Domača naloga pri vajah iz Fizike trdne snovi

Alan Šuligoj

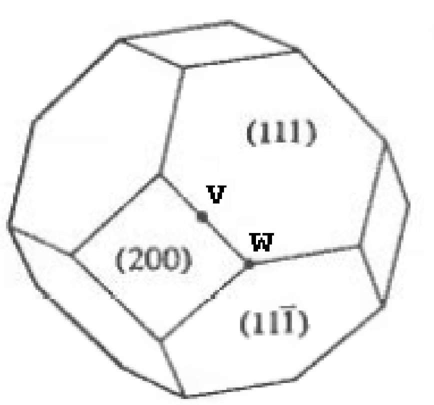
28. 11. 2007

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 $U_{(111)} = U_{(11-1)} = U_1$ in $U_{(200)} = U_2$.

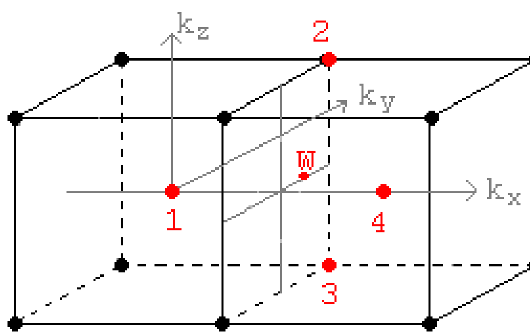
Rešitev

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. struktura 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

$$\varepsilon_1^0 = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{1}$$

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_2^0 &= \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}-\frac{2\pi}{a}(1,1,1))^2 && (2)\\
\varepsilon_3^0 &= \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}-\frac{2\pi}{a}(1,1,-1))^2 && (3)\\
\varepsilon_4^0 &= \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}-\frac{2\pi}{a}(2,0,0))^2 && (4)
\end{aligned}
$$

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

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

lahko zapišemo v matriko

$$
\underbrace{\begin{pmatrix}
\varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_1}-\varepsilon & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_1} & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_1} & U_{\vec{K}_4-\vec{K}_1}\\
U_{\vec{K}_1-\vec{K}_2} & \varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_2}-\varepsilon & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2} & U_{\vec{K}_4-\vec{K}_2}\\
U_{\vec{K}_1-\vec{K}_3} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} & \varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_3}-\varepsilon & U_{\vec{K}_4-\vec{K}_3}\\
U_{\vec{K}_1-\vec{K}_4} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_4} & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_4} & \varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_4}-\varepsilon
\end{pmatrix}}_{A}
\begin{pmatrix}
c_{\vec{k}-\vec{K}_1}\\ c_{\vec{k}-\vec{K}_2}\\ c_{\vec{k}-\vec{K}_3}\\ c_{\vec{k}-\vec{K}_4}
\end{pmatrix}=0 \tag{6}
$$

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

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

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

$$
detA=\begin{vmatrix}
\varepsilon_W-\varepsilon & U_1 & U_1 & U_2\\
U_1 & \varepsilon_W-\varepsilon & U_2 & U_1\\
U_1 & U_2 & \varepsilon_W-\varepsilon & U_1\\
U_2 & U_1 & U_1 & \varepsilon_W-\varepsilon
\end{vmatrix}=0 \tag{8}
$$

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

$$
detA=(\varepsilon_W-\varepsilon-U_2)\begin{vmatrix}
\varepsilon_W-\varepsilon & U_2 & U_1\\
U_2 & \varepsilon_W-\varepsilon & U_1\\
U_1 & U_1 & \varepsilon_W-\varepsilon
\end{vmatrix}+(\varepsilon_W-\varepsilon-U_2)\begin{vmatrix}
U_1 & \varepsilon_W-\varepsilon & U_2\\
U_1 & U_2 & \varepsilon_W-\varepsilon\\
U_2 & U_1 & U_1
\end{vmatrix}=0 \tag{9}
$$

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

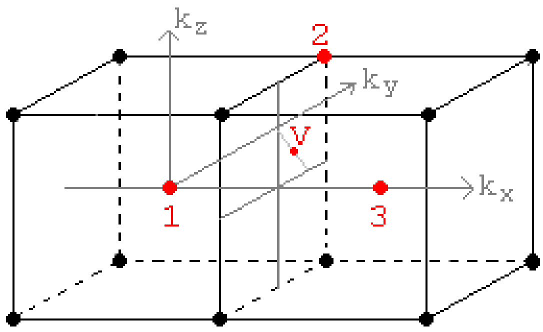
$$
\begin{aligned}
detA &= (\varepsilon_W-\varepsilon-U_2)(\begin{vmatrix}\varepsilon_W-\varepsilon & U_1\\ U_1 & \varepsilon_W-\varepsilon\end{vmatrix}+\begin{vmatrix}U_2 & U_1\\ U_1 & \varepsilon_W-\varepsilon\end{vmatrix}-\begin{vmatrix}U_1 & \varepsilon_W-\varepsilon\\ U_2 & U_1\end{vmatrix}-\begin{vmatrix}U_1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

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

$$
\begin{aligned}
\varepsilon &= \varepsilon_W-U_2 \quad (2x) && (11)\\
\varepsilon &= \varepsilon_W+U_2\pm 2U_1 && (12)
\end{aligned}
$$

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

Podobno izracunamo 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.*

$$\varepsilon_1^0 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \tag{13}$$

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

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

Tokrat imamo set treh enačb, ki jih zapišemo v matriko

$$\begin{pmatrix} \varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_1} - \varepsilon & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_1} & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_1} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_2} & \varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_2} - \varepsilon & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_3} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} & \varepsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_3} - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}-\vec{K}_1} \\ c_{\vec{k}-\vec{K}_2} \\ c_{\vec{k}-\vec{K}_3} \end{pmatrix} = 0 \tag{16}$$

kar je spet problem lastnih vrednosti

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

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

$$\varepsilon = \varepsilon_V - U_2 \tag{18}$$

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