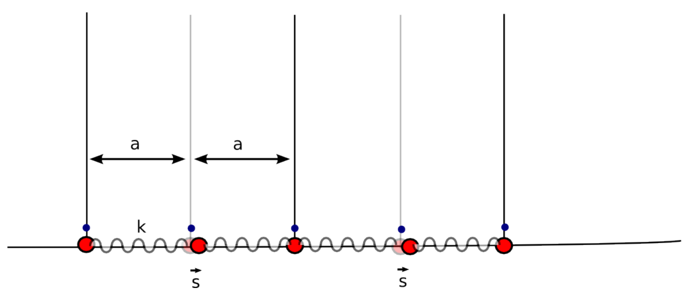
Peierlsova nestabilnost

Jurij Kodre

1 Naloga



Slika 1: Predstavitev problema: v enakomernem 1D kristalu, kjer atome na razdalji a drži skupaj potencial $\frac{1}{2}kx^2$ sode atome, premaknemo za majhen s iz ravnovesne lege in opazujemo, če pridemo tako do energetsko ugodnejše rešitve.

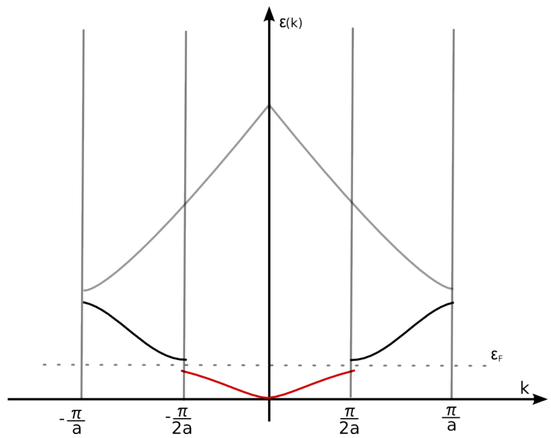
Enodimenzionalen kristal, atomi so razmaknjeni za razdaljo a, vsak ima elektron (slika **??**). Ti elektroni so v Kroenig-Penneyjevem potencialu. Peierls nam zagotavlja, da je stanje, kjer je vsak drugi elektron izmaknjen iz ravnine, energijsko ugodneje.

Pa poglejmo kaj se zgodi, ko izmaknemo vsak drugi elektron za razdaljo $s << a$ iz ravnovesne lege (slika 1):

- perioda potenciala se premakne z a na $2a$ - zato se Brillouinovo območje zmanjša iz $\frac{\pi}{a}$ na $\frac{\pi}{2a}$, kjer dobimo tudi novi gap zaradi špičastega potenciala

Kroenig-Penneyjev potencial zapišemo kot:

$$V_0(x) = \lambda \sum_n \delta(x - na)$$



Slika 2: Sprememba frekvenčnega območja zaradi premika atomov. Zaradi podvojene periode, se frekvenčno območje skrči na polovico, kjer dobimo tudi nov gap. Zanimala nas bo integracija spremembe energijske gostote po premiku, na področju, ki je označen rdeče.

ali po izmiku:

$$V(x) = \lambda \sum_n \delta(x - 2na) + \lambda \sum_n \delta(x - (2n+1)a - s)$$

Koeficienti razvoja po ravnih valovih - potrebovali ga bomo kasneje:

$$V(x) = \sum_n V_n e^{-i\frac{2\pi}{2a}x} = \frac{1}{2a}\left[\lambda + \lambda e^{-i\frac{2\pi}{2a}(a+s)}\right] =$$

$$= \frac{\lambda}{2a}\left[1 - e^{-i\pi\frac{s}{a}}\right]$$

Pogledamo razvoj do prvega reda:

$$V_k \approx \frac{\lambda}{2a}\left[1 - 1 + i\pi\frac{s}{a}\right] = \frac{\lambda}{2a} i\pi \frac{s}{a} = i\pi\lambda\frac{s}{2a^2}$$

in

$$|V_k| = \frac{\pi\lambda s}{2a^2}$$

Spremembo energije zaradi izmika zapišemo kot:

$$\Delta E(s) = \frac{1}{2}ks^2 + \Delta_{el}(s)$$

Potrebovali bomo še gostoto energije ϵ, za katero smo izpeljali prek perturbacijske energije (v približku prostih elektronov):

$$\epsilon = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2}{4} + |V_k|^2}$$

V našem primeru je

$$\begin{aligned}
\epsilon_1 &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2a} + q\right)^2 &(1)\\
\epsilon_2 &= \frac{\hbar^2 \left(\frac{2\pi}{2a} - k\right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2a} - q\right)^2 &(2)\\
\epsilon_1 + \epsilon_2 &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2}{2a^2} + 2q^2\right) &(3)\\
\epsilon_1 - \epsilon_2 &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi q}{a} + 2q^2\right)^2 &(4)
\end{aligned}$$

ker je $k = \frac{\pi}{2a} + q$ in $\frac{2\pi}{2a} - k = \frac{\pi}{2a} - q$.

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{4m}\left(\frac{\pi^2}{2a^2} + 2q^2\right) \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{4m}\left(\frac{2\pi q}{a}\right)^2 + |V_k|^2}$$

Razliko energijskih gostot dobimo zaradi potenciala ko je:

$$\Delta\epsilon(k) = \pm\left[\sqrt{\frac{\hbar^2\pi^2 q^2}{ma^2} + |V_k|^2} - \sqrt{\frac{\hbar^2\pi^2 q^2}{ma^2}}\right]$$

Razliko energij dobimo z integracijo energijske gostote po spektru (da nastane gap, se prilagodi celoten spekter, če ne zadeva ne bi bila več zvezna), kjer dobimo še faktor dva zaradi spinskih stanj (integracijo pa si še olajšamo z upoštevanjem simetrije po $\pm k$):

$$\Delta E_{el} = 2\frac{L}{2\pi}2\int_0^{\frac{\pi}{2a}} sq\Delta\epsilon(q) = \frac{4L}{2\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2a}}\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\pi^2 q^2}{ma^2}} - \sqrt{\frac{\hbar^2\pi^2 q^2}{ma^2} + |V_k|^2}\right)$$

$$\Delta E_{el} = \frac{2L}{\pi}|V_k|\int_0^{\frac{\pi}{2a}}\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\pi^2 q^2}{ma^2|V_k|^2}} - \sqrt{1 + \frac{\hbar^2\pi^2 q^2}{ma|V_k|^2}}\right)dq$$

Zaradi večje preglednosti naredimo substitucijo $\frac{1}{b^2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2|V_k|^2}$, $c = \frac{2L}{\pi}|V_k|$:

$$\Delta E_{el} = c\int_0^{\frac{\pi}{2a}}\left(\sqrt{\frac{q^2}{b^2}} - \sqrt{1 + \frac{q^2}{b^2}}\right)dq$$

Integriramo (prvi del je enostaven, za drugega pa pokukamo v priročnik ali Mathematico):

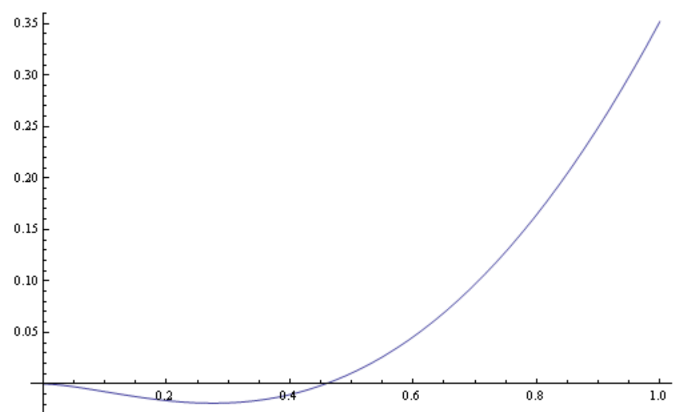
$$\Delta E_{el} = \frac{1}{2}c\left(\sqrt{\frac{1}{b^2}}\frac{\pi^2}{4a^2} - \frac{\pi}{2a}\sqrt{1+\frac{\pi^2}{4a^2b^2}} - b \operatorname{arcsinh}\left(\frac{\pi}{2ab}\right)\right)$$

Po $\operatorname{arcsinh}(x) = \ln(x+\sqrt{x^2+1})$:

$$\Delta E_{el} = \frac{1}{2}c\left(\sqrt{\frac{1}{b^2}}\frac{\pi^2}{4a^2} - \frac{\pi}{2a}\sqrt{1+\frac{\pi^2}{4a^2b^2}} - b\ln\left(\frac{\pi}{2ab}+\sqrt{\frac{\pi^2}{4a^2b^2}+1}\right)\right)$$

$$\Delta E_{el} = \frac{1}{2}\frac{\lambda s L}{a^2}\left(\sqrt{\frac{4\hbar^2a^4}{\lambda^2s^2m}}\frac{\pi^2}{4a^2} - \frac{\pi}{2a}\sqrt{1+\frac{\pi^2\hbar^2a^2}{\lambda^2s^2m}} - \frac{\lambda s\sqrt{m}}{2\hbar a^2}\ln\left(\frac{\pi\hbar a}{\lambda s\sqrt{m}}+\sqrt{\frac{\pi^2\hbar^2a^2}{\lambda^2s^2m}+1}\right)\right)$$

Pri majhnih členih se s-ji pokrajšajo v konstantno odvisnost okoli $s=0$ ($\sqrt{(1+x^2)} \approx x$), zadnji člen pa je potem odvisen od $s^2\ln(s)$. Sklepamo lahko, da se odvisnost pri večjih s lahko obrne, saj začne prevladovati 1 in se koren razvije drugače. Boljši pregled odvisnosti nam pokaže spodnji graf razlike med kvadratnim členom in Δ členom (slika 3).



Slika 3: Prikaz energijske odvisnosti elektronov pri Peierlsovi nestabilnosti - na abscisi imamo odmik, na ordinati pa spremembo energije. Seveda stvari niso v pravih enotah, vendar je graf v pravih enotah le primerno raztegnjen.

2 V nadaljne razmišljanje

2.1 2D, 3D Peierlsova nestabilnost

Po kratki razpravi nam je asistent dr. Rejec zagotovil, da tega pojava v večih dimenzijah ni.

2.2 Novo stabilno stanje

Zanimivo bi bilo izračunati tudi novo stabilno stanje, tako da bi izračunali minimum v enotah $\frac{s}{a}$.