Fizika trdne snovi
2007/08

Gostota stanj za fcc v približku tesne vezi

Vid Agrež

December 29, 2007

V približku tesne vezi za ploskovno centrirano kubično mrežo numerično določi gostoto stanj in preveri korensko odvisnost za male energije.

Prvo izpeljimo izraz za gosoto stanj v približku tesne vezi. Celotna gostota stanj je enaka vsoti gostote stanj po posameznih točkah Brillouinove cone:

$$g(\epsilon) = \sum_n g_n(\epsilon) \tag{1}$$

$$g_n(\epsilon) = \sum_{\vec{k},s} \delta(\epsilon - \epsilon_n(\vec{k})) = 2\sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_n(\vec{k})) \tag{2}$$

Z upoštevanjem $\sum_{\vec{k}} = \int_{1BC} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}$ preoblikujemo v:

$$g_n(\epsilon) = 2\int_{1BC} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\, \delta(\epsilon - \epsilon_n(\vec{k})) \tag{3}$$

Z razvojem $\epsilon_n(\vec{k})$ do prvega reda:

$$\epsilon_n(\vec{k}) = \epsilon + \delta\vec{k} \cdot \nabla_{\vec{k}}\epsilon_n(\vec{k})|_{\vec{k}_0} \tag{4}$$

prevedemo na itegral po površini:

$$g(\epsilon) = \sum_n \int_{S_n(\epsilon_n)} \frac{dS}{4\pi^3} |\nabla_{\vec{k}}\epsilon_n(\vec{k})|^{-1} \tag{5}$$

kjer integriramo po površini S z energijo ϵ_n v porstoru $\vec{k}$. Direktno integrala(5) ne moremo reševati, saj ne poznamo gradienta energije v posamezni točki. Prvi način aprosimacije je tetraedrična metoda. Tu razdelimo prvo Brillouinovo na tetraedre in s pomočjo linearne interpolacje dločimo gradient. Drugi način je numerična integracija s pomočjo metode Monte Carlo, ki ga bom uporabil v nadaljevanju. Za to ponovno predelamo enačbe(5) s pomočjo Gauss-Ostrogradskega in dobimo integral v **k** prostoru :

$$g(\epsilon)\, d\epsilon = \frac{1}{4\pi^3} \int_{1BC,\ \epsilon(k)} d\vec{k}^3 \qquad \epsilon < \epsilon(k) < \epsilon + d\epsilon \tag{6}$$

V nadaljnem postopku rabimo izraz za disperzijo za ploskovno centrirano kubično mrežo:

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_s - \beta - 4\gamma[\cos(\frac{1}{2}k_x a)\cos(\frac{1}{2}k_y a) + \cos(\frac{1}{2}k_y a)\cos(\frac{1}{2}k_z a) + \cos(\frac{1}{2}k_z a)\cos(\frac{1}{2}k_x a)] \tag{7}$$

Njena podrobna izpeljava je narejena v domačni nalogi Petra Jakopiča: *Izračun energijskih nivojev v približku tesne vezi za primer FCC kristala.*

Faktor γ je za vse atome v celici enak in ga postavimo na ena. Tudi izhodišče energije si lahko postavimo na nič: $\epsilon_s - \beta = 0$. Tako dobimo brezdimnzijski energijski interval od -12 do 4. Razdelil sem ga na 500 predalčkov. Uvedemo brezidmezijsko spremenljivko za valovni vektor (a=1):

$$\mu = k\frac{a}{2\pi} \qquad 0 \le \mu \le 1 \tag{8}$$

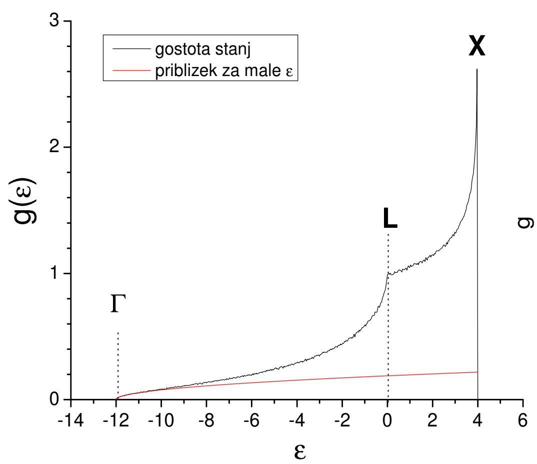
Zdaj naključno generirana, enakomerno porazdeljena števila [0,1) μ_x, μ_y in μ_z, vstavljamo v enačbo:

$$\epsilon(\mu) = -4[\cos(\mu_x\pi)\cos(\mu_y\pi) + \cos(\mu_y\pi)\cos(\mu_z\pi) + \cos(\mu_z\pi)\cos(\mu_x\pi)] \tag{9}$$

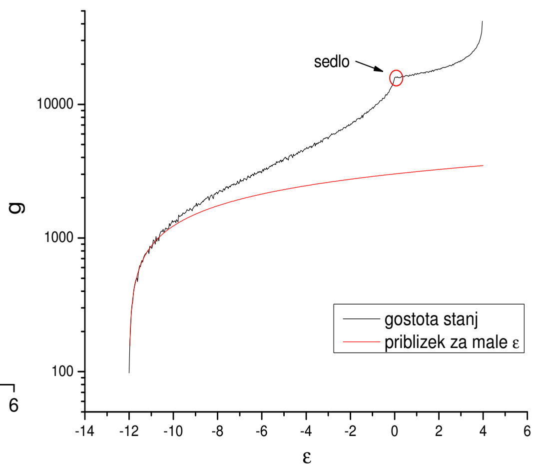
ter za vsako energijo pogledamo v kateri predalček paše. Takih trojic oziroma energij sem zgeneriral $N = 4\cdot 10^6$. Tako dobimo potek funkcije $\tilde{g}(\epsilon)$. Seveda jo je potrebno še normalizirati, da dobimo potek gostote stanj. Normalizacijska konstanta je v tem primeru:

$$\alpha = \frac{V_{1BC}}{4\pi^3\cdot(\epsilon_{max} - \epsilon_{min})}\frac{N_p}{N} = \frac{1}{2\gamma a^3}\frac{N_p}{N} = \frac{1}{2}\frac{N_p}{N} \quad \Rightarrow \quad g(\epsilon) = \alpha\,\tilde{g}(\epsilon) \tag{10}$$

kjer je N_p število predalčkov in $V_{1BC} = (4\pi/a)^3/2$ volumen prve Brillouinove cone. Faktor $\epsilon_{max} - \epsilon_{min}$ pa sledi, iz levega dela enačbe(6), ko pointegriramo po vseh predalčkih. V našem primeru znaša 16γ.



Slika 1: *gostota stanj v odvisnosti od energije*



Slika 2: *slika(1) v logaritemski skali*

Korenska odvisnost za male energije.

Za počasne energije se elektroni obnašajo kot prosti, z efektivno maso m^*. Izracunamo jo iz razvoja disperzije okoli točke $\vec{k} = (0,0,0)$ (točke Γ), torej za male k. Iz enačbe(7) tako sledi:

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_s - \beta - 4\gamma[3 - \frac{1}{4}k_x^2 a^2 - \frac{1}{4}k_y^2 a^2 - \frac{1}{4}k_z^2 a^2 + O(k^4)] \qquad (11)$$

Poračunamo pri čemer zanemarimo člene s $k^4 a^4$ in dobimo:

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_s - \beta - 12\gamma + \gamma k^2 a^2 \qquad (12)$$

Za gostoto stanj prostih elektronov vemo da velja zveza:

$$g(\epsilon) = \frac{Vk^2}{\pi^2}\frac{dk}{de} \qquad (13)$$

Iz(12) izrazimo k^2:

$$k^2 = \frac{\epsilon - \epsilon_0}{\gamma a^2}, \qquad \epsilon_0 = \epsilon_s - \beta - 12\gamma \qquad (14)$$

Potrebujemo še odvod, ki je:

$$\frac{de}{dk} = 2\gamma k a^2 \;\; = \;\; 2\gamma a^2 \sqrt{\frac{\epsilon - \epsilon_0}{\gamma a^2}} \qquad (15)$$

Vstavimo v (13) poračunamo in dobimo:

$$g(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2 a^3 \gamma^{3/2}} \sqrt{\epsilon - \epsilon_0} \qquad (16)$$

To lahko prepisemo v obliko z efektivno maso:

$$g(\epsilon) = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2}\, (m^*)^{3/2} \, \sqrt{\epsilon - \epsilon_0} \qquad (17)$$

Z efektivno maso

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2} \qquad (18)$$

Torej velja zveza :

$$g(\epsilon) = \kappa \cdot \sqrt{\epsilon} \quad \Rightarrow \quad \kappa_{fit} = 0,051(1 \pm 0,02) \;\; ; \;\; \kappa_i = 0,05 \qquad (19)$$

Kjer smo κ_{fit} dobili iz fitane krivulje in κ_i izracunali iz (15) torej $\kappa_i = (2\pi^2\gamma^{3/2})^{-1}$. Tukaj smo privzeli, da je $V \approx a^3$, torej priblizno dve Brillouinovi coni in $\gamma = 1$.

Korenski približek dobro drži do energije: $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_s - \beta - 10,5\gamma$

Sedla

Na sliki(2) vidimo singularnost,ki je posledica sedla disperzijske funkcije. Nahaja se v točki L(slika(3)), kjer velja $\vec{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ Da preverimo če je res sedlo preverimo s tem, da morata biti prvi in drugi odvod enačbe(7) v tej točki nič.

$$\epsilon' = 2a\gamma \begin{bmatrix} \sin k_x a \cdot \cos k_y a + \cos k_x a \cdot \sin k_y a + \\ + \sin k_x a \cdot \cos k_z a + \cos k_x a \cdot \sin k_z a + \\ + \sin k_y a \cdot \cos k_z a + \cos k_y a \cdot \sin k_z a \end{bmatrix} \qquad (20)$$

Če v zgornji izraz vstavimo komponente vektorja k v tej točki dobimo prvi odvod nič. Izraza za drugi odvod tukaj ne bom pisal. Bralec ga za vajo lahko naredi sam. Dobimo ponovno produkte sinusa in kosinusa, ki so pri danih pogojih ponovno nič. Isto sled za nadaljne odvode. Sledi, da dobmo sedlo pri energiji: $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_s - \beta$.

Drugi način je preko razvoja disperzije(7) v tej točki.

$$\cos(\frac{a}{2}\delta k + \frac{\pi}{2}) = \cos\frac{\pi}{2} - \delta k\frac{a}{2}\sin\frac{\pi}{2} - \delta k^2\frac{a^2}{4\cdot 2!}\cos\frac{\pi}{2} \tag{21}$$

tako jo zapišemo kot:

$$\epsilon(\delta\vec{k})|_L = \epsilon_s - \beta - a^2\gamma[\delta k_x\delta k_y + \delta k_x\delta k_z + \delta k_y\delta k_z] \tag{22}$$

Pol

Na sliki(2) vidimo tudi pol, ki nastopi pri $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_s - \beta + 4\gamma$. Nastane kot posledica sedla disperzijske funkcije v točki X, torej za $\vec{k} = (0, \frac{2\pi}{a}, 0)$. Da potrdimo obstoj sedla, ponovno pogledamo prvi in drugi odvod enačbe(7). Dobimo vsoto produkta sinusa in kosinusa, ki imata za argument valovni vektor in našo točko. Kot vidimo je zmeraj enden od niju enak nič in posledično prvi in drugi odvod (prav tako tudi vsak nadaljni).

DODATEK

Gostota stanj po simetrijskih oseh Brillouinove cone

Vajo od zgoraj sem ponovil še za posamezne simetrijske osi za katere velja:

$$\Gamma X : k_x = k_z = 0,\ k_y = \frac{\mu 2\pi}{a} \quad 0 \le \mu \le 1 \tag{23}$$

$$\epsilon = -4(1 + 2\cos(\mu\pi))$$

$$\Gamma L : k_x = k_y = k_z = \frac{\mu 2\pi}{a} \quad 0 \le \mu \le \frac{1}{2} \tag{24}$$

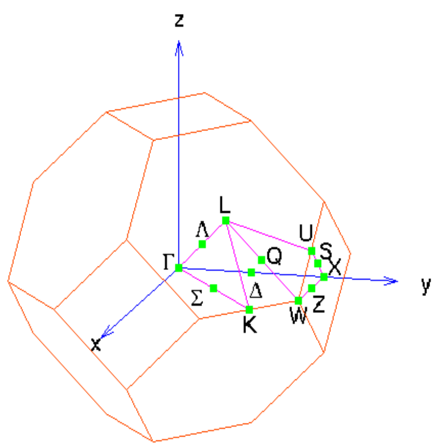
$$\epsilon = -12\cos(\mu\pi)^2$$

$$\Gamma K : k_x = k_y = \frac{\mu 2\pi}{a},\ k_z = 0 \quad 0 \le \mu \le \frac{3}{4} \tag{25}$$

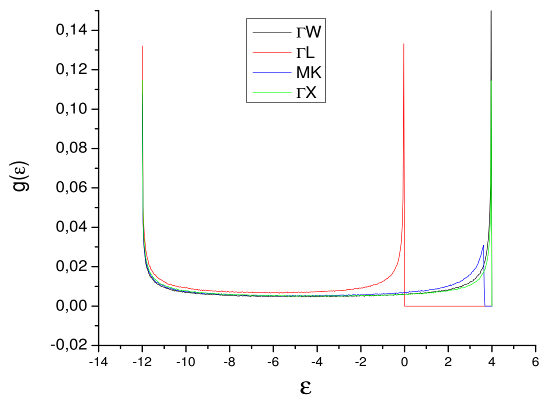
$$\epsilon = -4(\cos(\mu\pi)^2 + 2\cos(\mu\pi))$$

$$\Gamma W : k_z = 0,\ k_y = \frac{\mu\pi}{a},\ k_x = \frac{\mu 2\pi}{a} \quad 0 \le \mu \le 1 \tag{26}$$

$$\epsilon = -4(\cos(\mu\pi) + \cos(\frac{1}{2}\mu\pi) + \cos(\mu\pi)\cos(\frac{1}{2}\mu\pi))$$



Slika 3: *Simetrijske osi Brillouinove cone*



Slika 4: *Gostota stanj po simetrijskih oseh Brillouinove cone*