

Электроны в кристаллах.

§8 Основы теории энергетических зон кристаллов. Волны Блоха.

План:

- 1. Волны Блоха.*
- 2. Стационарные состояния электрона в кристалле в приближении сильной связи.*
- 3. Закон дисперсии. Почти свободные электроны в кристалле.*
- 4. Брэгговские отражения на границах зоны Бриллюэна.*
- 5. Динамика электронов в кристалле.*

1. Волны Блоха

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1)$$

$$V(\vec{r} + \vec{a}) = V(\vec{r}) \quad (2) \quad -\vec{a} \quad \vec{\rho} \text{ (с проекциями } \xi, \eta, \zeta)$$

$$\vec{\rho} = \vec{r} + \vec{a} \quad (3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{\rho}) + V(\vec{\rho})\psi(\vec{\rho}) = E\psi(\vec{\rho}) \quad (4)$$

$$\nabla^2 = \Delta_r = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} = \Delta_\rho \quad (5)$$

$$V(\vec{\rho}) = V(\vec{r} + \vec{a}) = V(\vec{r}) \quad (6)$$

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = c_a \psi(\vec{r}) \quad (7)$$

$$\psi(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (8)$$

2. Стационарные состояния электрона в кристалле в приближении сильной связи

$$\Psi_n \quad \Psi_{n-1} \quad \Psi_{n+1} \quad \Psi_n N$$
$$\Psi = \sum_{n=1}^N C_n(t) \Psi_n \quad (9)$$

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = \sum_m E_{mn} C_m \quad (10)$$

$$|C_n(t)|^2$$

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = E_0 C_n(t) - AC_{n+1}(t) - AC_{n-1}(t) \quad (11)$$

$$E_{mn} = E_0 \quad \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

$$C_n(t) = C_0 \exp\left(-ikx_n - \frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (12)$$

2. Стационарные состояния электрона в кристалле в приближении сильной связи

$$i\hbar\left(-\frac{iE}{\hbar}\right)C_n = E_0C_n - AC_{n-1} - AC_{n+1} \quad (13)$$

$$x_n = na$$

$$E = E_0 - A\exp(ika) - A\exp(-ika) = E_0 - 2A\cos ka \quad (14)$$

$$|C_n|^2 = |C_0|^2 = \text{const} \quad (15)$$

$$E = E_0 - 2A\cos k_x a_x - 2A\cos k_y a_y - 2A\cos k_z a_z \quad (16)$$

$$ka \quad E = f(k)$$

$$ka \ll 1 \quad \cos ka \approx 1 - \frac{k^2 a^2}{2}$$

$$E \sim Ak^2 a^2$$

3. Закон дисперсии. Почти свободные электроны в кристалле

$$E = E_0 - A \exp(ika) - A \exp(-ika) = E_0 - 2A \cos ka$$

$$k \rightarrow k' = k + \frac{2\pi}{a}n \quad E(k) = E(k') \quad C_n \quad -\infty < k < \infty$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \quad E_0 - 2A \leq E \leq E_0 + 2A \quad (17)$$

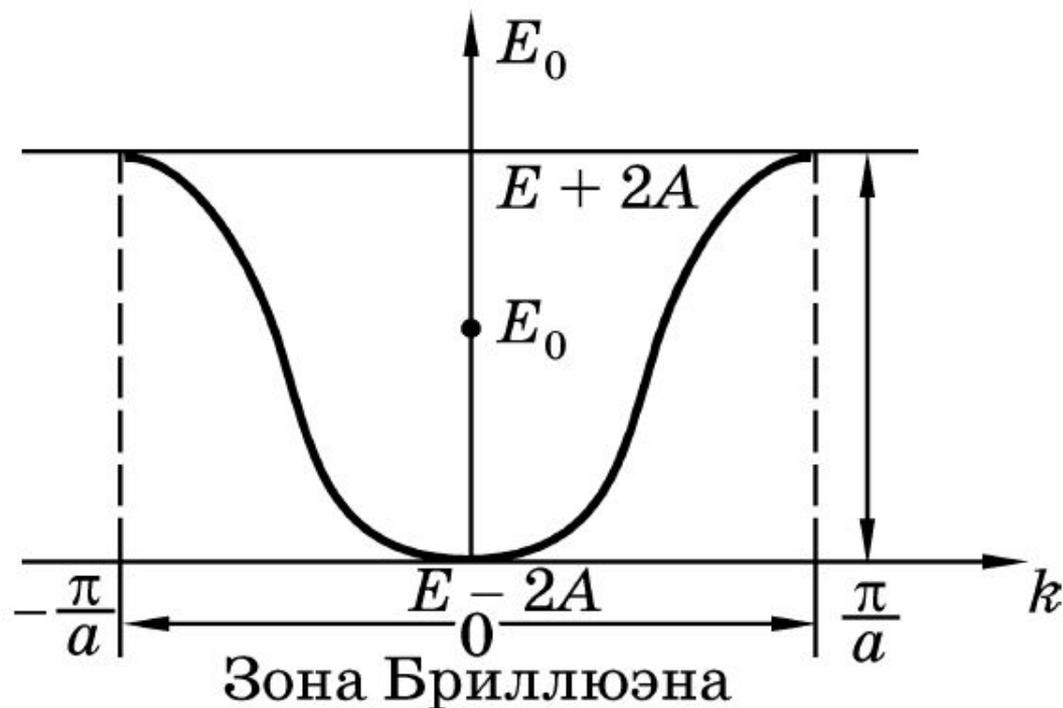


График функции $E = f(k)$ для первой энергетической зоны кристалла (основной зоны Бриллюэна)

3. Закон дисперсии. Почти свободные электроны в кристалле

$$C_i = C_{i+N}$$

$$\exp(ikx_i) = \exp(ikx_{i+N}) = \exp(ik(x_i + Na)) \quad (18)$$

$$\exp(ikaN) = 1$$

$$kaN = 2\pi m, \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \frac{N}{2}$$

$$k = \frac{2\pi}{Na} m \approx \frac{2\pi}{L} m \quad (19) \quad L = a(N-1) \approx aN$$

$$N \approx 10^{27} \quad \Delta E \approx 10^{-15} \text{ эВ}$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}; \quad -\frac{\pi}{b} \leq k_y \leq \frac{\pi}{b}; \quad -\frac{\pi}{c} \leq k_z \leq \frac{\pi}{c} \quad (20)$$

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} m_1; \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} m_2; \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} m_3$$

3. Закон дисперсии. Почти свободные электроны в кристалле

$$m_i = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \frac{N_i}{2}$$

$$L_x \approx N_1 a, L_y \approx N_2 b, L_z \approx N_3 c \text{ и } N_1, N_2, N_3 = N$$

$$k' = \vec{k} + 2\pi\vec{G}$$

$$2(|A_1| + |A_2|) \ll E_{01} - E_{02} \quad (21)$$

4. Брэгговские отражения на границах зоны Бриллюэна

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad (22)$$

$$\theta = \frac{\pi}{2} \quad d = a \quad \lambda = 2\frac{\pi}{k}$$

$$k = \frac{\pi}{a}n, \quad p = \frac{\pi\hbar}{a}n \quad (23)$$

$$a = \frac{n\lambda}{2} \quad 2a = n\lambda \quad k = \pm\frac{\pi}{a}n \quad n = 1$$

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \exp\left(i\frac{\pi}{a}x\right) + \exp\left(-i\frac{\pi}{a}x\right) = 2\cos\frac{\pi}{a}x, \\ \psi_2(x) &= \exp\left(i\frac{\pi}{a}x\right) - \exp\left(-i\frac{\pi}{a}x\right) = 2i\sin\frac{\pi}{a}x \end{aligned} \quad (24)$$

4. Брэгговские отражения на границах зоны Бриллюэна

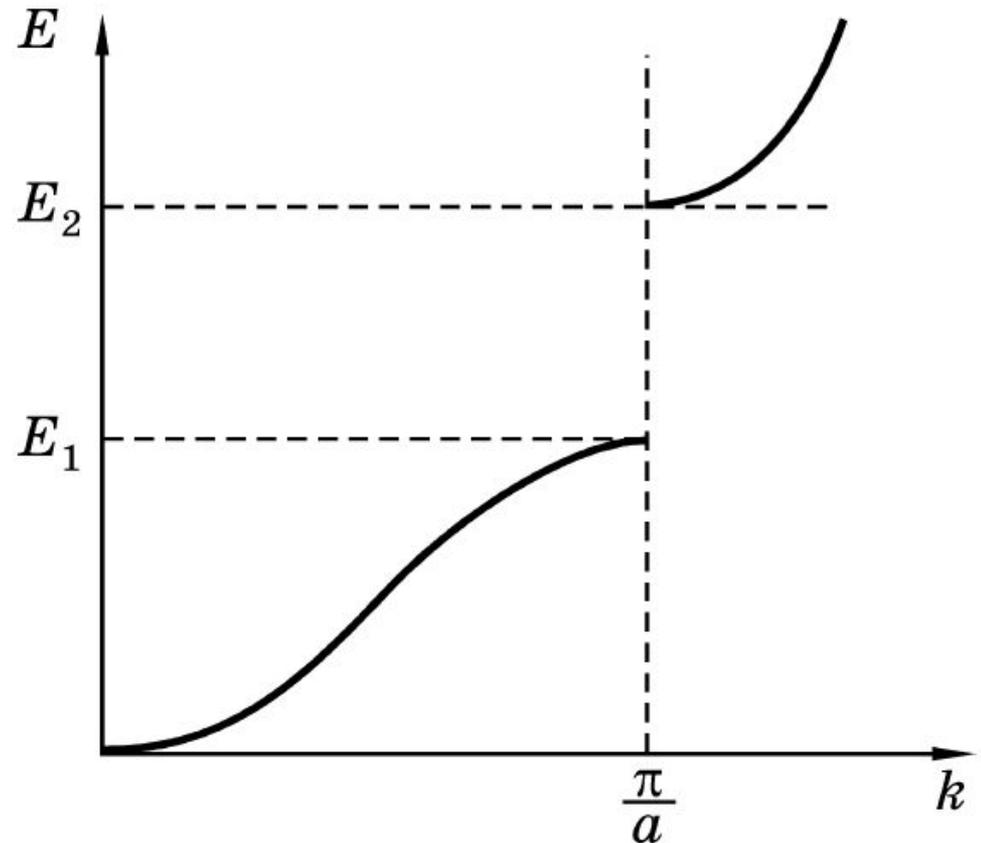
$$E_1 < E_2 \quad E_2 - E_1 = \Delta E$$

$$k = n \frac{\pi}{a}, \quad n > 1$$

$$U_0 = \Delta E$$

Разрыв энергии электрона

$$\text{при } k = \frac{\pi}{a}$$



5. Динамика электронов в кристалле

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \frac{d\nu}{dt} = \frac{F}{m} \quad (25)$$

$$dE = F\nu dt \quad (26)$$

$$\nu = \frac{d\omega}{dk} \quad (27)$$

$$E = \hbar\omega \quad (28)$$

$$\nu = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (29)$$

$$dE = \hbar\nu dk$$

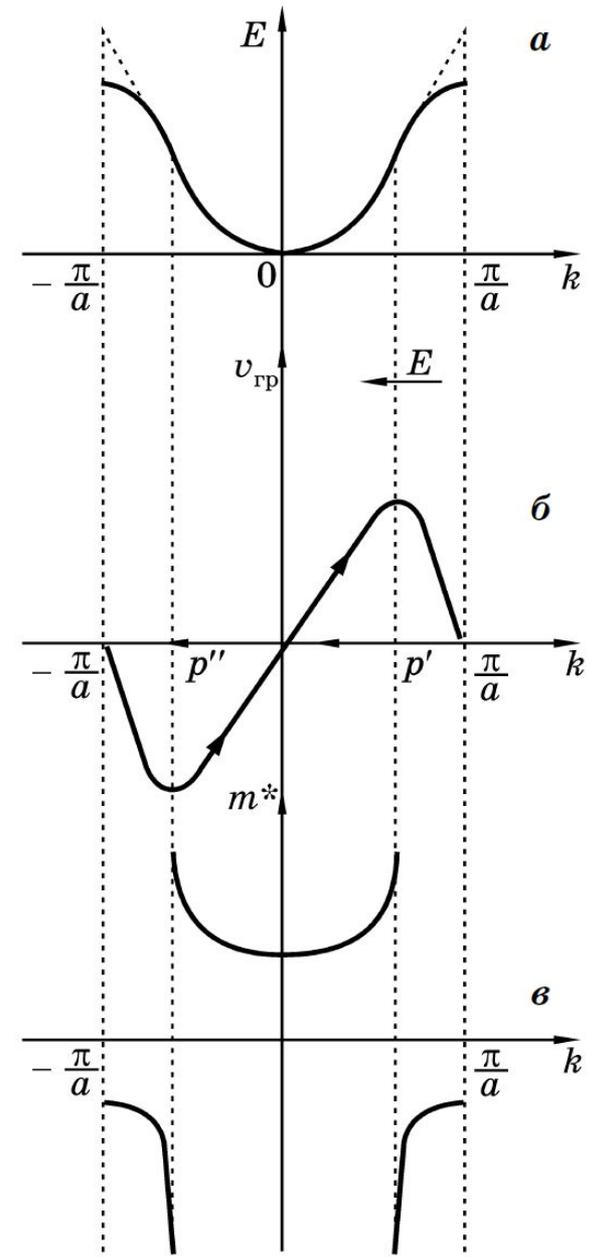
$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar} \quad (30)$$

$$\frac{d\nu}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F \quad (31)$$

5. Динамика электронов в кристалле

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (32)$$

$$v_{\text{гр}}(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad \text{и} \quad m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \quad (33)$$



*Зависимость
от волнового числа:*

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