Gostota energijskih stanj za 2-D kvadratno mrežo

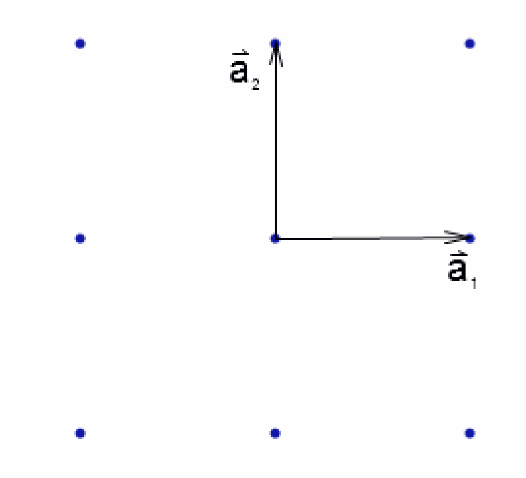
17. 12. 2007

Petar Milošević

Naloga : Analitično izračunaj gostoto stanj za 2-D kvadratno mrežo za energije $\pm 4t$ in 0. Uporabi približek tesne veze.

Za začetek določimo recipročno mrežo in izračunamo primitivne vektorje s pomočjo katerih določimo Wigner-Seitzovo celico.

Vektorji primitivne mreže :



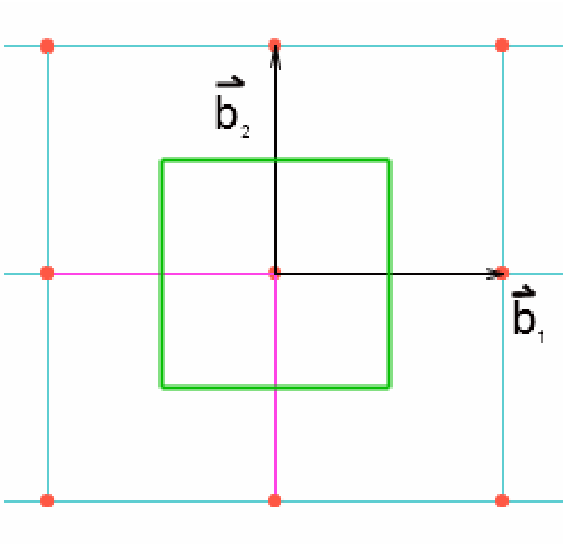
$$\vec{a}_1 = a(1,0)$$

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

Iz tega sledijo vektorji primitivne mreže :

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

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



Wigner-Seitzova celica je označena z zelenimi robovi.

Sedaj lahko v približku tesne vezi analitično izračunamo gostoto energijskih stanj. Energija v približku tesne vezi je enaka :

$$\varepsilon = \varepsilon_n - t\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{K}\vec{R}} = \varepsilon_n - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$

Pri naših izračunih bomo prvi člen (prekrivalni integral orbital) zanemarili, upoštevali bomo samo drugi člen, ki je odvisen od vektorja $\vec{k}$, po kateremu bomo razvili energijo v ekstremih (E = $\pm 4t$) in pri energiji nič.

Za začezek obravnavajmo ekstreme.

$$\vec{k} \approx (0,0) \approx (\delta k_x, \delta k_y)$$

Razvoj energije za dani vektor nam da sledeče :

$$\varepsilon(\vec{k}) = -2t(\cos\delta k_x a + \cos\delta k_y a) \approx -2t(1 - \tfrac{1}{2}(\delta k_x a)^2 + 1 - \tfrac{1}{2}(\delta k_y a)^2) = -4t + ta^2(\delta k_x{}^2 + \delta k_y{}^2) = -4t + A\delta k^2$$

$$\lim_{\delta k_x, \delta k_y \to 0} \varepsilon(\vec{k}) = -4t$$

Za dani valovni vektor, dobimo ekstrem in sicer minimum energije. Sedaj aproksimiramo za drugi valovni vektor, kjer predpostavljamo drug ekstrem – maksimum.
Te točke predpostavljamo v središčih primitivne mreže, oziroma v ogliščih Wigner-Seitzove celice.

$$\vec{k} = (\pm\tfrac{\pi}{a}, \tfrac{\pi}{a}) \wedge (\tfrac{\pi}{a}, \pm\tfrac{\pi}{a}) \approx (\pm\tfrac{\pi}{a} + \delta k_x, \tfrac{\pi}{a} + \delta k_y) \wedge (\tfrac{\pi}{a} + \delta k_x, \pm\tfrac{\pi}{a} + \delta k_y)$$

Zaradi sodosti kosinusne funkcije je v vseh štirih točkah rezultat enak.

$$\varepsilon(\vec{k}) = 4t - ta^2(\delta k_x{}^2 + \delta k_y{}^2) = 4t - A(\delta k^{\,2})$$

$$\lim_{\delta k_x, \delta k_y \to 0} \varepsilon(\vec{k}) = 4t$$

V obeh ekstremih dobimo enačbo paraboloida premaknjeno za neko konstanto ($\pm 4t$), razlika je le v orientaciji. Pri sedlu v centru Seitzove celice je parabola obrnjena navzgor (energija od minimuna narašča), pri središčih sosednjih Seizovih celic pa je parabola obrnjena navzdol (energija od maximuma pada).

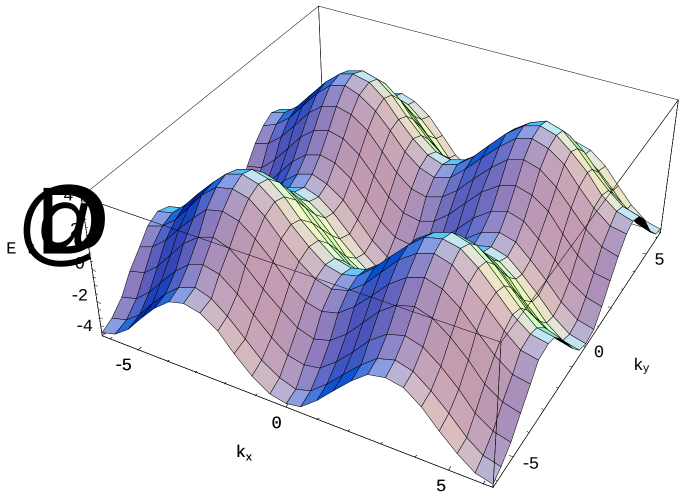
Sedaj še pogledamo kakšna je energija v središčih stranic Wigner-Seitzove celice.
Oglišča so določena s sledečimi vektorji:

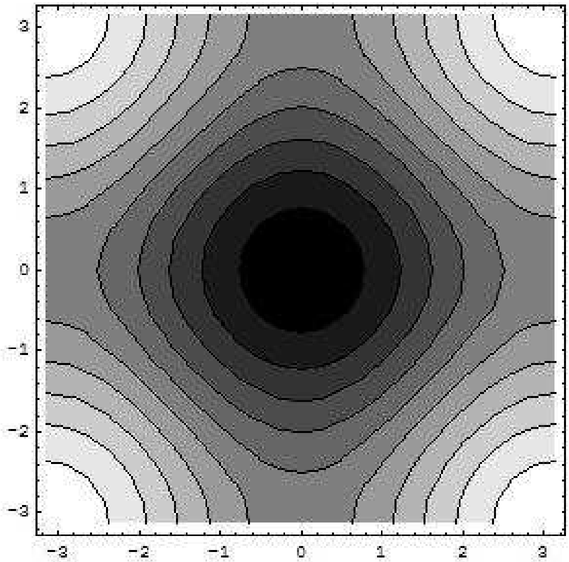
$$\vec{k} = \pm(\tfrac{\pi}{a}, 0) \wedge \pm(0, \tfrac{\pi}{a}) \approx \pm(\tfrac{\pi}{a} + \delta k_x, \delta k_y) \wedge \pm(\delta k_x, \tfrac{\pi}{a} + \delta k_y)$$

Rezultati za energijo bodo za dane vektorje podobne oblike, energija bo limitirala proti 0.

$$\varepsilon(\vec{k} = (\tfrac{\pi}{a} + \delta k_x, \delta k_y)) = -ta^2(\delta k_y{}^2 - \delta k_x{}^2) \Rightarrow \lim_{\delta k_x, \delta k_y \to 0} \varepsilon(\vec{k}) = 0$$

Zgornja enačba opisuje hiperboloide in sicer 4 različne za 4 različne vektorje. Bolj ko gremo proti središčem stranic Seitz-Wignerjeve celice, bolj postajajo energijske izohipse hiperbolične. Bolj ko gremo proti središču same celice, pa postaja energijska izohipsa pravilen krog.





S tem smo zaključili analizo energij ob različnih mrežnih točkah in tako umestili energijske pasove, za katero bomo sedaj računali gostoto enegrijskih stanj.
Kot prvo bomo izračunali gostoto stanj za energijo E=0. Kot smo povedali, ta nastopa na obodu (robovih) Wigner-Sietzove celice.

$$g(\varepsilon(\vec{k}=\pm(\tfrac{\pi}{a},0)\wedge\pm(0,\tfrac{\pi}{a})))=A\int_0^{\frac{\pi}{2a}} dk_x \int_{\sqrt{\frac{\varepsilon}{ta^2}+\delta k_x{}^2}}^{\sqrt{\frac{\varepsilon+\Delta\varepsilon}{ta^2}+\delta k_x{}^2}} dk_y \cong A\int_0^{\frac{\pi}{2a}} dk_x\Big(\frac{\Delta\varepsilon}{2ta^2\sqrt{\frac{\varepsilon}{ta^2}+\delta k_x{}^2}}\Big)=A\frac{\Delta\varepsilon}{2ta^2}\ln(\delta k_x+\sqrt{\delta k_x{}^2+\tfrac{\varepsilon}{ta^2}})\Big|_0^{\frac{\pi}{2a}}=$$

$$=A\frac{\Delta\varepsilon}{ta^2}\left[\ln(\tfrac{\pi}{2a^2}+\sqrt{\tfrac{\pi^2}{4a^2}+\tfrac{\varepsilon}{ta^2}})+\tfrac{1}{2}\ln(ta^2)-\tfrac{1}{2}\ln(\varepsilon)\right]=C.-\tfrac{1}{2}\ln(\varepsilon)$$

$$\Rightarrow g(\varepsilon)\propto -\ln(\varepsilon)$$

Analitični izračun nam pokaže, da se s približevanjem energiji E=0 gostota stanj logaritemsko približuje osi y. Začetno konstanto smo zanemarili, ta sicer vpliva samo na to, da graf nekoliko dvigne za določeno konstanto, kar rezultira na to da ne preidemo v negativni del, saj gostota stanj ne more biti negativno število.

Sedaj pogledamo še gostoto stanj v ekstremih. Kot smo zgoraj videli so energijske izohipse ob sedlih kar krožnice, zato lahko v tem primeru uvedemo polarne koordinate.

$$g(\varepsilon(\vec{k} = (0,0) \wedge \pm(\tfrac{\pi}{a}, \tfrac{\pi}{a}))) = 2\frac{S_0 2\pi k dk}{(2\pi)^2 d\varepsilon} = \frac{S_0 2\pi k}{(2\pi)^2 2ta^2 k} = \frac{S_0}{2\pi t a^2} \neq f(\varepsilon),$$

kjer smo privzeli da je $\left|\frac{d\varepsilon}{dk}\right| = 2ta^2 k$. Kot je razvidno, gostota stanj pri energiji ($E = \pm 4t$) ni odvisna od energije in je neka konstanta.

Graf za gostoto stanj :