



Del I  
Bravaisove mreže



# 1. Wigner-Seitzova celica

Albert Horvat

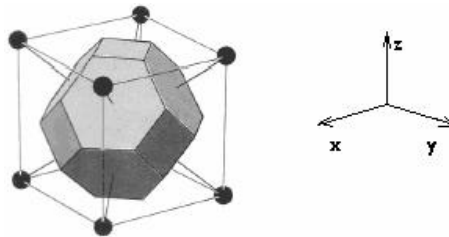
19. januar 2008

## 1 Naloga

Poišči Wigner-Seitzovo celico za bcc in fcc mrežo.

Wigner-Seitzovo celico konstruiramo tako, da izberemo mrežno točko (Bravejeve mreže), nato pa povlečemo črte do sosednjih točk. Na razpolovišču teh črt pravokotno na nje narišemo ravnine (normala kaže v smeri črt). Najmanjši zaprt prostor dobljen na ta način je WS celica.

## 2 bcc



Slika 1: Wigner-Seitzova celica za bcc mrežo (Prisekan oktaeder). Izbira koordinatnega sistema na mreži. Izhodišče je v središču celice in ni vidno na sliki.

Za bcc mrežo preverimo ali je ena izmed ploskev WS celice na sliki res pravilni šestkotnik. Najbližji sosedi kakšne točke v bcc mreži so

$$\mathbf{a}_1 = \pm a(1, 0, 0)$$

$$\mathbf{a}_2 = \pm a(0, 1, 0)$$

$$\mathbf{a}_3 = \pm a(0, 0, 1)$$

$$\mathbf{a}_4 = \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, \pm 1), \quad (1)$$

kjer je  $a$  dolžina osnovne celice. Ravnino opišemo z enačbo

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{n} = d \quad (2)$$

kjer je  $d$  razdalja ravnine od izhodišča, če je vektor normale  $\mathbf{n}$  enotski,  $\mathbf{r}$  pa so točke z ravnine. Omejil sem se le na nekaj točk, saj ostale dobimo analogno z menjavo ustreznih predznakov. Enačbe ravnin so naslednje:

$$x = \frac{a}{2} \quad y = \frac{a}{2} \quad z = \frac{a}{2} \quad x + y + z = \frac{3a}{4} \quad (3)$$

Presečišče treh ravnin lahko najdemo (tudi) tako, da rešimo enačbo  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ , kjer v matriko po vrsticah  $A$  zložimo normale ravnin, v  $\mathbf{b}$  pa konstante na desni strani enačb. Če je determinanta matrike  $A$  od nič različna, se ravnine sekajo v točki. Nato z leve pomnožimo enačbo z  $A^{-1}$  (ta obstaja saj  $\det A \neq 0$ ) in dobimo koordinate presečišča. Na ta način dobimo naslednje točke:

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_1 &= \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{4}\right) \\ \mathbf{t}_2 &= \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{4}, 0\right) \\ \mathbf{t}_3 &= \left(\frac{a}{4}, 0, \frac{a}{2}\right) \\ \mathbf{t}_4 &= \left(0, \frac{a}{4}, \frac{a}{2}\right) \end{aligned} \quad (4)$$

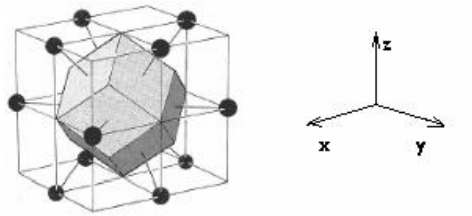
Ostalih točk šestkotnika nisem računal, saj so enačbe precej simetrične. Vse te točke ležijo v isti ravnini, namreč  $x + y + z = \frac{3a}{4}$ . Razdalje med sosednjimi točkami so enake  $(\frac{a\sqrt{2}}{4})$ . Na podlagi tega lahko zaključimo, da točke tvorijo oglišča pravih šestkotnika. Sicer pa je Wigner-Seitzova celica za bcc mrežo prisekan oktaeder.

### 3 fcc

Pri fcc mreži je bilo potrebno pokazati, da je razmerje med dolgo in kratko diagonalo romba na sliki  $\sqrt{2}$ . Spet poiščemo vektorje do najbližjih sosedov

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, 0)$$





Slika 2: Wigner-Seitzova celica za fcc mrežo (Rombski dodekaeder).

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(\pm 1, 0, \pm 1) \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}(0, \pm 1, \pm 1)\end{aligned}\tag{5}$$

Nato poiščemo enačbe ravnin

$$x + z = \frac{a}{2} \quad x + y = \frac{a}{2} \quad y + z = \frac{a}{2}.\tag{6}$$

Poiščemo presečišče teh treh ravnin, nato pa s pomočjo slike dobimo še ostale točke

$$\begin{aligned}\mathbf{t}_1 &= \frac{a}{4}(1, 1, 1) \\ \mathbf{t}_2 &= \frac{a}{2}(1, 0, 0) \\ \mathbf{t}_3 &= \frac{a}{4}(1, 1, -1) \\ \mathbf{t}_4 &= \frac{a}{2}(0, 1, 0)\end{aligned}\tag{7}$$

Izračunamo razmerje med kratko in dolgo diagonalo v rombu.

$$\sqrt{\frac{\|\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_3\|}{\|\mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_3\|}} = \frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}.\tag{8}$$

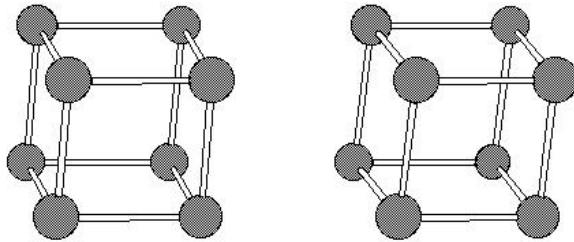
Domača naloga za predmet Fizika trdne snovi

Matevž Caserman

11. oktober 2007

Naloga: Določi zapolnitvena razmerja v kristalnih mrežah SC, BCC in FCC.

Najprej določimo zapolnitveno razmerje za kristalno strukturo SC. Če proučimo strukturo, lahko ugotovimo, da se atomi nahajajo v vsakem ogljišču, vendar je le osmina atoma vsebovana v celici. Ker imamo 8 ogljišč, je tako ravno 1 cela krogl (atom) vsebovana v celici SC. Radij te krogle je določen s polovico dimenzije a strukture SC, saj se dve kroglji na robu kocke stikata.



$$V_{SC} = 8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{3} = a^3 \frac{\pi}{6}$$

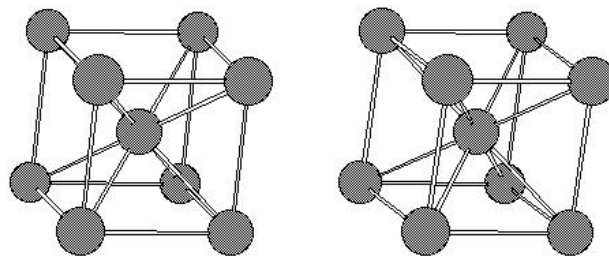
Splošno velja, da je zapolnitveno razmerje količnik med polnim volumnom atomov in volumnom osnovne celice:

$$\eta = \frac{V_{atomov}}{V_{osn.cel.}}$$

V prvem primeru je tako:

$$\eta_{SC} = \frac{V_{SC}}{V_{osn.cel.}} = \frac{a^3 \frac{\pi}{6}}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0,523$$

Če naredimo enak premislek za strukturo BCC, hitro lahko ugotovimo, da le ta vsebuje več atomov, saj je poleg osmink v ogljiščih prisoten tudi cel atom v centru celice. Tako sta skupaj v celici 2 cela atoma. Njihov radij pa lahko izračunamo tako, da predpostavimo, da se krogle po telesni diagonali celice stikajo in tako definirajo enačbo:



$$a\sqrt{3} = 4r$$

Zdaj je radij naslednji:

$$r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

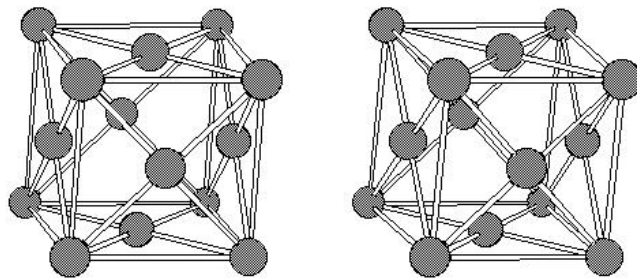
In polni volumen v BCC strukturi:

$$V_{BCC} = \left(8\frac{1}{8} + 1\right) \frac{4\pi\left(\frac{a\sqrt{3}}{4}\right)^3}{3} = a^3 \frac{\pi}{6} \frac{(\sqrt{3})^3}{4}$$

Zapolnitveno razmerje je za BCC strukturo:

$$\eta_{BCC} = \frac{\pi}{6} \frac{(\sqrt{3})^3}{4} = \frac{\pi}{6} 1,3 = 0,68$$

Ravno tako postopamo pri strukturi FCC, kjer je vsota vseh atomov znotraj celice kar 4 - osem osmink in šest polovic. Njihov radij pridobimo tako, da predpostavimo, da se krogle (atomi) stikajo na navadni diagonali naše celice in tako tvorijo naslednji pogoj:



$$a\sqrt{2} = 4r$$

Zdaj je radij naslednji:

$$r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$

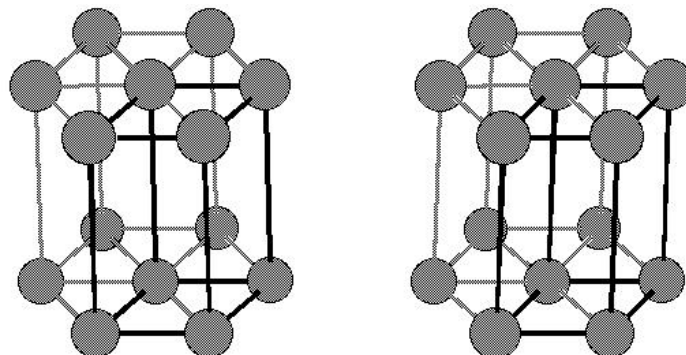
In polni volumen v FCC strukturi:

$$V_{FCC} = \left(8\frac{1}{8} + 6\frac{1}{2}\right) \frac{4\pi\left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{3} = a^3 \frac{\pi}{6} \frac{(\sqrt{2})^3}{2}$$

Zapolnitveno razmerje je za FCC strukturo:

$$\eta_{FCC} = \frac{\pi}{6} \frac{(\sqrt{2})^3}{2} = \frac{\pi}{6} 1,41 = 0,74$$

Podobno lahko izračunamo zapolnitveno razmerje za SH strukturo, kjer je znotraj celice ravno šest dvanajstink atoma, torej ena polovica krogle (atoma). Njihov radij je sedaj še vedno polovica  $a$ , vendar se spremeni volumen osnovne celice:



$$r = \frac{a}{2}$$

$$V_{osn.cel.SH} = \frac{a^2\sqrt{3}}{4}a = \frac{\sqrt{3}}{4}a^3$$

In polni volumen v SH strukturi:

$$V_{SH} = \left(6 \frac{1}{12}\right) \frac{4\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3}{3} = a^3 \frac{\pi}{6} \frac{1}{2}$$

Zapolnitveno razmerje je za SH strukturo:

$$\eta_{SH} = \frac{1}{2} \frac{\pi}{6} \frac{4}{\sqrt{3}} = \frac{\pi}{6} \frac{2\sqrt{3}}{3} = \frac{\pi}{6} 1,155 = 0,60$$

FIZIKA TRDNE SNOVI, DOMAČA NALOGA

## GOSTI SKLAD ABC

Samo Ratnik (28010615), matematično-fizikalna smer

## Naloga

Pokaži, da je ‘ABC’ različica heksagonalnega tesnega sklada ekvivalentna ploskovno centrirani kubični Bravaisovi mreži.

## Rešitev

## FCC mreža

Najprej si ogledjmo ploskovno centrirano kubično (FCC) Bravaisovo mrežo. Eden od možnih (osnovnejših) izborov primitivnih vektorjev je

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(1, 1, 0), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(0, 1, 1).$$

Očitno je dolžina vseh treh primitivnih vektorjev enaka (‘permutacija’ ničle). Izračunajmo jo

$$a_i = |\mathbf{a}_i| = |\mathbf{a}_1| = \sqrt{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1} = \sqrt{a^2/2} = \frac{a}{\sqrt{2}}, \quad (i = 1, 2, 3).$$

Sedaj se spomnimo še formule iz srednje šole za kot med dvema vektorjema

$$\cos \sphericalangle(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{|\mathbf{a}||\mathbf{b}|},$$

pa lahko izračunamo kote med vzajemnimi primitivnimi vektorji. Spet je

$$\cos \sphericalangle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = \cos \sphericalangle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3) = \cos \sphericalangle(\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) = \frac{(a/2)^2}{(a^2/2)} = \frac{1}{2}.$$

Tako smo ugotovili sledeče. Vse stranice lika, ki ga (tako izbrani) primitivni vektorji oklepajo, so enako dolge in koti med njimi so  $60^\circ$ . Spet iz srednje šole se lahko spomnimo, da se tak lik imenuje (pravilni) tetraeder. Na koncu omenimo še, da ponekod v literaturi FCC mrežo najdemo tudi pod imenom *tesno zložena kubična* (angl. cubic close-packed, CCP).

## HCP mreža

Heksagonalni tesni sklad dobimo pri zlaganju gradnikov v (pravilno oz. enakostranično) trikotno mrežo v osnovni ravnini. V prvi višji ravnini gradnike postavimo v težišča trikotnikov osnovne ravnine. V drugi višji ravnini pa imamo dve možnosti. Gradnike lahko postavimo v enake lege (v  $xy$ -ravnini), kot so gradniki osnovne ravnine—ta tip mreže označimo z ‘ABAB’. V tem primeru

dobimo mrežo, ki jo ponavadi najdemo pod imenom *heksagonalna tesno zložena* (HCP). Lahko pa gradnike postavimo v težiščne lege trikotnikov iz prve višje ravnine—mreža ‘ABCABC’. Izkaže se (in to bi radi dokazali), da v tem primeru dobimo FCC mrežo. Še največ o obliki opisanih mrež povedo priložene slike (glej spodaj).

Sedaj pokažimo zahtevano. Vektorji do leg gradnikov v osnovni in prvi višji ravnini so sledeči ( $a$  je pri tem razdalja med dvema gradnikoma)

$$\mathbf{a}_1 = a(1, 0, 0), \quad \mathbf{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \quad \mathbf{a}_3 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{6}, \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\right).$$

Poračunajmo dolžine teh vektorjev

$$|\mathbf{a}_1| = a, \quad |\mathbf{a}_2| = \sqrt{a^2\left(\frac{1}{4} + \frac{3}{4}\right)} = a, \quad |\mathbf{a}_3| = \sqrt{a^2\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{12} + \frac{2}{3}\right)} = a.$$

In še kote med vzajemnimi vektorji (spet po zgornji formuli)

$$\cos \sphericalangle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = \cos \sphericalangle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3) = \frac{a^2/2}{a^2} = \frac{1}{2}, \quad \cos \sphericalangle(\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) = \frac{a^2((1/4) + (3/12))}{a^2} = \frac{1}{2}.$$

Dobili smo pravzaprav tisto, kar smo že vedeli: tako zloženi gradniki tvorijo seveda spet pravilni tetraeder. Za dokaz ekvivalence, ki jo zahteva naloga, je treba povedati le še, da pri ‘ABAB’ konfiguraciji Bravaisovo mrežo ne sestavlja tak tetraeder, saj v drugi višji ravnini na mestu težišč trikotnikov iz prve višje ravnine ni gradnikov. Je pa obratno res pri ‘ABCABC’ skladu (spet so priložene slike najbrž vredne več kot besedni opis). S tem smo dokazali zahtevano.

### Polnitvena razmerja (neobvezno)

Pri tesnih skladih je zanimivo omeniti tudi polnitvena razmerja. Polnitveno razmerje (označimo ga z  $\alpha$ ) je delež volumna primitivne celice, ki ga zapolnjujejo gradniki. Povedano z drugimi besedami: zanima nas, kako se spleča zložiti pomaranče v zaboje, tako da jih bomo natovorili na ladjo čimveč (pomaranč, seveda). V nekaj točkah se sprehodimo čez zgodovino.

- Problem optimalnega zlaganja je (pričakovano) že kar star. Tako je leta 1611 Johannes Kepler postavil famozno domnevo, da noben sklad enakih krogel nima večjega (boljšega) polnitvenega razmerja kot FCC in HCP mreži (govorimo seveda o 3D evklidskem prostoru). Polnitveno razmerje obeh omenjenih mrež je

$$\alpha_{\text{FCC}} = \alpha_{\text{HCP}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74048.$$

- Kepler svoje domneve ni znal dokazati. Namesto njega je to storil Gauß, leta 1831. Gaußov dokaz pa je bil nepopoln. Veljal je namreč le za mreže, kjer so gradniki razporejeni v oglišča pravilnih mnogokotnikov (t.i. regularne mreže). Da se pokazati, da obstajajo neregularne mreže, ki v majhnih volumnih dosegaajo boljše pokritje od omenjenih dveh mrež. Ni pa enostavno zložiti takih mrež v sklade, ki bi napolnili cel prostor.
- Od Gaußa naprej ni bilo signifikantnih rezultatov in David Hilbert leta 1900 vključil problem med svojih ‘triindvajset nerešenih matematičnih problemov’.

- Naslednji bolj pomemben korak se zgodi v letu 1958, ko angleški matematik Claude Ambrose Rogers postavi zgornjo mejo za polnitveno razmerje

$$\alpha_{\text{MAX}} = \sqrt{18} \left( \cos^{-1} \frac{1}{3} - \frac{\pi}{3} \right) \approx 0.77964.$$

- Z razvojem računalnikov so se problema lotili numeriki. Leta 1998 je skupina pod vodstvom Thomasa Halesa objavila numerični dokaz. Ta je vseboval 250 strani zapiskov in 3 gigabajte programov, podatkov in rezultatov. V letu 2003 je revija Annals of Mathematics objavila delo—po štirih letih dela so uradni ocenjevalci revije dokazu pripisali ‘99-odstotno zanesljivost’.
- V letu 2003 je Hales najavil začetek iskanja formalnega dokaza za Keplerjevo domnevo. V najavi je ocenil, da bo iskanje vzelo verjetno približno dvajset let dela.

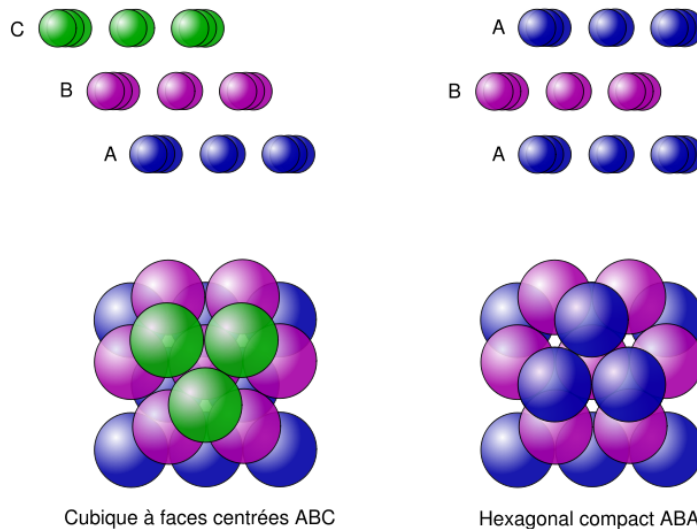
Več o tem na:

[http://en.wikipedia.org/wiki/Kepler\\_conjecture](http://en.wikipedia.org/wiki/Kepler_conjecture)

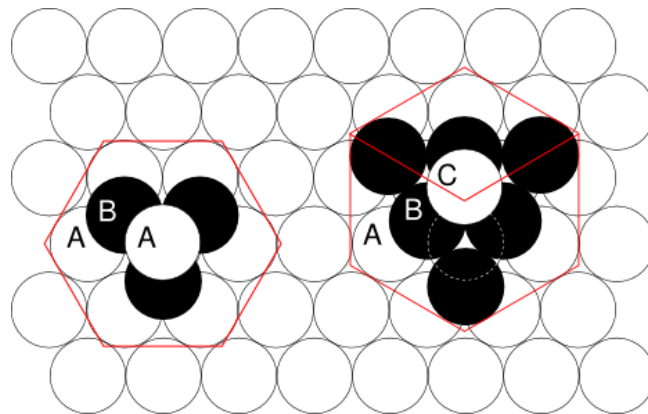
<http://en.wikipedia.org/wiki/Close-packing>

[http://en.wikipedia.org/wiki/Sphere\\_packing](http://en.wikipedia.org/wiki/Sphere_packing)

Na koncu še nekaj slik, ki ponazarjajo razliko med ‘ABAB’ in ‘ABCABC’ strukturo (vzete iz omejenih spletnih strani).



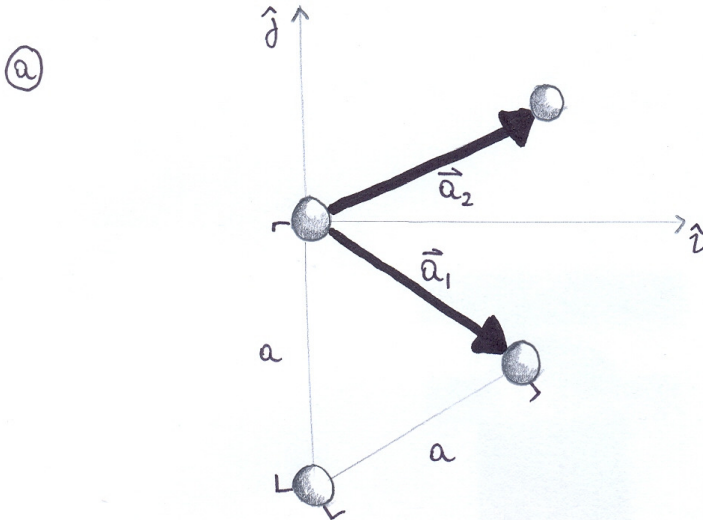




Naloga iz Fizike Trdne Snovi

Vladimir Radulović  
280 30 220

Piši recipročni mreži za (a) trikotno mrežo  
in (b) ploskovno centrirano kubično mrežo (FCC)



Božni vektorji

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} [\sqrt{3}, -1, 0]$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} [\sqrt{3}, 1, 0]$$

$$\vec{a}_3 = c [0, 0, 1]$$

Prostornina osnovne celice:  $V_0 = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) =$

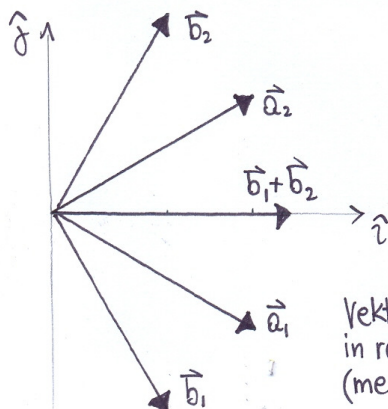
$$= \frac{a}{2} \cdot \frac{a}{2} \cdot c \begin{vmatrix} \sqrt{3} & -1 & 0 \\ \sqrt{3} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^2 c}{4} (\sqrt{3} - (-\sqrt{3})) = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

Vektorji recipročne mreže

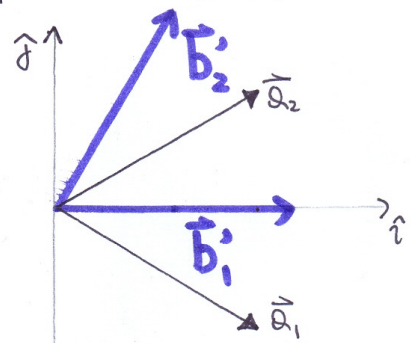
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{4\pi}{\sqrt{3} a^2 c} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 0 & 1 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \end{vmatrix} \frac{a}{2} \cdot c = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_0} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{4\pi}{\sqrt{3} a^2 c} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 0 & 1 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \end{vmatrix} \frac{a}{2} c = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_0} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{4\pi}{\sqrt{3} a^2 c} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ \sqrt{3} & 1 & 0 \end{vmatrix} \frac{a^2}{4} = \frac{\pi}{c\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2\sqrt{3} \end{bmatrix} = \frac{2\pi}{c} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$



Vektorji Bravaisove  
in recipročne mreže  
(merilo ni točno, zanima jo nas smeri)



b)

Bazni vektorji

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} [0, 1, 1]$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} [1, 0, 1]$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} [1, 1, 0]$$

Prostornina osnovne celice

$$V_0 = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) =$$

$$= \frac{a^3}{8} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{8} \cdot 2 = \frac{a^3}{4}$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_0} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{8\pi}{a^3} \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_0} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{2\pi}{a} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_0} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{2\pi}{a} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Povzetek

a) Recipročna mreža, trikotne mreže je trikotna mreža. Če je stranica Bravaisove mreže enaka  $a$ , je stranica recipročne mreže enaka

$$2 \cdot \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}. \text{ Recipročna mreža je zasukana za kot } 30^\circ \text{ glede na Bravaisov}$$

b) Recipročna mreža, ploskovno centrirane kubične mreže s stranico  $a$  telesno centrirane, kubične mreže s stranico  $2 \cdot \frac{2\pi}{a} = \frac{4\pi}{a}$ .

- Glavna stran
- Zadnje spremembe

## Bravaisove mreže

### Iz Fizika trdne snovi 2007 - 2008

Bravais je leta 1848 pokazal, da iz simetrije kristala in točkovnih simetrijskih operacij (rotacija, zrcaljenje in inverzija) izhaja največ 14 različnih načinov, kako uredimo točke po prostoru, da bodo še translacijsko periodične. Povedano drugače imamo 7 kristalnih sistemov (triklinski, monoklinski, ortorombski, tetragonalni, kubični, heksagonalni in trigonalni) kot prikazuje Media:14BrM.jpg in nekateri od teh imajo več možnih mrež. Vseh možnih mrež je 14. To so Bravaisove mreže.

### Vsebina

- 1 Naloga
  - 1.1 1. Primer:
  - 1.2 2. Primer:
  - 1.3 3. Primer:
  - 1.4 4. Primer:

## Naloga

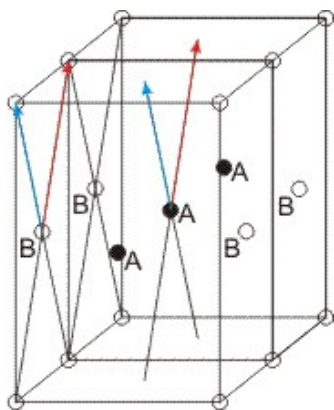
Radi bi na nekaj primerih pokazali, da z dodajanjem novih točk obstoječim Bravaisovim mrežam, ne moremo dobiti novih Bravaisovih mrež.

Vzamemo torej eno od štirinajstih Bravaisovih mrež, ji dodamo na poljubna mesta nove točke in se vprašamo:

- 1.) Ali je še Bravaisova mreža?
- 2.) Ali je nova Bravaisova mreža?

### 1. Primer:

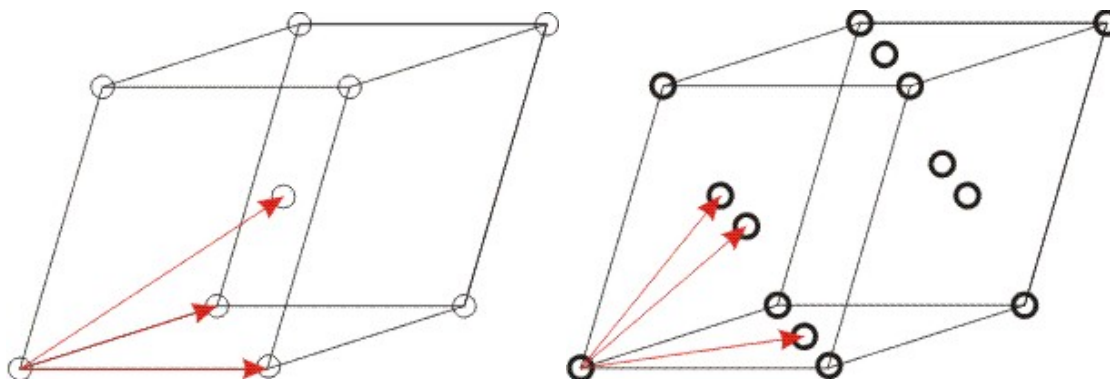
Ortorombske Bravaisove mreže so štiri: preprosta, s centrirano ploskvijo C, telesno centrirana in ploskovno centrirana. Zanima nas, če bi dobili novo Bravaisovo mrežo, če bi imeli mrežo s centrirano ploskvijo A in s centrirano ploskvijo B?



Na skici sta narisani dve sosednji ortorombski celici, ki imata vsaka po dve nasprotni centrirani ploskvi. Če se premaknemo iz katerekoli točke B v smeri rdečega ali modrega vektorja pridemo do sosednje mrežne točke, medtem ko če isti premik opravimo iz katerekoli točke A naletimo na praznino. **Ker okolica vsake točke ni popolnoma enaka, to ni BM!**

## 2. Primer:

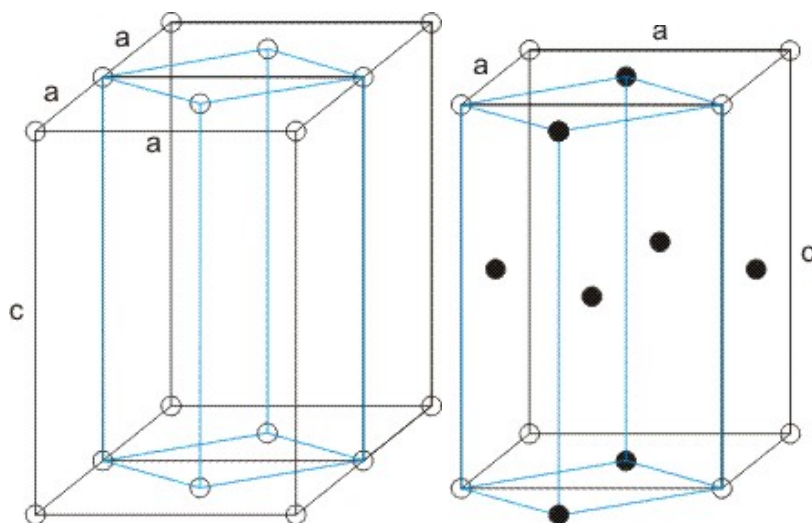
Triklinjski sistem ima samo preprosto Bravaisovo mrežo. Ali so telesno centrirana, ploskovno centrirana in mreža s ploskovno centrirano ploskvijo C nove BM v triklinskem sistemu?



Prva skica prikazuje telesno centrirano triklinsko mrežo, druga skica pa ploskovno centrirano triklinsko mrežo. V obeh primerih se izkaže, da obstaja manjša osnovna celica (paralelepiped), ki jo napenjajo trije rdeče označeni vektorji. Isto se da pokazati tudi za triklinsko mrežo s centrirano ploskvijo C. **Ker se v navedenih mrežah vedno najde manjšo triklinsko preprosto BM, to niso nove BM!**

## 3. Primer:

Tetragonalni BM sta dve (preprosta in telesno centrirana). Zakaj ne obstajata tudi tetragonalna ploskovno centrirana BM in tetragonalna BM s centrirano ploskvijo C?

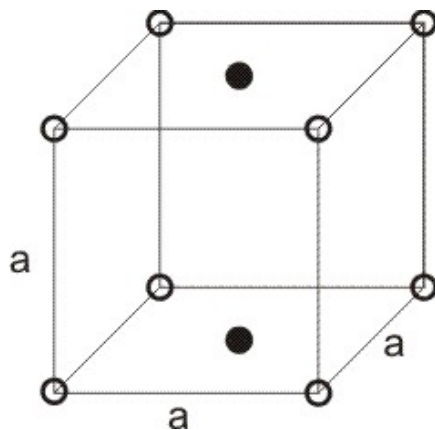


Prva skica prikazuje tetragonalno mrežo s centrirano ploskvijo C. To ni nova BM, ker lahko v taki mreži vedno dobimo tetragonalno preprosto BM (modra barva) z manjšo prostornino.

Druga skica prikazuje tetragonalno ploskovno centrirano mrežo. To ni nova BM, ker lahko v taki mreži vedno dobimo tetragonalno telesno centrirano BM (modra barva) z manjšo prostornino.

#### 4. Primer:

Kubične BM so tri: preprosta, ploskovno centrirana in telesno centrirana. Ali je mreža s centrirano ploskvijo C nova BM v kubičnem sistemu?



Ko smo preprosti kubični BM dodali dve točki na nasprotnih stranicah kocke, smo podrli rotacijsko simetrijo mreže. **Ta mreža ni več kubična pač pa tetragonalna!**

Vzpostavljeno iz »[http://burana.ijs.si/wiki3/index.php/Bravaisove\\_mre%C5%BEe](http://burana.ijs.si/wiki3/index.php/Bravaisove_mre%C5%BEe)«

- |
- Članek |
- Pogovor |
- Uredite stran |
- Zgodovina strani |

- |
- [Kaj se povezuje sem](#) |
- [Sorodne spremembe](#) |
- [Naloži datoteko](#) |
- [Posebne strani](#) |
- [Prijavite se / registrirajte se](#) |

---

Čas zadnje spremembe: 01:54, 24 november 2007. Stran je bila naložena 4.248-krat.

- - [Z Fizika trdne snovi 2007 - 2008](#) |
  - [Zanikanja odgovornosti](#) |
  - [Powered by MediaWiki](#) |
  - [Design by Paul Gu](#)
-

## Simetrijska grupa kubične mreže

Simon Čopar

11. november 2007

### 1 Opis grupe

Rotacijska grupa je množica vseh rotacij in psevdorotacij, ki kocko preslikajo samo vase. Število orientacij enostavno določimo: vsaka ploskev je lahko na vrhu (6), vsakič je lahko kocka rotirana na (4) različne načine, vse od teh konfiguracij imajo še svojo zrcalno sliko po inverziji prostora (2), skupaj  $6 \otimes 4 \otimes 2 = 38$ . Ker gre za rotacije, je ta grupa podgrupa  $O(3)$ , reprezentiramo pa jo lahko s pomočjo matrik  $3 \times 3$ . Ker v vseh orientacijah koordinatne osi kažejo vzdolž istih smeri v prostoru, so elementi matrike lahko samo 1,  $-1$ . Vsako rotacijo lahko enolično predstavimo s koordinatnim trirobom, ki ga v osnovnem stanju postavimo v oglišče kocke. Stolpci matrike predstavljajo smeri kamor kažejo ustrezne koordinatne osi. Kratek račun potrди število elementov: obstaja  $3!$  permutacij osi, vsaka kaže lahko v pozitivno ali negativno smer, skupaj  $2^3 3! = 48$ .

### 2 Simetrijske osi

Iz zvezne rotacijske grupe  $SO(3)$  vemo, da lahko vsako orientacijo izrazimo z osjo rotacije in kotom. Za popis vseh rotacij potrebujemo produkt 3 rotacij okrog paroma nekolinearnih osi (npr. Eulerjevi koti). Izkazalo se bo, da v primeru kocke potrebujemo le 2 izmed 3 rotacij okrog koordinatnih osi.

Kocka ima

- **3 4-števne osi**, ki potekajo vzdolž vektorjev  $x, y, z$ .
- **4 3-števne osi**, izberimo jih simetrično vzdolž vektorjev  $x + y + z, -x + y + z, x - y + z, x + y - z$ .
- **6 2-števni osi**, vzdolž diagonal ploskev,  $x + y, y + z, y + x, -x + y, -y + z, -z + x$ .

Na podlagi zgoraj povedanega bo 24 pravih rotacij (brez zrcaljenj) izraženih z zgoraj naštetimi rotacijami.

### 3 Cayleyeva tabela

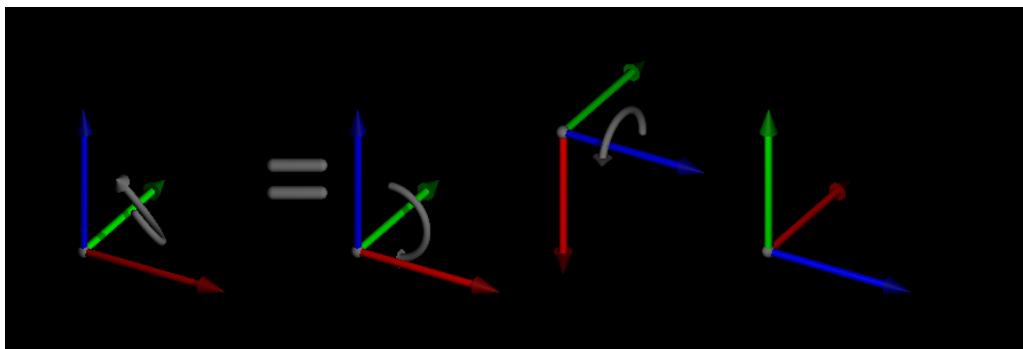
S pomočjo množenja parov rotacij okrog koordinatnih osi (poleg identitete ima vsaka od teh osi 3 "kote" rotacije) bomo izrazili vseh 24 pravih rotacij (identiteto označimo z  $c_0$ ).



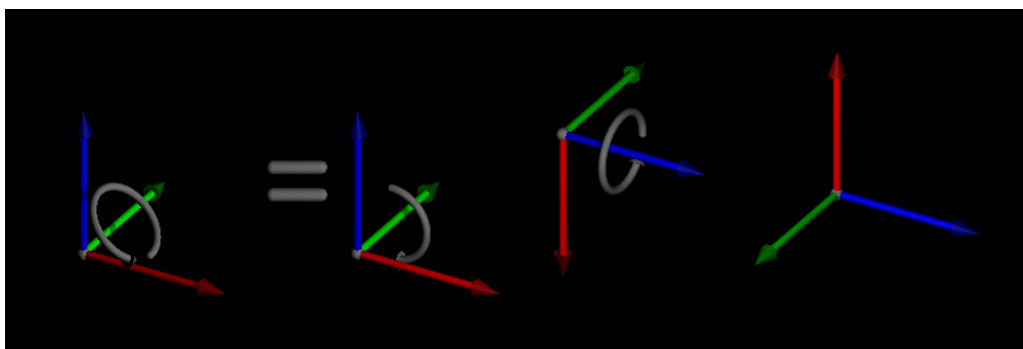
$c_0$	$x c_4^1$	$x c_4^2$	$x c_4^3$	$y c_4^1$	$y c_4^2$	$y c_4^3$	$z c_4^1$	$z c_4^2$	$z c_4^3$
$x c_4^1$	$x c_4^2$	$x c_4^3$	$c_0$	$0 c_3^+$	$x c_2^+$	$x c_3^+$	$y c_3^-$	$\bar{x} c_2^-$	$z c_3^-$
$x c_4^2$	$x c_4^3$	$c_0$	$x c_4^1$	$y c_2^+$	$z c_4^2$	$\bar{y} c_2^+$	$\bar{z} c_2^-$	$y c_4^2$	$z c_2^-$
$x c_4^3$	$c_0$	$x c_4^1$	$x c_4^2$	$y c_3^+$	$\bar{x} c_2^+$	$z c_3^+$	$x c_3^-$	$x c_2^-$	$0 c_3^-$
$y c_4^1$	$z c_3^-$	$\bar{y} c_2^-$	$x c_3^-$	$y c_4^2$	$y c_4^3$	$c_0$	$0 c_3^+$	$y c_2^+$	$y c_3^+$
$y c_4^2$	$\bar{x} c_2^-$	$z c_4^2$	$x c_2^-$	$y c_4^3$	$c_0$	$y c_4^1$	$z c_2^-$	$x c_4^2$	$\bar{z} c_2^-$
$y c_4^3$	$y c_3^-$	$y c_2^-$	$0 c_3^-$	$c_0$	$y c_4^1$	$y c_4^2$	$z c_3^+$	$\bar{y} c_2^-$	$x c_3^+$
$z c_4^1$	$0 c_3^+$	$z c_2^+$	$z c_4^1$	$x c_3^-$	$\bar{z} c_2^-$	$y c_3^-$	$z c_4^2$	$z c_4^3$	$c_0$
$z c_4^2$	$x c_2^+$	$y c_4^2$	$\bar{x} c_2^-$	$\bar{y} c_2^-$	$x c_4^2$	$y c_2^-$	$z c_4^3$	$c_0$	$z c_4^1$
$z c_4^3$	$x c_3^+$	$\bar{z} c_2^-$	$y c_4^-$	$z c_3^-$	$z c_2^-$	$0 c_3^-$	$c_0$	$z c_4^1$	$z c_4^2$

Rotacije okrog vsake izmed osi so modularna podgrupa naše grupe,  $c_n = \mathbb{Z}_n$ . Opazimo tudi

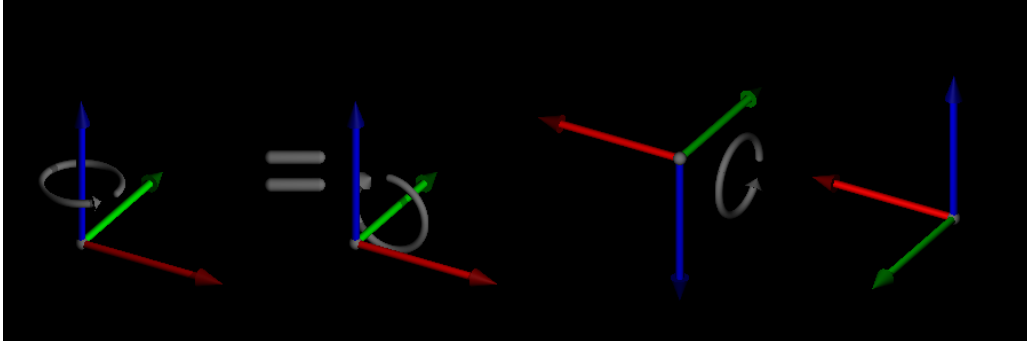
$$x c_4^2 y c_4^2 z c_4^2 = c_0$$



Slika 1: Ponazoritev rotacije  $0 c_3^1$  kot produkt rotacij okrog koordinatnih osi.



Slika 2: Rotacija okrog simetrale stranice  $y c_2$ .



Slika 3: Ponazoritev rotacije  $z c_4^2$ . Rotacije za pol obrata okrog vseh treh osi v poljubnem vrstnem redu da identiteto.

## 4 Zrcaljenja

Drugih 24 elementov grupe dobimo tako, da pomnožimo vse zgoraj dobljene rotacije z operatorjem inverzije prostora. Inverzija prostora komutira z vsemi ostalimi operatorji ker je mnogokratnik identitete. Dve zaporedni zrcaljenji ohranita parnost in sta ekvivalentni dvakratnim rotacijam okrog ustrezne osi. Enako velja za zaporedje inverzije in zrcaljenja.

$$\begin{aligned}\sigma_i \sigma_j &= {}^k c_4^2 \\ \sigma_i^2 &= c_0 \\ -\sigma_i &= \sigma_j \sigma_k = {}^i c_4^2\end{aligned}$$

Posebno pozornost si zaslužijo še operatorji oblike

$$\sigma_{yz} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

ki zrcalijo preko ploskovnih diagonal. Tak operator je ekvivalenten rotaciji komponirani z zrcaljenjem.

$$\sigma_{yz} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \sigma_y {}^x c_4^1 = \sigma_z {}^x c_4^3 = -{}^{\bar{x}} c_2$$

Na koncu sem izrazil z rotacijo in inverzijo prostora.

## 5 Množenje poljubnega para rotacij

Po zgornji tabeli poljubno rotacijo lahko zapišemo kot produkt dveh rotacij okrog osnovnih osi na različne načine. Z izbiro primerne kombinacije se izraz lahko poenostavi. Primer za  ${}^x c_3^+ {}^{\bar{z}} c_2$ :

$$\begin{aligned}{}^x c_3^+ &= y c_4^3 {}^x c_4^1 = z c_4^3 y c_4^3 = x c_4^1 z c_4^3 \\ {}^{\bar{z}} c_2 &= x c_4^2 z c_4^3 = y c_4^2 z c_4^1 = z c_4^1 x c_4^2 = z c_4^3 y c_4^2\end{aligned}$$

Izberemo tako, da sta rotaciji v sredini iste vrste.

$${}^x c_3^+ {}^{\bar{z}} c_2 = x c_4^1 z c_4^3 z c_4^1 x c_4^2 = x c_4^1 x c_4^2 = x c_4^3$$

FIZIKA TRDNE SNOVI  
2007/08  
**vaja: Millerjevi indeksi**

Jure Klučar

7. november 2007

## 1 Naloga

Kakšni so Millerjevi indeksi (oz. koliko jih manjka) za telesno centrirano (BCC) in polskovno centrirano kubično mrežo (FCC)?

## 2 Millerjevi indeksi

Millerjevi indeksi, ponavadi jih označimo z  $h$ ,  $k$  in  $l$ , so cela števila in nam določajo neko mrežno ravnino. Zaradi neenoličnosti vzamemo tako trojico, ki nima skupnega delitelja. Po drugi strani pa nam lahko Millerjevi indeksi določajo nek vektor  $\vec{K}$  recipročne mreže. Vektor  $\vec{K}$  naj bo vzporeden z normalo mrežne ravnine, velikost najmanjšega vektorja pa naj bo  $2\pi/d$ , kjer je  $d$  razdalja med vzporednimi mrežnimi ravninami, ki določajo ta vektor. Imamo torej enolično zvezo med mrežnimi ravninami in vektorji recipročne mreže.

## 3 Navadna kubična mreža (SC)

Ugotovili smo, da lahko raziščemo M. indekse, se tem da gledamo vektorje recipročne mreže. Kot prvi in najosnovnejši primer vzamemo navadno kubično mrežo. Vektorje recipročne mreže izračunamo tako, da zadostimo enačbi

$$e^{i\vec{K}_{hkl}\cdot\vec{R}_n} = 1, \quad (1)$$

kjer so  $\vec{R}_n$  v tem primeru vektorji navadne kubične mreže, vektorji  $\vec{K}_{hkl}$  pa so vektorji ustrezne recipročne mreže.

Če zapišemo vektor  $\vec{R}_n$  kot

$$\vec{R}_n = a(n_1, n_2, n_3) \quad (2)$$

in vektor  $\vec{K}_{hkl}$  kot

$$\vec{K}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l) \quad (3)$$

in vstavimo v enačbo (1), dobimo

$$e^{i2\pi(hn_1+kn_2+ln_3)} = 1. \quad (4)$$

Očitno je, da vse trojice  $h$ ,  $k$  in  $l$  zadostijo pogoju (4). Pri navadni kubični mreži (SC) imamo torej vse M. indekse.

#### 4 Telesno centrirana kubična mreža (BCC)

Poglejmo še, kakšni so M. indeksi za BCC. Račun je podoben, vendar tu računamo še z bazo, saj imamo v osnovni celici še en atom v sredini celice. Do njega bo kazal bazni vektor. Vektor  $\vec{R}_n$  bo za BCC izgledal

$$\vec{R}_n^{bcc} = \vec{R}_n^{sc} + bzza = \vec{R}_n^{sc} + z_1\vec{r}_1 + z_2\vec{r}_2, \quad (5)$$

kjer sta  $z_1$  in  $z_2$  nič ali ena, bazna vektorja pa

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= 0 \\ \vec{r}_2 &= \frac{a}{2}(1, 1, 1). \end{aligned} \quad (6)$$

Ko (5) in (6) poberemo skupaj in vstavimo v (1) dobimo zahtevo

$$e^{i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{R}_n^{bcc}} = e^{i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{R}_n^{sc}} e^{i\vec{K}_{hkl} \cdot z_2\vec{r}_2} = e^{i2\pi(hn_1+kn_2+ln_3)} e^{i2\pi z_2(\frac{h+k+l}{2})} = 1. \quad (7)$$

Enakost (7) mora biti zadoščena za vse možne  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$  in  $z_2$  zato eksponenta ne moremo pobrati skupaj. Iz (7) razberemo, da enakost velja le če je vsota vseh M. indeksov soda. Možnosti so štiri.

h	k	l
sod	sod	sod
lih	lih	sod
lih	sod	lih
sod	lih	lih

Ker je vseh možnosti osem, lahko rečemo, da je recipročna mreža BCC ravno pol redkejša kot pri SC. To je logično, saj smo vzeli osnovno celico, ki zajema dva atoma.

## 5 Ploskovno centrirana kubična mreža (FCC)

Pri FCC je račun zelo podoben zgornjemu. V tem primeru imamo štiri bazne vektorje

$$\begin{aligned}\vec{r}_1 &= 0 \\ \vec{r}_2 &= \frac{a}{2}(1, 1, 0) \\ \vec{r}_3 &= \frac{a}{2}(1, 0, 1) \\ \vec{r}_4 &= \frac{a}{2}(0, 1, 1).\end{aligned}\tag{8}$$

Zapišemo

$$\vec{R}_n^{fcc} = \vec{R}_n^{sc} + baza = \vec{R}_n^{sc} + z_1\vec{r}_1 + z_2\vec{r}_2 + z_3\vec{r}_3 + z_4\vec{r}_4,\tag{9}$$

in nato (2) in (8) vstavimo v (9) in nato po (1) dobimo zahtevo

$$e^{i\vec{K}_{hkl}\cdot\vec{R}_n^{fcc}} = e^{i2\pi(hn_1+kn_2+ln_3)} e^{i2\pi z_2(\frac{h+k}{2})} e^{i3\pi z_3(\frac{h+l}{2})} e^{i2\pi z_4(\frac{k+l}{2})},\tag{10}$$

ki mora veljati za vse  $n_1, n_2, n_3, z_2, z_3$  in  $z_4$ . Po premisleku ugotovimo, da enakosti (10) zadostijo le vsi lihi ali pa vsi sodi M. indeksi, torej imamo le dve možnosti od osmih, kar pomeni da je recipročna mreža za FCC kar štirikrat bolj redka kot pri SC. Vzeli smo osnovno celico, ki zajema štiri atome.

h	k	l
sod	sod	sod
lih	lih	lih



## Del II

# Sipanje rentgenskih žarkov





## SIPANJE NA KUBIČNI MREŽI

Matjaž Ivančič

25. 10. 2007

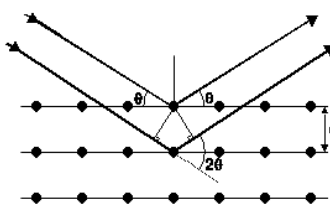
**Naloga:**

Določi sipalni kot ojačitev dane valovne dolžine, ki pada na kubično mrežo z dano medatomske razdalje.

**Rezultat:**

Pogoj za ojačitev valovne dolžine ob odboju na kristalu opisuje Braggov pogoj. Ta pravi, da razlika prepotovanih razdalj fotona, ki se odbije na prvi ravnini kristala in na neki naslednji ravnini, mora biti celoštevilski mnogokratnik valovne dolžine  $\lambda$  upadlega valovanja. Pri tem seveda predpostavljamo, da odbita svetloba ima enako valovno dolžino kakor primarna.

$$2d \sin \theta = m\lambda$$



Slika 1: Braggov uklon

Ker je razlika valovnega vektorja upadne in odbite svetlobe ravno vektor recipročne mreže, se nam splača prevesti medravninsko razdaljo  $d$ , na razdaljo recipročnih ravnin v dano smer.

$$|\vec{K}_0| = \frac{2\pi}{d}$$

Recipročni vektor pa je definiran kot

$$\vec{K} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$$

Kjer so vektorji  $\vec{b}_i$  vektorji recipročne baze, in sicer definirani kot

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (0, 1, 0)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (0, 0, 1)$$

$m_i$ , pa Millerjevi indeksi.

Enačbo Braggovega uklona prevedemo tako na

$$\sin \theta = \frac{m\lambda}{2a} \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2}$$

V našem primeru bomo določili, da bo valovna dolžina enaka medatomski razdalji  $\lambda = a$ .

Tako da se nam zgornja enačba pokrajša na

$$\sin \theta = \frac{m}{2} \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2}$$

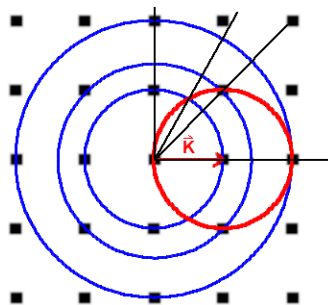
Ker z ustrezno rotacijo lahko dobimo iste ravninske razdalje, zreduciramo millerjeve indekse na spodnje vrednosti, ter tako pri danih pogojih dobimo naslednje kote ojačitev:

Millerjevi indeksi			Prispevek večkratnika valovne dolžine	Kot ojačitve
$m_1$	$m_2$	$m_3$	$m$	$\theta$
1	0	0	1	30°
1	0	0	2	90°
1	0	0	3	N.a.
1	1	0	1	45°
1	1	0	2	N.a.
1	1	1	1	60°
1	1	1	2	N.a.
2	1	0	1	N.a.

Rezultat si lahko nazorno predstavljamo s shemo Ewaldove krogle. Na spodnji sliki je narisana samo ravnina xy, zato upoštevamo le prva dva Millerjeva koeficienta.

Modre črte predstavljajo točke recipročne mreže ob rotaciji kristala, rdeča črta pa predstavlja rotacijo valovnega vektorja, torej samega upadnega žarka.

Na točkah kjer se krogle sekajo (v našem primeru so le krožnice) dobimo kot ojačitve. Druga presečišča so simetrična prvotnim.



Slika 2: Ewaldova krogle

## FIZIKA TRDNE SNOVI

Marko Petrič

marko.petric@guest.arnes.si

Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani

(Dated: 7. november 2007)

## I. STRUKTURNI FAKTOR

Definirajmo strukturni faktor kot

$$S_K = \int_{r_0} \rho(\vec{r}) e^{i\vec{K}\vec{r}} dV \quad ,$$

$$= \sum_{j=1} f_j e^{-i\vec{K}\vec{r}_j} \quad ,$$

kjer je

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1} \rho_j(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad .$$

Razvijemo vektor  $\vec{K}$  po recipročni bazi in  $\vec{r}_j$  po vektorjih do atomov osnovne celice

$$\vec{K} = \sum_i m_i \vec{b}_i \quad in \quad \vec{r}_j = \sum_i \eta_i \vec{a}_i \quad .$$

Splošno lahko zapišemo produkt

$$\vec{K}\vec{r}_j = 2\pi (m_1\eta_1 + m_2\eta_2 + m_3\eta_3) \quad .$$

## II. FCC

Izračunajmo strukturni faktor za FCC mrežo. Bazni vektorji za FCC mrežo so:

$$(0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad .$$

Sedaj lahko zapišemo strukturni faktor

$$S_K = 1 + e^{-i\pi(m_1+m_2)} + e^{-i\pi(m_3+m_2)} + e^{-i\pi(m_1+m_3)} \quad .$$

Ugotovimo lahko da obstajajo štiri možnosti

1.  $m_1, m_2, m_3$  so vsi sodi, potem je  $S_K = 4$ ,
2.  $m_1, m_2, m_3$  so vsi lihi, potem je  $S_K = 4$ ,
3. en faktor sod dva liha, potem je  $S_K = 0$ ,
4. en faktor lih dva soda, potem je  $S_K = 0$ .

## III. DIAMANT

Iračunajmo strukturni faktor za diamant. Dimant je FCC mreža z bazo  $(0, 0, 0), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$ . V primeru kadar imamo mrežo z bazo lahko zapišemo strukturni faktor kot

$$S_K = S_{\text{mreza}} S_{\text{baza}} \quad ,$$

$$= \left[ 1 + e^{-i\pi(m_1+m_2)} + e^{-i\pi(m_3+m_2)} + e^{-i\pi(m_1+m_3)} \right] \left[ 1 + e^{-i\frac{\pi}{2}(m_1+m_2+m_3)} \right] \quad .$$

Tukaj lahko opazimo tri možnosti

1.  $m_1 + m_2 + m_3 = 4n$  in so vsi sodi, potem je  $S_K = 8$ ,
2.  $m_1, m_2, m_3$  so vsi lihi, potem je  $S_K = 4(1+i)$ ,
3.  $m_1 + m_2 + m_3 = 2(2n+1)$  potem je  $S_K = 0$ .

## Naloga

Izračunaj strukturalni faktor za heksagonalno mrežo, zloženo na dva različna načina, *ABAB* in *ABACABAC*.

## Rešitev

### Heksagonalna mreža

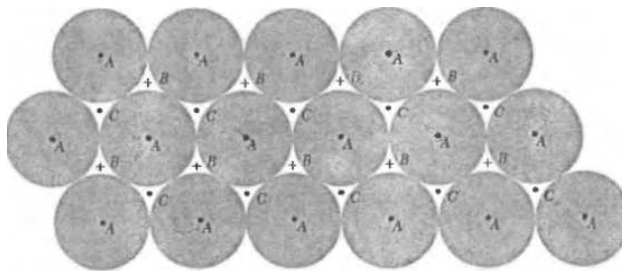
Najprvo se spomnimo Bravaisove mreže za heksagonalno strukturo, kjer zlagamo mreže neposredno eno nad drugo. Razdaljo med točkami heksagonalne mreže označimo z  $a$ , razdaljo med posameznimi mrežami z  $c$ . Tedaj se Bravaisova mreža izraža kot

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1, 0) \quad , \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1, 0) \quad , \\ \mathbf{a}_3 &= c(0, 0, 1) \quad , \end{aligned} \tag{1}$$

njej pripadajoča recipročna mreža pa je oblike

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}(\sqrt{3}/3, 1, 0) \quad , \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}(-\sqrt{3}/3, 1, 0) \quad , \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi}{c}(0, 0, 1) \quad . \end{aligned} \tag{2}$$

Seveda zlaganje heksagonalnih mrež neposredno eno nad drugo ni edini možen način. Zaporedne mreže lahko tudi zamikamo na dva različna načina in tako tvorimo različne sklade. Z  $A$  označimo prvo možnost, ko se mreži prekrivata, z  $B$  in  $C$  pa označimo zamaknjeni mreži (Slika 1).

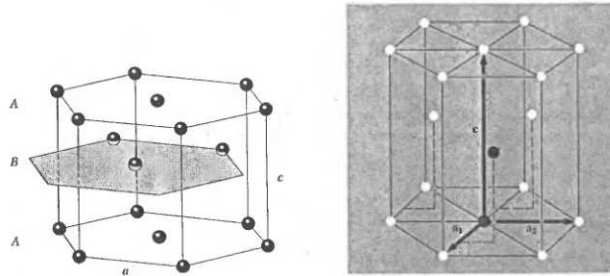


Slika 1: Zlaganje heksagonalnih mrež v sklade [1]

### Sklad $ABAB$

Oglejmo si primer, ko heksagonalne mreže zlagamo v zaporedju  $ABAB$ . Problema se najlažje lotimo tako, da za osnovno celico vzamemo paralelepiped, določen z vektorji Bravaisove mreže (1), napet med dvema  $A$  mrežama, vmesno  $B$  mrežo pa popišemo z bazo (Slika 2). Sklad  $ABAB$  je tako navadna heksagonalna mreža z dvema baznima vektorjema,

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= 0 \quad , \\ \mathbf{r}_2 &= \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{2}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3 \quad . \end{aligned} \quad (3)$$



Slika 2: Sklad  $ABAB$ . Osnovno celico napenjajo vektorji  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  in  $\mathbf{a}_3$ , na desni sliki pa sta s črno označena atoma baze. [1]

Strukturalni faktor za takšno mrežo, sestavljeno iz enakih atomov, se izraža kot

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_j \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}_j) \quad , \quad (4)$$

kjer je  $\mathbf{K} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3$  vektor recipročne mreže, vsota pa teče po vektorjih baze. V našem primeru tako dobimo

$$S_{\mathbf{K}} = 1 + \exp\left(i2\pi\left[\frac{m_1}{3} + \frac{2m_2}{3} + \frac{m_3}{2}\right]\right) \quad . \quad (5)$$

Zanima nas, kdaj je strukturalni faktor enak nič – na teh ravninah namreč pri sipanju svetlobe ne dobimo odboja. Vidimo, da bo strukturalni faktor (5) enak nič, kadar bo eksponentni člen enak  $-1 = e^{i\pi}$ , oziroma ko bo izraz v oglatem oklepaju lih večkratnik  $1/2$ ,

$$\frac{m_1}{3} + \frac{2m_2}{3} + \frac{m_3}{2} = \frac{2n+1}{2} \quad , \quad n \in \mathcal{Z} \quad . \quad (6)$$

Posebej obravnavajmo še primera, ko je valovni vektor vpadne svetlobe vzporeden z  $\mathbf{a}_3$  ( $m_1 = m_2 = 0$ ) in pravokoten nanj ( $m_3 = 0$ ). Hitro se prepričamo, da bo v prvem primeru strukturalni faktor enak nič za lihe vrednosti  $m_3$ , v drugem primeru pa bo strukturalni faktor vedno od nič različen.

### Sklad ABACABAC

Na enak način kot prej se lotimo primera, ko so mreže zložene v zaporedju ABACABAC. Osnovno celico izberemo podobno kot prej, le da se tokrat razteza med prvo in tretjo A mrežo, bazni vektorji pa so štirje:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= 0 \quad , \\ \mathbf{r}_2 &= \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{2}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{4}\mathbf{a}_3 \quad , \\ \mathbf{r}_3 &= \frac{2}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{3}{4}\mathbf{a}_3 \quad , \\ \mathbf{r}_4 &= \frac{1}{2}\mathbf{a}_3 \quad . \end{aligned} \tag{7}$$

Strukturalni faktor znova izračunamo po enačbi (4):

$$S_{\mathbf{K}} = 1 + e^{i2\pi\left[\frac{m_1}{3} + \frac{2m_2}{3} + \frac{m_3}{4}\right]} + e^{i2\pi\left[\frac{2m_1}{3} + \frac{m_2}{3} + \frac{3m_3}{4}\right]} + e^{i2\pi\left[\frac{m_3}{2}\right]} \quad . \tag{8}$$

V prejšnjem primeru, ko smo med dve A mreži vrinili dodatno B mrežo, smo pri sipanju svetlobe, vzporedne z  $\mathbf{a}_3$ , dobili prvi odboj pri  $m_3 = 2$ . Sedaj, ko se med A mrežama nahajajo tri dodatne (BAC), torej pričakujemo, da bo prvi neničeln odboj takšne svetlobe šele pri  $m_3 = 4$ , in s kratkim računom se lahko prepričamo, da je temu res tako.

### Literatura

- [1] Kittel, C., *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed., Wiley, New York 1967
- [2] Ashcroft, N.W. in Mermin, N.D., *Solid State Physics*, Harcourt College Pub. 1976

Fizika trdne snovi

**Sipanje na praškastem vzorcu**

Matjaž Ivančič

September, 2009

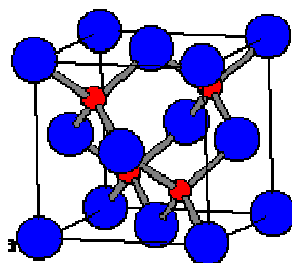
**Naloga:**

Praškast vzorec treh različnih enoatomnih kubičnih kristalov analiziramo z Debye-Sherrer kamero. Znano je, da en vzorec ima BCC, drugi FCC in tretji diamantno strukturo. Približni odklon prvih štirih žarkov je viden v tabeli 1.

A	B	C
42,2°	28,8°	42,8°
49,2°	41,0°	73,2°
72,0°	50,8°	89,0°
87,3°	59,6°	115,0°

**Tabela 1)** izmerjeni odkloni žarkov za tri neznane strukture.

- Določi kristalne strukture A, B in C.
- Določi dolžino stranice osnovne celice, če je valovna dolžina X-žarkov  $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$ .
- Pod kakšnimi koti bi opazili prve štiri odklone, v kolikor bi diamantno strukturo zamenjali z »zincblende« strukturo (ZnS) (Slika 1) z osnovno celico enake velikosti?



**Slika 1)** Osnovna celica t.i. zincblende strukture oz. ZnS kristala. Struktura je podobna diamantni le, da namesto enega gradnika imamo v tem primeru dva, in sicer Zn (rdeče kroglice) ter S (modre kroglice).

**Rešitev:**

a) V nalogi obravnavamo tri strukture, in sicer BCC, FCC in diamantno (FCC + baza). BCC mreži pripada recipročna mreža FCC oblike, FCC mreži BCC recipročna mreža in diamantni pa BCC s posebnostmi.

Pri obravnavanju sipanja žarka na praškastem vzorcu uporabimo enačbo

$$K = 2k \sin\left(\frac{1}{2}\phi\right), \quad 1)$$

kjer je  $k = 2\pi/\lambda$ . Enačbo (1) lahko tako uporabimo na prvih štirih recipročnih vektorjih vsake strukture in tako pogledamo ujemanje kotov. V spodnji tabeli (Tabela 2) so navedene dolžine prvih štiri recipročnih vektorjev za vsako strukturo. Dolžine dobimo po sledeči enačbi

$$K = \frac{2\pi}{a} \sqrt{l^2 + m^2 + n^2}, \quad 2)$$

kjer je  $a$  dolžina celice kristala,  $l$ ,  $m$  in  $n$  pa Millerjevi indeksi. Dovoljene indekse dobimo s pomočjo izračuna strukturnega faktorja (glej nalogo Strukturni faktor - kubične mreže od Marka Petriča leta 2007/08).

BCC	FCC	diamant
$\frac{2\pi}{a}\sqrt{2}$	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$
$\frac{2\pi}{a}\sqrt{4}$	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{4}$	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{8}$
$\frac{2\pi}{a}\sqrt{6}$	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{8}$	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{11}$
$\frac{2\pi}{a}\sqrt{8}$	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{11}$	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{16}$

**Tabela 2)** Tabela dolžin prvih štirih recipročnih vektorjev posamezne strukture.

Ker je valovni vektor vpadne svetlobe ves čas enak, lahko enačbo za vsak prvi kot oz. recipročni vektor enačimo s preostalimi tremi. Tako dobimo niz enačb

BCC	FCC	diamant	
$\sin(1/2 \phi_2)$ $= \sqrt{2}\sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_2)$ $= \sqrt{4/3}\sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_2)$ $= \sqrt{8/3}\sin(1/2 \phi_1)$	
$\sin(1/2 \phi_3)$ $= \sqrt{3}\sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_3)$ $= \sqrt{8/3}\sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_3)$ $= \sqrt{11/3}\sin(1/2 \phi_1)$	3)
$\sin(1/2 \phi_4)$ $= \sqrt{4}\sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_4)$ $= \sqrt{11/3}\sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_4)$ $= \sqrt{16/3}\sin(1/2 \phi_1)$	

V kolikor uporabimo niz enačb (3) na vsak prvi kot iz tabele 1 dobimo:

	$\phi_1$	$\phi_2$	$\phi_3$	$\phi_4$
<b>BCC</b>	28,8	41,2	51,0	59,7
<b>BCC</b>	42,2	61,2	77,1	92,1
<b>BCC</b>	42,8	62,1	78,4	93,7



<b>FCC</b>	28,8	33,4	47,9	56,9
<b>FCC</b>	42,2	49,1	71,0	87,2
<b>FCC</b>	42,8	49,8	73,1	88,6
<b>diamant</b>	28,8	47,9	56,9	70,1
<b>diamant</b>	42,2	72,	87,2	112,5
<b>diamant</b>	42,8	73,1	88,6	114,8

Tabela 3) Približne velikosti kotov sipane svetlobe dobljenih iz niza enačb (3) in prvih kotov tabele 1.

Iz tabele 3 lahko tako razberemo, da je struktura A FCC oblike, struktura B BCC in struktura C diamantna.

b) Dolžine stranic osnovnih celic določimo z enačbo (1), kjer uporabimo zvezo  $k = 2\pi/\lambda$ . Na podlagi že izračunanih dolžin prvih recipročnih vektorjev in njim prirejenimi koti dobimo, da je za strukturo A

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(1/2 \phi_1)} \sqrt{2} = 4,3 \text{ \AA}, \quad (4)$$

za strukturo B

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(1/2 \phi_1)} \sqrt{3} = 3,6 \text{ \AA}, \quad (5)$$

in za strukturo C

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(1/2 \phi_1)} \sqrt{3} = 3,6 \text{ \AA}. \quad (6)$$

c) V kolikor diamantno strukturo zamenjamo z ZnS dobimo FCC strukturo z bazo. Razlika v gradnikih spremeni tudi strukturni faktor kristala (glej nalogo Strukturni faktor – mreže z bazo od Štefana Kreka leta 2007/08) in zaradi tega vrhovi (1, 1, 0), (2, 0, 0), (2, 2, 2)... ne izginejo več. Kote za to strukturo pri dani velikosti celice smo že izračunali v tabeli 3, in sicer 42.8, 49.8, 73.1 in 88.6. Pri izračunu smo tako upoštevali FCC strukturo in prvi kot, ki je enak kotu diamantne strukture.



Del III

Prosti elektroni



- Glavna stran
- Zadnje spremembe

## Gostota stanj in stisljivost elektronskega plina

Iz Fizika trdne snovi 2007 - 2008

### Vsebina

- 1 Naloga
- 2 Gostota stanj
  - 2.1 3D
  - 2.2 2D
  - 2.3 1D
- 3 Stisljivost
- 4 Povzetek

### Naloga

Izračunaj gostoto stanj in stisljivost Fermijevega plina elektronov v treh, dveh in eni razsežnosti.

### Gostota stanj

#### 3D

Obravnavamo plin elektronov, zaprtih v kocko z robom  $L$  in prostornino  $V = L^3$ . Gostota stanj  $g(\varepsilon)$  pove, koliko delcev v sistemu ima dano energijo  $\varepsilon$ :

$$g(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}.$$

Stanja z dano energijo  $\varepsilon(k)$  v prostoru valovnih vektorjev  $k$  ležijo v krogelni lupini debeline  $dk$  s prostornino

$$dV_k = 4\pi k^2 dk,$$

vsako stanje v njej pa zaseda

$$V_{k0} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

prostora. V vsakem stanju se lahko nahajata dva elektrona z nasprotnim spinom, tako da za gostoto stanj dobimo

$$g(\varepsilon) = 2 \frac{dV_k(\varepsilon)}{d\varepsilon V_{k0}} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k^2 dk}{d\varepsilon} = \frac{V}{\pi^2} \frac{k^2 dk}{d\varepsilon}.$$

Da jo izrazimo le z energijo, upoštevamo zvezo

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

in njen odvod

$$\frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m},$$

pa dobimo končno obliko

$$g(\varepsilon) = \frac{V \sqrt{2m^3 \varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3}.$$

Gostota stanj v treh razsežnostih z energijo korensko narašča.

## 2D

Tokrat so elektroni omejeni na površino  $S$  s stranicama  $L$ . Stanja z enako energijo sedaj ležijo na kolobarju s površino

$$dS_k = 2\pi k dk,$$

od katere je vsakemu pripada

$$S_{k0} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 = \frac{(2\pi)^2}{S}.$$

Zveza med energijo in valovnim vektorjem je seveda za vse razsežnosti enaka, tako da za gostoto stanj dobimo

$$g(\varepsilon) = 2 \frac{dS_k(\varepsilon)}{d\varepsilon S_{k0}} = \frac{Sm}{\pi \hbar^2}.$$

V dveh dimenzijah torej ni odvisna od energije.

## 1D

Če se elektroni lahko gibljejo le po daljici dolžine  $L$ , namesto krogelne lupine oz. kolobarja stanj z določeno energijo ostaneta le še dva intervala

$$dL_k = 2dk,$$

posamezno stanje pa zavzema

$$L_{k0} = \frac{2\pi}{L}.$$

Gostota stanj je v tem primeru enaka

$$g(\varepsilon) = 2 \frac{dL_k(\varepsilon)}{d\varepsilon L_{k0}} = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{\varepsilon}},$$

torej z naraščajočo energijo pada.

## Stisljivost

Stisljivost opazovanega sistema je količina, ki pove, za koliko se mu zmanjša prostornina  $V$ , če malo povečamo tlak  $p$ , v primerjavi z začetno prostornino:

$$\chi = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p}.$$

V tem primeru bo prikladneje izračunati njeno obratno vrednost - modul stisljivosti  $K$

$$K = \frac{1}{\chi} = -V \frac{\partial p}{\partial V},$$

saj bomo tlak dobili iz definicije

$$p = -\frac{\partial E}{\partial V},$$

torej iz povečanja energije sistema  $E$  ob zmanjšanju njegove prostornine. Energijo izračunamo tako, da seštejemo prispevke vseh delcev. Ti pri temperaturi  $T = 0$  zasedajo stanja do Fermijeve energije  $\varepsilon_F$ :

$$E = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon = \frac{2}{5} \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} V \varepsilon_F^{5/2},$$

kjer pa je tudi Fermijeve energija odvisna od prostornine. V  $k$  prostoru  $N$  delcev zaseda stanja do  $k_F$ , ki ustreza  $\varepsilon_F$ :

$$N = 2 \frac{V_{kF}}{V_{k0}} = 2 \frac{4\pi k_F^3}{3} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{V k_F^3}{3\pi^2},$$

od koder lahko izrazimo Fermijev valovni vektor in ga nadomestimo s Fermijevo energijo

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{2/3}.$$

Ko dobljeno vstavimo nazaj v izraz za celotno energijo, ostane

$$E = \frac{3}{5} \varepsilon_F N \propto V^{-2/3}.$$

Tlak sedaj dobimo z odvajanjem energije

$$p = + \frac{32}{53} \varepsilon_F \frac{N}{V} = \frac{2}{5} \varepsilon_F n \propto V^{-5/3},$$

kjer je  $n$  številska gostota delcev. Stisljivostni modul sledi s še enim odvodom

$$K = +V \frac{25}{53} \varepsilon_F \frac{N}{V^2} = \frac{2}{3} \varepsilon_F n = \frac{5}{3} p.$$

V dveh oz. eni razsežnosti je ob upoštevanju drugačne gostote stanj in smiselno spremenjenih definicijah tlaka in stisljivosti postopek povsem enak. Rezultati so zbrani v spodnji preglednici.

## Povzetek

	<b>3D</b>	<b>2D</b>	<b>1D</b>
$n$	$\frac{N}{V}$	$\frac{N}{S}$	$\frac{N}{L}$
$g(\varepsilon)$	$\frac{V \sqrt{2m^3 \varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3}$	$\frac{Sm}{\pi \hbar^2}$	$\frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{\varepsilon}}$
$\varepsilon_F$	$\frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$	$\frac{\pi \hbar^2}{m} n$	$\frac{\pi \hbar^2}{8m} n^2$
$E$	$\frac{3}{5} \varepsilon_F N$	$\frac{1}{2} \varepsilon_F N$	$\frac{1}{3} \varepsilon_F N$
$p$	$\frac{2}{5} \varepsilon_F n$	$\frac{1}{2} \varepsilon_F n$	$\frac{2}{3} \varepsilon_F n$
$K$	$\frac{5}{3} p$	$2p$	$3p$

Vzpostavljeno iz »[http://burana.ijs.si/wiki3/index.php/Gostota\\_stanj\\_in\\_stisljivost\\_elektronskega\\_plina](http://burana.ijs.si/wiki3/index.php/Gostota_stanj_in_stisljivost_elektronskega_plina)«

- |
- Članek |
- Pogovor |
- Uredite stran |



- [Zgodovina strani](#) |
- [|](#)
- [Kaj se povezuje sem](#) |
- [Sorodne spremembe](#) |
- [Naloži datoteko](#) |
- [Posebne strani](#) |
- [Prijavite se / registrirajte se](#) |

---

Čas zadnje spremembe: 09:58, 7 oktober 2008. Stran je bila naložena 5.132-krat.

- [Z Fizika trdne snovi 2007 - 2008](#) |
- - [Zanikanja odgovornosti](#) |
  - [Powered by MediaWiki](#) |
  - [Design by Paul Gu](#)
-

## TEMPERATURNA ODVISNOST KEMIJSKEGA POTENCIALA

9. december 2007

### Naloga 1

Izračunaj temperaturno odvisnost kemijskega potenciala  $\mu$  za plin elektronov v 1D, 2D in 3D s pomočjo Sommerfeldovega razvoja!

### Rešitev 1

S Sommerfeldovim razvojem smo na predavanjih izpeljali splošno enačbo za kemijski potencial v odvisnosti od temperature. Torej vemo:

$$\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)}, \quad (1)$$

kjer je  $\varepsilon_F$  Fermijeva energija,  $g(\varepsilon_F)$  gostota stanj pri Fermijevi energiji in  $g'(\varepsilon_F)$  odvod gostote stanj pri Fermijevi energiji.

V primeru treh dimenzij vstavimo v enačbo (1) gostoto stanj

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{\pi^2} \sqrt{2} \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{\varepsilon} = A \sqrt{\varepsilon} \quad (2)$$

in njen odvod

$$g'(\varepsilon) = \frac{1}{2} A \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \quad (3)$$

pri Fermijevi energiji. Dobimo:

$$\mu(T) = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{12} \frac{(kT)^2}{\varepsilon_F} = \varepsilon_F - \xi T^2. \quad (4)$$

Podobno naredimo za eno dimenzijo. V enačbo (1) vstavimo gostoto stanj

$$g(\varepsilon) = \frac{L}{\pi \hbar} \frac{\sqrt{2m}}{\sqrt{\varepsilon}} = \frac{B}{\sqrt{\varepsilon}} \quad (5)$$

in njen odvod

$$g'(\varepsilon) = -\frac{1}{2} \frac{B}{\varepsilon^{3/2}} \quad (6)$$

pri Fermijevi energiji. Dobimo:

$$\mu(T) = \varepsilon_F + \frac{\pi^2 (kT)^2}{12 \varepsilon_F} = \varepsilon_F + \xi T^2. \quad (7)$$

V primeru dveh dimenzij je gostota stanj konstantna in posledično njen odvod enak 0:

$$g(\varepsilon) = \frac{Sm}{\pi \hbar^2} \Rightarrow g'(\varepsilon) = 0. \quad (8)$$

Dobimo, da je kemijski potencial enak Fermijevi energiji in neodvisen od temperature  $\mu = \varepsilon_F$ . To ni res, saj nam členi v Sommerfeldovem razvoju, ki so pravzaprav členi Taylorjeve vrste in za konstantno funkcijo vsi enaki nič, ne daje dovolj natančnega rezultata. Postopati moramo drugače. Začnimo z integralom:

$$N = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (9)$$

kjer je  $N$  število elektronov v sistemu in  $f(\varepsilon)$  Fermijeva funkcija. Ker je  $g(\varepsilon)$  v dveh dimenzijah konstanta, je število elektronov sorazmerno integralu Fermijeve funkcije.

$$N = \frac{Sm}{\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \quad (10)$$

Uvedemo novo spremenljivko  $u = e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1$  in dobimo:

$$N = \frac{Sm}{\pi \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} \frac{du}{u(u-1)}. \quad (11)$$

Ločimo na parcialne ulomke in integriramo:

$$N = \frac{Sm}{\pi \hbar^2 \beta} \int_0^{\infty} \left[ \frac{1}{(u-1)} - \frac{1}{u} \right] du = \frac{Sm}{\pi \hbar^2 \beta} [\ln(u-1) - \ln(u)]_{e^{-\beta\mu}+1}^{\infty} = \frac{Sm}{\pi \hbar^2 \beta} \left[ \ln\left(\frac{u-1}{u}\right) \right]_{e^{-\beta\mu}+1}^{\infty} \quad (12)$$

$$N = -\frac{Sm}{\pi \hbar^2 \beta} \ln \left[ \frac{e^{-\beta\mu}}{e^{-\beta\mu} + 1} \right]. \quad (13)$$

Predpostavimo, da se število delcev v našem sistemu ne spreminja s temperaturo. Izračunamo število delcev pri  $T=0$ , kjer je Fermijeva funkcija stopničasta:

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{Sm}{\pi \hbar^2} \varepsilon_F. \quad (14)$$

Vstavimo v enačbo (13) in izrazimo  $\mu$  :

$$\frac{Sm}{\pi\hbar^2}\varepsilon_F = -\frac{Sm}{\pi\hbar^2\beta}\ln\left[\frac{e^{-\beta\mu}}{e^{-\beta\mu}+1}\right], \quad (15)$$

$$\frac{e^{-\beta\mu}}{e^{-\beta\mu}+1} = e^{-\beta\varepsilon_F}, \quad (16)$$

$$e^{-\beta\mu} = \frac{e^{-\beta\varepsilon_F}}{1 - e^{-\beta\varepsilon_F}}, \quad (17)$$

logaritmiramo in upoštevamo  $kT \ll \varepsilon_F$ . Dobimo pravo temperaturno odvisnost kemijskega potenciala za dve dimenziji:

$$\mu(T) = \varepsilon_F - kTe^{-\frac{\varepsilon_F}{kT}}. \quad (18)$$

## Naloga 2

Pri kateri temperaturi je kemijski potencial enak 0?

## Rešitev 2

Nalogo lahko rešimo hkrati za 1D, 2D in 3D tako, da gostoto stanj zapišemo:

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_F) \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^{\frac{d}{2}-1}, \quad (19)$$

kjer  $d$  pomeni število dimenzij sistema. To gostoto stanj vstavimo v integral za število delcev, hkrati pa v Fermijevi funkciji postavimo  $\mu = 0$ :

$$N = \int_0^\infty g(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\infty g(\varepsilon_F) \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^{\frac{d}{2}-1} \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}+1}. \quad (20)$$

Uvedemo novo spremenljivko  $x = \beta\varepsilon$  in dobimo:

$$N = \frac{g(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F^{\frac{d}{2}-1}\varepsilon_F^{\frac{d}{2}}} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{d}{2}-1}dx}{e^x+1} = \frac{g(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F^{\frac{d}{2}-1}\varepsilon_F^{\frac{d}{2}}} C_d, \quad (21)$$

kjer je  $C_d$  vrednost integrala za  $d$  dimenzij. Ker se število elektronov ne spreminja in je pri absolutni ničli enako:

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{g(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F^{\frac{d}{2}-1}} \int_0^\infty \varepsilon^{\frac{d}{2}-1}d\varepsilon = g(\varepsilon_F) \frac{2}{d}\varepsilon_F. \quad (22)$$

Izenačimo enačbi (21) in (22) in izrazimo temperaturo:

$$g(\varepsilon_F) \frac{2}{d} \varepsilon_F = \frac{g(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F^{\frac{d}{2}-1} \varepsilon^{\frac{d}{2}}} C_d, \quad (23)$$

$$T_d = \frac{\varepsilon_F}{k} \left( \frac{2}{C_d d} \right)^{\frac{2}{d}}, \quad (24)$$

kjer  $d$  predstavlja število dimenzij. Vrednosti konstant  $C_d$  so:

$$C_1 = (1 - \sqrt{2}) \sqrt{\pi} \zeta\left(\frac{1}{2}\right) \approx (1 - \sqrt{2}) \sqrt{\pi} (-1,46035), \quad (25)$$

$$C_2 = \ln(2), \quad (26)$$

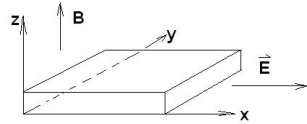
$$C_3 = \frac{1}{4} (2 - \sqrt{2}) \sqrt{\pi} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx \frac{1}{4} (2 - \sqrt{2}) \sqrt{\pi} 2,612, \quad (27)$$

kjer je  $\zeta(x)$  Zeta funkcija.

### Frekvenčna odvisnost Hallove konstante in prevodnosti kovine v Drudejevem modelu.

Primož Burger

21. 11. 2007



Imejmo frekvenčno odvisno električno polje v smeri  $x$ :  $\vec{E} = \vec{E}_o \exp(-i\omega t)$

Gibalna količina elektronov bo:  $\vec{p} = \vec{p}_o \exp(-i\omega t)$

Enačba v Drudejevem modelu se glasi:

$$\dot{\vec{p}} + \frac{\vec{p}}{\tau} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Po vstavitvi nastavkov v enačbo se eksponenti pokrajšajo in dobimo:

$$-i\omega\vec{p}_o + \frac{\vec{p}_o}{\tau} = e(\vec{E}_o + \vec{p}_o \times \vec{B})$$

Če gibalno količino nadomestimo s hitrostjo  $\vec{p}_o = m\vec{v}_o$  dobimo vektorsko enačbo, ki jo rešujemo po komponentah.

$$(-i\omega + \frac{1}{\tau})\vec{v}_o = \frac{e}{m}(\vec{E}_o + \vec{v}_o \times \vec{B})$$

$x$ :

$$(-i\omega\tau + 1)v_{0x} = \frac{e\tau}{m}E_{0x}$$

$y$ :

$$0 = \frac{e\tau}{m}(E_{0y} - v_{0x}B) \implies E_{0y} = v_{0x}B$$

Gostota toka v smeri  $x$  je:

$$j_{0x} = env_{0x}$$

Halova konstanta je po definiciji:

$$R_H = \frac{E_{0y}}{j_{0x}B} = \frac{v_{0x}B}{env_{0x}B} = \frac{1}{en}$$

in je neodvisna od frekvence in gostote magnetnega polja. Prevodnost

$$\sigma(\omega) = \frac{j_{0x}}{E_{0x}} = \frac{env_{0x}}{E_{0x}} = \frac{ene\tau E_{0x}}{E_{0x}m(1 - i\omega\tau)} = \frac{e^2n\tau}{m} \frac{1}{(1 - i\omega\tau)}$$

je ista kot, če ne bi bilo magnetnega polja. Skratka precej dolgočasna naloga.

FIZIKA TRDNE SNOVI (VAJE)  
Šolsko leto 2007/08

Hallov pojav v sistemu z dvema vrstama nosilcev naboja

27. november 2007  
Gašper Renko

**Naloga**

Imamo frekvenčno odvisno električno polje v smeri osi x. V Drudejevem modelu bomo izračunali Hallovo konstanto in specifično prevodnost snovi za primer, ko imamo v snovi dve vrsti nosilcev naboja.

**Izračun**

Na predavanjih smo izpeljali enačbo za Druderjev model:

$$\dot{\vec{p}} + \frac{\vec{p}}{\tau} = \vec{F}(t)$$

$$\dot{\vec{p}} + \frac{\vec{p}}{\tau} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Ko upoštevamo frekvenčno odvisno električno polje, gibalno količino nabitega delca in zvezi za gibalno količino ter gostoto toka:

$$\vec{p} = \vec{p}_0 e^{-i\omega t}$$

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$$

$$\vec{p} = m\vec{v}$$

$$\vec{j} = en\vec{v}$$

In pokrajšamo eksponente in prestavimo vektorski produkt z desne na levo stran enačbe, dobimo:

$$\frac{m}{\tau}(1 - i\omega\tau)\vec{j}_0 - e\vec{j}_0 \times \vec{B} = e^2 n \vec{E}_0$$

izračunamo vektorski produkt:

$$\begin{pmatrix} j_{0x} \\ j_{0y} \\ j_{0z} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} = i(j_{0y}B) - j(j_{0x}B)$$

Dobimo enačbo:

$$\frac{m}{\tau}(1-i\omega\tau)\begin{pmatrix} j_{0x} \\ j_{0y} \\ 0 \end{pmatrix} - e\begin{pmatrix} j_{0y}B \\ -j_{0x}B \\ 0 \end{pmatrix} = e^2n\begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ E_{0z} \end{pmatrix}$$

Ki jo razpišemo po komponentah:

$$E_{0x} = \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau)j_{0x} - \frac{B}{en}j_{0y}$$

$$E_{0y} = \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau)j_{0y} - \frac{B}{en}j_{0x}$$

$$E_{0z} = \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau)j_{0z}$$

ali v matrični obliki:

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau) & -\frac{B}{en} \\ \frac{B}{en} & \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau) \end{pmatrix} \vec{j}_0$$

Kjer lahko z komponento izpustimo, ker nam nič ne prinese k rešitvi, računanje z matrikami dimenzije 2x2 pa je bolj prijazno, kot pa z matrikami 3x3. Na vajah dne 21.11.2007 smo že izračunali Hallovo konstanto za primer samo ene vrste nosilcev naboja. Za rezultate smo dobili podobne izraze, ki pri obravnavanem problemu nastopajo v zgornji matriki kot členi.

$$\rho(\omega) = \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau)$$

$$R_H = \frac{1}{en}$$

In tako

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \rho(\omega) & -BR_H \\ BR_H & \rho(\omega) \end{pmatrix} \vec{j}_0 = \underline{\underline{\rho}}(\omega) \vec{j}_0$$

Imamo dve različni vrsti nosilcev naboja, pri katerih so v splošnem različni predznak naboja, relaksacijski čas, število, in masa. Zgornje razmišljanje velja za vsako vrsto nosilcev posebj...tako zapišemo:

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \rho_1(\omega) & -BR_{H1} \\ BR_{H1} & \rho_1(\omega) \end{pmatrix} \vec{j}_0 = \underline{\underline{\rho}}_1(\omega) \vec{j}_0 \quad \vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \rho_2(\omega) & -BR_{H2} \\ BR_{H2} & \rho_2(\omega) \end{pmatrix} \vec{j}_0 = \underline{\underline{\rho}}_2(\omega) \vec{j}_0$$

Spomnimo se zveze:

$$\vec{j}_0 = \underline{\underline{\sigma}}(\omega) \vec{E}_0, \text{ kjer je } \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\rho}}^{-1}$$

Gostota toka je seštevek obeh tokov:

$$\vec{j}_0 = \vec{j}_{01} + \vec{j}_{02} = \underline{\underline{\sigma}}_1(\omega) \vec{E}_0 + \underline{\underline{\sigma}}_2(\omega) \vec{E}_0 = \left[ \underline{\underline{\rho}}_1^{-1}(\omega) + \underline{\underline{\rho}}_2^{-1}(\omega) \right] \vec{E}_0$$



Nas zanima specifična prevodnost:

$$\vec{E}_0 = \left[ \underline{\rho}_1^{-1}(\omega) + \underline{\rho}_2^{-1}(\omega) \right]^{-1} \vec{j}_0 = \underline{\rho}_0 \vec{j}_0$$

Računanje inverzov prepuščam bralcu, za mirnejše živce pa priporočam uporabo računalniškega programa. Spomnimo se še, kako se izračuna inverz 2x2 matrike,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} \quad \det A = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

In rezultat:

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \frac{\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + B^2 (R_2^2 \rho_1 + R_1^2 \rho_2)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} & -\frac{B (B^2 R_1 R_2 (R_1 + R_2) + R_2 \rho_1^2 + R_1 \rho_2^1)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} \\ \frac{B (B^2 R_1 R_2 (R_1 + R_2) + R_2 \rho_1^2 + R_1 \rho_2^1)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} & \frac{\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + B^2 (R_2^2 \rho_1 + R_1^2 \rho_2)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} \end{pmatrix} \vec{j}_0$$

Spomnimo se, da smo izračunali:

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \rho(\omega) & -BR_H \\ BR_H & \rho(\omega) \end{pmatrix} \vec{j}_0 = \underline{\rho}(\omega) \vec{j}_0$$

In z primerjavo členov med matrikami dobimo iskana rezultata:

$$\rho(\omega) = \frac{\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + B^2 (R_2^2 \rho_1 + R_1^2 \rho_2)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} \quad R_H = \frac{B^2 R_1 R_2 (R_1 + R_2) + R_2 \rho_1^2 + R_1 \rho_2^1}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2}$$

Kjer lahko opazimo specifično prevodnost in Hallovo konstanto v odvisnosti od magnetnega polja.

FIZIKA TRDNE SNOVI (VAJE)  
Šolsko leto 2007/08

Hallov pojav v sistemu z dvema vrstama nosilcev naboja

27. november 2007  
Gašper Renko

**Naloga**

Imamo frekvenčno odvisno električno polje v smeri osi x. V Drudejevem modelu bomo izračunali Hallovo konstanto in specifično prevodnost snovi za primer, ko imamo v snovi dve vrsti nosilcev naboja.

**Izračun**

Na predavanjih smo izpeljali enačbo za Druderjev model:

$$\dot{\vec{p}} + \frac{\vec{p}}{\tau} = \vec{F}(t)$$

$$\dot{\vec{p}} + \frac{\vec{p}}{\tau} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Ko upoštevamo frekvenčno odvisno električno polje, gibalno količino nabitega delca in zvezi za gibalno količino ter gostoto toka:

$$\vec{p} = \vec{p}_0 e^{-i\omega t}$$

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$$

$$\vec{p} = m\vec{v}$$

$$\vec{j} = en\vec{v}$$

In pokrajšamo eksponente in prestavimo vektorski produkt z desne na levo stran enačbe, dobimo:

$$\frac{m}{\tau}(1 - i\omega\tau)\vec{j}_0 - e\vec{j}_0 \times \vec{B} = e^2 n \vec{E}_0$$

izračunamo vektorski produkt:

$$\begin{pmatrix} j_{0x} \\ j_{0y} \\ j_{0z} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} = i(j_{0y}B) - j(j_{0x}B)$$

Dobimo enačbo:

$$\frac{m}{\tau}(1-i\omega\tau)\begin{pmatrix} j_{0x} \\ j_{0y} \\ 0 \end{pmatrix} - e\begin{pmatrix} j_{0y}B \\ -j_{0x}B \\ 0 \end{pmatrix} = e^2n\begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ E_{0z} \end{pmatrix}$$

Ki jo razpišemo po komponentah:

$$E_{0x} = \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau)j_{0x} - \frac{B}{en}j_{0y}$$

$$E_{0y} = \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau)j_{0y} - \frac{B}{en}j_{0x}$$

$$E_{0z} = \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau)j_{0z}$$

ali v matrični obliki:

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau) & -\frac{B}{en} \\ \frac{B}{en} & \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau) \end{pmatrix} \vec{j}_0$$

Kjer lahko z komponento izpustimo, ker nam nič ne prinese k rešitvi, računanje z matrikami dimenzije 2x2 pa je bolj prijazno, kot pa z matrikami 3x3. Na vajah dne 21.11.2007 smo že izračunali Hallovo konstanto za primer samo ene vrste nosilcev naboja. Za rezultate smo dobili podobne izraze, ki pri obravnavanem problemu nastopajo v zgornji matriki kot členi.

$$\rho(\omega) = \frac{m}{e^2n\tau}(1-i\omega\tau)$$

$$R_H = \frac{1}{en}$$

In tako

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \rho(\omega) & -BR_H \\ BR_H & \rho(\omega) \end{pmatrix} \vec{j}_0 = \underline{\underline{\rho}}(\omega) \vec{j}_0$$

Imamo dve različni vrsti nosilcev naboja, pri katerih so v splošnem različni predznak naboja, relaksacijski čas, število, in masa. Zgornje razmišljanje velja za vsako vrsto nosilcev posebj...tako zapišemo:

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \rho_1(\omega) & -BR_{H1} \\ BR_{H1} & \rho_1(\omega) \end{pmatrix} \vec{j}_0 = \underline{\underline{\rho}}_1(\omega) \vec{j}_0 \quad \vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \rho_2(\omega) & -BR_{H2} \\ BR_{H2} & \rho_2(\omega) \end{pmatrix} \vec{j}_0 = \underline{\underline{\rho}}_2(\omega) \vec{j}_0$$

Spomnimo se zveze:

$$\vec{j}_0 = \underline{\underline{\sigma}}(\omega) \vec{E}_0, \text{ kjer je } \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\rho}}^{-1}$$

Gostota toka je seštevek obeh tokov:

$$\vec{j}_0 = \vec{j}_{01} + \vec{j}_{02} = \underline{\underline{\sigma}}_1(\omega) \vec{E}_0 + \underline{\underline{\sigma}}_2(\omega) \vec{E}_0 = \left[ \underline{\underline{\rho}}_1^{-1}(\omega) + \underline{\underline{\rho}}_2^{-1}(\omega) \right] \vec{E}_0$$

Nas zanima specifična prevodnost:

$$\vec{E}_0 = \left[ \underline{\rho}_1^{-1}(\omega) + \underline{\rho}_2^{-1}(\omega) \right]^{-1} \vec{j}_0 = \underline{\rho}_0 \vec{j}_0$$

Računanje inverzov prepuščam bralcu, za mirnejše živce pa priporočam uporabo računalniškega programa. Spomnimo se še, kako se izračuna inverz 2x2 matrice,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} \quad \det A = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

In rezultat:

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \frac{\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + B^2 (R_2^2 \rho_1 + R_1^2 \rho_2)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} & -\frac{B(B^2 R_1 R_2 (R_1 + R_2) + R_2 \rho_1^2 + R_1 \rho_2^1)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} \\ \frac{B(B^2 R_1 R_2 (R_1 + R_2) + R_2 \rho_1^2 + R_1 \rho_2^1)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} & \frac{\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + B^2 (R_2^2 \rho_1 + R_1^2 \rho_2)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} \end{pmatrix} \vec{j}_0$$

Spomnimo se, da smo izračunali:

$$\vec{E}_0 = \begin{pmatrix} \rho(\omega) & -BR_H \\ BR_H & \rho(\omega) \end{pmatrix} \vec{j}_0 = \underline{\rho}(\omega) \vec{j}_0$$

In z primerjavo členov med matrikami dobimo iskana rezultata:

$$\rho(\omega) = \frac{\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + B^2 (R_2^2 \rho_1 + R_1^2 \rho_2)}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2} \quad R_H = \frac{B^2 R_1 R_2 (R_1 + R_2) + R_2 \rho_1^2 + R_1 \rho_2^1}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_2 + R_1)^2 B^2}$$

Kjer lahko opazimo specifično prevodnost in Hallovo konstanto v odvisnosti od magnetnega polja.

Del IV

# Kronig-Penneyev model kristala



- Glavna stran
- Zadnje spremembe

## Kronig-Penneyev model kristala

Iz Fizika trdne snovi 2007 - 2008

### Naloga

Imamo delec v 1D Kronig-Penneyevem potencialu:

$$V(x) = \sum_n \lambda \delta(x - na)$$

Iščemo lastne funkcije energije za ta sistem.

### Rešitev

Potencial je več kot očitno periodičen:

$$V(x + a) = V(x)$$

Torej tudi za Hamiltonov operator velja, da je periodičen:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x)$$

$$\hat{H}(x + a) = \hat{H}(x)$$

Uvedimo operator translacije:

$$\hat{A}\psi(x) = \psi(x - a)$$

Za lastne funkcije tega operatorja torej sledi:

$$\hat{A}\psi_a(x) = \alpha\psi_a(x) = \psi_a(x - a)$$

Ker je Hamiltonov operator periodičen s periodo  $a$ , komutira z operatorjem translacije, torej velja naslednja zveza:

$$\hat{A}(\hat{H}\psi_a(x)) = \hat{H}(\hat{A}\psi_a(x)) = \alpha(\hat{H}\psi_a(x))$$

Od tod sledi, da so lastne funkcije operatorja translacije hkrati tudi lastne funkcije Hamiltonovega operatorja:

$$\hat{H}\psi_a(x) = \beta\psi_a(x)$$

Sedaj lahko izvedemo  $n$ -kratno translacijo tako, da  $n$ -krat delujemo na funkcijo z operatorjem translacije. Temu ustreza premik valovne funkcije za  $na$ .

$$\hat{A}^n\psi_a(x) = \alpha^n\psi_a(x) = \psi_a(x - na)$$

Ker vemo, da je verjetnost, da tam najdemo delec končna in od nič različna in ker imamo neskončen kristal (torej lahko  $n$  izberemo poljubno velik), dobimo od tod pogoj za lastno vrednost operatorja translacije kot:  $|\alpha| = 1$ , torej jo lahko zapišemo kot

$$\alpha = e^{-i\phi}$$

oziroma, če to izrazimo s periodo  $a$ , kot

$$\alpha = e^{-ika}$$

Če sedaj povzamemo vse skupaj:

$$\psi_a(x - a) = e^{-ika}\psi_a(x)$$

oziroma

$$\psi_a(x) e^{ika} = \psi_a(x + a)$$

Sedaj uporabimo sledeči nastavek:

$$\psi_a(x) = e^{ikx}u(x)$$

katerega nesemo v zgornjo enačbo:

$$e^{ik(x+a)}u(x) = e^{ik(x+a)}u(x+a)$$

in od tod dobimo pogoj za funkcijo  $u(x)$ :

$$u(x) = u(x+a)$$

Toliko nam lahko da sama simetrija problema - torej periodičnost potenciala.

Lastne funkcije poiščemo s pomočjo Schrodingerjeve enačbe:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \hat{V}(x)\psi = \hat{H}\psi = E\psi$$

Rešitve v vmesnih področjih, kjer je  $V=0$ , so oblike

$$\psi_n(x) = A_n e^{iqx} + B_n e^{-iqx} = e^{ikx} (A_n e^{i(q-k)x} + B_n e^{-i(q+k)x}) = e^{ikx} u_n(x)$$

kjer je  $\psi_n(x)$  lastna funkcija energije v  $n$ -tem področju in  $q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Sedaj nesemo dobljeni izraz za  $u(x)$  v pogoj, dobljen iz periodičnosti potenciala:  $u(x)=u(x+a)$ :

$$u_n(x) = u_{n+1}(x+a)$$

$$A_n e^{i(q-k)x} + B_n e^{-i(q+k)x} = A_{n+1} e^{i(q-k)(x+a)} + B_{n+1} e^{-i(q+k)(x+a)}$$

Ker to velja za vsak  $x$ , sledi:

$$A_{n+1} = A_n e^{-i(q-k)a}$$

$$B_{n+1} = B_n e^{i(q+k)a}$$

torej

$$A_n = A e^{-i(q-k)na}$$

$$B_n = B e^{i(q+k)na}$$

kjer sta:  $A = A_0$  in  $B = B_0$

Torej lahko zapišemo rešitev Schrodingerjeve enačbe za  $n$ -to področje kot:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= e^{ikx} (A e^{i(q-k)(x-na)} + B e^{-i(q+k)(x-na)}) = \\ &= A e^{iqx} e^{-i(q-k)na} + B e^{-iqx} e^{i(q+k)na} \end{aligned}$$

Neznane količine:  $q$  (in torej tudi lastne energije  $E$ ),  $A$  in  $B$ , dobimo iz začetnih in robnih pogojev.

#### Robni pogoji:

$$1.) \psi_{n-1}(x=na) = \psi_n(x=na)$$

$$2.) \left( \frac{\partial \psi_n(x=na)}{\partial x} - \frac{\partial \psi_{n-1}(x=na)}{\partial x} \right) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi_n(x=na) = 2Q \psi_n(x=na)$$

kjer je  $Q = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$

Ko vstavimo valovno funkcijo v prvi robni pogoj, dobimo:

$$\psi_{n-1}(na) = \psi_n(na)$$

$$A_{n-1} e^{iqna} + B_{n-1} e^{-iqna} = A_{n-1} e^{-i(q-k)a} e^{iqna} + B_{n-1} e^{i(q+k)a} e^{-iqna}$$

$$A_{n-1} e^{iqna} (1 - e^{-iqa} e^{ika}) = B_{n-1} e^{-iqna} (e^{iqa} e^{ika} - 1)$$

Iz drugega robnega pogoja pa dobimo:

$$\psi'_n(na) - \psi'_{n-1}(na) = 2Q \psi_n(na)$$

$$iq (A_{n-1} e^{-i(q-k)a} e^{iqna} - B_{n-1} e^{i(q+k)a} e^{-iqna} - A_{n-1} e^{iqna} + B_{n-1} e^{-iqna}) = 2Q (A_{n-1} e^{-i(q-k)a} e^{iqna} + B_{n-1} e^{i(q+k)a} e^{-iqna})$$

$$A_{n-1} e^{iqna} (iq e^{-iqa} e^{ika} - iq - 2Q e^{-iqa} e^{ika}) = B_{n-1} e^{-iqna} (iq e^{iqa} e^{ika} - iq + 2Q e^{iqa} e^{ika})$$



Sedaj lahko med seboj zdelimo obe enačbi, ki sledita iz robnih pogojev, ter se tako znebimo konstant  $A$  in  $B$

$$\begin{aligned} (1 - e^{-iqa} e^{ika}) (iqe^{iqa} e^{ika} - iq + 2Qe^{iqa} e^{ika}) &= (e^{iqa} e^{ika} - 1) (iqe^{-iqa} e^{ika} - iq - 2Qe^{-iqa} e^{ika}) \\ (iqe^{iqa} e^{ika} - iq + 2Qe^{iqa} e^{ika} - iqe^{2ika} + iqe^{-iqa} e^{ika} - 2Qe^{2ika}) &= (iqe^{2ika} - iqe^{iqa} e^{ika} - 2Qe^{2ika} - iqe^{-iqa} e^{ika} + iq + 2Qe^{-iqa} e^{ika}) \end{aligned}$$

Pomnožimo celotno enačbo s členom  $e^{-ika}$ :

$$\begin{aligned} (iqe^{iqa} - iqe^{-ika} + 2Qe^{iqa} - iqe^{ika} + iqe^{-iqa} - 2Qe^{ika}) &= (iqe^{ika} - iqe^{iqa} - 2Qe^{ika} - iqe^{-iqa} + iqe^{-ika} + 2Qe^{-iqa}) \\ (2iqe^{iqa} + 2iqe^{-iqa} - 2iqe^{ika} - 2iqe^{-ika} + 2Qe^{iqa} - 2Qe^{-iqa}) &= 0 \end{aligned}$$

$$4iq \cos(qa) - 4iq \cos(ka) + 4iQ \sin(qa) = 0$$

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{Q}{q} \sin(qa)$$

Prišli smo do enačbe, ki povezuje "valovni vektor"  $k$  s konstanto  $q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ .  $Q$  je tu le parameter, odvisen od višine potenciala  $\lambda$  in mase delca  $m$ .

Analizirajmo sedaj to rešitev in pogledimo kakšne energije ji ustrezajo.

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{Qa}{qa} \sin(qa)$$

Leva stran enačbe je omejena z vrednostima  $+1$  in  $-1$ , medtem, ko za desno stran to očitno ne velja. Za majhne vrednosti parametra  $qa$  gre faktor  $\frac{\sin(qa)}{qa}$  proti 1, prav tako pa tudi člen  $\cos(qa)$ , zato celotna desna stran v tem pasu presega vrednost  $+1$  in to ne glede na (pozitivno) vrednost parametra  $Qa$ .

Težave se pojavijo tudi v okolici točk  $qa = n\pi$ ;  $n \in \mathfrak{R}$ . Tam lahko člen  $\cos(qa)$  precej dobro aproximiramo s parabolo, medtem, ko ima člen  $\frac{\sin(qa)}{qa}$  tam ničle in ga smemo razviti le do linearne člena, kar pomeni, da v bližnji okolici teh točk ta člen prevlada in desna stran zgornje enačbe po absolutni vrednosti preseže 1.

Ta rezultat interpretiramo tako, da imamo tam prepovedane pasove - v teh območjih energije ( $qa$ ) enačba nima rešitev. Prepovedani energijski pasovi ustrezajo energijam:

$$E \approx \frac{1}{2m} \left( \frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2$$

Vzpostavljeno iz »[http://burana.ijs.si/wiki3/index.php/Kronig-Penneyev\\_model\\_kristala](http://burana.ijs.si/wiki3/index.php/Kronig-Penneyev_model_kristala)«

- |
- Članek |
- Pogovor |
- Uredite stran |
- Zgodovina strani |
- |
- Kaj se povezuje sem |
- Sorodne spremembe |
- Naloži datoteko |
- Posebne strani |
- Prijavite se / registrirajte se |

Čas zadnje spremembe: 20:14, 18 november 2008. Stran je bila naložena 3.647-krat.

- - 
  - 
  - 
  -
- Z Fizika trdne snovi 2007 - 2008 |  
Zanikanja odgovornosti |  
Powered by MediaWiki |  
Design by Paul Gu



Del V

## Približek šibkega potenciala



## Kronig-Penneyev model v približku šibkega potenciala

V tej nalogi bomo izračunali širino energijske vrzeli iz točne rešitve Kronig-Penneyevega modela in primerjali dobljeno vrednost s približno vrednostjo elektronov v šibkem potencialu. Potencial je oblike:

$$V(x) = \sum_n \lambda \delta(x - na)$$

Na prvih vajah, ko smo računali Kronig-Penneyev model kristala smo prišli do enačbe, ki povezuje naš valovni vektor  $q = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  in valovni vektor  $k$  iz Blochove valovne funkcije

$$\cos(ka) = \cos(qa) + Qa \frac{\sin(qa)}{qa}$$

kjer je:  $Q = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$ . Leva stran enačbe ima vrednost med  $-1$  in  $1$  rešitve so  $qa = n\pi \Rightarrow q = n\frac{\pi}{a}$ , pri teh vrednostih desna stran zapusti območje med  $-1$  in  $1$ , ponovno pa se vrne pri  $qa = \pi + ax$ , če  $n = 1$ . Da izračunamo  $x$  razvijemo desno stran okoli  $qa = \pi$ :

$$\begin{aligned} -1 &= -1 + \frac{1}{2}(ax)^2 + \frac{Qa}{\pi + ax}(-ax) \\ \frac{a^2x^2}{2} + \frac{Qa}{\pi}(-ax) \\ x &= \frac{2Qa^2}{a^2\pi} = \frac{2Q}{\pi} \\ q &= \frac{\pi}{a} + \frac{2Q}{\pi} \end{aligned}$$

Sedaj ko imamo celoten interval prepovedanih valovnih vektorjev lahko izračunamo velikost energijske reže:  $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$ .

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \left( \frac{\pi}{a} + \frac{2Q}{\pi} \right)^2 - \frac{\pi^2}{a^2} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi^2}{a^2} + \frac{4Q\pi}{a\pi} + \frac{4Q^2}{\pi^2} - \frac{\pi^2}{a^2} \right)$$

kjer člen s  $Q^2$  zanemarimo in dobimo:

$$\Delta E = \frac{4\hbar^2 m \lambda}{2ma\hbar^2} = \frac{2\lambda}{a}$$

V približku šibkega potenciala pa razvijemo potencial po vektorjih recipročne mreže  $K = \frac{2\pi}{a}m$ :

$$\begin{aligned} V(x) &= \sum_n \lambda \delta(x - na) = \sum_K U_K e^{iKx} \\ U_K &= \frac{1}{a} \int_{\text{celica}} e^{-iKx} V(x) dx \end{aligned}$$

Ker je  $V(x)$  realen in ker imamo simetrijo  $V(x) = V(-x) \Rightarrow U_{-K} = U_K^* = U_K$  tudi realen:  $U_K = \frac{\lambda}{a}$ . Enačbo, ki opisuje energijo, smo izpeljali na predavanjih:

$$(\epsilon_{k-K_i}^0 - \epsilon) C_{k-K_i} + \sum_{K_j} U_{K_j-K_i} C_{k-K_j} = 0$$

Ker je  $\epsilon_{k-K_i}^0$  enaka za dva valovna vektorja recipročne mreže  $K_1 = 0$  in  $K_2 = \frac{2\pi}{a}$  pri  $k = \frac{\pi}{a}$  imamo 2 kratno degeneracijo, sistem enačb:

$$(\epsilon^0 - \epsilon)C_1 + U_{\frac{2\pi}{a}}C_2 = 0$$

$$(\epsilon^0 - \epsilon)C_2 + U_{-\frac{2\pi}{a}}C_1 = 0$$

nam da:

$\epsilon_1 = \epsilon^0 + U$  in lastni vektor  $[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}]$  in  $\epsilon_2 = \epsilon^0 - U$  in  $[-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}]$ . Energijska reža je:

$$\Delta\epsilon = \epsilon^0 + U - (\epsilon^0 - U) = 2U = \frac{2\lambda}{a}$$

Valovna funkcija je:

$$\psi_k(r) = \sum_K C_{k-K} e^{i(k-K)r}$$

in gostota verjetnosti je  $\rho(r) = |\psi|^2$

za  $\epsilon_1$ :

$$\psi_{\frac{\pi}{a}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\frac{\pi}{a}x} + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{\pi}{a}x} = \sqrt{2}\cos\frac{\pi}{a}x$$

$$\rho(x) = 2\cos^2\frac{\pi}{a}x$$

za  $\epsilon_2$ :

$$\psi_{\frac{\pi}{a}}(x) = -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\frac{\pi}{a}x} + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{\pi}{a}x} = -i\sqrt{2}\sin\frac{\pi}{a}x$$

$$\rho(x) = 2\sin^2\frac{\pi}{a}x$$

Če pogledamo valovne funkcije za stanja  $\epsilon_1$  in  $\epsilon_2$  in njune gostote verjetnosti, vidimo da se elektroni s stanjem  $\epsilon_1$  nahajajo na delta funkcijah, kjer je potencial večji, z večjo verjetnostjo. Zato tudi imajo večjo energijo.

Domača naloga pri vajah iz Fizike trdne snovi

Alan Šuligoj

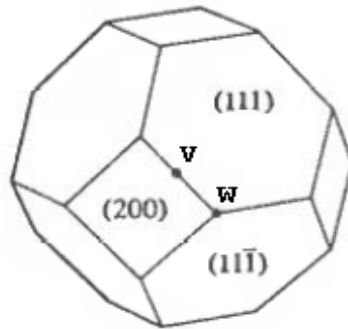
28. 11. 2007

**Naloga**

Za dani točki ( $\vec{k}_W = \frac{2\pi}{a}(1, \frac{1}{2}, 0)$ ) in  $\vec{k}_V = \frac{2\pi}{a}(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ) v k prostoru f.c.c. strukture izračunaj razcep energijskih stanj pod vplivom šibkega periodičnega potenciala, za katerega velja  $U_{(111)} = U_{(11\bar{1})} = U_1$  in  $U_{(200)} = U_2$ .

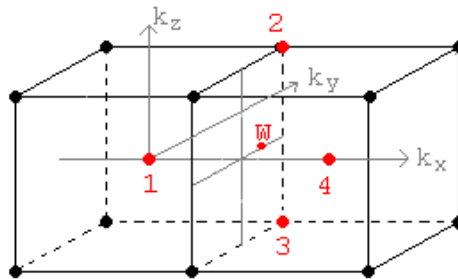
**Rešitev**

Recipročna mreža f.c.c. strukture je b.c.c. struktura, katere Brillonova cona ima obliko prisekanega oktaedra. Dani točki ležita na enem robu prisekanega oktaedra, torej v presečišču Braggovih ravnin (slika 1). Dani točki W moramo poiskati najbližje enako oddaljene



Slika 1: Točki W in V ležita na robu prisekanega oktaedra, torej na presečišču Braggovih ravnin.

točke recipročne mreže (b.c.c. strukture na sliki 2), da dobimo degeneracijo energije. V



Slika 2: Položaj točke W v b.c.c. strukturi. Štiri najbližje točke so oštevilčene.

tem primeru so te točke 4 in degeneracija je zato štirikratna. Lahko zapišemo energije za proste elektrone

$$\epsilon_1^0 = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{1}$$

$$\varepsilon_2^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \vec{k} - \frac{2\pi}{a} (1, 1, 1) \right)^2 \quad (2)$$

$$\varepsilon_3^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \vec{k} - \frac{2\pi}{a} (1, 1, -1) \right)^2 \quad (3)$$

$$\varepsilon_4^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \vec{k} - \frac{2\pi}{a} (2, 0, 0) \right)^2 \quad (4)$$

Degeneracija se pojavi v točki  $\vec{k} = \vec{k}_W$ , kjer so vse štiri energije enake  $\varepsilon_i^0 = \varepsilon_W = \frac{\hbar^2}{2m} k_W^2$ . Set (Schrödingerjevih) enačb

$$(\varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_i}^0 - \varepsilon) c_{\vec{k}-\vec{K}_i} + \sum_j U_{\vec{K}_j-\vec{K}_i} c_{\vec{k}-\vec{K}_i} = 0 \quad \text{kjer je } i, j = 1, \dots, 4 \quad (5)$$

lahko zapišemo v matriko

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_1}^0 - \varepsilon & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_1} & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_1} & U_{\vec{K}_4-\vec{K}_1} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_2} & \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_2}^0 - \varepsilon & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2} & U_{\vec{K}_4-\vec{K}_2} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_3} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} & \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_3}^0 - \varepsilon & U_{\vec{K}_4-\vec{K}_3} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_4} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_4} & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_4} & \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_4}^0 - \varepsilon \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} c_{\vec{k}-\vec{K}_1} \\ c_{\vec{k}-\vec{K}_2} \\ c_{\vec{k}-\vec{K}_3} \\ c_{\vec{k}-\vec{K}_4} \end{pmatrix} = 0 \quad (6)$$

To je problem lastnih vrednosti, zato računamo  $\det A = 0$ . Ker imamo center inverzije se potenciali zaradi simetrijske grupe nekoliko poenostavijo, tako da imamo lahko le dve različni vrednosti. Upoštevamo namreč  $U_{\vec{k}} \in \mathcal{R} \implies U_{-\vec{k}} = U_{\vec{k}}^* = U_{\vec{k}}$  in dejstvo, da je npr.

$$U_{K_2-K_1} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U(\vec{r}) e^{i(K_2-K_1)r} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U(\vec{r}) e^{i(K_2-K_4)r} = U_{K_2-K_4} \quad (7)$$

saj se pri rotaciji koordinatnega sistema zaradi simetrije  $U(\vec{r})$  ne spremeni. Dobimo

$$\det A = \begin{vmatrix} \varepsilon_W - \varepsilon & U_1 & U_1 & U_2 \\ U_1 & \varepsilon_W - \varepsilon & U_2 & U_1 \\ U_1 & U_2 & \varepsilon_W - \varepsilon & U_1 \\ U_2 & U_1 & U_1 & \varepsilon_W - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (8)$$

Od 1. vrstice odštejemo zadnjo, da dobimo dva ničelna elementa in lažje razvijemo na poddeterminante po prvi vrstici

$$\det A = (\varepsilon_W - \varepsilon - U_2) \begin{vmatrix} \varepsilon_W - \varepsilon & U_2 & U_1 \\ U_2 & \varepsilon_W - \varepsilon & U_1 \\ U_1 & U_1 & \varepsilon_W - \varepsilon \end{vmatrix} + (\varepsilon_W - \varepsilon - U_2) \begin{vmatrix} U_1 & \varepsilon_W - \varepsilon & U_2 \\ U_1 & U_2 & \varepsilon_W - \varepsilon \\ U_2 & U_1 & U_1 \end{vmatrix} = 0 \quad (9)$$

V obeh poddeterminantah od prve vrstice odštejemo drugo in razvijemo po poddeterminantah

$$\begin{aligned} \det A &= (\varepsilon_W - \varepsilon - U_2) \left( \begin{vmatrix} \varepsilon_W - \varepsilon & U_1 \\ U_1 & \varepsilon_W - \varepsilon \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} U_2 & U_1 \\ U_1 & \varepsilon_W - \varepsilon \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} U_1 & \varepsilon_W - \varepsilon \\ U_2 & U_1 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} U_1 & U_2 \\ U_2 & U_1 \end{vmatrix} \right) = \\ &= (\varepsilon_W - \varepsilon - U_2)^2 \underbrace{((\varepsilon_W - \varepsilon)^2 + 2U_2(\varepsilon_W - \varepsilon) + U_2^2 - 4U_1^2)}_{=0} = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

V prvem oklepaju dobimo eno dvokratno rešitev, preostali dve pa iz kvadratne enačbe v drugem oklepaju. Tako dobimo razcep stanj

$$\varepsilon = \varepsilon_W - U_2 \quad (2x) \quad (11)$$

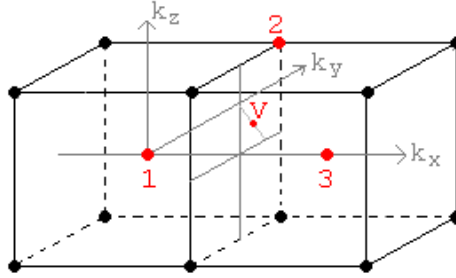
$$\varepsilon = \varepsilon_W + U_2 \pm 2U_1 \quad (12)$$



kjer imamo za eno energijo še vedno (dvokratno) degeneracijo.

Podobno izračunamo tudi za točko V ( $\vec{k}_V = \frac{2\pi}{a}(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ). V tem primeru (slika 3) imamo 3 točke recipročne mreže, ki so enako oddaljene od izbrane točke, tako da je degeneracija v točki V trikratna ( $\varepsilon_i^0 = \varepsilon_V = \frac{\hbar^2}{2m}k_V^2$ ).

Energije za proste elektrone so



Slika 3: Recipročna mreža in tri enako oddaljene najbližje točke v primeru točke V.

$$\varepsilon_1^0 = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \quad (13)$$

$$\varepsilon_2^0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{k} - \frac{2\pi}{a}(1, 1, 1)\right)^2 \quad (14)$$

$$\varepsilon_3^0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{k} - \frac{2\pi}{a}(2, 0, 0)\right)^2 \quad (15)$$

Tokrat imamo set treh enačb, ki jih zapišemo v matriko

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_1}^0 - \varepsilon & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_1} & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_1} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_2} & \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_2}^0 - \varepsilon & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_3} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} & \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_3}^0 - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}-\vec{K}_1} \\ c_{\vec{k}-\vec{K}_2} \\ c_{\vec{k}-\vec{K}_3} \end{pmatrix} = 0 \quad (16)$$

kar je spet problem lastnih vrednosti

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_V - \varepsilon & U_1 & U_2 \\ U_1 & \varepsilon_V - \varepsilon & U_1 \\ U_2 & U_1 & \varepsilon_V - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (17)$$

ki ga rešujemo kot prej, le da je računanja manj. Dobimo razcep stanj

$$\varepsilon = \varepsilon_V - U_2 \quad (18)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_V + \frac{1}{2}U_2 \pm \frac{1}{2}\sqrt{U_2^2 + 8U_1^2} \quad (19)$$

## Domača naloga pri Fiziki trdne snovi: Fermijeva površina v približku šibkega potenciala

Marko Mravlak

18. januar 2008

**Naloga:** Analiziraj spreminjanje Fermijeve površine v bližini Braggove ravnine v šibkem periodičnem potencialu  $U_{\mathbf{K}} \neq 0$  za dvodimenzionalno kvadratno mrežo.

**Rešitev:** Za lastno energijo elektronov v bližini Braggove ravnine smo v modelu skoraj prostih elektronov (šibki periodični potencial) izpeljali enačbo:

$$\epsilon = \frac{\epsilon_{\mathbf{q}}^0 + \epsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0}{2} \pm \left[ \left( \frac{\epsilon_{\mathbf{q}}^0 - \epsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0}{2} \right)^2 + |U_{\mathbf{K}}|^2 \right]^{1/2} \quad (1)$$

Vektor  $\mathbf{K}$  določa Braggovo ravnino,  $\mathbf{q}$  pa je valovni vektor elektrona, katerega lastno energijo računamo.

Valovni vektor  $\mathbf{q}$  gledamo v okolici točke  $\frac{1}{2}\mathbf{K}$  na Braggovi ravnini. Ko zapišemo  $\mathbf{q} = \frac{1}{2}\mathbf{K} + \mathbf{k}$  in razstavimo  $\mathbf{k}$  na vzporedno ( $k_{\parallel}$ ) in pravokotno komponento ( $k_{\perp}$ ) glede na  $\mathbf{K}$ , dobimo

$$\epsilon = \epsilon_{\mathbf{K}/2}^0 + \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \pm \left( 4\epsilon_{\mathbf{K}/2}^0 \frac{\hbar^2}{2m}k_{\parallel}^2 + |U_{\mathbf{K}}|^2 \right)^{1/2} \quad (2)$$

Fermijevo energijo  $\epsilon_F$  merimo glede na najmanjšo vrednost od pasov, ki jih poda enačba (2):

$$\epsilon_F = \epsilon_{\mathbf{K}/2}^0 - |U_{\mathbf{K}}| + \Delta \quad (3)$$

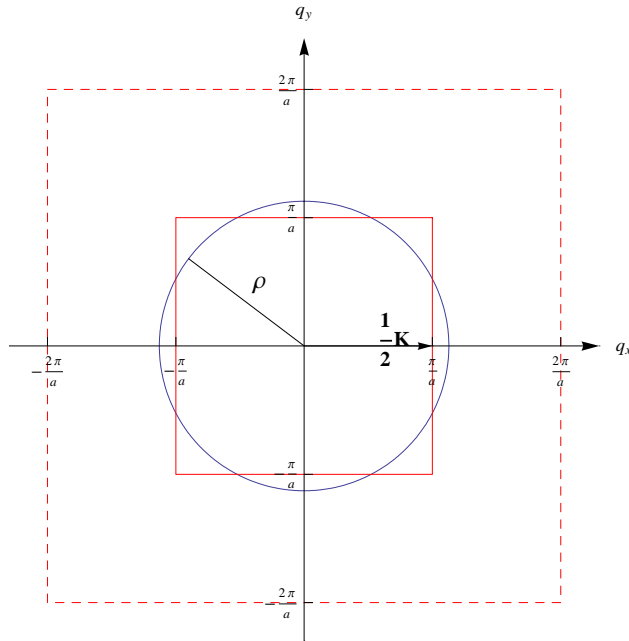
Oglejmo si spreminjanje Fermijeve površine na desnem robu dvodimenzionalne kvadratne mreže kot je prikazana na Sliki (1). Braggovo ravnino določa vektor  $\frac{1}{2}\mathbf{K} = (\frac{\pi}{a}, 0)$ , vektor  $\mathbf{k}$  pa razstavimo glede na  $\mathbf{K}$  na vzporedno in pravokotno komponento:  $\mathbf{k} = (q_x, q_y)$ . Zanima nas, kako se spreminja energija na Braggovi ravnini, zato postavimo vzporedno komponento  $q_x = 0$ .

Za energijski razcep na tej Braggovi ravnini sledi po enačbi (2):

$$\epsilon = \epsilon_{\mathbf{K}/2}^0 + \frac{\hbar^2}{2m}q_y^2 \pm |U_{\mathbf{K}}| \quad (4)$$

Zanima nas kdaj Fermijeva površina seka Braggovo ravnino. Tedaj je  $\epsilon_F = \epsilon$ , sledi

$$\epsilon_{\mathbf{K}/2}^0 - |U_{\mathbf{K}}| + \Delta = \epsilon_{\mathbf{K}/2}^0 + \frac{\hbar^2}{2m}q_y^2 \pm |U_{\mathbf{K}}| \quad (5)$$



Slika 1: Fermijeva površina (modro) in Braggova ravnina (rdeče) za dvodimenzionalno kvadratno mrežo.

Torej

$$q_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (\Delta - |U_{\mathbf{K}}| \mp |U_{\mathbf{K}}|) \quad (6)$$

Med rešitvami ločimo tri primere:

- $\Delta < 0$   
Fermijeva površina ne seka Braggove ravnine
- $0 < \Delta < |U_{\mathbf{K}}|$   
Fermijeva površina leži v celoti v spodnjem pasu in seka Braggovo ravnino v krogu z radijem

$$\rho = \sqrt{\frac{2m\Delta}{\hbar^2}}$$

- $\Delta > 2|U_{\mathbf{K}}|$   
Spodnji pas:  $q_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (\Delta - 2|U_{\mathbf{K}}|)$ , zgornji pas:  $q_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \Delta$ .  
Fermijeva površina leži v obeh pasovih in deli Braggovo ravnino v dveh krogih z radijema  $\rho_1$  in  $\rho_2$ . Razlika v površini obeh krogov je

$$\pi(\rho_2^2 - \rho_1^2) = \frac{4m\pi}{\hbar^2} |U_{\mathbf{K}}|.$$



Del VI

Približek tesne vezi



# Izračun energijskih nivojev v približku tesne vezi za primer FCC kristala

Peter Jakopič

11.12.2007

## 1 Naloga:

Izpelji izraz za energijske pasove v približku tesne vezi za ploskovno centrirano mrežo. Obravnavaj primere za majhne  $ka$ . Nariši disperzijsko zvezo v smeri simetrijskih osi Brillouinove cone FCC mreže.

## 2 Približek tesne vezi

V približku tesne vezi (PTV) obravnavamo gradnike kristala kot posamezne atome, pri čemer vpliv sosednjih atomov opišemo kot motnjo. Zapišemo hamiltonijan kot:

$$H = H_{at} + \Delta U(\mathbf{r})$$

pri čemer je

$$H_{at}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r})$$

Upoštevamo Blochov teorem

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r})$$

V primeru, da bi bil  $\Delta U$  zanemarljivo majhen ter funkcije  $\psi_n(\mathbf{r})$ , povsem lokalizirane okoli svojega atoma, lahko posamezno funkcijo razširimo v izraz:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = A \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

Ta izraz očitno ustreza Blochovemu kriteriju:

$$\begin{aligned} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}') &= A \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R} + \mathbf{R}') \\ &= A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} \psi_n(\mathbf{r} - (\mathbf{R} - \mathbf{R}')) \\ &= A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \sum_{\bar{\mathbf{R}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\bar{\mathbf{R}}} \psi_n(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{R}}) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

V tem primeru so energijski nivoji kar enaki nivoji enodelčnega stanja  $E_{n,k}$ .

V realnem primeru moramo upoštevati še potencial zaradi periodičnih ponovitev. Uporabimo zgoraj zapisani izraz, pri čemer definiramo nove enodelčne funkcije  $\phi_n$ , ki jih v bistvu ne poznamo:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = A \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

(Vnaprej bomo pisali  $E_{n,\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}$ , pri čemer se zavedamo, da enačbe veljajo za vsak nivo posebej.)

Popravek energije  $\Delta E_{\mathbf{k}}$  zapišemo s pomočjo perturbacije:

$$\Delta E_{\mathbf{k}} = \langle \psi_{\mathbf{k}} | \Delta U | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$$

Dobimo:

$$\Delta E_{\mathbf{k}} = A^2 \int d^3\mathbf{r} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} \Delta U(\mathbf{r}) \phi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}') \phi(\mathbf{r}-\mathbf{R})$$

Postavimo se v enega od atomov ter uporabimo približek tesne vezi, kjer upoštevamo, da nam v vsoti ostanejo le integrali produktov valovne funkcije z njenimi najbližjimi sosedi (označeni z  $\mathbf{R}_n$ ). Dobimo:

$$\Delta E_{\mathbf{k}} = \int d^3\mathbf{r} \sum_{\mathbf{R}_n} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \Delta U(\mathbf{r}) \phi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n) \phi(\mathbf{r})$$

(Normalizacijski faktor  $A$  smo izpustili, pri čemer smo v normalizaciji zanemarili tudi najbližje sosede)

Definiramo še oznake.

$$\gamma(\mathbf{R}_n) = \int d^3\mathbf{r} \Delta U(\mathbf{r}) \phi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n) \phi(\mathbf{r}) \quad (\text{na predavanjih: } -t)$$

$$\beta = - \int d^3\mathbf{r} \Delta U(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2$$

Tako dobimo:

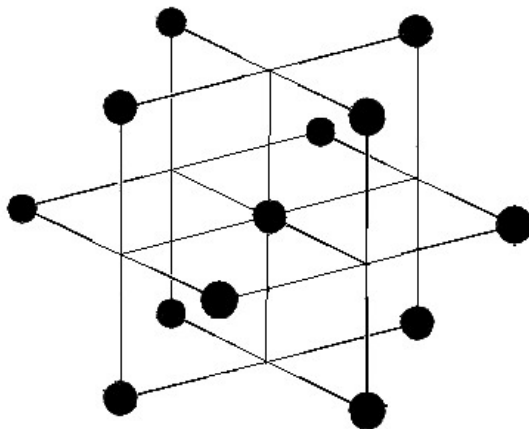
$$\Delta E_{\mathbf{k}} = -\beta - \sum_{\mathbf{R}_n} \gamma(\mathbf{R}_n) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}$$

Celotna energija  $n$ -tega nivoja je torej:

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 + \Delta E_{\mathbf{k}} = E_0 - \beta - \sum_{\mathbf{R}_n} \gamma(\mathbf{R}_n) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}$$

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 - \beta - \sum_{\mathbf{R}_n} \gamma(\mathbf{R}_n) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n)$$

### 3 Približek tesne vezi za FCC



Slika 1: FCC mreža ima 12 najbližjih sosedov.

Omejimo se na s orbitale enodelčnih funkcij, ki so sferno simetrične. Iz simetrije FCC torej sledi, da je  $\gamma$  za vse atome enak. Najbližje atome opišemo kot:

$$\mathbf{R}_{1-12} = \frac{a}{2} (\pm 1, \pm 1, 0), \frac{a}{2} (\pm 1, 0, \pm 1), \frac{a}{2} (0, \pm 1, \pm 1)$$



Za  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  dobimo:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = \frac{a}{2} (\pm k_x \pm k_y), \frac{a}{2} (\pm k_x \pm k_z), \frac{a}{2} (\pm k_y \pm k_z)$$

Dobimo:

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} &= E_0 - \beta - \gamma \left( \begin{aligned} &\cos(k_x + k_y) \frac{a}{2} + \cos(-k_x + k_y) \frac{a}{2} + \cos(k_x - k_y) \frac{a}{2} + \cos(-k_x - k_y) \frac{a}{2} + \\ &\cos(k_x + k_z) \frac{a}{2} + \cos(-k_x + k_z) \frac{a}{2} + \cos(k_x - k_z) \frac{a}{2} + \cos(-k_x - k_z) \frac{a}{2} + \\ &\cos(k_y + k_z) \frac{a}{2} + \cos(-k_y + k_z) \frac{a}{2} + \cos(k_y - k_z) \frac{a}{2} + \cos(-k_y - k_z) \frac{a}{2} \end{aligned} \right) = \\ &= E_0 - \beta - \gamma \left( \begin{aligned} &2 \cos(k_x + k_y) \frac{a}{2} + 2 \cos(k_x - k_y) \frac{a}{2} + 2 \cos(k_x + k_z) \frac{a}{2} + 2 \cos(k_x - k_z) \frac{a}{2} + \\ &+ 2 \cos(k_y + k_z) \frac{a}{2} + 2 \cos(k_y - k_z) \frac{a}{2} \end{aligned} \right) \\ &= E_0 - \beta - \gamma \left( \begin{aligned} &2 \cos k_x \frac{a}{2} \cos k_y \frac{a}{2} - \sin k_x \frac{a}{2} \sin k_y \frac{a}{2} + 2 \cos k_x \frac{a}{2} \cos k_z \frac{a}{2} + \sin k_x \frac{a}{2} \sin k_z \frac{a}{2} + \\ &+ 2 \cos k_x \frac{a}{2} \cos k_z \frac{a}{2} - \sin k_x \frac{a}{2} \sin k_z \frac{a}{2} + 2 \cos k_y \frac{a}{2} \cos k_z \frac{a}{2} + \sin k_y \frac{a}{2} \sin k_z \frac{a}{2} + \\ &+ 2 \cos k_y \frac{a}{2} \cos k_z \frac{a}{2} - \sin k_y \frac{a}{2} \sin k_z \frac{a}{2} + 2 \cos k_y \frac{a}{2} \cos k_z \frac{a}{2} + \sin k_y \frac{a}{2} \sin k_z \frac{a}{2} \end{aligned} \right) = \\ &= E_0 - \beta - 4\gamma \left( \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_y a + \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_z a + \cos \frac{1}{2} k_y a \cos \frac{1}{2} k_z a \right) \end{aligned}$$

#### 4 Približek za majhne $ka$

V limiti majhnih  $k$  lahko izraz razvijemo (označimo še  $\tilde{E} = E_0 - \beta$  in  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ ):

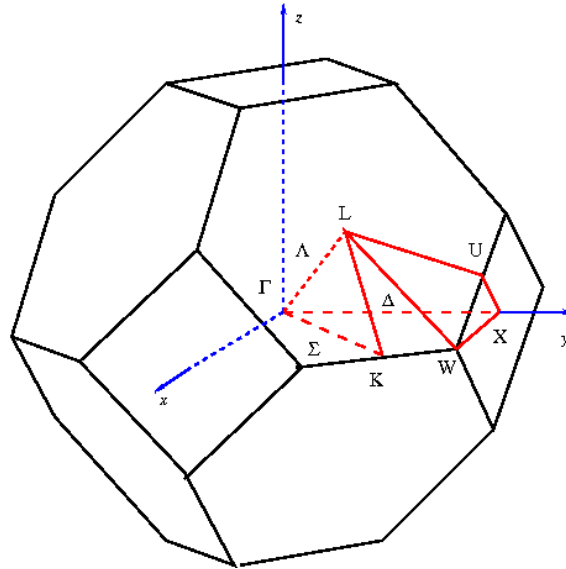
$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} &= \tilde{E} - 4\gamma \left( \left(1 - \frac{1}{8} k_x^2 a^2\right) \left(1 - \frac{1}{8} k_y^2 a^2\right) + \left(1 - \frac{1}{8} k_x^2 a^2\right) \left(1 - \frac{1}{8} k_z^2 a^2\right) + \left(1 - \frac{1}{8} k_y^2 a^2\right) \left(1 - \frac{1}{8} k_z^2 a^2\right) \right) = \\ &= \tilde{E} - 4\gamma \left( 3 - \frac{1}{4} k_x^2 a^2 - \frac{1}{4} k_y^2 a^2 - \frac{1}{4} k_z^2 a^2 + O(k^4) \right) = \tilde{E} - 12\gamma + \gamma a^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ &= \tilde{E} - 12\gamma + \gamma a^2 k^2 \end{aligned}$$

Vidimo, da so ploskve konstantne energije za majhne  $k$  kar krogle v  $k$ -prostoru, kar spominja na prost delec. Počasni elektroni se v mreži torej obnašajo kot prosti in jim lahko določimo efektivno maso:

$$\begin{aligned} E' &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \gamma k^2 a^2 \Rightarrow \\ \Rightarrow m^* &= \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2} \end{aligned}$$

#### 5 Energija pasu znotraj Brillouinove cone FCC

Na sliki so označene simetrijske osi Brillouinove cone mreže FCC. Za vsako oznako definiramo ustrezen vektor  $\mathbf{k}$  ter izračunamo spreminjanje energije vzdolž te osi:



Slika 2: Simetrijske osi Brillouinove cone.

$$\Gamma X : \left( k_x = k_z = 0, k_y = \frac{\mu 2\pi}{a} \right), (0 \leq \mu \leq 1)$$

$$\Gamma L : \left( k_x = k_y = k_z = \frac{\mu 2\pi}{a} \right), \left( 0 \leq \mu \leq \frac{1}{2} \right)$$

$$\Gamma K : \left( k_x = k_y = \frac{\mu 2\pi}{a}, k_z = 0 \right), \left( 0 \leq \mu \leq \frac{3}{4} \right)$$

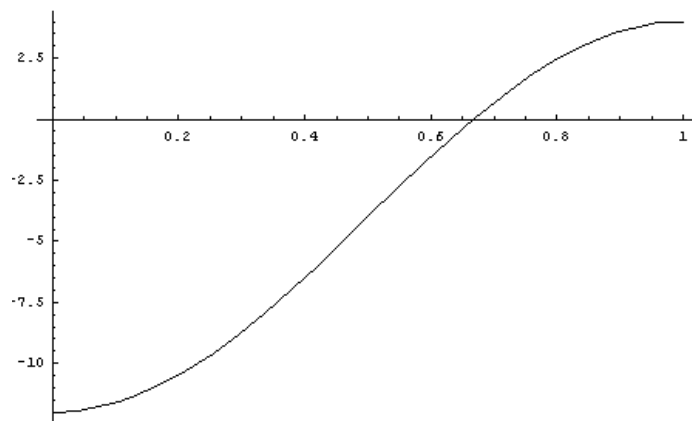
$$\Gamma W : \left( k_z = 0, k_x = \frac{1}{2} \frac{\mu 2\pi}{a}, k_y = \frac{\mu 2\pi}{a} \right), (0 \leq \mu \leq 1)$$

Izraz za energiju je:

$$E = \tilde{E} - 4\gamma \left( \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_y a + \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_z a + \cos \frac{1}{2} k_y a \cos \frac{1}{2} k_z a \right)$$

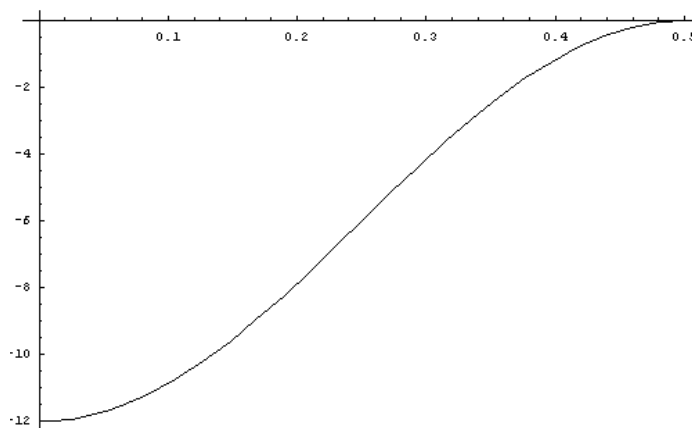
Dobimo:

$$\Gamma X : E = \tilde{E} - 4\gamma(1 + 2 \cos \mu\pi)$$



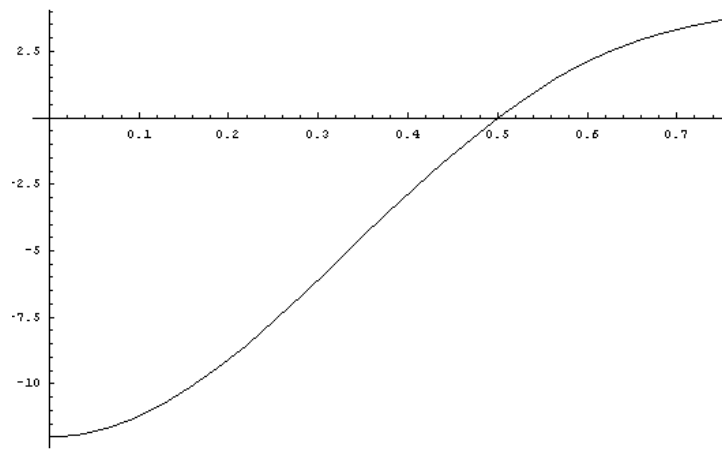
Slika 3: Energija v odvisnosti od  $k$  znotraj prve Brillouinove cone v smeri  $\Gamma X$ .  $\tilde{E}$  smo postavili na 0,  $\gamma$  pa na vrednost 1. Na x osi je parameter  $\mu$ .

$$\Gamma L : E = \tilde{E} - 12\gamma \cos^2(\mu\pi)$$



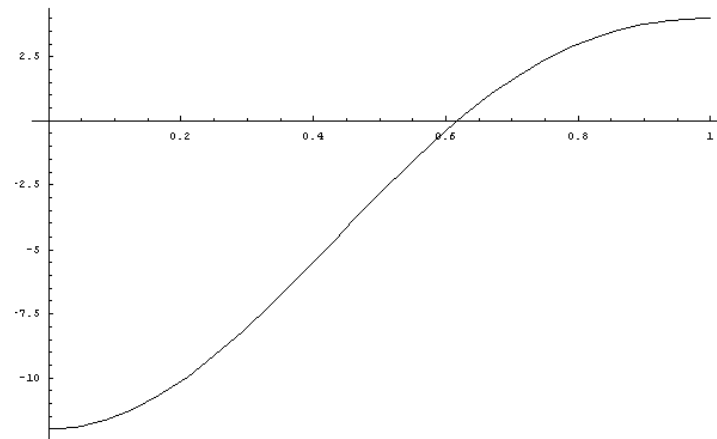
Slika 4: Energija v smeri  $\Gamma L$ . Na x osi je  $\mu$ . ( $\gamma = 1, \tilde{E} = 0$ )

$$\Gamma K : E = \tilde{E} - 4\gamma(\cos^2 \mu\pi + 2 \cos \mu\pi)$$



Slika 5: Energija v smeri  $\Gamma K$ . Na x osi je  $\mu$ . ( $\gamma = 1, \tilde{E} = 0$ )

$$\Gamma W : E = \tilde{E} - 4\gamma \left( \cos \mu\pi + \cos \frac{1}{2}\mu\pi + \cos \mu\pi \cos \frac{1}{2}\mu\pi \right)$$



Slika 6: Energija v smeri  $\Gamma W$ . Na x osi je  $\mu$ . ( $\tilde{E} = 0, \gamma = 1$ )

Domača naloga pri predmetu  
Fizika trdne snovi

KRONIG-PENNEYEV MODEL  
V PRIBLIŽKU TESNE VEZI

Jernej Mazej

(Junij 2009)

**Naloga** (*Mihaly, Problem 3.3*): Atome v enodimenzionalni verigi z mrežno razdaljo  $a$  predstavimo z delta potenciali oblike  $V(x) = aV_0\delta(x)$ .

- a) Določi osnovno stanje enoatomnega problema.
- b) Izračunaj širino pasu najnižjega energijskega pasu v približku tesne vezi.

a) Schrodingerjeva enačba za naš primer ima obliko:

$$aV_0\delta(x) \cdot \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E \cdot \psi. \quad [*]$$

Ker je delta funkcija povsod razen v izhodišču enaka nič, se enačba [\*] za vse vrednosti  $x \neq 0$  prepiše v:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E \cdot \psi$$

Rešitve tega so linearne kombinacije funkcij  $e^{\pm\kappa|x|}$ . Če naj gre  $\psi \rightarrow 0$ , ko pošljemo  $x \rightarrow \pm\infty$ , moramo (ob simetriji levo-desno) seveda izbrati:

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|} \text{ za } x > 0 \text{ in}$$

$$\psi(x) = Ae^{\kappa|x|} \text{ za } x < 0.$$

Krajše povedano:

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}.$$

Konstanto  $\kappa$  lahko določimo iz Schrodingerje enačbe [\*], če jo integriramo okrog izhodišča:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} aV_0\delta(x) \cdot \psi \, dx - \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} \, dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E \cdot \psi \, dx.$$

$$aV_0\psi(x=0) - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon}^{x=\varepsilon} = E \cdot \bar{\psi} (\xi \in (-\varepsilon, \varepsilon)) \cdot 2\varepsilon$$

Zdaj limitiramo  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Desna stran gre za radi omejenosti valovne funkcije proti 0, na levi pa pridelamo levi in desni odvod  $\psi$  v točki  $x=0$ :

$$aV_0\psi(x=0) - \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi}{dx} (0^+) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi}{dx} (0^-) \right).$$

Ostanemo torej z enačbo:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d\psi}{dx} (0^+) - \frac{d\psi}{dx} (0^-) \right] = aV_0\psi(0) \quad [**]$$

Ker je:

$$\frac{d\psi}{dx} (0^+) = \frac{d}{dx} (A \cdot e^{-\kappa|x|}) \Big|_{x=0} = -|\kappa| \cdot A \cdot e^{-\kappa|x|} \Big|_{x=0} = -|\kappa| \cdot A$$

in podobno:

$$\frac{d\psi}{dx} (0^-) = \frac{d}{dx} (A \cdot e^{\kappa|x|}) \Big|_{x=0} = |\kappa| \cdot A \cdot e^{\kappa|x|} \Big|_{x=0} = |\kappa| \cdot A,$$

se enačba [\*\*] prepiše v:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot 2|\kappa|A = aV_0\psi(0).$$

Ob upoštevanju  $\psi(0) = 1$ , od tod preberemo:

$$|\kappa| = -maV_0/\hbar^2 \quad [***]$$

(rezultat nas mimogrede še opomni, da mora biti  $V_0 < 0$ ). Drugo konstanto,  $A$ , pa bomo dobili iz pogoja normalizacije:

$$1 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2|\kappa|x} \, dx = \frac{2A^2}{-2|\kappa|} \cdot e^{-2|\kappa|x} \Big|_0^{\infty} = \frac{A^2}{|\kappa|} \Rightarrow A = \sqrt{|\kappa|}.$$

Končna rešitev za osnovno stanje enoatomnega problema je tedaj:

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa} \cdot e^{-\kappa|x|}.$$

- b)** Ker upoštevamo v vsakem atomu le en (osnovni) nivo, lahko z računanjem v približku tesne vezi začnemo (namesto z matričnimi enačbami za lastne vrednosti) kar z eksplicitnim izrazom za energijo (npr.: Ashcroft&Mermin, enačba 10.15):

$$\varepsilon(\vec{k}) = E_0 - \frac{\beta + \sum \gamma(\vec{R}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}}{1 + \sum \alpha(\vec{R}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}}, \quad [****]$$

kjer so:

$$\begin{aligned} \beta &= -\int \Delta U(\vec{r}) \cdot |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}, \\ \gamma &= -\int \psi^*(\vec{r}) \cdot \Delta U(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}, \\ \alpha &= \int \psi^*(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}. \end{aligned}$$

Količina  $\Delta U$  pomeni razliko med celotnim periodičnim potencialom kristala in potencialom izoliranega atoma v izhodišču ( $\Delta U = U_{periodični} - U_{at}$ ),  $E_0$  pa je energija osnovnega stanja osamljenega atoma.

Enodimenzionalnost problema prinese takojšnje poenostavitve ( $\vec{k} \rightarrow k$ ,  $\vec{R} \rightarrow \pm na$ ,  $\vec{r} \rightarrow x$ ). Ker ima vsak  $e^{ikna}$  svoj par v  $e^{-ikna}$  in poleg tega velja  $\gamma, \alpha(R) = \gamma, \alpha(-R)$ , lahko začetno enačbo zapišemo tudi takole:

$$\varepsilon(k) = E_0 - \frac{\beta + 2 \sum \gamma(R) \cdot \cos(kr)}{1 + 2 \sum \alpha(R) \cdot \cos(kr)} = E_0 - \frac{\beta + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \gamma(R) \cdot \cos(nka)}{1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \alpha(R) \cdot \cos(nka)}.$$

Če upoštevamo le najbližje sosede (t. j. neposredno levega in neposredno desnega), pa je:

$$\varepsilon(k) \approx E_0 - \frac{\beta + 2\gamma(a) \cdot \cos(ka)}{1 + 2\alpha(a) \cdot \cos(ka)}.$$

Zdaj eksplicitno izračunajmo integrale  $\alpha$ ,  $\beta$  in  $\gamma$ . Slednji je pri omenjenem približku upoštevanja zgolj najbližjih sosedov en sam in enak:

$$\gamma = -aV_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \cdot \delta(x \pm a) \cdot \psi(x \pm a) dx,$$

kjer smo že razpisali  $\Delta U$  za naš primer atomov s potenciali v obliki delta funkcij; na prekrivalne integrale, v katerih bi nastopali členi  $\psi(x \pm 2a)$ ,  $\psi(x \pm 3a)$  itd., bomo pozabili. Če v zadnji izraz nesemo na prejšnji strani izračunano valovno funkcijo enega atoma, dobimo:

$$\gamma = -aV_0 \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\kappa} e^{-|\kappa||x|} \cdot \delta(x - a) \cdot \sqrt{\kappa} e^{-|\kappa||x-a|} dx.$$

Upoštevamo lastnost delta funkcije (integrand je od 0 različen le pri  $x = a$ ) in ostanemo z:

$$\gamma = -aV_0 |\kappa| \cdot e^{-|\kappa|a}.$$

Podobno izračunajmo še  $\alpha$  (zopet upoštevamo le najbližje sosede):

$$\begin{aligned} \alpha &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \cdot \psi(x \pm a) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\kappa} e^{-|\kappa||x|} \cdot \sqrt{\kappa} e^{-|\kappa||x-a|} dx. \end{aligned}$$

Ker sta meji različnega tretiranja absolutnih vrednosti pri  $x = 0$  in  $x = a$ , integral takole razdelimo na tri dele:

$$\begin{aligned} \alpha &= |\kappa| \int_{-\infty}^0 e^{|\kappa|x} \cdot e^{|\kappa|(x-a)} dx + |\kappa| \int_0^a e^{-|\kappa|x} \cdot e^{|\kappa|(x-a)} dx + |\kappa| \int_a^{\infty} e^{-|\kappa|x} \cdot e^{-|\kappa|(x-a)} dx = \\ &= |\kappa| \int_{-\infty}^0 e^{-|\kappa|a} \cdot e^{2|\kappa|x} dx + |\kappa| \int_0^a e^{-|\kappa|a} dx + |\kappa| \int_a^{\infty} e^{-|\kappa|a} \cdot e^{-2|\kappa|x} dx = \\ &= |\kappa| \frac{e^{-|\kappa|a}}{2|\kappa|} \cdot e^{2|\kappa|x} \Big|_{-\infty}^0 + |\kappa| e^{-|\kappa|a} \cdot x \Big|_0^a + |\kappa| \frac{e^{-|\kappa|a}}{-2|\kappa|} \cdot e^{-2|\kappa|x} \Big|_a^{\infty} = \\ &= \frac{1}{2} \cdot e^{-|\kappa|a} + |\kappa| a \cdot e^{-|\kappa|a} + e^{-3|\kappa|a} = \\ &= |\kappa| a \cdot e^{-|\kappa|a} + e^{-|\kappa|a} \left( \frac{1}{2} + e^{-2|\kappa|a} \right). \end{aligned}$$

V skladu s približkom tesne vezi, da se valovne funkcije »sicer prekrivajo, a ne premočno« in so atomske orbitale še vedno dobro lokalizirane, lahko privzamemo  $|\kappa|a \gg 1$  (torej: atomska valovna funkcija na razdalji  $|\kappa|a$  od atoma že znatno upade), iz česar sledi  $a \ll 1$ . Zaradi enostavnosti členov z  $a$  tedaj niti ni treba jemati v račun in dejansko bomo tako tudi ravnali. Kako pa je z integrali  $\beta$ ? Ker smo člene z  $a$  v začetnem izrazu za  $\varepsilon$  [\*\*\*\*] pravkar zanemarili, je imenovalc izraza zdaj konstanten; ker poleg tega tudi v samih izrazih za  $\beta$  ni funkcijske odvisnosti od  $k$ , členi z  $\beta$  sploh ne morejo več vplivati na širino pasu, ki jo računamo.

Ob vseh narejenih poenostavitvah ima končni izraz za energijo pasov [\*\*\*\*] naslednjo obliko:

$$\varepsilon(k) = E_0' - 2\gamma \cos(ka),$$

oziroma, ko vstavimo še izraz za prekrivalni integral  $\gamma$ :

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= E_0' + 2V_0 \kappa a \cdot \cos(ka) = \\ &= E_0' - 2|V_0| \kappa a e^{-|\kappa|a} \cdot \cos(ka). \end{aligned}$$

Zadnji izraz ima minimum, ko je  $\cos(ka) = 1$  (torej pri  $k = 0$ ), maksimum pa pri  $\cos(ka) = -1$ . Celotni razmah je  $4V_0 \kappa a e^{-|\kappa|a}$  in je enak širini energijskega pasu.

Upoštevamo še  $|\kappa| = -maV_0/\hbar^2$  [\*\*\*] in povzamemo v podanih količinah, da je širina energijskega pasu v našem modelu enaka

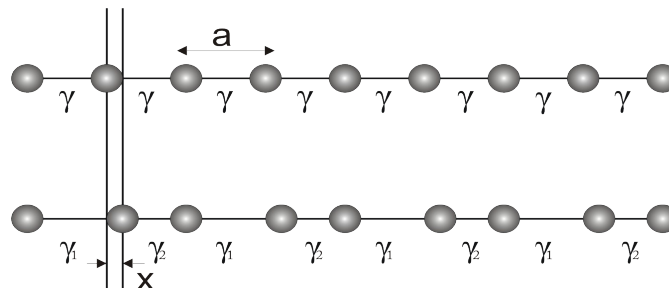
$$w = 4(aV_0)^2 m/\hbar^2 \cdot \exp[a^2|V_0|m/\hbar^2].$$



## Trdna snov Energijska reža v približku tesne vezi

Marko Franinovič  
Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani  
(23. maj 2012)

V približku tesne vezi obravnavamo enodimenzionalno verigo atomov z mrežno razdaljo  $a=3\text{\AA}$ . Prekrivalni integral med najbližjimi sosedi je  $\gamma=2.5\text{ eV}$ . Pri faznem prehodu se vsak drugi atom v kristalu premakne za  $x$  proti svojemu desnemu sosedu. Prekrivalni integral med premaknjenim atomom in njegovim desnim sosedom se poveča na  $\gamma_D=\exp(x/a)$ , prekrivalni integral med premaknjenim atomom in njegovim levim sosedom pa se zmanjša na  $\gamma_L=\exp(-x/a)$ . Zanima nas kolikšen je premik  $x$ , če je širina energijske reže med elektronskima pasovoma  $\varepsilon_g=0.1\text{ eV}$ ?



Slika 1: veriga atomov z mrežno razdaljo  $a$  (zgoraj) in veriga z vsakim drugim atomom premaknjenim za  $x$  (spodaj)

Disperzijo energije za enodimenzionalni kristal zapišemo kot:

$$\epsilon(k) = 2\gamma \cos(ka) \tag{1}$$

Ko vsak drugi elektron v verigi premaknemo z  $x$  v desno se perioda kristala podvoji iz  $a$  na  $2a$ . Briullova cona kristala se razširi na interval od  $-\pi/2a$  do  $+\pi/2a$ . Z  $|m, 1\rangle$  in  $|m, 2\rangle$  označimo lastno stanje prvega in drugega atoma v  $m$ -ti osnovni celici. Z uporabo Blochovega teorema lahko zapišemo osnovno stanje verige kot:

$$\Psi_k = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ik2ma} (c_1(k)|m, 1\rangle + c_2(k)|m, 2\rangle) \tag{2}$$

Enačbi lastnih stanj vstavimo v Schrödingerjevo enačbo  $H\Psi_k = E_k\Psi_k$ . Dobimo sistem enačb:

$$\begin{aligned} (\gamma_1 e^{-i2ka} + \gamma_2) c_2(k) &= E_k c_1(k) \\ (\gamma_1 e^{i2ka} + \gamma_2) c_1(k) &= E_k c_2(k) \end{aligned} \tag{3}$$

Rešitev sistema enačb nam da obliko pasu (Slika 2):

$$E_k = \pm \sqrt{(\gamma_1 - \gamma_2)^2 + 4\gamma_1\gamma_2 \cos^2(ka)} \tag{4}$$

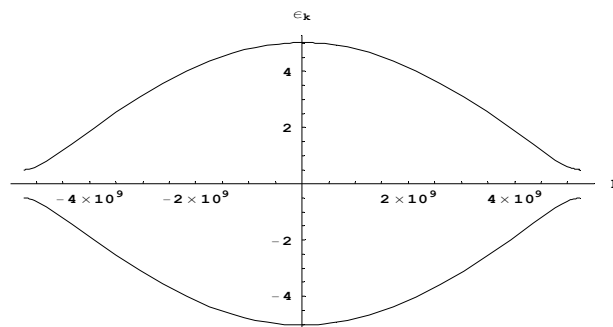
Energijska reža se pojavi pri na robu Briullove cone pri  $\pm\pi/2a$ . Pti tej vrednosti  $k$  lahko iz enčbe (4)

izračunamo energijsko režo  $\epsilon_g$ :

$$\begin{aligned}\epsilon_g &= 2(\gamma_1 - \gamma_2) \\ \epsilon_g &= 2\left(\gamma e^{\frac{-x}{a}} - \gamma e^{\frac{x}{a}}\right)\end{aligned}\quad (5)$$

Ker nas zanima nas premik  $x$  za podano energijsko režo razvijemo eksponentno funkcijo do prvega reda in izrazimo  $x$ :

$$\begin{aligned}\epsilon_g &= 2\gamma\left(1 + \frac{x}{a} - 1 + \frac{x}{a}\right) \\ x &= \frac{\epsilon_g}{4\gamma}a\end{aligned}\quad (6)$$



Slika 2: Graf elektronskih pasov vzdolž valovnega vektorja  $k$

Del VII

Kvaziklasičen približek



Stanko Manojlovič, 28030341  
 Mentor: dr. Peter Prelovšek  
 Asistent: dr. Tomaž Rejec  
 FIZIKA TRDNIH SNOVI  
 Domača naloga

1.Del: Izračunaj ciklotronsko frekvenco v odvisnosti od magnetnega polja iz tenzorja efektivne mase.

Ker imamo pri ciklotronu močno magnetno polje, moramo gledati silo na naboj, torej:

$$\vec{F}(\vec{r}) = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Najprej bomo uporabili kvaziklasični približek, ki smo ga izpeljali na predavanjih (upoštevana je le šibka sila).

$$\vec{F}(\vec{r}) = \hbar \dot{\vec{k}}$$

Prav tako smo na predavanjih že izpeljali grupno hitrost valovenga paketa

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} = \dot{\vec{r}}$$

Ter jo zapišemo za n-ti pas s težiščem pri  $\vec{k}$

$$\vec{v}_{n\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}} = \dot{\vec{r}}$$

Odvajamo po času in dobimo pospešek

$$\dot{\vec{v}}_{n\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k} \partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k} \partial t} \frac{\partial \vec{k}}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}^2} \dot{\vec{k}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}^2} \hbar \dot{\vec{k}}$$

$M^{-1} = \text{tenzor efektivne mase}$

$$M^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}^2}$$

Torej imamo  $\dot{\vec{v}} = M^{-1} \cdot \hbar \dot{\vec{k}}$ , če pa obrnemo pa imamo  $M \dot{\vec{v}} = \hbar \dot{\vec{k}}$ .

To uporabimo v našem kvazi klasičnem približku in imamo silo :

$$e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = \vec{F}(\vec{r}) = \hbar \dot{\vec{k}} = M \dot{\vec{v}} = \left( \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}^2} \right)^{-1} \dot{\vec{v}}$$

Napravimo še izračun:

Denimo, da imamo polje samo v smeri z  $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z$ , električnega polja nimamo  $\vec{E} = 0$

Velja torej:  $e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = M \dot{\vec{v}}$

$$e \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{bmatrix}, \text{ ter gledamo za ravno val: } \vec{v} = \vec{v}_0 e^{-i\omega t}$$

$$e \begin{bmatrix} v_y B \\ -v_x B \\ 0 \end{bmatrix} = -i\omega \begin{bmatrix} M_{xx} v_x + M_{xy} v_y + M_{xz} v_z \\ M_{yx} v_x + M_{yy} v_y + M_{yz} v_z \\ M_{zx} v_x + M_{zy} v_y + M_{zz} v_z \end{bmatrix}$$

Preuredimo desno matriko in uporabimo  $\lambda = i \frac{eB}{\omega}$

$$\begin{bmatrix} M_{xx} & M_{xy} - \lambda & M_{xz} \\ M_{yx} + \lambda & M_{yy} & M_{yz} \\ M_{zx} & M_{zy} & M_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{v}_x \\ \bar{v}_y \\ \bar{v}_z \end{bmatrix} = 0$$

$$M_{xx}M_{yy}M_{zz} + (M_{xy} - \lambda)M_{yz}M_{zx} + M_{xz}(M_{yx} + \lambda)M_{zy} + M_{xz}M_{yy}M_{zx} - M_{yz}M_{zy}M_{xx} - M_{zz}(M_{xy} - \lambda)(M_{yx} + \lambda) = 0$$

$$\det(M) - \lambda(M_{yz}M_{zx} - M_{xz}M_{zy}) - \lambda(M_{xx}M_{yx} - M_{yx}M_{xx}) + \lambda^2 M_{zz} = 0$$

Tako se nam odštejeta sredinska člena:

$$\lambda^2 = -\frac{\det(M)}{M_{zz}} = -\left(\frac{eB}{\omega}\right)^2$$

Ciklotronska frekvenca je torej

$$\omega = \frac{eB}{\sqrt{\det(M)/M_{zz}}}, \quad m^* = \sqrt{\det(M)/M_{zz}}$$

## BLOCHOVE OSCILACIJE

Mitja Eržen

18.1.12008

**1.Naloga:**

Imamo elektrone v periodičnem 1D kristalu. Kristal postavimo v električno polje, kateri je vzporeden z našim kristalom.

Zanima nas, kako se te elektroni gibljejo( $x(t)$ ), disperzija( $\varepsilon$ ) in polarizacijo(P). Omeniti moramo, da elektrone obravnavamo v kvaziklasičnem približku.

**2.Račun:**

Za elektron v električnem polju velja:

$$\frac{h}{2\pi} \dot{k} = e\bar{E} \rightarrow \int_0^t \rightarrow k(t) = k(0) - \frac{2\pi e}{h} Et$$

Ker imamo 1D mrežo, nam ni več potrebno pisati vektorskih znakov.

Disperzijo pa izračunamo tako, da vzamemo približek tesne vezi:

$$\varepsilon(k) = E_s - \beta - \sum_{n.n.} \gamma(R) \cos(kR)$$

To je vsota do najbližjih sosedov(n.n.= nearest neighbours) in kjer je  $\gamma(R)$  prekrivalni integral,  $R$  pa oddaljenost do soseda, ki je v našem primeru  $a$ . Razlika prvih dveh členov  $E_s - \beta$  je enaka 0, ker je odvisno kako vzamemo izhodišče naše energije. Pravzaprav ta del nas tako ali tako ne zanima, ker v naslednjem delu odvajamo funkcijo in se tega dela znebimo.

Potem dobimo:

$$\varepsilon(k) = -2\gamma \cos(ka)$$

kjer je  $a$  mrežna razdalja oziroma razdalja med atomi v kristalu. 2 pa dobimo od tega, ker upoštevamo 2 soseda(levo,desno).

Zdaj lahko dobimo  $x$  in sicer iz:

$$\dot{x} = \frac{d\varepsilon}{dk} \frac{2\pi}{h} = \frac{2\gamma a 2\pi}{h} \sin[k(t)a]$$

Če integriramo potem dobimo:

$$x(t) = x(0) + \frac{2\gamma}{eE} \left( \cos\left[k(0)a - \frac{eEa2\pi}{h}t\right] - 1 \right)$$

Če izberemo  $x(0)=0$  in  $k(0)=0$ , dobimo:

$$x(t) = \frac{2\gamma}{eE} \left( \cos\left[-\frac{eEa2\pi}{h}t\right] - 1 \right)$$

$$\omega_b = \frac{eEa2\pi}{h}$$

kjer je  $\omega_b$  Blochova frekvenca. Vidimo, da je gibanje elektrona v električnem polju v 1D kristalu harmonično, medtem ko pa se prost elektron v E giblje enakomerno pospešeno.

Zdaj pa izračunajmo še polarizacijo. Seštejemo vse elektrone v pasu. Se pravi od  $-k_f$  pa do  $k_f$ . To je fermijev valovni vektor, kateri je meja do kje je pas še zapolnjen.

Velja:

$$P(t) = \sum_k -ex_k(t) = konst - \sum_k \frac{2\gamma}{E} \cos(ka - \omega_b t)$$

Zdaj vsoto prevedemo na integral in dobimo:

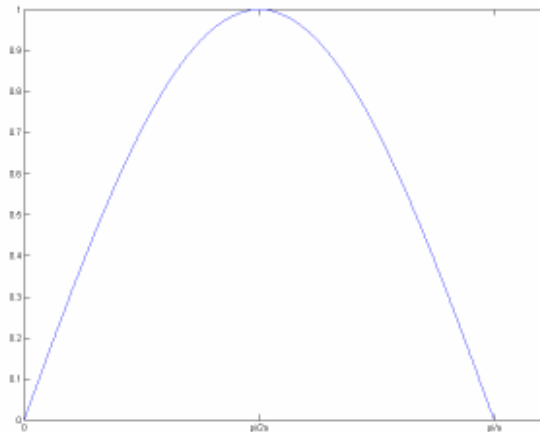
$$P(t) = konst - \frac{L}{2\pi} \int_{-k_f}^{k_f} \frac{2\gamma}{E} \cos(ka - \omega_b t) dk$$

$$P(t) = konst - \frac{2L}{\pi} \frac{\gamma}{E} \sin(ka) \cos(\omega_b t)$$

Dobimo zdaj  $P(t)$ . Zdaj pa pa odštejemo med sabo  $P(t)$  in  $P(0)$ , tako se bomo znebili tudi konstante, ki nas ne zanima. Tako dobimo rezultat:

$$\frac{P(t) - P(0)}{L} = \frac{P(0) - P(0)}{L} - \frac{2\gamma}{\pi E a} \sin(k_f a) [\cos(\omega_b t) - 1]$$

Če pogledamo kako Blochove oscilacije odvisne od zasedenosti pasu vidimo, da je amplituda največja, kadar je pas samo pol zaseden in najmanjša, kadar je prazen ali pa čisto zaseden. Na spodnjem gradu se to vidi:





Del VIII

Polprevodniki



## Degenerirani in nedegenerirani polprevodniki

Jaka Petelin

Januar, 2008

Za polprevodnike veljata enačbi za gostoto elektronov v prevodnem pasu ( $n_c$ ) in gostoto vrzeli v valenčnem pasu ( $p_v$ ):

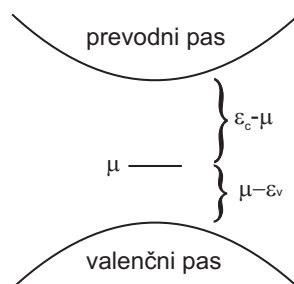
$$n_c = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} g_c(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon$$

$$p_v = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} g_v(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\mu-\varepsilon)} + 1} d\varepsilon$$

pri čemer sta  $g_c(\varepsilon)$  in  $g_v(\varepsilon)$  ustrezni gostoti stanj v prevodnem oziroma valenčnem pasu,  $\mu$  pa je kemijski potencial. O nedegeneriranem polprevodniku govorimo, kadar lahko v imenovalcu zgornjih enačb zanemarimo enko, oziroma:

$$\varepsilon_c - \mu \gg kT$$

$$\mu - \varepsilon_v \gg kT$$



To pomeni, da mora biti kemijski potencial nekje vmes med valenčnim in prevodnim pasom ampak dovolj daleč od obeh (v primerjavi s  $kT$ ). V tem primeru se zgornji enačbi za gostoto elektronov in vrzeli poenostavita:

$$n_c = N_c(T) e^{-\beta(\varepsilon_c - \mu)}$$

$$p_v = P_v(T) e^{-\beta(\mu - \varepsilon_v)}$$

pri čemer velja:

$$N_c(T) = \int_{\varepsilon_v}^{\infty} g_c(\varepsilon) e^{-\beta(\varepsilon - \varepsilon_c)} d\varepsilon$$

$$P_v(T) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} g_v(\varepsilon) e^{-\beta(\varepsilon_v - \varepsilon)} d\varepsilon$$

Za nadaljnji izračun bomo potrebovali gostoto stanj  $g_c$  in  $g_v$ . Gostota stanj je definirana takole:

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{V} \frac{dN}{d\varepsilon}$$

Število stanj v energijskem pasu širine  $d\varepsilon$  pa se izračuna takole:

$$dN = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} (V_K(\varepsilon + d\varepsilon) - V_K(\varepsilon))$$

pri čemer je  $V_K$  volumen v K-prostoru, vse skupaj pa je pomnoženo z 2 zaradi spina elektronov. Pri izračunu  $V_K$  moramo upoštevati še, da masa elektronov oziroma vrzeli v splošnem ni izotropna in jo opišemo s tenzorjem  $M$ . Vedno pa se lahko postavimo v lastni sistem tenzorja, pri čemer je tenzor  $M$  diagonalna matrika:

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 \end{pmatrix}$$

Tako lahko v lastnem koordinatnem sistemu tenzorja  $M$  zapišemo disperzijo:

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$$

Zadnja enačba opisuje elipsoid. Za volumen elipsoida, ki ga opisuje spodnja enačba velja:

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2 = 1$$

$$V = \frac{4\pi}{3} abc$$

Za računanje  $V_K(\varepsilon)$  tako upoštevamo:

$$a = \sqrt{\frac{2m_1\varepsilon}{\hbar^2}}$$

$$b = \sqrt{\frac{2m_2\varepsilon}{\hbar^2}}$$

$$c = \sqrt{\frac{2m_3\varepsilon}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow V_K(\varepsilon) = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{m_1 m_2 m_3}$$

$$= \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\det M}$$

Podobno izračunamo tudi  $V_K(\varepsilon + d\varepsilon)$ :

$$\begin{aligned} a, b, c &= \sqrt{\frac{2m_{1,2,3}(\varepsilon + d\varepsilon)}{\hbar^2}} \\ \Rightarrow V_K(\varepsilon + d\varepsilon) &= \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\det M} \end{aligned}$$

Zadnjo enačbo razvijemo do prvega reda:

$$V_K(\varepsilon + d\varepsilon) = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}\right) \sqrt{\det M}$$

Ko vse to vstavimo v enačbo za gostoto stanj dobimo:

$$g(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\det M} \sqrt{\varepsilon}$$

To enačbo primerjamo z gostoto stanj za Fermijev plin elektronov:

$$g_F(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} m^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon}$$

Tako vpeljemo efektivno maso elektronov oziroma vrzeli:

$$m_{c,v}^* = (\det M_{c,v})^{\frac{1}{3}}$$

Sedaj lahko končno izračunamo izraza za  $N_c(T)$  in  $P_v(T)$ :

$$\begin{aligned} N_c(T) &= \dots = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_c^* kT}{\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \\ P_v(T) &= \dots = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_v^* kT}{\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

Sedaj pa se vrnimo na vprašanje, pod kakšnimi pogoji je polprevodnik nedegeneriran oziroma degeneriran. Za čisti polprevodnik velja  $n_c(T) = p_v(T) = n_i(T)$ , saj vsak elektron, ki skoči v prevodni pas, za sabo pusti vrzel v valenčnem pasu. Ob upoštevanju tega lahko izračunamo:

$$\begin{aligned} N_c(T) e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} &= P_v(T) e^{-\beta(\mu - \varepsilon)} \\ \Rightarrow \ln(N_c(T)) - \beta(\varepsilon - \mu) &= \ln(P_v(T)) - \beta(\mu - \varepsilon) \end{aligned}$$

Od tod izrazimo kemijski potencial:

$$\begin{aligned} \mu = \mu_i &= \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_v}{2} + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{P_v}{N_c}\right) \\ &= \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_v}{2} + \frac{3kT}{4} \ln\left(\frac{m_v^*}{m_c^*}\right) \end{aligned}$$

Vidimo, da se pri dovolj nizkih temperaturah kemijski potencial nahaja točno na sredini energijske reže, oziroma, če vpeljemo širino energijske reže  $E_g = \varepsilon_c - \varepsilon_v$ :

$$\mu - \varepsilon_v = \frac{E_g}{2} + \frac{3kT}{4} \ln \left( \frac{m_v^*}{m_c^*} \right)$$

Iz zadnje enačbe vidimo, da bo pri dovolj nizkih temperaturah  $\mu - \varepsilon_v \approx \frac{E_g}{2}$ . Prvotni pogoj za nedegeneriranost polprevodnika pa je bil  $\mu - \varepsilon_v \gg kT$ . Ta pogoj je torej izpolnjen, če velja:

$$E_g \gg kT$$

Energija reže  $E_g$  je tipično reda velikosti  $1 \text{ eV}$ ,  $kT$  pa ima pri sobni temperaturi vrednost približno  $\frac{1}{40} \text{ eV}$ . Vidimo, da je čisti polprevodnik pri normalnih pogojih vedno nedegeneriran in je bila prvotna poenostavitev izrazov za  $n_c$  in  $p_v$  upravičena.

Pri dopiranem polprevodniku pa velja:

$$\begin{aligned} n_c &\neq p_v \\ n_c - p_v &= \Delta n \end{aligned}$$

Za nedegeneriran, dopiran polprevodnik lahko zapišemo:

$$\begin{aligned} n_c &= n_i e^{\beta(\mu - \mu_i)} \\ p_v &= n_i e^{-\beta(\mu - \mu_i)} \end{aligned}$$

pri čemer je  $\mu_i$  kemijski potencial čistega polprevodnika. Tako sledi:

$$\frac{\Delta n}{n_i} = 2 \sinh \beta (\mu - \mu_i)$$

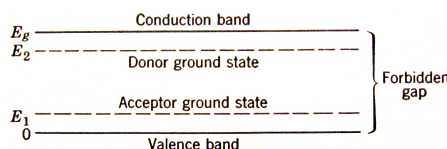
Dopiran polprevodnik postane (podobno kot nedopiran) degeneriran takrat, ko se kemijski potencial preveč približa robu valenčnega ali prevodnega pasu. Takrat je  $|\mu - \mu_i| \gg kT$ , saj se intrinzični kemijski potencial  $\mu_i$  še vedno nahaja približno na sredini energijske reže. Posledično je izraz  $2 \sinh \beta (\mu - \mu_i) \gg 1$ . Tako vidimo, da postane dopiran polprevodnik degeneriran takrat, ko je  $\left| \frac{\Delta n}{n_i} \right| \gg 1$ , torej kadar imamo opravka z močno dopiranim polprevodnikom.

## Temperaturna odvisnost kemijskega potenciala v polprevodniku tipa n

Rok Prislan

23. maj 2008

Med prevodnim in valenčnim pasom polprevodnika je energijska špranja velikosti  $E_g$ . Ko imajo polprevodniki dodane nečistoče, postane njihov vpliv na prevodnost kristala prevladujoče. Energije elektronov na nivoju donorjev in akceptorjev so znotraj energijske špranje, kot prikazuje spodnja slika.



V našem primeru imamo v polprevodnik domešane nečistoče donorskega tipa in naša naloga je izračunati temperaturno odvisnost kemijskega potenciala za ta primer. Z  $N_d$  označimo koncentracijo donorjev,  $N_d^0$  koncentracijo neioniziranih donorjev, z  $N_d^+$  pa koncentracijo ioniziranih. Uporabili bomo Fermi-Diracovo statistiko.

$$N_d^0 = \frac{N_d}{1 + e^{(E_2 - \mu)\beta}}$$

$$N_d^+ = N_d - N_d^0 = N_d \left( 1 - \frac{1}{1 + e^{(E_2 - \mu)\beta}} \right) = \frac{N_d}{1 + e^{-(E_2 - \mu)\beta}}$$

$$N_a^- = N_a \left( \frac{1}{1 + e^{(E_1 - \mu)\beta}} \right)$$

V vse tri zgornje izraze smo na predavanjih postavili faktor  $\frac{1}{2}$  pred eksponentni člen v imenovalcu. Tak zapis je pravilnejši, saj vsa stanja niso dovoljena. Mi bomo kljub temu računali brez prefaktorja.

Kot smo že izračunali za intrinzični primer sta

$$N_c = \frac{1}{4} \left( \frac{2m_c^*}{\pi \hbar^2 \beta} \right)^{3/2} \quad P_v = \frac{1}{4} \left( \frac{2m_v^*}{\pi \hbar^2 \beta} \right)^{3/2}.$$

Za kristal zahtevamo, da je električno nevtralen. To je tudi naš nastavek, za nadlajno računanje.

$$p_v + N_d^+ = n_c + N_a^-,$$

kjer je  $p_v$  koncentracija vrzeli v valenčnem pasu,  $n_c$  pa elektronov v prevodnem. Tako zapišemo

$$P_v e^{-\mu\beta} + \frac{N_d}{1 + e^{-(E_2 - \mu)\beta}} = N_c e^{(\mu - E_g)\beta} + N_a \left( \frac{1}{1 + e^{(E_1 - \mu)\beta}} \right).$$

Ker računamo kemijski potencial za n-tip polprevodnika, je  $N_a = 0$ . Omejimo se na primer, ko lahko  $p$  zanemarimo. Tako se enačba poenostavi.

$$\frac{N_d}{1 + e^{-(E_2 - \mu)\beta}} = N_c e^{(\mu - E_g)\beta}$$

Množimo z imenovalcem levega dela nečbe. Tako lahko zapišemo kvadratno enačbo za  $e^{\mu\beta}$

$$(N_c e^{-(E_2 + E_g)\beta}) e^{2\mu\beta} + (N_c e^{-E_g\beta}) e^{\mu\beta} - N_d = 0.$$

Rešitvi kvadratne enačbe sta

$$e^{\mu\beta} = \frac{-N_c e^{-E_g\beta} \pm \sqrt{(N_c e^{-E_g\beta})^2 + 4N_c^0 e^{-(E_2 + E_g)\beta} N_d}}{2N_c^0 e^{-(E_2 + E_g)\beta}}$$

Če izraz podelimo z  $N_c e^{-E_g\beta}$  in upoštevamo, da je smiselna le rešitev s plusom, dobimo

$$e^{\mu\beta} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\frac{N_d}{N_c} e^{-(E_2 - E_g)\beta}}}{2e^{-E_2\beta}}.$$

Iz tega izraza lahko poračunamo dve limiti.

**a)**  $4\frac{N_d}{N_c} e^{-(E_2 - E_g)\beta} \ll 1$

To je limita, ko je gostota donorskih primesi majhna, ali pa za temperatura visoka. Koren razvijemo po Taylorju in dobimo

$$e^{\mu\beta} = \frac{N_d}{N_c} e^{E_g\beta} \quad \implies \quad \mu = E_g + kT \ln\left(\frac{N_d}{N_c}\right).$$

**b)**  $4\frac{N_d}{N_c} e^{-(E_2 - E_g)\beta} \gg 1$

To je limita, ko je gostota donorskih primesi velika ali temperatura nizka. Enice v števcu zanemarimo in dobimo

$$e^{\mu\beta} = \left(\frac{N_d}{N_c}\right)^{1/2} e^{(E_g + E_2)\beta/2} \quad \implies \quad \mu = \frac{E_g + E_2}{2} + kT \frac{1}{2} \ln\left(\frac{N_d}{N_c}\right)$$

V približku visoke temperature se kemijski potencial spušča proti sredini energijske reže, zato pri dovolj visoki temperaturi predpostavka, da je  $p$  majhen, odpove. Kemijski potencial bi bilo zato potrebno izračunati iz zadnje enačbe na prvi strani.



# FIZIKA TRDNE SNOVI 2007/08

## ZAPORNA PLAST V N-P STIKU

Žiga Lenarčič\*

*Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani*

20. februar 2008

### 1 Naloga

Pokazali bomo, da se Poissonova enačba

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon \epsilon_0}$$

na p-n stiku zapiše kot diferencialna enačba za funkcijo  $\psi(x) = \beta(e\phi(x) + \mu - \mu_i)$  v obliki

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = K^2 \left[ \sinh \psi(x) - \frac{\Delta N(x)}{2n_i} \right], \quad (1)$$

kjer je  $K^2 = \frac{2n_i e^2 \beta}{\epsilon \epsilon_0}$ ,  $\Delta N(x) = N_d(x) - N_a(x)$ ,  $\mu_i$  in  $n_i$  pa sta intrinzični (za nedopiran polprevodnik) kemijski potencial in intrinzična gostota nosilcev naboja pri isti temperaturi. Izpeljali bomo rešitev  $\psi(x)$  za primer  $n_i \gg N_d, N_a$ , ko privzamemo  $\sinh \psi(x) \approx \psi(x)$ .

### 2 Rešitev

#### 2.1 Prevedba Poissona na diferencialno enačbo s $\psi(x) = \beta(e\phi(x) + \mu - \mu_i)$

V enodimenzionalnem primeru (p-n stik obravnavamo le v eni dimenziji) zapišemo Poissonovo enačbo v obliki

$$\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon \epsilon_0}. \quad (2)$$

V našem primeru računamo, kot da so vsi donorji in akceptorji ionizirani, zato k naboju prispevata kar celotni koncentraciji dopantov  $N_d$  in  $N_a$ :

$$\rho(x) = e \left[ \underbrace{N_d(x) - N_a(x)}_{\Delta N(x)} - n_c(x) + p_v(x) \right]$$

Gostoti  $n_c$  in  $p_v$  lahko izrazimo v odvisnosti od kemijskega potenciala tako

$$n_c = e^{\beta(\mu - \mu_i)} n_i \quad p_v = e^{-\beta(\mu - \mu_i)} n_i,$$

vendar moramo v našem primeru, ko imamo še spreminjajoč potencial v eksponent dodati še člen  $e\phi(x)$ . Z uvedbo nove spremenljivke  $\psi = \beta(e\phi + \mu - \mu_i)$  se gostoti zapišeta:

$$n_c(x) = e^{\beta(e\phi(x) + \mu - \mu_i)} n_i = e^{\psi(x)} n_i \quad p_v(x) = e^{-\beta(e\phi(x) + \mu - \mu_i)} n_i = e^{-\psi(x)} n_i$$

---

\*e-mail naslov: [ziga.lenaric@student.fmf.uni-lj.si](mailto:ziga.lenaric@student.fmf.uni-lj.si).

Sedaj uporabimo še zvezo  $2 \sinh x = e^x - e^{-x}$  ter zapišemo gostoto naboja kot

$$\rho(x) = -e[2n_i \sinh \psi - \Delta N(x)].$$

Oglejmo si drugi odvod funkcije  $\psi(x) = \beta(e\phi(x) + \mu - \mu_i)$  po  $x$  - preživi le prvi člen, saj sta  $\mu$  in  $\mu_i$  neodvisna od  $x$ . Torej velja  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = e\beta \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ . To in gostoto naboja vtaknemo v enodimenzionalno Poissonovo enačbo (2) in, če malo premečemo, dobimo enačbo

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2n_i e^2 \beta}{\epsilon \epsilon_0} \left[ \sinh \psi(x) - \frac{\Delta N(x)}{2n_i} \right],$$

ki je enaka enačbi (1) za  $K^2 = 2n_i e^2 \beta / \epsilon \epsilon_0$ .

## 2.2 Primer šibko dopiranega polprevodnika: $n_i \gg N_d, N_a$

Pogledali si bomo primer šibko dopiranega (skoraj intrinzičnega) polprevodnika. V tem primeru se izkaže, da je  $\psi(x) \ll 1$ , kar nam da uporabno aproksimacijo  $\sinh \psi(x) \approx \psi(x)$ , ki nam bo omogočala izračun rešitve  $\psi(x)$  okrog stika p-n. Zaenkrat še ni jasno, zakaj iz  $n_i \gg N_d, N_a$  sledi  $\psi(x) \ll 1$ , bo pa razvidno iz rešitve, zakaj je  $\psi(x) \ll 1$  dober privzetek za naš primer.

Zanima nas rešitev diferencialne enačbe

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - K^2 \psi(x) = -\frac{K^2 \Delta N(x)}{2n_i},$$

pri čemer sta  $K^2$  in  $n_i$  konstanti,  $\Delta N(x) = N_d(x) - N_a(x)$  pa je tudi konstanten za območji  $x < 0$  (p-tip polprevodnika) in  $x \geq 0$  (n-tip polprevodnika), in sicer zavzame vrednosti  $-N_a$  ter  $N_d$  na omenjenih dveh intervalih.  $N_d$  je gostota donorjev v n-tipu polprevodnika,  $N_a$  pa gostota akceptorjev v p-tipu.

### Šnelkurz reševanja zgornje diferencialne enačbe

Rešitev  $\psi(x)$  bomo dobili s pomočjo konvolucije Greenove funkcije in desnega dela enačbe. Greenova funkcija je funkcija  $\psi_G$ , ki reši diferencialno enačbo za delta funkcijo

$$\frac{\partial^2 \psi_G(x)}{\partial x^2} - K^2 \psi_G(x) = \delta(x) \quad (3)$$

Rešitev zgornje enačbe (3) v homogeni različici (desna stran je 0) se v splošnem glasi  $\psi(x) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx}$ . Ker ne želimo, da rešitev raste v neskončnost vzamemo le padajočo eksponentno funkcijo. Rešitev je sedaj oblike  $\psi(x) = Ae^{-K|x|}$ . Konstanto  $A$  določimo tako, da enačbo (3) integriramo okrog  $x = 0$  in gledamo limito, ko gre interval integracije proti 0. Zapišemo

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \frac{\partial^2 \psi_G(x)}{\partial x^2} dx - \underbrace{\lim_{\Delta \rightarrow 0} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} K^2 \psi_G(x) dx}_{=0} = \underbrace{\lim_{\Delta \rightarrow 0} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \delta(x) dx}_{=1}. \quad (4)$$

Integral delta funkcije je seveda 1, integral  $\psi_G(x)$  je, ko gremo z intervalom proti 0 enak 0, saj je  $\psi_G$  zvezna pri  $x = 0$ . V prvi člen vstavimo odvod našega nastavka  $\psi_G = Ae^{-K|x|}$ :

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \psi'_G(x) \Big|_{-\Delta/2}^{\Delta/2} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} (A(-K)e^{-K|x|}) \Big|_{-\Delta/2}^{\Delta/2} = -2AK = 1 \quad (5)$$

Dobimo koeficient  $A = (-2K)^{-1}$  in naša Greenova funkcija se v končni verziji glasi

$$\psi_G(x) = -\frac{1}{2K} e^{-K|x|} \quad (6)$$

Skonvolviramo jo z desno stranjo originalne diferencialne enačbe ter tako dobimo rešitev  $\psi(x)$ :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{K^2 \Delta N(x')}{2n_i} \psi_G(x-x') dx' = \frac{K}{4n_i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-K|x-x'|} \Delta N(x') dx' \quad (7)$$

**Izračun integrala**

Ta integral lahko izračunamo analitično po delih (kar nekaj dela). Najprej razrešimo absolutno vrednost in vrednost  $\Delta N(x)$ .

$$|x - x'| = \begin{cases} x - x'; & x' < x \\ x' - x; & x' > x \\ 0 & ; \quad x' = x \end{cases} \quad (8)$$

$$\Delta N(x) = \begin{cases} -N_a; & x < 0 \\ N_d & ; \quad x \geq 0 \end{cases} \quad (9)$$

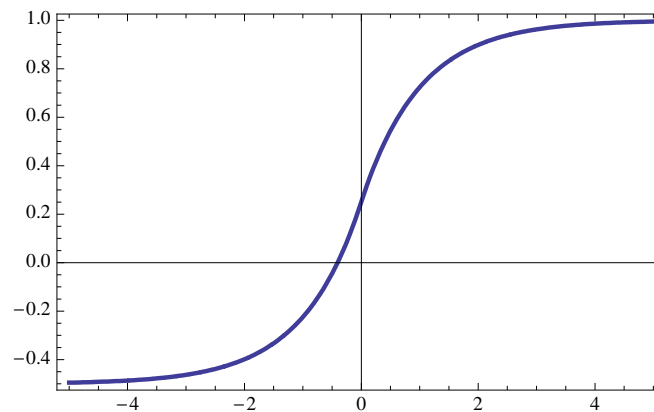
Sedaj ločimo izračuna za  $\psi(x < 0)$  in  $\psi(x \geq 0)$ . Pripravimo si tudi nedoločena integrala  $\int \exp -K(x - x')dx' = \frac{1}{K} \exp -K(x - x')$  in  $\int \exp -K(x' - x)dx' = -\frac{1}{K} \exp -K(x - x')$ . Integrala bom označeval z 1 in 2. Zapišemo:

$$\begin{aligned} \psi(x < 0) &= \frac{K}{4n_i} \left[ -N_a \int_{-\infty}^x 1dx' - N_a \int_x^0 2dx' + N_d \int_0^{\infty} 2dx' \right] = \\ &= \frac{1}{4n_i} [-N_a + N_a e^{Kx} - N_a + N_d e^{Kx}] \end{aligned} \quad (10)$$

Podoben integral naredimo za  $\psi(x > 0)$ , le da so tokrat intervali  $[-\infty, 0], [0, x]$  in  $[x, \infty]$ . Tako dobimo zlepljeno funkcijo - rešitev:

$$\begin{aligned} \psi(x < 0) &= \frac{1}{4n_i} [e^{Kx}(N_d + N_a) - 2N_a] \\ \psi(x \geq 0) &= \frac{1}{4n_i} [-e^{-Kx}(N_d + N_a) + 2N_d] \end{aligned} \quad (11)$$

Iz rešitve je sedaj razvidno, da je naš privzetelek  $n_i \gg N_d, N_a \rightarrow \psi \ll 1$  dober, saj je rešitev  $\psi(x)$  "ujeta" med  $-\frac{N_a}{2n_i} \leq \psi(x) \leq \frac{N_d}{2n_i}$ , kar pomeni  $|\psi| \ll 1$ .



Slika 1: Graf funkcije  $\psi(x)$  za poskusne vrednosti  $N_d = 2$  in  $N_a = n_i = K = 1$ .



Del IX

# Mrežna nihanja

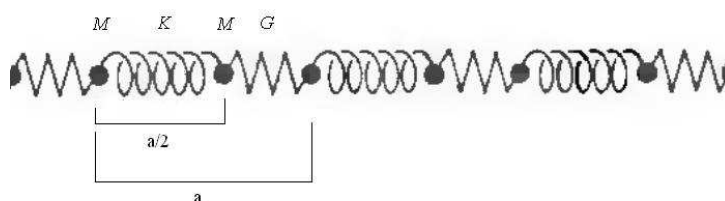


Fizika trdne snovi  
Nihanje 1D mreže z bazo

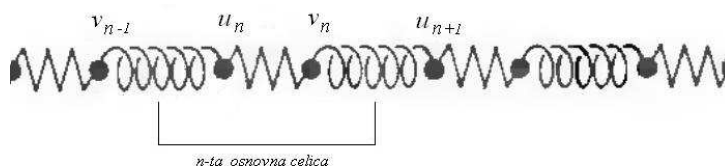
Nuša Pukšič

Naloga:

Obravnavamo nihanje eno-dimenzionalne mreže enakih atomov na razdalji  $a/2$ , ki so izmenično povezani z vzmetmi s koeficientoma  $K$  in  $G$ , kot kaže slika 1. Kakšna je fononska disperzija take verige?



Slika 1: Prikaz verige z označbami (slika ni v merilu). Razdalje med atomi so  $a/2$ , osnovna celica vsebuje dva atoma (dolžina osnovne celice je  $a$ ). Koeficienta vzmeti označimo s  $K$  in  $G$ , maso atomov z  $M$ .



Slika 2: Prikaz verige z označbami (slika ni v merilu). Osnovne celice oštevilčimo. V vsaki celici prvemu atomu pripišemo odmik  $u$  in drugemu odmik  $v$ .

Rešitev:

Potencialno energijo sistema zapišemo z vsoto po osnovnih celicah:

$$U = \frac{1}{2} \sum_n \left( K(u_n - v_{n-1})^2 + G(v_n - u_n)^2 \right), \quad (1)$$

iz tega pa dobimo gibalne enačbe z odvajanjem po  $u_n$  in  $v_n$ :

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_n &= -\frac{\partial U}{\partial u_n} = -K(u_n - v_{n-1}) + G(v_n - u_n), \\ M\ddot{v}_n &= -\frac{\partial U}{\partial v_n} = K(u_{n+1} - v_n) - G(v_n - u_n). \end{aligned} \quad (2)$$

Rešitve iščemo v obliki:

$$u_n = A e^{ikna - i\omega t}, \quad v_n = B e^{ikna - i\omega t}, \quad (3)$$

kjer sta  $A$  in  $B$  konstanti, katerih razmerje bo določalo relativno amplitudo in fazo nihanja atomov v osnovni celici. Nastavka vstavimo v zgornji enačbi gibanja in dobimo:

$$\begin{aligned} -\omega^2 MA + K(A - B e^{-ika}) - G(B - A) &= 0, \\ -\omega^2 MB - K(A e^{ika} - B) + G(B - A) &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Tak par sklopljenih homogenih enačb za  $A$  in  $B$  ima netrivialne rešitve, ko je determinanta matrike koeficientov enaka nič.

$$M = \begin{pmatrix} -\omega^2 M + K + G & -K e^{-ika} - G \\ -K e^{ika} - G & -\omega^2 M + K + G \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\det M = 0 = (K + G - M\omega^2)^2 - (K e^{ika} + G)(K e^{-ika} + G). \quad (6)$$

Iz tega dobimo kvadratno enačbo za  $\omega^2$ :

$$M^2 \omega^4 - 2M(K + G)\omega^2 + 2KG(1 - \cos ka) = 0 \quad (7)$$

z rešitvijo:

$$\omega^2 = \frac{K + G}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos ka}. \quad (8)$$

Krivulji  $\omega(k)$  imenujemo veji disperzijske zveze (slika 3). Spodnjo vejo imenujemo akustična<sup>1</sup>, drugo optična<sup>2</sup>.

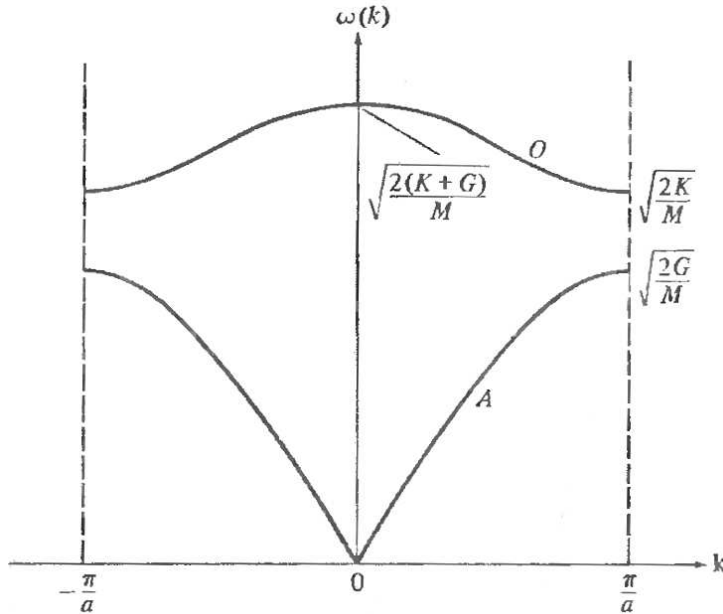
Razmerje amplitud nihanja atomov v osnovni celici dobimo tako, da dobljeno  $\omega^2$  vstavimo v eno od enačbo za  $A$  in  $B$  (enačbi 4) in izrazimo razmerje:

$$\frac{B}{A} = \mp \frac{K e^{ika} + G}{\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos ka}} = \mp \frac{K e^{ika} + G}{|K e^{ika} + G|}. \quad (9)$$

<sup>1</sup>Akustična veja: Ime je posledica tega, da je disperzija za majhne  $k$  oblike  $\omega = ck$ , ki je značilna za zvočno valovanje.

<sup>2</sup>Optična veja: Nihanja z večjimi valovnimi dolžinami lahko v ionskih kristalih interagirajo z elektromagnetnim valovanjem in prispevajo k optičnim lastnostim kristalov.





Slika 3: Disperzija verige. Spodnja veja je akustična, zgornja optična. Na sliki so označene mejne vrednosti  $\omega$ .

1. primer:  $ka \rightarrow 0$

V tem primeru lahko  $\cos ka$  nadomestimo s prvima členoma vrste:  $1 - (ka)^2/2$  in koren razvijemo:

$$\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \left(1 - \frac{(ka)^2}{2}\right)} = \sqrt{(K+G)^2 - KG(ka)^2} = \quad (10)$$

$$= (K+G) \sqrt{1 - \frac{KG(ka)^2}{(K+G)^2}} \rightarrow (K+G) \left(1 - \frac{KG}{2(K+G)^2} (ka)^2\right). \quad (11)$$

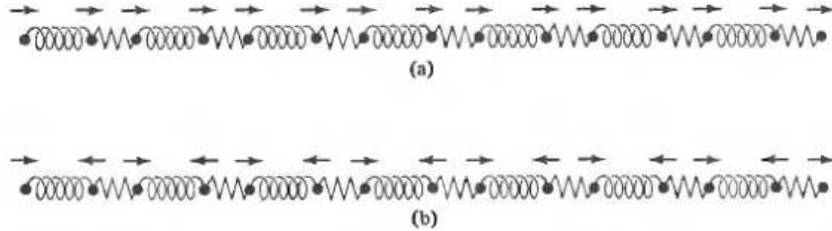
Tedaj lahko zapišemo:

$$\omega^2 = \frac{K+G}{M} \pm \frac{K+G}{M} \left(1 - \frac{KG}{2(K+G)^2} (ka)^2\right), \quad (12)$$

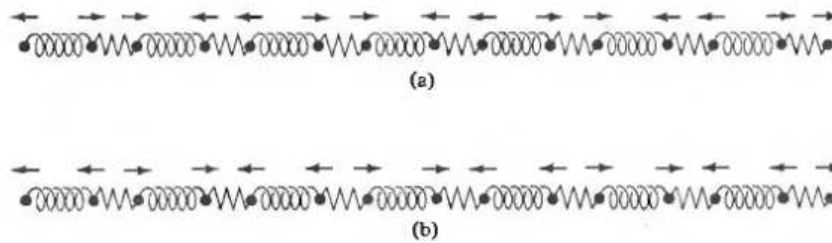
in ločeno za optično in akustično vejo:

$$\omega_{opt} = \sqrt{\frac{2(K+G)}{M}}, \quad \omega_a = ka \sqrt{\frac{KG}{2M(K+G)}}. \quad (13)$$

Hkrati dobimo za razmerje amplitud (enačba 9):  $B = \mp A$ . Plus ustreza akustični veji in nihanju atomov v osnovni celici z isto fazo, minus pa ustreza optičnemu načinu s faznim zamikom  $\pi$  med atomoma v osnovni celici. (Slika 2.)



Slika 4: Akustični (a) in optični (b) nihajni način v centru Brillouinove cone. Vse osnovne celice nihajo enako. Osnovna celica vsebuje atoma povezana z vzmetjo s koeficientom  $G$  (nazobčana črta).



Slika 5: Akustični (a) in optični (b) nihajni način na robu Brillouinove cone. Faza se med sosednjimi celicami spreminja za  $\pi$ , znotraj celice pa je nihanje v obeh primerih isto kot v 1. primeru. Če bi bila koeficienta vzmeti  $K$  in  $G$  enaka, bi bili gibanji nerazločljivi.

2. primer:  $ka \rightarrow \pi$

V tem primeru aproksimiramo  $\cos ka$  z  $-1$  in dobimo:

$$\omega^2 = \frac{K + G}{M} \pm \frac{K - G}{M}, \quad (14)$$

$$\omega_{opt} = \sqrt{\frac{2K}{M}}, \quad \omega_a = \sqrt{\frac{2G}{M}}. \quad (15)$$

Tudi v tem primeru velja  $B = \mp A$ , le da je gibanje sosednjih celic fazno zamaknjeno za  $\pi$ . V obeh primerih se razteguje in krči le ena vrsta vzmeti. (Slika 3.)

### Masni defekt ali nečistoča v linearni verigi.

Primož Burger

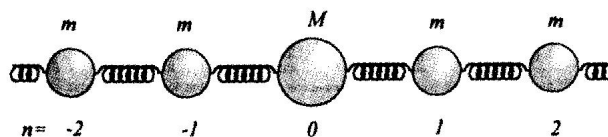
12. 3. 2008

## 1 Naloga

Izračunaj lastno frekvenco linearne verige z masnim defektom (izotop) na mestu  $n=0$ , privzemi natavek

$$s_n = s_0 e^{-k(\omega)|n|a - i\omega t}$$

konstanta vzmeti je  $\kappa$ ,  $a$  pa je razdalja med atomi.



Slika 1: Linearna veriga sklopljenih atomov z nečistočo na mestu  $n$ .

## 2 Rešitev

Če je premik  $n$ . atoma  $s_n$ , sta enačbi gibanja za masi  $n=-1$  in  $n=0$ :

$$m\ddot{s}_{-1} = \kappa(s_{-2} - 2s_{-1} + s_0)$$

$$M\ddot{s}_0 = \kappa(s_{-1} - 2s_0 + s_1)$$

ali bolj splošno

$$m\ddot{s}_n = \kappa(s_{n-1} - 2s_n + s_{n+1}) \quad \text{za } n \neq 0$$

Ko v gornji enačbi damo naš nastavek

$$s_n = s_0 e^{-kan - i\omega t} \quad \text{za } n > 0$$

$$s_n = s_0 e^{-i\omega t} \quad \text{za } n = 0$$

$$s_n = s_0 e^{+kan - i\omega t} \quad \text{za } n < 0$$

dobimo dve enačbi

$$m\omega^2 = \kappa(2 - e^{ka} - e^{-ka})$$

$$M\omega^2 = 2\kappa(1 - e^{-ka})$$

katerih rešitev je:

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sqrt{\frac{m/M}{2 - M/m}}$$

in

$$ka = \ln\left(1 - \frac{2m}{M}\right)$$

### 3 Diskusija

1. Za  $M > 2m$  je  $\omega$  imaginarna in  $k$  negativen in realen. To pomeni, da naš nastavek ne deluje. Rešitev s časom pada in z naraščajočim  $n$  divergira.

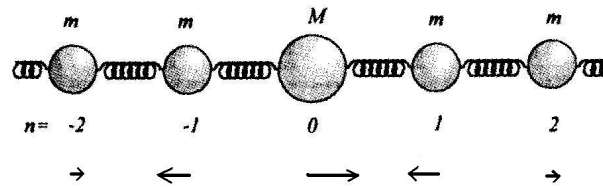
2. Za  $M < 2m$  je  $\omega$  realna  $k$  pa je kompleksen. To je oscilirajoča rešitev. Z uporabo zveze  $\ln(-A) = i\pi + \ln A$  kjer je  $A > 0$  dobimo:

$$ka = i\pi + \ln\left(\frac{2m}{M} - 1\right)$$

a) Za  $m < M < 2m$  je  $\text{Re}(k)$  negativen in rešitev  $s_n$  divergira za velike  $n$ . Naš nastavek ni dober.

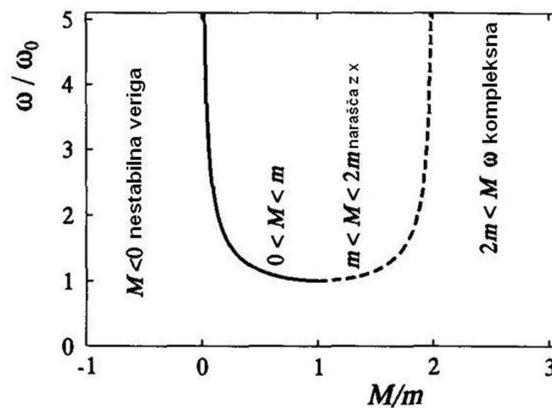
b) Za  $M < m$  je  $\text{Re}(k)$  pozitiven. V tem primeru je naš nastavek uporaben. Rešitev opisuje nihajoče delece. Amplituda nihanja pada z naraščajočim  $n$ .

$$s_n = s_0 e^{-k(\omega)|n|a - i\omega t} = s_0 (-1)^n \left(\frac{2m}{M} - 1\right)^{-|n|} e^{-i\omega t}$$



Slika 2: Smeri odmikov alternirajo, amplituda pada z razdaljo od  $n=0$

Za zaključek lahko rečemo, da je naš nastavek uporaben le za  $0 < M < m$ . (Za negativne mase  $M$  bi bila veriga nestabilna.) Časovna odvisnost rešitve je nihanje. Amplituda z razdaljo od defekta pada. Opazimo lahko, da je frekvenca nihanja  $\omega \geq 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$ , medtem ko je za verigo brez nečistoče ( $M=m$ )  $\omega_0 = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$ . Frekvenca nihanja verige z nečistočo je nad najvišjo frekvenco fononov čiste verige. To je razumljivo, saj manjša masa pomeni večjo frekvenco nihanja. Ta rezultat prikazuje slika 3.



Slika 3: Frekvenca kot funkcija mase izotopa. Nihajoča rešitev je nedivergentna le za  $0 < M < m$ .

## Gostota stanj in toplotna kapaciteta 1-D kristala

Matjaž Žganec

21. marec 2008

### Naloga

Zanimata nas gostota stanj in specifična toplotna kapaciteta verige  $N + 1$  mas  $m$ , ki so povezane z vzmetmi s koeficientom raztezka  $k$ . Mase so razmaknjene za  $a$ , dolžina celotne verige je  $L$ .

### Rešitev

#### Gostota stanj v eni dimenziji

Predpostavimo, da sta prva in zadnja masa v verigi fiksirani (ne nihata). Potem vibracijski načini nihanja verige predstavljajo stoječe valovanje z odmikom mase na mestu  $s$

$$u_s = u(0) \exp(-i\omega_K t) \sin(sKa), \quad s = 0, 1, \dots, N. \quad (1)$$

Robna pogoja določata možne valovne vektorje

$$K = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \dots, \frac{(N-1)\pi}{L}. \quad (2)$$

Rešitev z največjim valovnim vektorjem  $K_{max} = N\pi/L$  ne da nihanja, saj vozli stoječega valovanja sovpadajo z legami mas. Dobili smo  $N - 1$  neodvisnih valovnih vektorjev. To je toliko, kolikor je mas, ki lahko nihajo. Vsak valovni vektor  $K$  določa drugo stoječe valovanje.

Namesto fiksni mas na začetku in koncu verige lahko uporabimo periodične robne pogoje. Z nastavkom za ravni val

$$u_s = u(0) \exp(i(sKa - \omega_K t)), \quad (3)$$

kjer je

$$K = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm \frac{N\pi}{L}, \quad (4)$$

spet dobimo toliko nihajnih načinov, kolikor je nefiksiranih mas - v tem primeru  $N + 1$ . V obeh primerih lahko zaključimo, da z valovnim vektorjem manjšim od  $|K|$  dobimo

$$N = \frac{L}{\pi} |K| \quad (5)$$

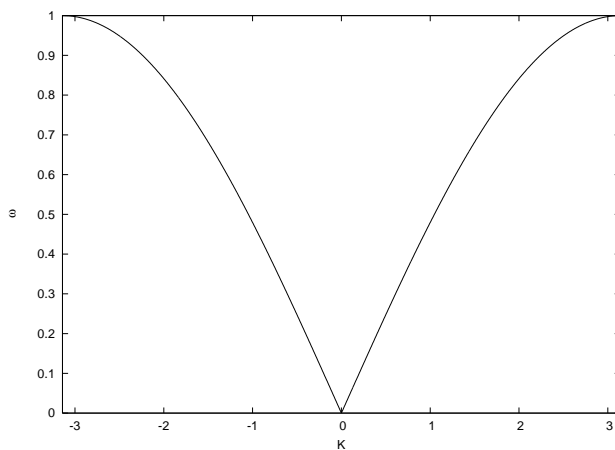
nihajnih načinov.

### Debye model gostote stanj

Na predavanjih smo za verigo mas izpeljali disperzijsko zvezo

$$\omega(K) = \sqrt{\frac{4k}{m}} \sin\left(\frac{|K|a}{2}\right) \approx \frac{\omega_0 a}{2} |K| = v|K|, \quad (6)$$

kjer je  $v$  grupna hitrost. Pri tem smo v aproksimaciji upoštevali  $|K|a \ll 1$  in  $\omega_0 = \sqrt{4k/m}$ . Funkcijo  $\omega(K)$  prikazuje Slika 1.



Slika 1: Disperzijska zveza za verigo mas. Vzeli smo  $\omega_0 = a = 1$ . Pri majhnih  $K$  velja linearna zveza.

Gostoto stanj zapišemo kot

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega}. \quad (7)$$

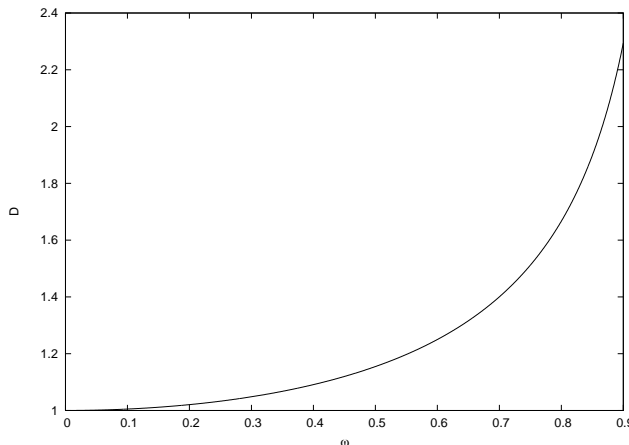
Če  $dN$  izrazimo iz (5) in  $d\omega$  iz disperzijske zveze (6), dobimo

$$D(\omega) = \frac{2L}{\pi a \omega_0 \cos\left(\frac{|K|a}{2}\right)} = \frac{2L}{\pi a \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}} \approx \frac{2L}{\pi a \omega_0} = \frac{L}{\pi v}. \quad (8)$$

Na prehodu drugega enačaja smo uporabili

$$\frac{\omega}{\omega_0} = \sin\left(\frac{|K|a}{2}\right) \quad \rightarrow \quad \cos\left(\frac{|K|a}{2}\right) = \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2}.$$

Na koncu smo gostoto stanj zapisali v limiti  $\omega/\omega_0 \rightarrow 0$ . Odvisnost prikazuje Slika 2.



Slika 2: Gostota stanj za verigo mas. Vzeli smo  $2L/\pi a = \omega_0 = 1$ . Pri majhnih  $\omega$  velja  $D = L/\pi v$ .

Z znano gostoto stanj  $D(\omega)$  lahko zapišemo notranjo energijo sistema kot

$$U = \int_0^{\omega_0} D(\omega) \left( \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega d\omega. \quad (9)$$

Zasedenost stanj harmonskih oscilatorjev smo opisali z Bose - Einsteinovo statistiko. Pri tem se spleča energijsko skalo premakniti tako, da  $1/2$  v oklepaju odpade, zato je v nadaljevanju več ne bomo pisali. Toplotno kapaciteto izračunamo kot

$$C_V = \left( \frac{dU}{dT} \right)_V. \quad (10)$$

Ko vstavimo gostoto stanj v limiti  $\omega/\omega_0 \rightarrow 0$ , sledi

$$U = \frac{L(k_B T)^2}{\pi \hbar v} \int_0^{x_0} \frac{x}{\exp x - 1} dx, \quad (11)$$

$$C_V = \frac{Lk_B^2 T}{\pi \hbar v} \int_0^{x_0} \frac{x^2 \exp x}{(\exp x - 1)^2} dx. \quad (12)$$

Pri tem smo vpeljali  $x = \hbar\omega/k_B T$  in  $x_0 = \hbar\omega_0/k_B T$ . Pri nizkih temperaturah  $x_0 \gg 1$  lahko zgornjo integralsko mejo potegnemo v neskončnost in dobimo

$$U = \frac{L(k_B T)^2}{\pi \hbar v} \frac{\pi^2}{6} \propto T^2, \quad (13)$$

$$C_V = \frac{Lk_B^2 T}{\pi \hbar v} \frac{\pi^2}{3} \propto T. \quad (14)$$

Pri visokih temperaturah  $x \ll 1$  z razvojem eksponentnih členov v obeh integrandih sledi *Dulong - Petitova limita*

$$U = \frac{L(k_B T)^2}{\pi \hbar v} x_0 = N k_B T, \quad (15)$$

$$C_V = \frac{L k_B^2 T}{\pi \hbar v} x_0 = N k_B. \quad (16)$$

Na zadnjem enačaju smo vstavili  $x_0$ , izrazili  $\omega_0$  s  $K$  iz disperzijske zveze (6),  $K$  pa zapisali s številom stanj (5).

### Einsteinov model gostote stanj

V tem modelu predpostavimo, da  $N$  oscilatorjev niha s frekvenco  $\omega_0$ . Potem je gostota stanj enaka

$$D(\omega) = N \delta(\omega - \omega_0). \quad (17)$$

Notranja energija takega sistema se zapiše kot

$$U = N \langle n \rangle \hbar \omega_0 = \frac{N \hbar \omega_0}{\exp(\hbar \omega_0 / k_B T) - 1}. \quad (18)$$

Z odvajanjem po temperaturi dobimo toplotno kapaciteto

$$C_V = N k_B x_0^2 \frac{\exp x_0}{(\exp x_0 - 1)^2}. \quad (19)$$

Pri visokih temperaturah  $x_0 \rightarrow 0$  gre toplotna kapaciteta proti  $N k_B$ . Pri nizkih temperaturah  $x_0 \rightarrow \infty$  je toplotna kapaciteta sorazmerna z  $\exp(-x_0)$ , kar je v nasprotju z eksperimentalnimi rezultati. Nizkotemperaturno limito pravilno opiše Debyeov model.



## Grüneisenov parameter

Jernej Kavčič

19.3.2008

### 1 Definicija Grüneisenovega parametra

Poglejmo najprej, kaj sploh je Grüneisenov parameter. Koeficient temperaturnega raztezka lahko zapišem kot

$$\alpha = \frac{1}{L} \left( \frac{\partial L}{\partial T} \right)_p,$$

pri čemer se zavedam, da računam v 1D, zato volumen  $V$  povsod nadomestim z dolžino  $L$ . Izračunati moram torej  $\left(\frac{\partial L}{\partial T}\right)_p$ , zato se poslužim sledečega trika:

$$\left( \frac{\partial L}{\partial T} \right)_p = - \frac{\left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_L}{\left( \frac{\partial p}{\partial L} \right)_T} \quad (1)$$

Elastnični modul  $E$  smo definirali kot

$$\left( \frac{\partial p}{\partial L} \right)_T = -EL,$$

torej se (1) zapiše kot

$$\left( \frac{\partial L}{\partial T} \right)_p = -\frac{1}{EL} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_L \quad (2)$$

Poiskati je torej treba  $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_L$ . Spomnim se termodinamike in proste energije  $F$ :

$$F = U - TS$$

$$dF = dU - dTS - TdS$$

$$dU = -pdL + TdS$$

$$dF = -pdL - SdT$$

$$p = -\left( \frac{\partial F}{\partial L} \right)_T$$

$$\left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_L = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_L$$

$$F = U - T \int_0^T \frac{dT'}{T'} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_L$$

Energijo  $U$  lahko zapišem kot člen brez fononov + prispevek fononov:

$$U = U^{eq} + \frac{1}{2} \sum_k \hbar\omega_k + \sum_k \hbar\omega_k n_k \quad (3)$$

$$n_k = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_k} - 1}$$

V (3) ostane le 3. člen, saj je samo ta odvisen od  $T$  in zato edini preživi odvajanje po  $T$ . Tako dobim iskani odvod:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_L = \sum_k -\frac{\partial \hbar \omega_k}{\partial L} \frac{\partial n_k}{\partial T}$$

Velja še:

$$c_v = \sum_k \frac{\hbar \omega_k}{L} + \frac{\partial}{\partial T} n_k \quad (4)$$

Koeficient temperaturnega raztezka  $\alpha$  je torej

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{LE} \sum_k -\frac{\partial \hbar \omega_k}{\partial L} \frac{\partial n_k}{\partial T} \\ &= \frac{1}{LE} \sum_k -\frac{\partial \hbar \omega_k}{\partial L} \frac{L}{\hbar \omega_k} \frac{\hbar \omega_k}{L} \frac{\partial n_k}{\partial T} \\ &= \frac{1}{LE} \sum_k \gamma_k c_{vk}, \end{aligned}$$

kjer smo vpeljali Grüneisenov parameter kot

$$\gamma = \sum_k -\frac{L}{\omega_k} \frac{\partial \omega_k}{\partial L}. \quad (5)$$

## 2 Grüneisenov parameter - upoštevam le najbližja soseda (Ashcroft, stran 508, problem 3)

Izračunaj  $\gamma$  za 1-D verigo atomov z dolžino  $L = Na$ , kjer je  $N$  število atomov, ki so razmaknjeni za  $a$ . Atomi delujejo drug na drugega s potencialom  $\phi(r)$ .

Najprej moram izračunati  $\omega$ .

$$T = \frac{m}{2} \sum_n \dot{u}_n^2$$

$$V = \sum_n \phi(u_{n+1} - u_n) = \sum_n \phi(a) + \phi'(a)(u_{n+1} - u_n) + \phi''(a)(u_{n+1} - u_n)^2 + \dots,$$

$$\phi'(a)(u_{n+1} - u_n) = 0, \text{ sicer nimam mirovne lege}$$

$$L = T - V$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_n} - \frac{\partial L}{\partial u_n}$$

$$0 = m\dot{u}_n + \phi''(a)(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \quad (6)$$

Enačbo (6) rešim z nastavkom:

$$u_n = Ae^{-i\omega t} e^{ikna}, \quad (7)$$

dobim:

$$\omega^2 m = \phi''(a)(e^{ika} + e^{-ika} - 2)$$

$$\omega^2 = \frac{4\phi''(a)}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \quad (8)$$

Odvod  $\frac{\partial \omega}{\partial L}$  izrazimo z odvodom  $\frac{\partial \omega^2}{\partial a}$ :

$$\frac{\partial \omega}{\partial L} = \frac{1}{2\omega N} \frac{\partial \omega^2}{\partial a}$$

$$\gamma_k = -\frac{a}{2\omega^2} \frac{\partial \omega^2}{\partial a}$$

Torej (upoštevam, da je produkt  $ka$  neodvisen od  $a$ ):

$$\frac{\partial \omega^2}{\partial a} = \frac{4\phi'''(a)}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \omega^2 \frac{\phi'''(a)}{\phi''(a)} \quad (9)$$

Grüneisenov parameter je - v primeru, da upoštevam le najbližje sosede - očitno neodvisen od  $k$ :

$$\gamma = \gamma_k = -\frac{a}{2} \frac{\phi'''(a)}{\phi''(a)}$$

### 3 Grüneisenov parameter - upoštevam 2 najbližja soseda

Pokaži, da je, v primeru, da upoštevaš še naslednja najbližja soseda, Grüneisenov parameter odvisen od valovnega vektorja.

V tem primeru lahko zapišem:

$$T = \frac{m}{2} \sum_n \dot{u}_n^2$$

$$V = \sum_n \phi(u_{n+1} - u_n) + \sum_n \phi(u_{n+2} - u_n) = \sum_n \phi(a) + \phi'(a)(u_{n+1} - u_n) + \phi''(a)(u_{n+1} - u_n)^2 + \dots$$

$$+ \sum_n \phi(2a) + \phi'(2a)(u_{n+2} - u_n) + \phi''(2a)(u_{n+2} - u_n)^2 + \dots,$$

$$\phi'(a)(u_{n+1} - u_n) = \phi'(2a)(u_{n+2} - u_n) = 0$$

$$L = T - V$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_n} - \frac{\partial L}{\partial u_n}$$

$$0 = m\dot{u}_n + \phi''(a)(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) + \phi''(2a)(2u_n - u_{n+2} - u_{n-2}) \quad (10)$$

Zopet uporabim nastavek (7) in dobim:

$$\omega^2 m = \phi''(a)(e^{ika} + e^{-ika} - 2) + \phi''(2a)(e^{2ika} + e^{-2ika} - 2)$$

$$\omega^2 = \frac{4\phi''(a)}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \frac{4\phi''(2a)}{m} \sin^2(ka)$$

$$\frac{\partial \omega^2}{\partial a} = \frac{4\phi'''(a)}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \frac{8\phi'''(2a)}{m} \sin^2(ka)$$

Opazim, da je v tem primeru  $\gamma_k$  res odvisen od valovnega vektorja in zato  $\gamma \neq \gamma_k$ .

### 4 Enostavnejša rešitev naloge 2

Nalogo Poglavlja 2 lahko rešim na enostavnejši način:

vem, da je v 3D:

$$\gamma = -\frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln V} \rightarrow \text{v 1 D: } \gamma = -\frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln L} = -\frac{L}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial L}$$

Dolžina verige je  $L = Na$ , potencial pa je odvisen le od razdalje:  $\phi(\vec{r}) = \phi(r)$ . Velja:

$$\kappa = \frac{\partial^2 \phi(a)}{\partial a^2} = \phi''$$

$$\omega \propto \sqrt{\kappa}$$

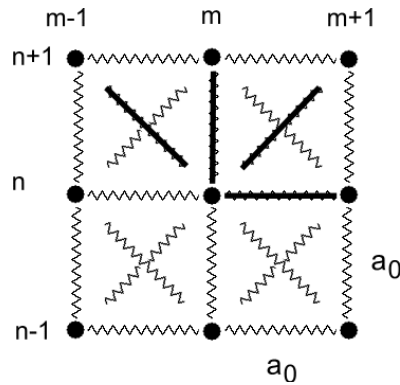
$$\begin{aligned}L &= Na, \\dL &= d(Na) = adN + Nda = Nda, \\ \gamma &= -\frac{L}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial L} = -\frac{Na}{\sqrt{\phi''}} \frac{\partial(\sqrt{\phi''(a)})}{N \partial L} = -\frac{a}{2} \frac{\phi'''(a)}{\phi''(a)}.\end{aligned}$$

# Disperzija fononov na dvodimenzionalni mreži

Martin Strojnik

FMF, vaje iz fizike trdne snovi, 26.3.2008

Predstavimo kristal kot dvodimenzionalno mrežo atomov, kjer je vsak atom povezan z vzetmi z osmimi sosednjimi atomi.



Z  $m$  in  $n$  označimo koordinate v  $x$  in  $y$  smeri.  $\mathbf{R}_{mn}$  naj bodo Bravaisovi vektorji do mrežnih koordinat,  $\mathbf{u}_{mn}$  pa odmiki atomov iz teh 'ravnovesnih' leg. Tako zapišemo koordinato atoma  $\mathbf{r}_{mn} = \mathbf{R}_{mn} + \mathbf{u}_{mn}$ . Zapišimo posebej kinetični in potencialni del energije (kjer predstavlja  $r = |\mathbf{r}|$ )

$$T = \frac{M}{2} \sum_{m,n} \dot{\mathbf{r}}_{mn}^2 = \frac{M}{2} \sum_{mn} \dot{\mathbf{u}}_{mn}^2, \quad (1)$$

$$V = \frac{K}{2} \sum_{\substack{m,n \\ \Delta m, \Delta n}} (|\mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{m+\Delta m, n+\Delta n}| - R_{\Delta m, \Delta n})^2. \quad (2)$$

Pri potencialnem delu pri vsakem atomu seštevamo še po njegovih neposrednih sosedih. Kjer pa zato, da upoštevamo vse vezi samo enkrat, seštevamo zgolj po sosedih

$$(\Delta m, \Delta n) = (-1, 1), (0, 1), (1, 0), (1, 1)$$

$$\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n} = \begin{bmatrix} \Delta m \\ \Delta n \end{bmatrix} a_0$$

Najprej nekoliko preuredimo izraz za  $V$  :

$$\begin{aligned}
|\mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{m+\Delta m, n+\Delta n}| &= |\mathbf{R}_{mn} + \mathbf{u}_{mn} - \mathbf{R}_{m+\Delta m, n+\Delta n} - \mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n}| \\
&= |-\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n} + (\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n})| \\
&= \sqrt{R_{\Delta m, \Delta n}^2 - 2\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n} \cdot (\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n}) + (\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n})^2} \\
&\approx R_{\Delta m, \Delta n} \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n} \cdot (\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n})}{R_{\Delta m, \Delta n}^2}} \\
&\approx R_{\Delta m, \Delta n} \left( 1 - \frac{\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n} \cdot (\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n})}{R_{\Delta m, \Delta n}^2} \right)
\end{aligned}$$

Sedaj lahko prepišemo potencialni del kot

$$\begin{aligned}
V &= \frac{K}{2} \sum_{\substack{m, n \\ \Delta m, \Delta n}} \left( -\frac{\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n} \cdot (\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n})}{R_{\Delta m, \Delta n}} \right)^2 \\
&= \frac{K}{2} \sum_{\substack{m, n \\ \Delta m, \Delta n}} (\mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \cdot (\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n}))^2 \quad ; \quad \mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} = \frac{\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n}}{R_{\Delta m, \Delta n}}
\end{aligned} \tag{3}$$

Imamo vse komponente Lagrangeove funkcije  $L = T - V$ , in lahko zapišemo Eluer-Lagrangeov sistem

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{mn}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{u}}_{mn}} = 0,$$

kjer za  $\mathbf{u}_{mn}$  vzamemo nastavek

$$\mathbf{u}_{mn} = \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{mn}} e^{-i\omega t}. \tag{4}$$

Prvi del je tako enak

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{mn}} &= -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{u}_{mn}} = -K \sum_{\Delta m, \Delta n} (\mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \cdot (-\mathbf{u}_{m+\Delta m, n+\Delta n} + 2\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m-\Delta m, n-\Delta n})) \mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \\
&= -K \sum_{\Delta m, \Delta n} (-e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{m+\Delta m, n+\Delta n}} + 2e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{mn}} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{m-\Delta m, n-\Delta n}}) e^{-i\omega t} (\mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})) \mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \\
&= -K \sum_{\Delta m, \Delta n} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{mn}} e^{-i\omega t} (2 - (e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n}} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{-\Delta m, -\Delta n}})) (\mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})) \mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \\
&= -2K \sum_{\Delta m, \Delta n} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{mn}} e^{-i\omega t} (1 - \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n})) (\mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})) \mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \\
&= -4K \sum_{\Delta m, \Delta n} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{mn}} e^{-i\omega t} \sin^2\left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta m, \Delta n}}{2}\right) (\mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})) \mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n}
\end{aligned} \tag{5}$$

drugi pa

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{u}}_{mn}} = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{u}}_{mn}} = M\ddot{\mathbf{u}}_{mn} = -M\omega^2 \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{mn}} e^{-i\omega t} \tag{6}$$

Sestavimo ju v gibalno enačbo, pokrajšamo eksponentne valovne dele in dobimo

$$4K \sum_{\Delta m, \Delta n} \sin^2 \left( \frac{\mathbf{kR}_{\Delta m, \Delta n}}{2} \right) (\mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})) \mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} - M\omega^2 \mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0$$

$$4\omega_0^2 \sum_{\Delta m, \Delta n} \sin^2 \left( \frac{\mathbf{kR}_{\Delta m, \Delta n}}{2} \right) (\mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})) \mathbf{e}_{\Delta m, \Delta n} - \omega^2 \mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0 \quad ; \quad \frac{K}{M} = \omega_0^2 \quad (7)$$

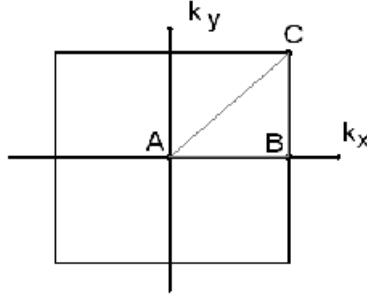
oz. v matrični obliki  $\underline{E}\mathbf{A} = 0$ , kjer je  $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \end{bmatrix}$ , ob upoštevanju relacije

$$(\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{A}) \hat{\mathbf{e}} = \begin{bmatrix} e_x e_x & e_y e_x \\ e_x e_y & e_y e_y \end{bmatrix} \mathbf{A}$$

pa dobimo matriko  $\underline{E}$ :

$$\begin{bmatrix} 2\omega_0^2 \left( \sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{-1,1}}{2} + 2 \sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{1,0}}{2} + \sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{1,1}}{2} \right) - \omega^2 & 2\omega_0^2 \left( -\sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{-1,1}}{2} + \sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{1,1}}{2} \right) \\ 2\omega_0^2 \left( -\sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{-1,1}}{2} + \sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{1,1}}{2} \right) & 2\omega_0^2 \left( \sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{-1,1}}{2} + 2 \sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{0,1}}{2} + \sin^2 \frac{\mathbf{kR}_{1,1}}{2} \right) - \omega^2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

Sedaj lahko izračunamo energijske pasove v prvi Brillouinovi coni po poti A(0,0)-B $\left(\frac{\pi}{a_0}, 0\right)$ -C $\left(\frac{\pi}{a_0}, \frac{\pi}{a_0}\right)$ -A(0,0):



1)  $k_x \in \left[0, \frac{\pi}{a_0}\right], k_y = 0$

Matrika  $E$  z lastnimi vrednostmi in vektorji je:

$$E = \begin{bmatrix} 8\omega_0^2 \sin^2 \frac{k_x a_0}{2} - \omega^2 & 0 \\ 0 & 4\omega_0^2 \sin^2 \frac{k_x a_0}{2} - \omega^2 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} \omega_1^2 &= 4\omega_0^2 \sin^2 \left( \frac{1}{2} k_x a_0 \right) \\ \omega_2^2 &= 8\omega_0^2 \sin^2 \left( \frac{1}{2} k_x a_0 \right) \end{aligned} \quad \begin{aligned} A_1 &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ A_2 &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

2)  $k_x = \frac{\pi}{a_0}, k_y \in \left[0, \frac{\pi}{a_0}\right]$

Matrika  $E$  z lastnimi vrednostmi in vektorji je:

$$E = \begin{bmatrix} 4\omega_0^2 \left( 1 + \cos^2 \left( \frac{k_y a_0}{2} \right) \right) - \omega^2 & 0 \\ 0 & 4\omega_0^2 - \omega^2 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} \omega_1^2 &= 4\omega_0^2 \\ \omega_2^2 &= 4\omega_0^2 \left( 1 + \cos^2 \left( \frac{1}{2} a_0 k_y \right) \right) \end{aligned} \quad \begin{aligned} A_1 &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ A_2 &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

3)  $k_x = k_y = k \in \left[0, \frac{\pi}{a_0}\right]$

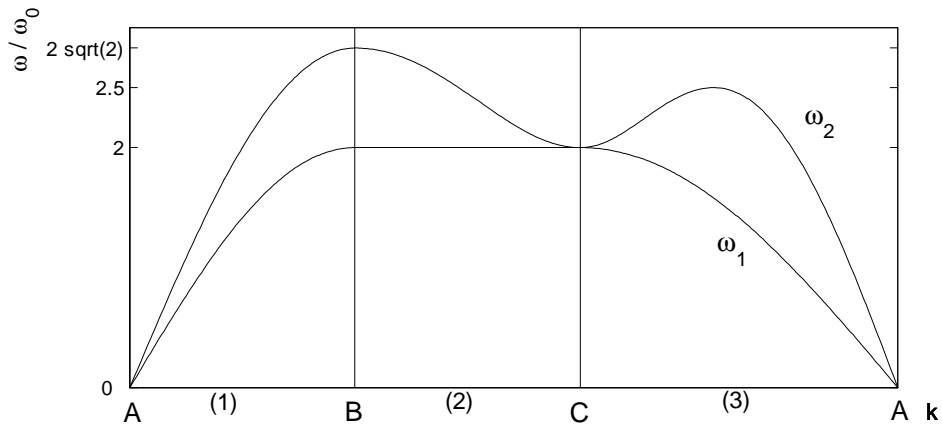
Matrika  $E$  z lastnimi vrednostmi in vektorji je:

$$E = \begin{bmatrix} 2\omega_0^2 \left(2 \sin^2 \frac{a_0 k}{2} + \sin^2 \frac{2a_0 k}{2}\right) - \omega^2 & 2\omega_0^2 \sin^2(a_0 k) \\ 2\omega_0^2 \sin^2(a_0 k) & 2\omega_0^2 \left(2 \sin^2 \frac{a_0 k}{2} + \sin^2 \frac{2a_0 k}{2}\right) - \omega^2 \end{bmatrix}$$

$$\omega_1^2 = 4\omega_0^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}ka_0\right) \quad A_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\omega_2^2 = 4\omega_0^2 \sin^2(ka_0) + 4\omega_0^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}ka_0\right) \quad A_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Disperzijska zveza po izbrani poti je narisana na spodnjem grafu, pri čemer  $\omega_1$  ustreza transverzalnemu,  $\omega_2$  pa longitudinalnemu nihanju atomov, glede na smer širitve vala.

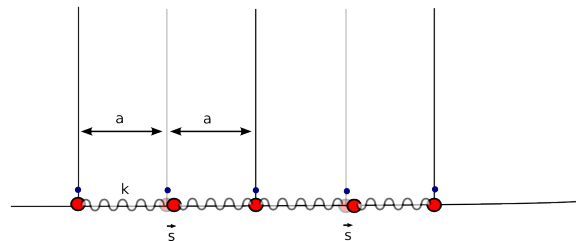




## Peierlsova nestabilnost

Jurij Kodre

### 1 Naloga



Slika 1: Predstavitev problema: v enakomernem 1D kristalu, kjer atome na razdalji  $a$  drži skupaj potencial  $\frac{1}{2}kx^2$  sode atome, premaknemo za majhen  $s$  iz ravnovesne lege in opazujemo, če pridemo tako do energetsko ugodnejše rešitve.

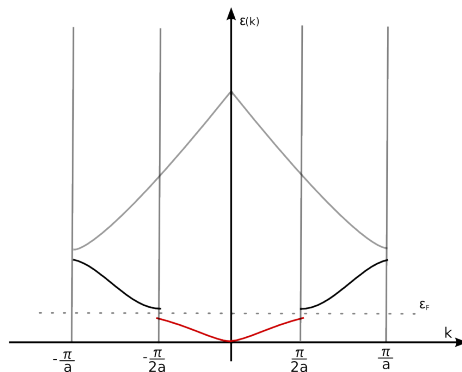
Enodimenzionalen kristal, atomi so razmaknjeni za razdaljo  $a$ , vsak ima elektron (slika ??). Ti elektroni so v Kroenig-Penneyjevem potencialu. Peierls nam zagotavlja, da je stanje, kjer je vsak drugi elektron izmaknjen iz ravnine, energijsko ugodnejše.

Pa pogledjmo kaj se zgodi, ko izmaknemo vsak drugi elektron za razdaljo  $s \ll a$  iz ravnovesne lege (slika 1):

- perioda potenciala se premakne z  $a$  na  $2a$  - zato se Brillouinovo območje zmanjša iz  $\frac{\pi}{a}$  na  $\frac{\pi}{2a}$ , kjer dobimo tudi novi gap zaradi špičastega potenciala

Kroenig-Penneyjev potencial zapišemo kot:

$$V_0(x) = \lambda \sum_n \delta(x - na)$$



Slika 2: Sprememba frekvenčnega območja zaradi premika atomov. Zaradi podvojene periode, se frekvenčno območje skrči na polovico, kjer dobimo tudi nov gap. Zanimala nas bo integracija spremembe energijske gostote po premiku, na področju, ki je označen rdeče.

ali po izmiku:

$$V(x) = \lambda \sum_n \delta(x - 2na) + \lambda \sum_n \delta(x - (2n + 1)a - s)$$

Koeficienti razvoja po ravnih valovih - potrebovali ga bomo kasneje:

$$\begin{aligned} V(x) &= \sum_n V_n e^{-i\frac{2\pi}{a}x} = \frac{1}{2a} \left[ \lambda + \lambda e^{-i\frac{2\pi}{a}(a+s)} \right] = \\ &= \frac{\lambda}{2a} \left[ 1 - e^{-i\pi\frac{s}{a}} \right] \end{aligned}$$

Pogledamo razvoj do prvega reda:

$$V_k \approx \frac{\lambda}{2a} \left[ 1 - 1 + i\pi\frac{s}{a} \right] = \frac{\lambda}{2a} i\pi\frac{s}{a} = i\pi\lambda\frac{s}{2a^2}$$

in

$$|V_k| = \frac{\pi\lambda s}{2a^2}$$

Spremembo energije zaradi izmika zapišemo kot:

$$\Delta E(s) = \frac{1}{2}ks^2 + \Delta_{el}(s)$$

Potrebovali bomo še gostoto energije  $\epsilon$ , za katero smo izpeljali prek perturbacijske energije (v približku prostih elektronov):

$$\epsilon = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2}{4} + |V_k|^2}$$

V našem primeru je

$$\epsilon_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{2a} + q \right)^2 \quad (1)$$

$$\epsilon_2 = \frac{\hbar^2 \left( \frac{2\pi}{2a} - k \right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{2a} - q \right)^2 \quad (2)$$

$$\epsilon_1 + \epsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi^2}{2a^2} + 2q^2 \right) \quad (3)$$

$$\epsilon_1 - \epsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi q}{a} + 2q^2 \right)^2 \quad (4)$$

ker je  $k = \frac{\pi}{2a} + q$  in  $\frac{2\pi}{2a} - k = \frac{\pi}{2a} - q$ .

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{4m} \left( \frac{\pi^2}{2a^2} + 2q^2 \right) \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{4m} \left( \frac{2\pi q}{a} \right)^2 + |V_k|^2}$$

Razliko energijskih gostot dobimo zaradi potenciala ko je:

$$\Delta\epsilon(k) = \pm \left[ \sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^2 q^2}{ma^2} + |V_k|^2} - \sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^2 q^2}{ma^2}} \right]$$

Razliko energij dobimo z integracijo energijske gostote po spektru (da nastane gap, se prilagodi celoten spekter, če ne zadeva ne bi bila več zvezna), kjer dobimo še faktor dva zaradi spinskih stanj (integracijo pa si še olajšamo z upoštevanjem simetrije po  $\pm k$ ):

$$\Delta E_{el} = 2 \frac{L}{2\pi} 2 \int_0^{\frac{\pi}{2a}} sq \Delta\epsilon(q) = \frac{4L}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2a}} \left( \sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^2 q^2}{ma^2}} - \sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^2 q^2}{ma^2} + |V_k|^2} \right)$$

$$\Delta E_{el} = \frac{2L}{\pi} |V_k| \int_0^{\frac{\pi}{2a}} \left( \sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^2 q^2}{ma^2 |V_k|^2}} - \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 \pi^2 q^2}{ma |V_k|^2}} \right) dq$$

Zaradi večje preglednosti naredimo substitucijo  $\frac{1}{b^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2 |V_k|^2}$ ,  $c = \frac{2L}{\pi} |V_k|$ :

$$\Delta E_{el} = c \int_0^{\frac{\pi}{2a}} \left( \sqrt{\frac{q^2}{b^2}} - \sqrt{1 + \frac{q^2}{b^2}} \right) dq$$

Integriramo (prvi del je enostaven, za drugega pa pokukamo v priročnik ali Mathematico):

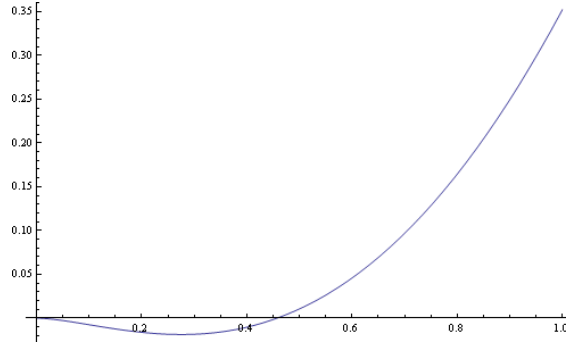
$$\Delta E_{el} = \frac{1}{2}c \left( \sqrt{\frac{1}{b^2} \frac{\pi^2}{4a^2}} - \frac{\pi}{2a} \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{4a^2b^2}} - b \operatorname{arcsinh} \left( \frac{\pi}{2ab} \right) \right)$$

Po  $\operatorname{arcsinh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 + 1})$ :

$$\Delta E_{el} = \frac{1}{2}c \left( \sqrt{\frac{1}{b^2} \frac{\pi^2}{4a^2}} - \frac{\pi}{2a} \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{4a^2b^2}} - b \ln \left( \frac{\pi}{2ab} + \sqrt{\frac{\pi^2}{4a^2b^2} + 1} \right) \right)$$

$$\Delta E_{el} = \frac{1}{2} \frac{\lambda s L}{a^2} \left( \sqrt{\frac{4\hbar^2 a^4}{\lambda^2 s^2 m} \frac{\pi^2}{4a^2}} - \frac{\pi}{2a} \sqrt{1 + \frac{\pi^2 \hbar^2 a^2}{\lambda^2 s^2 m}} - \frac{\lambda s \sqrt{m}}{2\hbar a^2} \ln \left( \frac{\pi \hbar a}{\lambda s \sqrt{m}} + \sqrt{\frac{\pi^2 \hbar^2 a^2}{\lambda^2 s^2 m} + 1} \right) \right)$$

Pri majhnih členih se  $s$ -ji pokrajšajo v konstantno odvisnost okoli  $s = 0$  ( $\sqrt{1+x^2} \approx x$ ), zadnji člen pa je potem odvisen od  $s^2 \ln(s)$ . Sklepamo lahko, da se odvisnost pri večjih  $s$  lahko obrne, saj začne prevladovati 1 in se koren razvije drugače. Boljši pregled odvisnosti nam pokaže spodnji graf razlike med kvadratnim členom in  $\Delta$  členom (slika 3).



Slika 3: Prikaz energijske odvisnosti elektronov pri Peierlsovi nestabilnosti - na abscisi imamo odmik, na ordinati pa spremembo energije. Seveda stvari niso v pravih enotah, vendar je graf v pravih enotah le primerno raztegnjen.

## 2 V nadaljne razmišljanje

### 2.1 2D, 3D Peierlsova nestabilnost

Po kratki razpravi nam je asistent dr. Rejec zagotovil, da tega pojava v večih dimenzijah ni.

### 2.2 Novo stabilno stanje

Zanimivo bi bilo izračunati tudi novo stabilno stanje, tako da bi izračunali minimum v enotah  $\frac{\hbar}{a}$ .