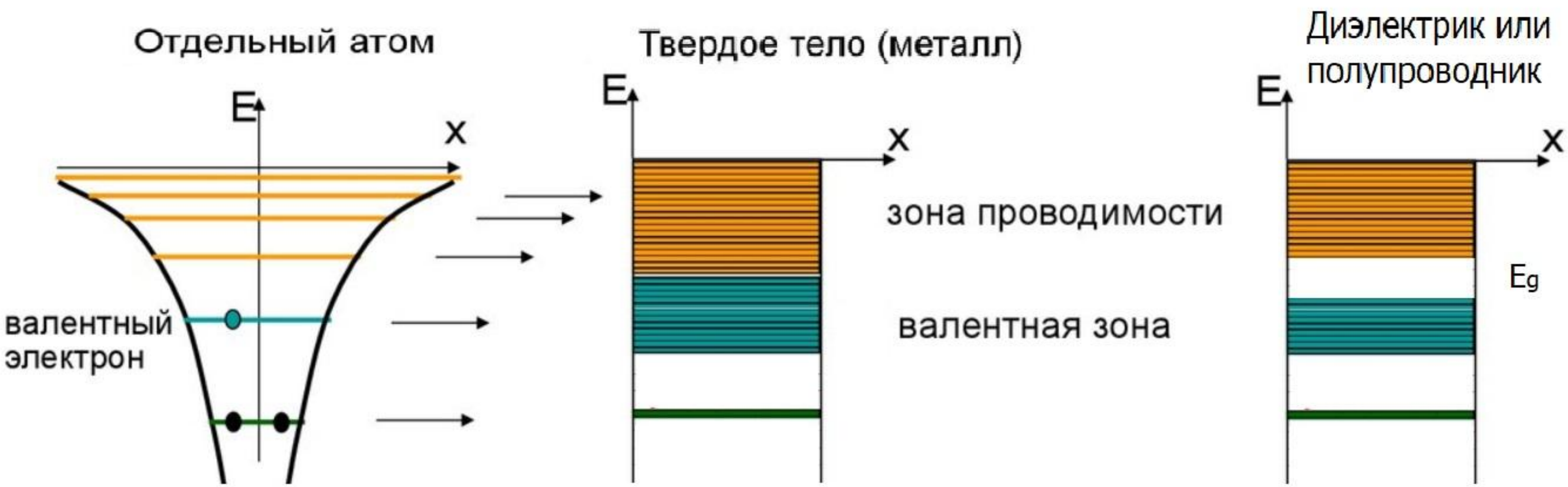


Дистанционный семинар №6

Зонный характер спектра электронов в твердых телах. Поверхность Ферми

Кубышкин А.В. - март 2021

Теорема Блоха. Блоховские волны электронов в кристалле

гамильтониан электрона в кристалле:

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_e^2c^2}\left[\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}\right] \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

$V(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$ $\mathbf{R}$ – вектор прямой решетки

собственная функция: $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{k} \in \mathrm{B}_1$

медленная огибающая

быстро осциллирующая периодическая часть

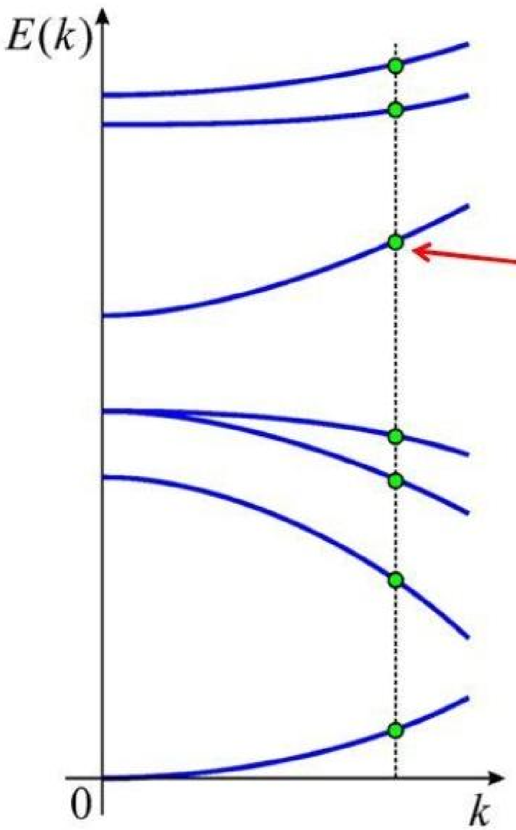
1. Решение уравнения Шредингера с учетом периодичности потенциального поля в кристалле имеет вид волн – *волны Блоха*, волновая функция частицы (обычно электрона), расположенной в периодическом потенциале.

2. В кристалле многие физические величины являются периодическими функциями Например квазиимпульс

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0\left[\boldsymbol{A}_X \boldsymbol{cos} \boldsymbol{k}_X \boldsymbol{a}_X + \boldsymbol{A}_Y\, \boldsymbol{cos} \boldsymbol{k}_Y \boldsymbol{a}_Y + \boldsymbol{A}_Z \boldsymbol{cos} \boldsymbol{k}_Z \boldsymbol{a}_Z\right]$$

Схема приведенных зон закона дисперсии

Базис блоховских функций



$$\left(\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}) + \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{m_e} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_e}\right)u_{n,\mathbf{k}} = E_n(\mathbf{k})\,u_{n,\mathbf{k}}$$

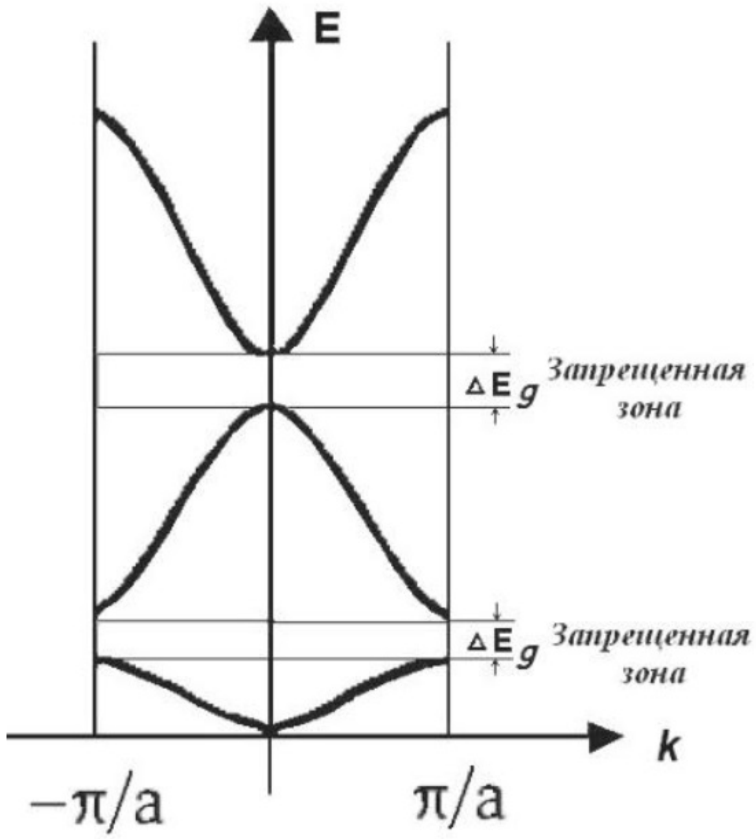
$$\psi_{c,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u_{c,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Базис для периодических функций:

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad n = 1, 2, \ldots$$

По нему можно разложить любую периодическую функцию

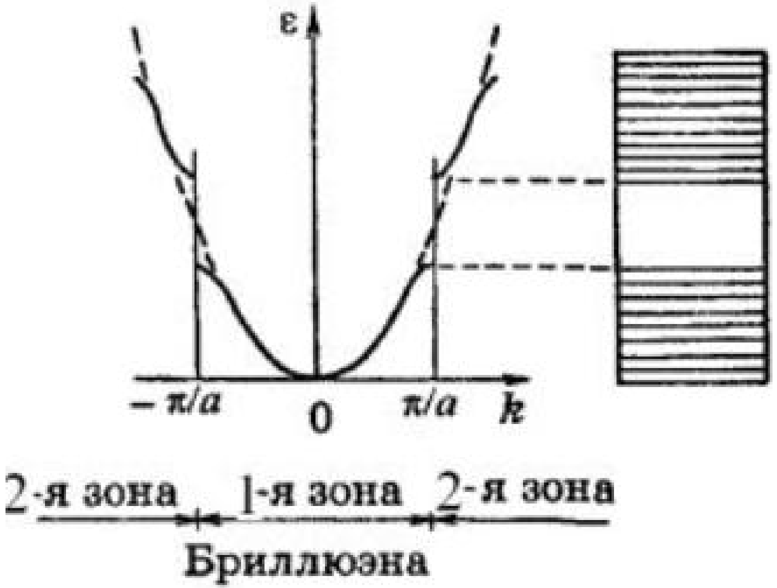
Пример численного решения в 1D

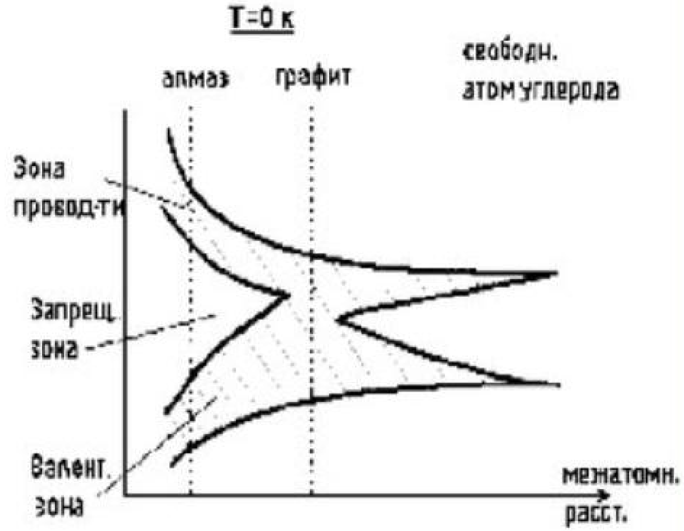


Приближения слабой и сильной связи

Оператор туннелирования $\hat{T}\Psi_i = t\left(\Psi_{i-1} + \Psi_{i+1}\right)$

Теория возмущений $\left(\hat{H}_0 + \hat{T}\right)\psi(k) = E_0\psi(k) + \ldots$





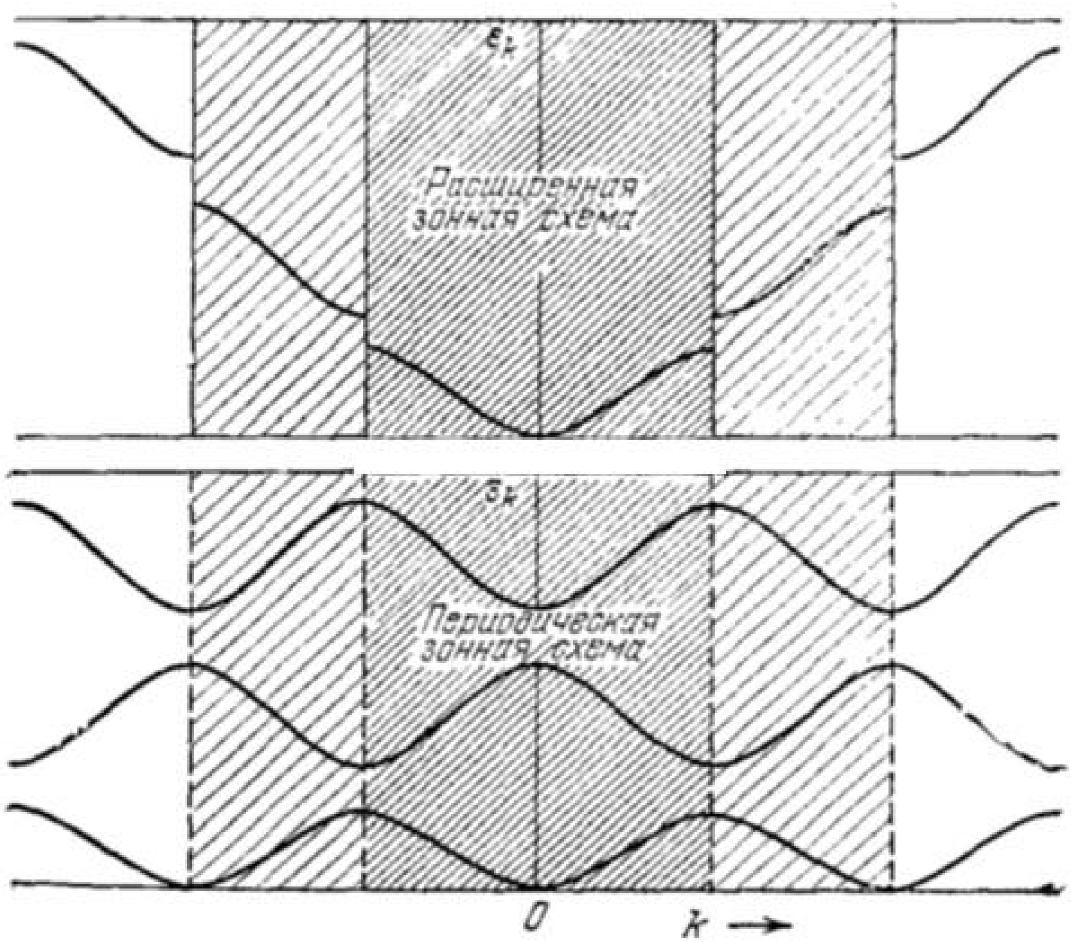
Взаимодействие с кристаллом $U = \delta\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$

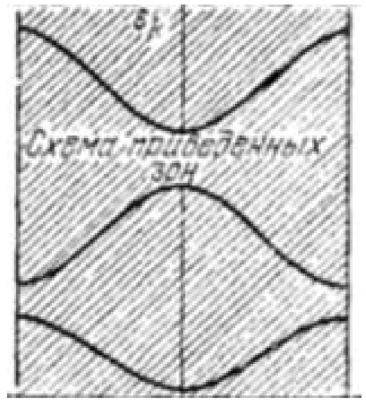
$$\hat{T}\psi(k) = t\sum_i \left(\Psi_{i-1} + \Psi_{i+1}\right)e^{ikR_i} =$$
$$= t\left(e^{ika} + e^{-ika}\right)\psi(k)$$

Поправка к энергии $\boxed{E\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \pm |\delta|}$

Закон дисперсии $\boxed{E(k) = E_0 + 2t\cos(ka)}$

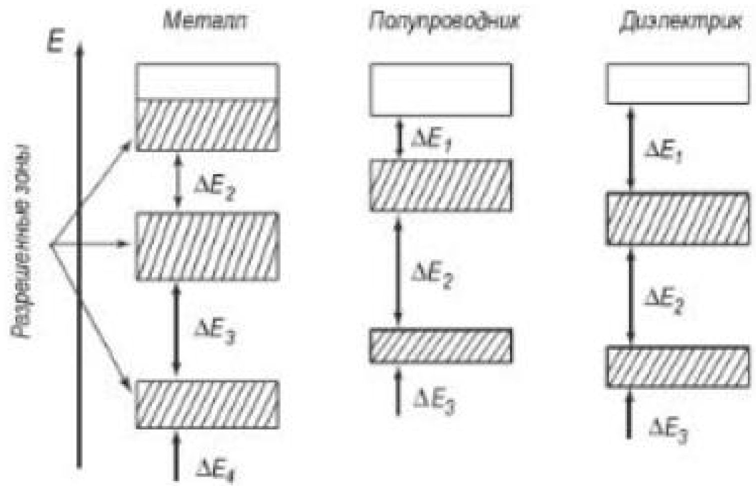
Формы представления зонной структуры





Решетка меняет параболу на периодические функции

Задачи 3.1 **и** 3.35



Эффективная масса и пример динамики электрона в кристалле

Вблизи экстремума закона дисперсии

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}\bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) + \cdots$$

Эффективная масса как тензор

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} \equiv \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$$

Задача T8

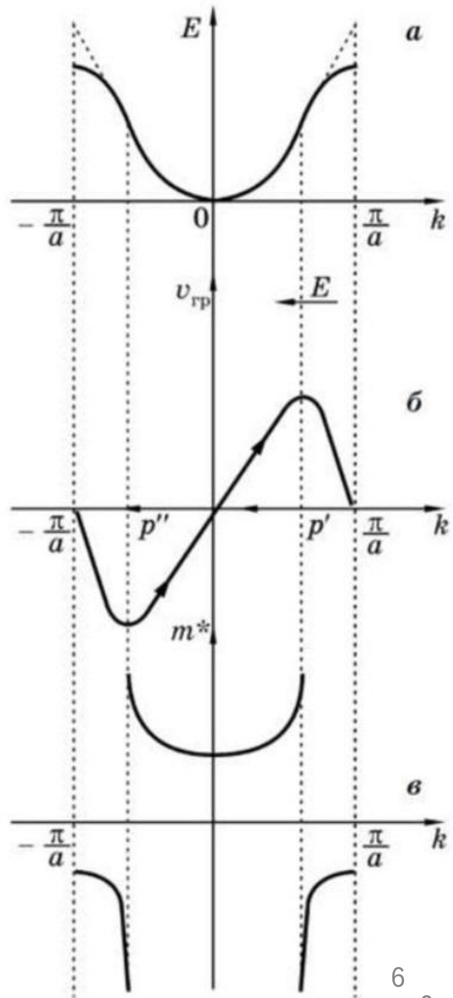
Диагонализуем матрицу 3×3

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{m_X^*}k_X^2 + \frac{1}{m_Y^*}k_Y^2 + \frac{1}{m_Z^*}k_Z^2\right]$$

Пример в 1D

$$\upsilon_{\text{гр}}(k) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} \quad \text{и}$$

$$m^* = \hbar^2\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}$$



Зависимость от волнового числа:

а — энергии; *б* — скорости; *в* — эффективной массы электрона.

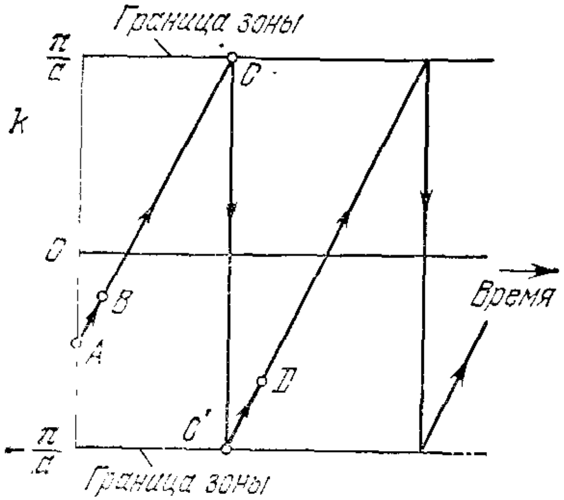
6
6

Электроны во внешних полях

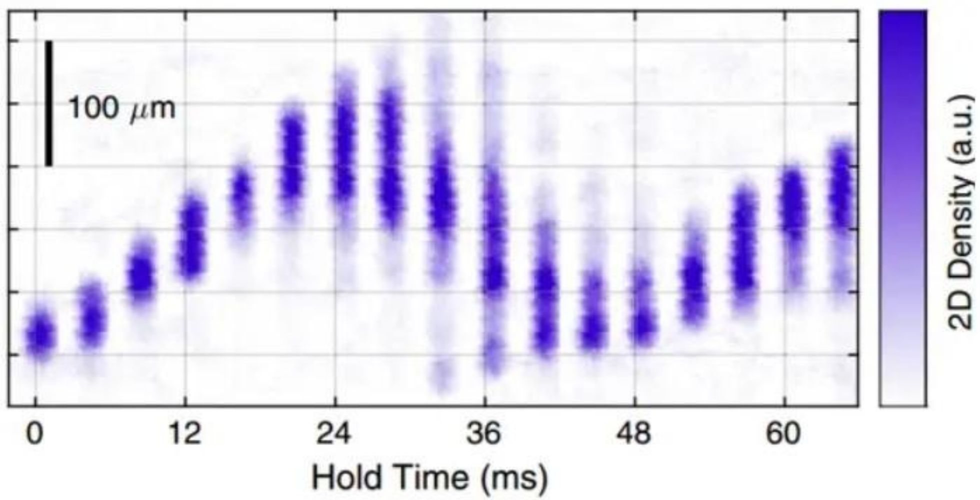
Блоховские осцилляции в электрическом поле

$$\vec{k} = \vec{k}_0 + \frac{e\vec{E}}{\hbar}t$$

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{d\mathcal{E}}{d\vec{k}}\frac{d\vec{k}}{dt} = e\vec{E}\cdot\vec{v}_{\text{гр}}(\vec{k})$$



Phys. Rev. Lett. 120, 213201 – Published 24 May 2018



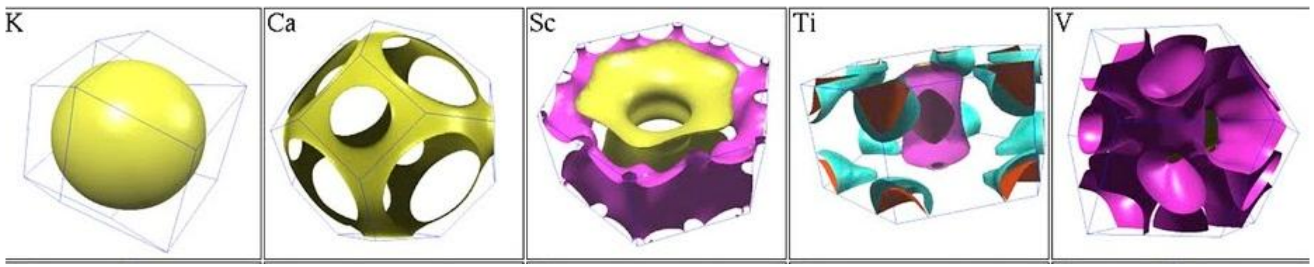
Циклотронный метод определения эффективных масс

$$\omega_c = \frac{eB}{m_c c} = \frac{2\pi eB}{c\hbar^2}\frac{d\mathcal{E}}{dA_k}$$

Задача 3.34

для изотропной параболической зоны

$$\mathcal{E}_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m^*}, A_k = \pi k^2 \rightarrow m_c \equiv m^*$$



закрытая **открытая** **две изолированные** **много**