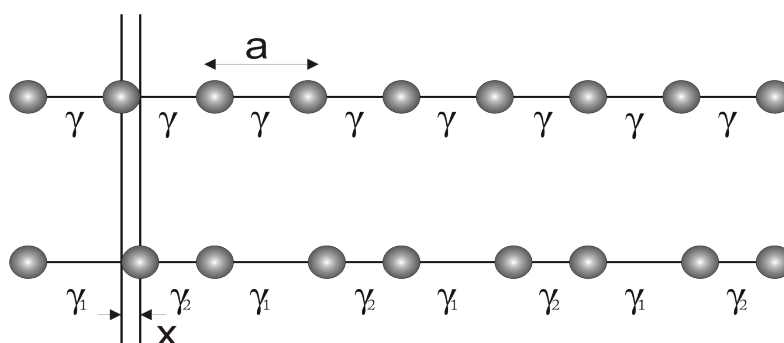


Trdna snov
 Energijska reža v približku tesne vezu
 Marko Franinović
 Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani
 (23. maj 2012)

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:

$$\epsilon(k) = 2\gamma \cos(ka) \quad (1)$$

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:

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

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

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

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

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

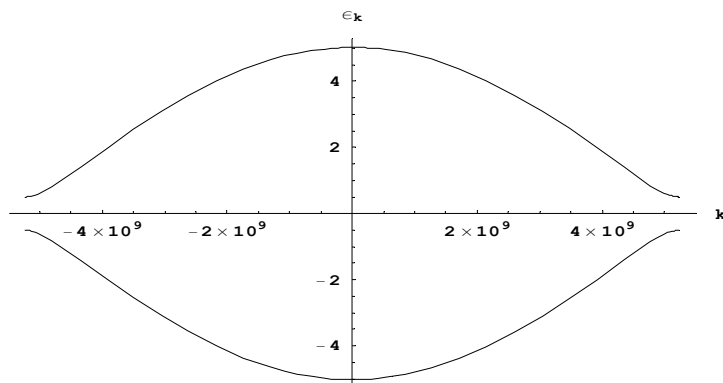
Energijska reža se pojavi pri na robu Briullove cone pri $\pm\pi/2a$. Pti tej vrednosti k lahko iz enčbe (4)

izračunamo energijsko režo ϵ_g :

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

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