Nestabilnost pri k_F

Mihaly, naloga 3.8

Nina Rogelj

1 Naloga

Imamo enodimenzionalen siste4m v šibkem periodičnem potencialu oblike $V(x) = V_0 cos(2k_F x)$. Izračunaj $E(k)$ za najnižji energijski pas in določi celotno energijo sistema pri T=0K kot funkcijo V_0.

2 Rešitev

Za valovno funkcijo

$$\psi(x) = C(k)e^{ikx} + C(k-G)e^{i(k-G)x}$$

rešujemo centralno enačbo

$$(\lambda_k - \epsilon)C(k) + UC(k-G) = 0$$

$$(\lambda_{k-G} - \epsilon)C(k-G) + UC(k) = 0,$$

kjer je $\lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Za obstoj rešitve sistema mora biti determinanta enaka 0. Iz tega pogoja dobimo enačbo za energijo

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

$$E^{\pm} = \frac{1}{2}(\lambda_{k-G} + \lambda_k) \pm \sqrt{(\frac{1}{4}(\lambda_{k-G} - \lambda_k)^2 + U_G^2}.$$

Za najnižji pas vzamemo v enačbi minus. Za periodični potencial lahko izračunamo U_G

$$U_G = \frac{1}{L}\int_0^L V(x)cos(Gx)dx = \frac{V_0}{2},$$

kjer je $G = 2k_F$ in dobimo vrzel v energiji, ki je vidna na sliki 1.

Za lažji pregled zapišemo $E^- = E^{(0)} - \Delta E$, kjer je $E^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ in

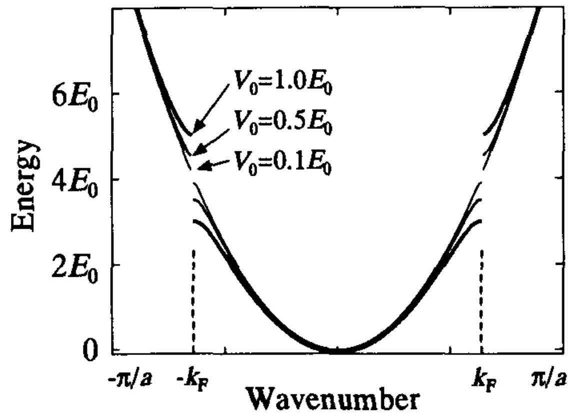
$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2}\{(k-q)^2 - k^2 - \sqrt{[k^2 - (k-q)^2]^2 + 4V_0^2(\frac{2m}{\hbar^2})^2}\}$$

Definiramo novo spremenljivko $\acute{k} = \frac{1}{2}q - k$ in prepišemo enačbo v

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m}\{q\acute{k} - \sqrt{(q\acute{k})^2 + V_0^2(\frac{2m}{\hbar^2})^2}\}.$$

Celotna energija pri $T = 0K$

$$E_{tot} = 2\int_0^{q/2} \frac{dk}{2\pi/L}(E^0 - \Delta E) = E_{tot}^0 - \Delta E_{tot}.$$



Slika 1: E(k) za periodični potencial na 1D sistemu. $E_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2}$

Integriramo le po pozitivnih k, zato pred integralom dodamo 2, da zajamemo še negativne k. To lahko naredimo, ker je potencial simetričen.

$$E^0_{tot} = \frac{L}{\pi}\int_0^{q/2} \frac{\hbar^2}{2m} k^2 dk = \frac{L\hbar^2 q^3}{24\pi m}$$

je energija, če ne bi bilo potenciala.

$$\Delta E_{tot} = \frac{L}{\pi}\int_0^{q/2} \frac{\hbar^2}{2m}\{q\acute{k} - \sqrt{(q\acute{k})^2 + V_0^2(\frac{2m}{\hbar^2})^2}\}d\acute{k}.$$

Pri integraciji upoštevamo, da je potencial šibek, $V_0 << \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{q}{2})^2$ in dobimo

$$\Delta E_{tot} = \frac{L}{\pi}\frac{V_0^2 m}{\hbar^2 q^2} log(\frac{V_0}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m}}).$$

Opazimo, da je popravek k energiji zaradi potenciala, $\Delta E_{tot} \sim V_0^2 log V_0$. Tako je pri majhnih V_0 popravek negativen, $\Delta E_{tot} < 0$. To pomeni, da se celotna energija elektronov zmanjša pri šibkem periodičnem potencialu, ker energija zasedenih stanj postane nižja, energija nezasedenih stanj pa naraste. Na koncu efekt privede do nestabilnosti v enodimenzionalnem sistemu elektronov.