

Часть I

Конспект занятий по Физике твердого тела.

Пятый семестр

Лекция 1

И.В. Иорш, И.А. Шелых

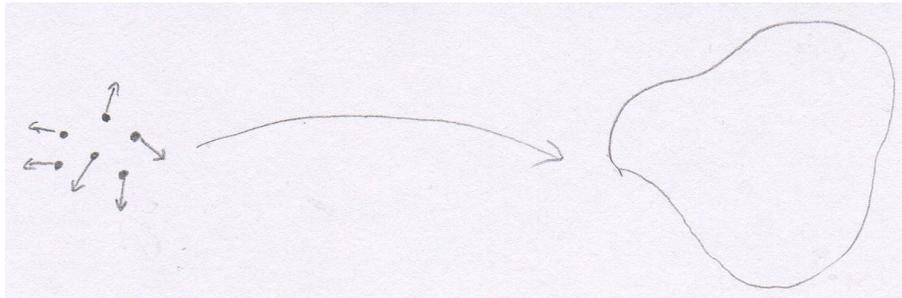
Аннотация

На данной лекции рассматривается базовая модель твердого тела в виде цепочки осцилляторов, а также структура двухатомной цепочки, как с одинаковыми атомами, так и с разными.

1 Введение

Список литературы можно найти на Google-диске, но в этом цикле лекций рекомендуется использование книг:

- 1) Н.Ашкрофт - Н.Мермин "Физика Твердого Тела"
- 2) Ч.Киттель "Квантовая теория твердых тел".



Первой задачей, рассматриваемой в данном курсе, станет обобщение законов поведения для каждой отдельной частицы для описания их поведения как общего макроскопического тела.

Итак, запишем определение теплоемкости и подставим туда энергию для газа.

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial t} = \frac{N}{2} K_b, \text{ где } N - \text{ количество степеней свободы}$$

Однако для твердых тел было установлено, что теплоемкость выражается как $C = 3K_b$, однако, эта формула была не точна даже для твердых тел, так как для некоторых материалов теплоемкость также зависела от температуры.

Для того, чтобы разобраться, как теплоемкость определяется в реальности рассмотрим модель твердого тела в ключе рассмотрения его частиц как гармонических осцилляторов.

Rem \forall потенциал вблизи положения равновесия можно приблизить квадратично, линейно это сделать невозможно, так как не будет существовать положение равновесия.

Запишем энергию гармонического осциллятора с одной степенью ствободы:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Запишем распределение Гиббса: $P_i \sim e^{-\beta E_i} = e^{-\beta \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)}$, $\beta = \frac{1}{K_B T}$

Отнормируем распределение на 1: $Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \rightarrow P_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$,

где Z является статистической суммой, а отнормированное P_i вероятностью.

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\beta \hbar\omega}{2}} e^{-\beta \hbar\omega n} = \frac{e^{-\beta \hbar\omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar\omega}} = \frac{1}{2 \sin \hbar \left(\frac{\beta \hbar\omega}{2} \right)},$$

$$\langle E \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i P_i \cdot E_i = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} E_i = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} z = -\frac{\partial \ln(z)}{\partial \beta},$$

где $e^{-\beta E_i} \cdot E_i = -\frac{\partial}{\partial \beta} \cdot e^{-\beta E_i}$

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \langle n \rangle\right),$$

что получается из $\frac{e^x+1}{e^x-1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^x-1} = \coth(x)$ и $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$.

Итак, запишем определение теплоемкости:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \hbar\omega \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial T}$$

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}; \quad \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial T} = \frac{-\frac{\hbar\omega}{kT^2} e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)^2}.$$

Подставим данное выражение в уравнение теплоемкости.

$$C = \hbar\omega \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial T} = \frac{k_b \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)^2} = \frac{k_b (\beta\hbar\omega)^2 e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} = C \quad - \text{Формула Эйнштейна (1907)} \quad (1)$$

Рассмотрим график функции $\frac{x^2 \cdot e^x}{(e^x - 1)^2}$, $x = \beta\hbar\omega$ При больших температурах $x \rightarrow 0$, при малых $x \rightarrow \infty$.

Приведем характерный вид получающегося графика:

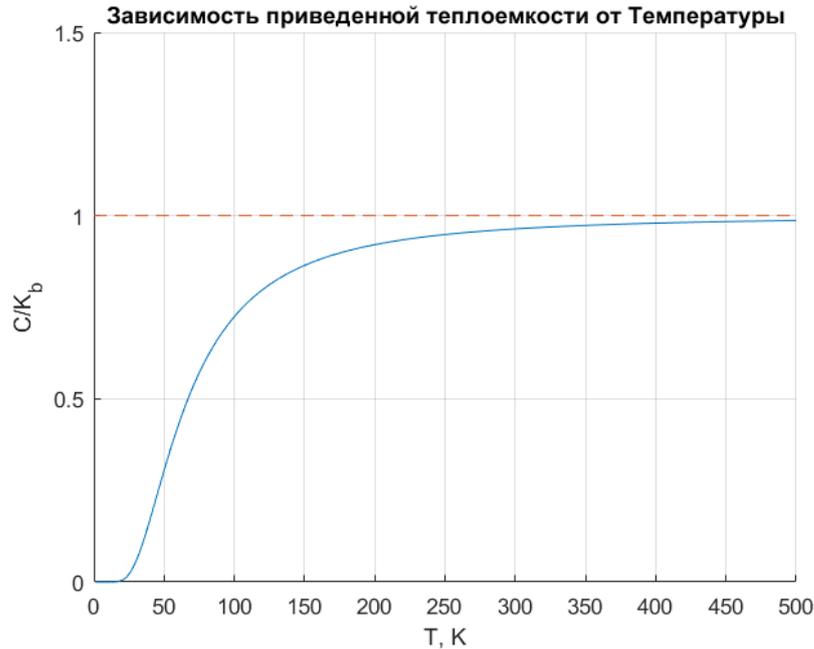


Рисунок 1 – График получающейся теплоемкости, отнормированной на K_b , пунктирной линией показан предел теплоемкости при больших температурах

Rem Положение на кривой зависит также и от собственной частоты.

Различие получившегося результата и экспериментального объясняется тем, что рассмотрен одномерный осцилятор, в то время как в реальных телах есть 3 степени свободы.

Ex. Проверить для 3-х степеней свободы, $E_n = \hbar\omega (n_x + n_y + n_z + 1/2)$

Однако, когда стало возможным измерять теплоемкость при низких температурах, оказалось, что $C_{T \rightarrow 0} \sim T^3$. Также не было понятно, откуда берется собственная частота.

Данные проблемы решил Петр Дебай (Peter Debye 1884-1966), предположив что колебания атомов внутри решетки не являются совсем независимыми друг от друга. Так, рассматривалось распространение в материалах упругих волн с известной дисперсией.

$$\langle E \rangle = 3 \sum_k \hbar \omega(k) (\langle n \rangle (\beta \hbar \omega(k)) + 1/2),$$

где $\langle n \rangle (\beta \hbar \omega(k)) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega(k)} - 1}$. Перейдем от суммы к интегралу также как в случае квантования в ящике, а также воспользуемся выражением частоты через дисперсию и волновое число $\omega = v|k|$.

$$\sum_k \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \int d^d x$$

Перейдем в сферическую систему координат: $\int d^3 x \rightarrow 4\pi \int_0^\infty x^2 dx = \frac{4\pi}{v^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega$

$$\langle E \rangle = 3 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{4\pi}{v^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega \hbar \omega \left(\frac{1}{2} + \langle n \rangle \beta \hbar \omega \right)$$

Введем концентрацию атомов: $nL^3 = N$

$$\langle E \rangle = N \frac{12\pi \hbar}{nv^3(2\pi)^3} \int_0^\infty \omega^3 d\omega \left(\frac{1}{2} + \langle n \rangle \right)$$

Подынтегральный член включающий в себя 1/2 стремится к бесконечности, и связано это с тем, что это энергия "нулевых" колебаний, существуют способы отрегулировать данное расхождение, однако мы их рассматривать не будем, так как данный член не зависит от температуры.

$$\boxed{\omega_D^3 = 6 \cdot \pi^2 n v^3} \text{ - частота Дебая}$$

$$\langle E \rangle = \frac{gN\hbar}{\omega_D^3} \int \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} + \text{const}(T) = \frac{9N\hbar}{\omega_D^3 (\beta \hbar)^4} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Приведем примерный способ вычисления последнего интеграла:

$$\int \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \int \frac{x^3 e^{-x}}{1 - e^{-x}} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-1}^{\infty} x^3 e^{-x} e^{-nx} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{(n+1)^n} = \zeta(4) = \frac{\pi^4}{15}$$

$$\langle E \rangle = \frac{\pi^4}{15} N \frac{9(kT)^4}{(\hbar \omega_D)^3}$$

$$\boxed{\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = K_b N \left(\frac{KT}{\hbar \omega_D} \right)^3 \frac{12\pi^4}{5} \sim T^3} \text{ - Формула Дебая} \quad (2)$$

Так, при малых значениях температуры получаем то же, что дает эксперимент, однако при больших температурах идет расхождение с формулой Эйнштейна и $C \rightarrow \infty$.

Ex. Получить формулу выше для 1D и 2D случаев.

$$\langle E \rangle = N \frac{12\pi}{nv^3(2r)^3} \int_0^\infty w^2 dw \hbar \omega (1/2 + \langle n \rangle),$$

где $\frac{12\pi}{nv^3(2r)^3} \cdot w^2$ - количество мод $g(\omega)$. $\hbar \omega (1/2 + \langle n \rangle)$ - энергия мод для диапазона частот от ω до $\omega + d\omega$

$$\int_0^{\omega_{cutoff}} g(\omega) d\omega = 3N$$

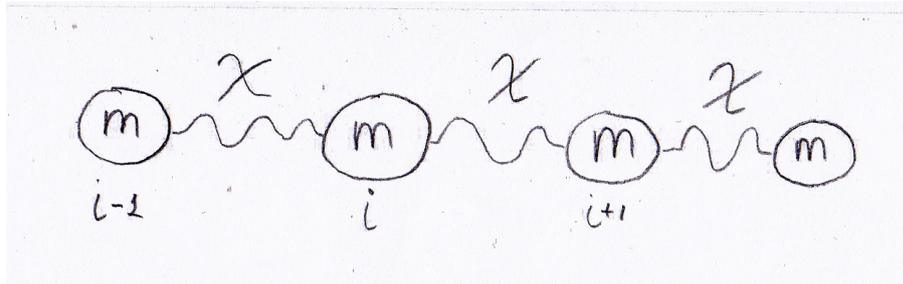
где 3 - число степеней свободы, а N - общее число состояний. Интеграл берется с конечным верхним пределом во избежание случая расходимости, то есть, существует максимальное значение ω_{cutoff} . Найдем его.

$$\begin{aligned} \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_{cutoff}} \omega^2 d\omega &= 3N = \frac{3N\omega_{cutoff}^3}{\omega_p^3} = 3N \Rightarrow \boxed{\omega_{cutoff} = \omega_D} \\ \langle E \rangle &= \frac{9N\hbar}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \text{const}(T) = \frac{9N}{(\hbar\omega_D)^3 \beta^4} \cdot \int_0^{\beta\hbar\omega_D} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \stackrel{\beta\hbar\omega \ll 1}{\approx} \\ &\approx \frac{9N}{(\hbar\omega_D)^3 \beta^4} \int_0^{\beta\hbar\omega} x^2 dx = \frac{3N}{\beta} = 3Nk_bT \end{aligned}$$

Следовательно, взяв производную по температуре и разделив на N мы получаем, что при достаточно больших температурах предел стал равен $C = 3K_b$, следовательно данная формула согласуется как с практическими экспериментами, показывающими кубическую зависимость при малых температурах, так и с тем, что при достаточно больших температурах теплоемкость становится постоянной.

Внутренняя структура вещества

Рассмотрим цепочку атомов.



$$V_{tot} = V_{eq} + \sum_i \frac{\chi}{2} (\delta x_i - \delta x_{i+1})^2,$$

Где V_{eq} - потенциал в равновесии. Запишем силу для i-го атома:

$$F_i = -\frac{\delta V}{\delta(\delta_i)} = \chi (\delta x_{n+1} - \delta x_n) + \chi (\delta x_{n-1} - \delta x_n)$$

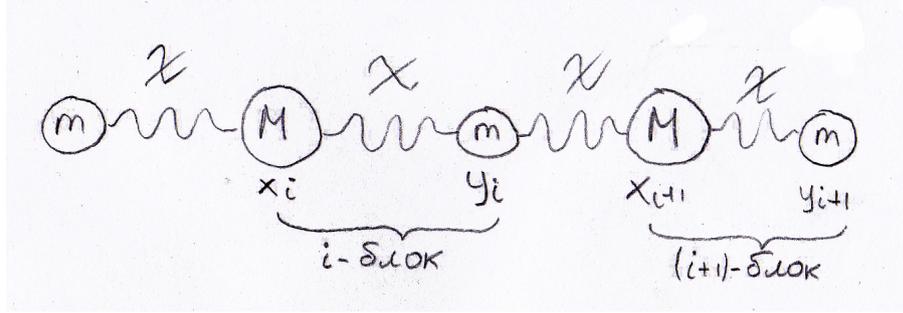
Далее, вместо δx будем писать просто x .

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_i &= \chi (x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) \\ x_n &= Ae^{i\omega t - kna} = Ae^{i\omega t - ikna} \\ -m\omega^2 Ae^{i\omega t - 2kna} &= \chi Ae^{i\omega t} [e^{-ika(n+1)} + e^{-ika(n-1)} - 2e^{-ikan}] \\ -m\omega^2 &= \chi [e^{-ika} + e^{ika} - 2] = 2\chi (\cos(ka) - 1) = -4\chi \sin^2 \frac{ka}{2} \\ \omega^2 &= \frac{4\chi}{m} \sin^2 \frac{ka}{2} \end{aligned}$$

$$\boxed{\omega = \pm 2 \sqrt{\frac{\chi}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|}$$

$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk}$, $v_{ph} = \frac{\omega}{k}$, при линейной дисперсии групповая и фазовая скорости совпадают, однако, вблизи зоны Бриллюэна т.е. при $k = \pi/a$ групповая скорость обращается в 0.

Далее, рассмотрим систему с двумя типами атомов, с разными массами.



$$V_{tot} = V_{eq} + \sum_i \frac{\chi}{2} \left((x_i - y_{i-1})^2 + (x_i - y_i)^2 \right)$$

Далее, распишем силы, действующие на i -ые атомы.

$$F_{x_i} = -(\chi(x_i - y_i) + \chi(x_i - y_{i-1})) = m\ddot{x}_i$$

$$F_{y_i} = -(\chi(y_i - x_{i+1}) + \chi(y_i - x_i)) = m\ddot{y}_i$$

Перепишем уравнения для ускорений:

$$\ddot{x}_i = -\frac{\chi}{M} (2x_i - y_i - y_{i-1})$$

$$\ddot{y}_i = -\frac{\chi}{m} (2y_i - x_i - x_{i+1})$$

Для координат получим следующие выражения:

$$x_n \sim Ae^{i\omega t} e^{-ika2n}$$

$$y_n \sim Be^{i\omega t} e^{-ik(2n+1)a}$$

Найдем дисперсионную зависимость, подставив полученные общие выражения в уравнения для ускорений.

$$-\omega^2 x_n = \frac{\chi}{M} \left(2Ae^{i\omega t - \sin kah} - Be^{i\omega t} e^{-ik(2n+1)a} - Be^{i\omega t} e^{-ik(2n-1)a} \right)$$

$$\omega^2 A = \frac{\chi}{M} \left(2A - Be^{-ika} - Be^{ika} \right)$$

$$\omega^2 B = \frac{\chi}{m} \left(2B - Ae^{-ika} - Ae^{ika} \right)$$

переобозначим $\omega^2 = \Omega$, и решим получившуюся систему.

$$\det \begin{pmatrix} \Omega - \frac{2\chi}{M} & \frac{\chi}{M} 2 \cos ka \\ \frac{\chi}{m} 2 \cos ka & \Omega - \frac{2\chi}{m} \end{pmatrix} = 0$$

$$\left(\Omega - \frac{2\chi}{M} \right) \left(\Omega - \frac{2\chi}{m} \right) = \frac{4\chi^2}{mM} \cos^2 ka$$

$$\Omega^2 - \Omega \left(\frac{2\chi}{M} + \frac{2\chi}{m} \right) + \frac{4\chi^2}{Mm} - \frac{4\chi^2}{mM} \cos^2 ka = 0$$

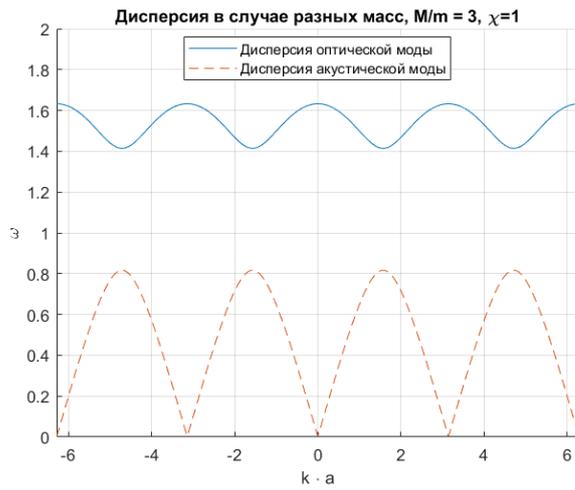
$$\omega^2 = \Omega = \frac{\chi}{\mu} \pm \sqrt{\frac{\chi^2}{\mu^2} - \frac{4\chi^2}{mM} \sin^2 ka},$$

где μ приведенная масса частиц.

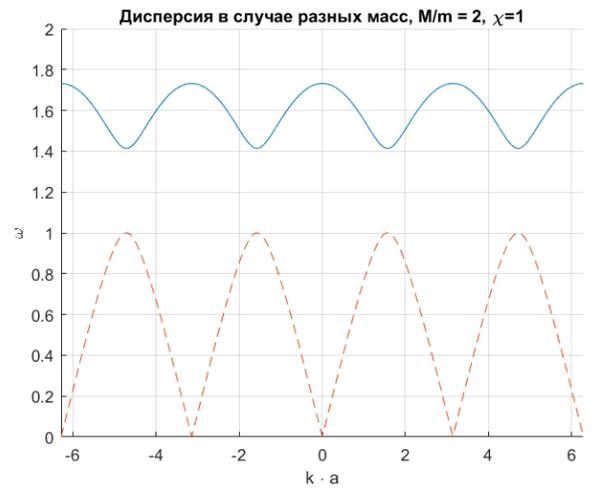
$$ka \ll 1: \quad \omega^2 \approx \frac{\chi}{\mu} \pm \sqrt{\frac{\chi^2}{\mu^2} - \frac{4\chi^2}{mM} (ka)^2} \approx \frac{\chi}{\mu} \pm \frac{\chi}{\mu} \left(1 - \frac{2k^2 a^2}{mM} \mu^2 \right)$$

Следовательно, мы переходим к выражению, из которого получим дисперсионное соотношение.

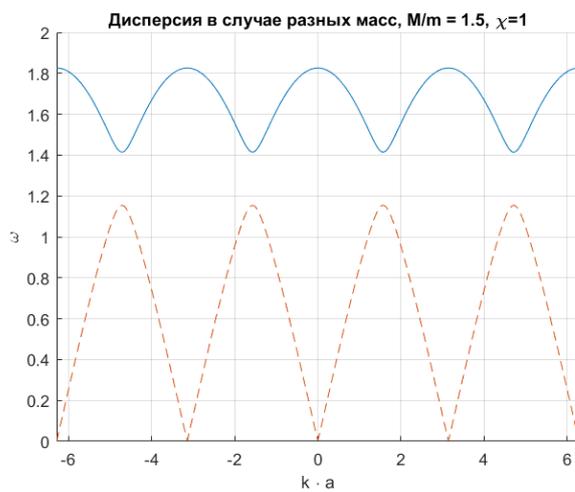
$$\omega^2 = \begin{bmatrix} \frac{2\chi}{\mu} - \frac{2k^2 a^2}{mM} \mu^2 \\ \frac{2k^2 a^2}{mM} \mu^2 \end{bmatrix}$$



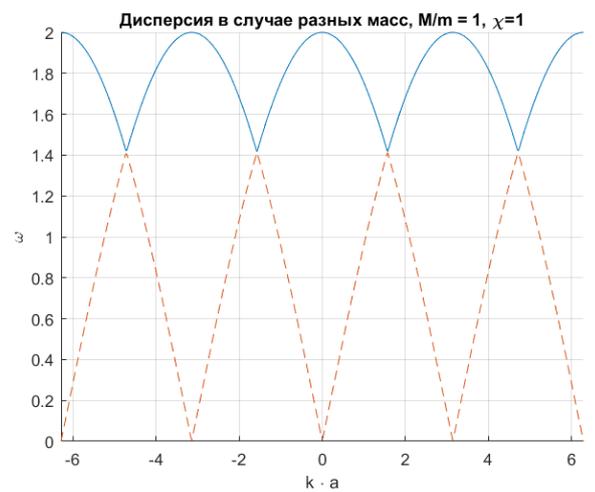
а)



б)



в)



г)

Рисунок 2 – Графики дисперсии для разных соотношений $M/m, \chi = 1$. Видно, что при уменьшении соотношения масс происходит переход к случаю системы с одинаковыми массами. Однако, нужно учесть, что в первом рассмотренном случае расстояние между грузами было a , а в этом случае $a/2$

Лекция 2

И.В. Иорш, И.А. Шельх.

Аннотация

На данной лекции рассматривается модель Друде рассеяния

1 Модель Друде

$$P_{\text{scattering}}(t) = (1 - e^{-t/\tau})$$

$$\langle p(t + dt) \rangle = \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) (\langle p(t) \rangle + F dt) + 0 \frac{dt}{\tau},$$

где $p(t)$ - импульс электрона в момент времени t . Рассмотрим случай рассеивания электрона в электрическом поле, соответственно, в этой модели возможен случай полной остановки электрона, а сила действующая на него равна $F = eE$.

Рассмотрим малое изменение импульса:

$$\frac{dp}{dt} = F - \frac{p}{\tau},$$

где $\frac{p}{\tau}$ - член вносимый рассеянием. Пусть $F = eE$:

$$\frac{dp}{dt} = eE - \frac{p}{\tau},$$

$$j = \left(\frac{ne^2\tau}{m}\right) E,$$

где $\frac{ne^2\tau}{m}$ это проводимость (δ),

$$\frac{p}{\tau} = eE \quad p = mV \quad j = nev - \text{ток},$$

выразим ток через импульс:

$$p = \frac{m}{ne} j$$

$$\vec{F} = e(\vec{E} + v \times \vec{B})$$

$$0 = eE + \frac{\vec{j} \times \vec{B}}{n} + \frac{m}{ne\tau} \vec{j}$$

$$E = \left(\frac{m}{ne^2\tau} \vec{j} - \frac{1}{ne} \vec{j} \times \vec{B}\right) \quad \vec{B} \parallel \vec{Z}$$

$$\vec{E} = \hat{p} \vec{j}$$

$$\begin{cases} \rho_{xx} = \rho_{yy} = \rho_{zz} = \frac{1}{\delta} = \frac{m}{ne^2\tau} & - \text{Эффект Холла} \\ \rho_{xy} = -\rho_{yx} = \frac{B}{ne} \end{cases}$$

В случае рассмотрения проводимости стоит взять обратную матрицу.

$$R_H = \frac{\rho_{xy}}{B} = \frac{1}{ne} - \text{Холловский коэффициент}$$

Однако при проведении эксперимента обнаружилось, что существуют так называемые положительные заряды - "дырки".

j^q – тепловой ток = Πj , где Π - коэффициент Пелетье

$$\vec{j} = ne\vec{v}$$

$$j^q \approx \frac{1}{3} (c_v T) nv$$

где cvT - тепло переносимое электроном

$$\Pi = \frac{j^q}{j} = \frac{c_v T}{3e}$$

$$\frac{\Pi}{T} = \frac{C}{3e} = \frac{K_B}{2e} = 10^{-4}$$

Однако в реальности, что эта величина порядка 10^{-7} .
Таким образом, классическое описание не совсем подходит.

2 Распределение Ферми

Рассмотрим статистическую сумму.

$$z = \sum_i e^{-\beta E_i}$$

Рассмотрим 1 квантово-механический уровень, для частиц будет действовать принцип запрета Паули.

$$z = 1 + e^{-\beta E_0}$$

Посчитаем среднее количество электронов на энергетическом уровне:

$$\langle n \rangle = \sum_i p_i n_i = \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{z} n_i = \frac{1}{1 + e^{-\beta E_0}} \cdot 0 + \frac{e^{-\beta E_0} 1}{1 + e^{-\beta E_0}}$$

$$n_F = \frac{1}{e^{\beta E_0} + 1}$$

Для системы, в которой количество частиц большое ($\rightarrow \infty$)

$$n_F(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \text{ — Распределение Ферми-Дирака}$$

$$N = \frac{v}{(2\pi)^3} \int d^3(k) n_F(k) = \frac{v}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty k^2 dk n_F(k)$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}; dk = \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2\varepsilon}}$$

$$\frac{v}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{2} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} d(\varepsilon) n_F(\varepsilon) = \frac{v}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{2} \int_0^{\varepsilon_F} \sqrt{\varepsilon} d(\varepsilon)$$

$$= \frac{U}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{2} \frac{\varepsilon_F^{3/2}}{3/2}$$

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{2} \cdot \varepsilon_F^{3/2}$$

$$\varepsilon_F = \left(\frac{3\pi^2 n}{\sqrt{2}}\right)^{2/3} \cdot \frac{\hbar^2}{m} \simeq (5 - 10 \text{eV})$$

Rem Чтобы электронный газ вел себя также, как и классический газ, его необходимо разогреть до температуры около 10000 К.

Посчитаем теплоемкость:

$$\langle E \rangle = \frac{v}{(2\pi)^3} \int d^3k \varepsilon(k) n_F(k)$$

Этот интеграл не берется. Рассмотрим асимптотику при $kT \ll \varepsilon_F$

$$\Delta \varepsilon \sim kT$$

$$N \sim g(E_F) \Delta \varepsilon$$

$$E \approx g(E_F) (kT)^2$$

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = 2g(E_F) \kappa^2$$

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k n_F(k) \rightarrow N = \int d\varepsilon g(\varepsilon) n_F(\varepsilon)$$

Лекция 3

И.В. Иорш, И.А. Шелых

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k n_F(\beta(\varepsilon - \mu))$$

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty 4\pi k^2 dk n_F,$$

где $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$.

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int 4\pi \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \cdot 1/2 \cdot d\varepsilon n_F(\varepsilon) = \int d\varepsilon g(\varepsilon) n_F(\varepsilon),$$

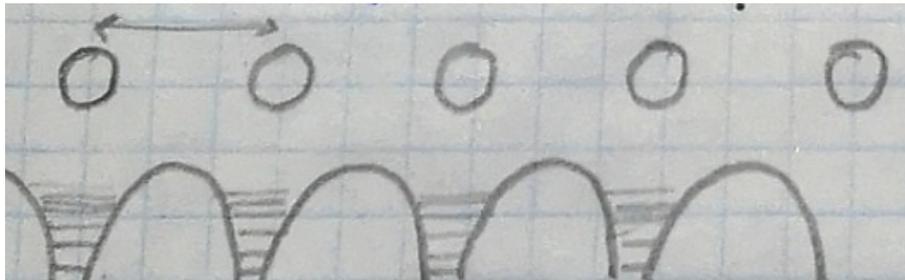
Плотность состояний определена зависимостью $\varepsilon(k)$, а также размерностью системы.

$$g(\varepsilon) = \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_F} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^{1/2} - \text{Параболический спектр } (\varepsilon \sim k^2)$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m} - \text{на самом деле } g(\varepsilon) \text{ не зависит от концентрации электронов.}$$

1 Приближение сильно связанных электронов.

Рассмотрим материал, как последовательную цепочку атомов.



Потенциал зададим периодически: $V(F + \vec{D}) = V(\vec{r})$.

Запишем Теорему Блоха в такой системе.

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{nk}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{nk}(\vec{r}),$$

где n - номер зоны, здесь нумерует элементарное состояние в элементарной ячейке.

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{R_j} V_{atomic}(R_j),$$

Rem Надо заметить, что в одномерной системе $R_j = jD$, где D расстояние между атомами.

$$V_{atomic} = -\frac{2e^2}{|r - R_j|}$$

Далее подставим следующий анзац:

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_j} e^{ikR_j} \varphi_n(r - R_j)$$

Запишем собственную волновую функцию для одного атома:

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_{atomic}(r_j) \right] \psi_n(r - R_j) = E_l \varphi_n(r - R_j)$$

Rem Решение также можно разложить по базису почти свободного электрона, но матрицы линейного уравнения будут более заполнены.

$$\langle 1 \rangle_{nn'}(k) = \int d^3 r \varphi_n^*(r) \psi_{n'}(r) = \frac{1}{N} \int d^3 r \sum_{R_j, R_{j'}} e^{ik(R_{j'} - R_j)} \varphi_n^*(r - R_j) \varphi_{n'}(r - R_{j'})$$

Зафиксируем R_j , $\sum_{R_{j'}}$, для любого другого $R_{j'}$ проведем сдвиг и получим тот-же результат в результате трансляционной симметрии, получаем N одинаковых интегралов.

$$= \int d^3 r \sum_{R_j} e^{-ikR_j} \varphi_n^*(r - R_j) \psi_{n'}(r) = \delta_{nn'} + \sum_{R_j \neq 0} e^{-ikR_j} \alpha_{nn'}(R_j)$$

$$\alpha_{nn'}(R_j) = \int d^3 r \varphi_n^*(r - R_j) \varphi_{n'}(r) - \text{Интеграл перекрытия.}$$

Теперь найдем матричные элементы H . $\langle H \rangle_{nn'}(k)$ —?

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{R_j} V_{atomic}(R_j)$$

$$H = H_{atomic} + \Delta V$$

$$H_{atomic} = \frac{p^2}{2m} + V_{atomic}(R_j = 0), \Delta V = \sum_{R_j \neq 0} V_{atomic}(R_j)$$

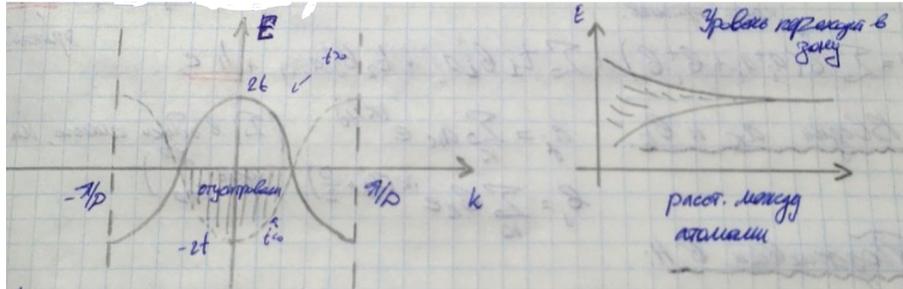
$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{\max}(k) &= \int d^3 r \varphi_{nk}^*(r) (H_{atomic} + \Delta V) \psi_{n'k}(r) = \\ &= \frac{1}{N} \int d^3 r \sum_{R, R_j} e^{ik(R_j + R)} \varphi_n^*(r - R_j) (H_{at} + \Delta V) \varphi_{n'}(r - R_j) \\ &= \int d^3 r \sum_{R_j} e^{-ikR_j} \varphi_n^*(r - R_j) (H_{atomic} + \Delta V) \varphi_{n'}(r) = \\ &= \int d^3 r \sum_{R_j} e^{-ikR_j} \varphi_n^*(r - R_j) \varepsilon_{n'} \varphi_{n'}(r) + \int d^3 r \sum_{R_j} e^{-ikR_j} \varphi_n^*(r - R_j) \Delta V \varphi_{n'}(r) \\ &= \varepsilon_{n'} \delta_{nn'} + \sum_{R_j \neq 0} e^{-ikR_j} \alpha_{nn'}(R_j) \cdot \sum_{R_i} R_j e^{-ikR_j} \gamma_{nn'}(R_i) \\ \det [\langle H \rangle_{nn'}(k) - E \langle 1 \rangle_{nn'}(k)] &= 0 \end{aligned}$$

Пусть в каждой яме только одно состояние:
 Пренебрегаем $\alpha(R_j)$:

$$\gamma(R_j) = \begin{cases} \Delta\varepsilon_i, R_j = 0 \\ t, j = \pm 1 \\ 0, - \text{ иначе} \end{cases}$$

$$\varepsilon + \Delta\varepsilon + 2t \cos(kD) - E = 0$$

$$E = \varepsilon + \Delta\varepsilon + 2t \cos(kD)$$



$4t$ - ширина зоны.

$$E = \varepsilon_0 - 2t \cos(kD), \ll kD \ll 1$$

$$E = \varepsilon_0 - 2t + t(kD)^2 = \tilde{\varepsilon} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad m^* = \frac{\hbar^2}{2tD^2} - \text{Эффективная масса.}$$

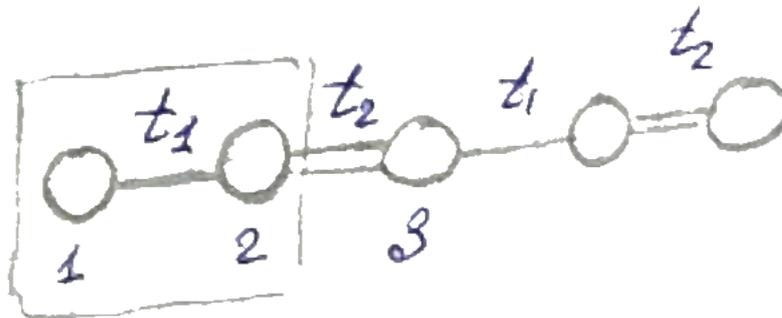
Однако, в действительности, t и D не являются независимыми величинами, так как $t \sim e^{-D}$ и t - интеграл перекрытия, а в среднем экспонента под барьером затухает.

Пусть теперь по одному электрону на атом.

N -атомов в 1-м состоянии, следовательно, $2N$ степеней свободы, а значит, ровно половина сост. занята.

Для металлов E_f внутри зоны, потому что должны быть свободные электроны.

Рассмотрим задачу, в которой в цепочке всегда есть 2 типа связи.



На каждый атом существует по 1 возможному состоянию.

γ -?. Введем операторы рождения и уничтожения для каждого атома ячейки $\hat{a}_i, \hat{\beta}_i, \hat{a}_i^+, \hat{\beta}_i^+$

$$H = \sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i + z_i + \sum_i \tilde{\varepsilon}_i b_i^+ b_i + \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} a_i^+ b_j + \tilde{t}_{ij} a_i^+ a_j + \tilde{t}_{ij} b_i^+ b_j + h.c.$$

$$H = \sum \varepsilon (a_i^+ a_i + b_i^+ b_i) + \sum t_1 b_i^+ a_i + t_2 b_i^+ a_{i+1} + \underline{h.c.}$$

Введем a_k и b_k :

$$a_i = \sum_k a_k e^{ix\kappa D j}$$

$$b_j = \sum_k b_k e^{i\kappa(Dj + \frac{D}{2})}$$

На самом деле это будут интегралы от $-\pi D$ до πD , но мы используем суммы.
Подставим все это в H:

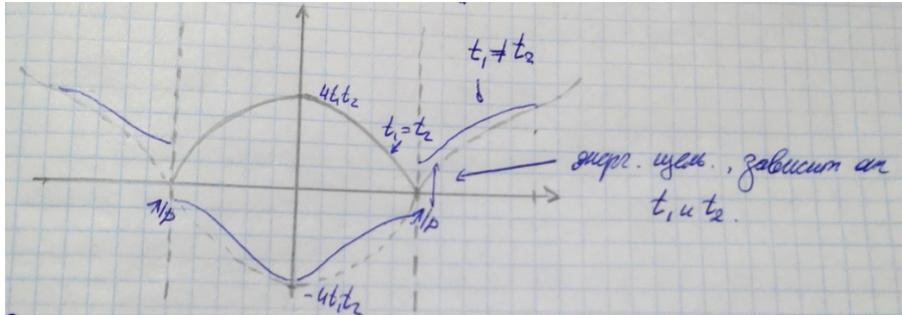
$$\begin{aligned} \sum_j \varepsilon a_j^+ a_j &= \sum_j \varepsilon \sum_{\kappa, \kappa'} a_{\kappa}^+ a_{\kappa'} e^{i(-\kappa D + \kappa' D)j} = \sum_j \varepsilon a_{\kappa}^+ a_{\kappa} \\ \sum_j t_1 b_j^+ a_j &= \sum_j t_1 \sum_{\kappa, \kappa'} b_{\kappa}^+ a_{\kappa'} e^{i(-\kappa D + \kappa' D)j} e^{-i\kappa \frac{D}{2}} = \sum_{\kappa} t_1 b_{\kappa}^+ a_{\kappa} e^{-i\kappa \frac{D}{2}} \end{aligned}$$

$$\sum t_2 b_j^+ a_{j+1} = \sum_j e^{i(-\kappa D j + \kappa' D (j+1))} e^{-i\frac{D}{2}} = \sum_k t_2 b_{\kappa}^+ a_{\kappa} e^{i\frac{\kappa D}{2}}$$

$$H = \begin{pmatrix} a_k^+ & b_k^+ \\ a_k & b_k \end{pmatrix} H_k \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

$$E = \varepsilon \pm (t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(kD))$$

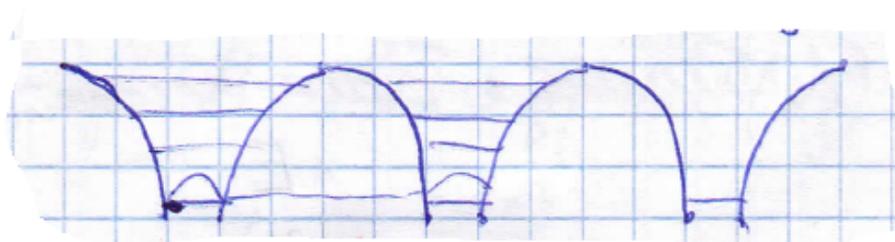
$$E = \varepsilon \pm \left[(t_1 - t_2)^2 + 4t_1 t_2 \cos^2 \frac{kD}{2} \right]$$



Лекция 4

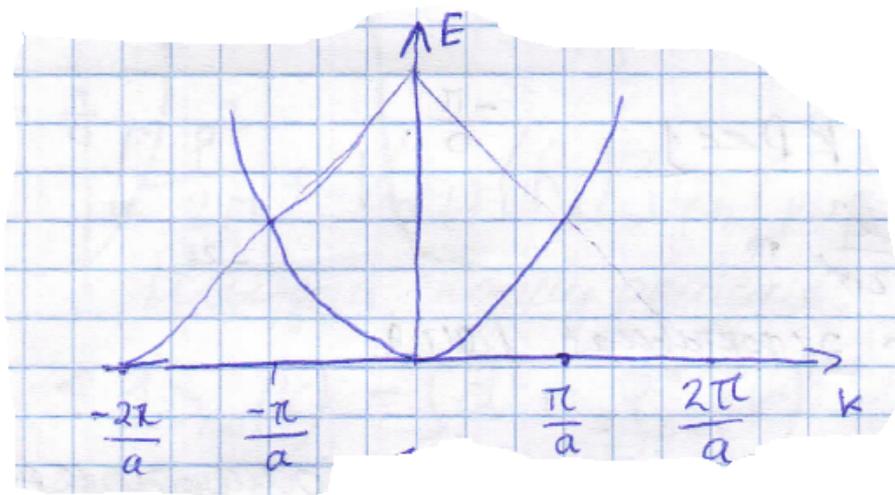
И.В. Иорш, И.А. Шелых

Nearly free electron approximation



$$\hat{H} = H_0 + U(r),$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} \quad U(r+a) = U(r).$$



Применим Т. Блоха:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \quad H\Psi = E\Psi \quad U(\vec{r} + \vec{a}) = U(\vec{r}) - \text{Условие периодичности,}$$

$$\Psi(r) = \Psi_k(r) = e^{i\vec{k}\vec{r}} U_k(r),$$

$$\vec{k} \in BZ \quad \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right]$$

$$U_k(\vec{r} + \vec{a}) = U_k(r) .$$

Перейдем в 1D:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \rightarrow e^{ikx},$$

$$\begin{aligned}
E e^{ikx} U_k(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(e^{ikx} U_k(x) \right) + U(x) e^{ikx} U_k(x), \\
\frac{\partial}{\partial x} \left[e^{ikx} U_k(x) \right] &= \left[ik U_k(x) + \frac{\partial}{\partial x} U_k(x) \right] e^{ikx}, \\
\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[e^{ikx} U_k(x) \right] &= \left[-k^2 U_k(x) + 2ik \frac{\partial}{\partial x} U_k(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} U_k(x) \right] e^{ikx}, \\
E_k U_k(x) &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left[-\left(-i \frac{\partial}{\partial x} + k \right)^2 \right] U_k(x) + U(x) U_k(x), \\
E_k U_k(x) &= \frac{1}{2m} (\hat{p} + \hbar k)^2 U_k(x) + V(x) U_k(x), \\
G &= \frac{2\pi}{a} \quad U_k(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^k e^{iGnx}, \\
V(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n(x) e^{iGnx}, \\
V_n &= \frac{1}{a} \int_0^a dx V(x) e^{-iGnx}, \\
\sum_{n=-\infty}^{\infty} E_k \cdot C_n^k e^{iGnt} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{2m} (Gn + k)^2 \cdot C_n^k e^{iGnt} + \sum_{n,m} V_m e^{iGnt} \cdot C_n^k e^{iGnx}.
\end{aligned}$$

Домножим все на

$$e^{-iG\tilde{n}x},$$

$$E_k C_{\tilde{n}}^k = \frac{\hbar^2}{2m} (G\tilde{n} + k)^2 C_{\tilde{n}}^k + \sum_n V_{\tilde{n}-n} \cdot C_n^k.$$

Rem Итоговая система уравнений решается для каждого k независимо.

$$T\psi(t) = \psi(t + a),$$

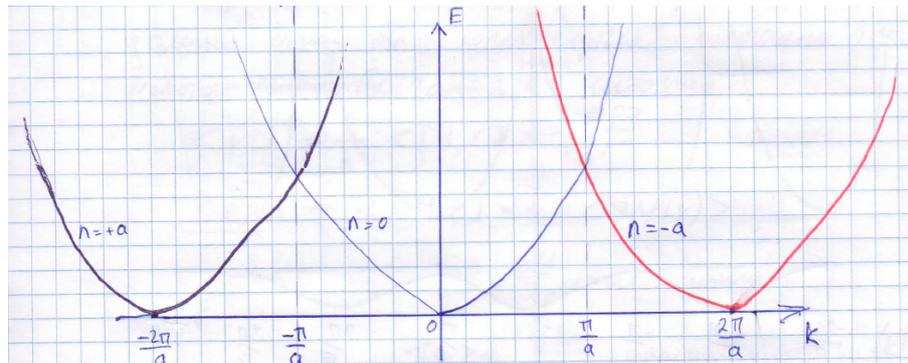
$$\hat{T} \cdot \psi(t) = e^{ikq},$$

$$[\hat{T}, \hat{H}] = 0.$$

Следовательно, такие функции будут собственными и для \hat{H} .

Построим следующую функцию:

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} (Gn + k)^2$$



Потенциал можно воспринимать как возмущение $U \ll \frac{\hbar^2 G}{2m}$, но вблизи пересечения графиков теория возмущений выходит за пределы применимости.

$$] \quad V(r) = V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a} \cdot x\right)$$

$$\frac{V_0}{2} \frac{1}{a} \int_0^a dx \cdot e^{-iGnx} \cdot (e^{iGnx} + e^{-iGnx}) = V_n,$$

Откуда получаем, что

$$V_n = \begin{cases} \frac{V_0}{2}, n = \pm 1 \\ 0, \text{иначе} \end{cases},$$

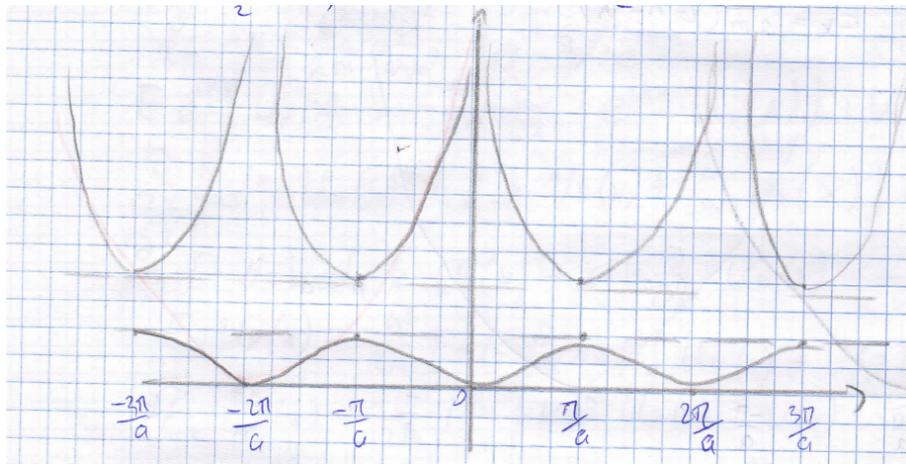
$$V_n = \frac{1}{a} \int_0^a dx \cdot e^{-iGnx} V(x)$$

$$E_k \cdot C_{\tilde{n}}^k = \frac{k^2}{2m} (G\tilde{n} + k)^2 C_{\tilde{n}}^k + \sum_n V_{\tilde{n}-n} \cdot C_n^k$$

$$V \ll \frac{\hbar^2 G^2}{2m}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{(k-G)^2}{2m} \hbar^2 & V_0/2 & 0 \\ \frac{V_0}{2} & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & \frac{V_0}{2} \\ 0 & V_0/2 & \frac{(k+G)^2 \hbar^2}{2m} \end{bmatrix}$$

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & V_0/2 \\ V_0/2 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \Delta E = \pm \frac{v}{2}$$



Rem: Почему есть запрещенная зона, но нет перекрытия?

$k = \frac{\sigma}{2} + \Delta k$, $E_{1/2} = \frac{V}{2} \pm \frac{\Delta k^2}{2m}$ Подведем некоторые итоги:

Как найти спектр? Th. Блоха \rightarrow решаем. Но до сих пор мы не учитывали вз-е электронов.

$$E_{B3} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \approx 10^{-19} \text{ Дж} = 1 \text{ эВ (чуть больше)}.$$

Это сравнимо с энергией Ферми. На самом деле систему можно описать с точки зрения невзаимодействующих электронов, но с поправочной эффективной массой, откуда появляется Теория Ферми-жидкости Ландау.

Полуклассическое приближение для Блоховских электронов

Rem: Электроны являются фермионами, для которых действует запрет Паули, соответственно ситуация, в которой две пары электронов должны были бы "соприкоснуться" исключена, так как некоторым электронам пришлось бы занять 2s состояние.

$$\langle \dot{r} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, r] \rangle = \frac{\langle \rho \rangle}{m}$$

$$\langle \dot{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, p] \rangle = -\langle \nabla V(r) \rangle$$

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p} \text{ - где } p \text{ настоящий импульс}$$

$$\langle \dot{r} \rangle = \frac{\partial \varepsilon_k^n}{\partial \hbar k} \text{ - квазиимпульс} = V_n(k)$$

Соответственно заменим импульс на квазиимпульс, а скорость на квазискорость.

$$\hbar \dot{k} = -eE(r, t) - \frac{e}{c} V_n(k) \times \bar{H}(rt)$$

$$\Psi_k(r, t) = \sum_{k'} g_k(k') e^{ik'r - i\frac{\varepsilon_{k'}}{\hbar} t}$$

Данное выражение работает только при $\Delta k \ll G = \frac{2\pi}{a}$.

Волновой пакет делокализован в масштабе периода решетки, т.е. \bar{e} - не замечают отдельный атом. Мы говорим только об изолированной зоне, в случае пересечения не работает прямое взятие производной, а значит нет магнитного поля, а существует только электрическое.

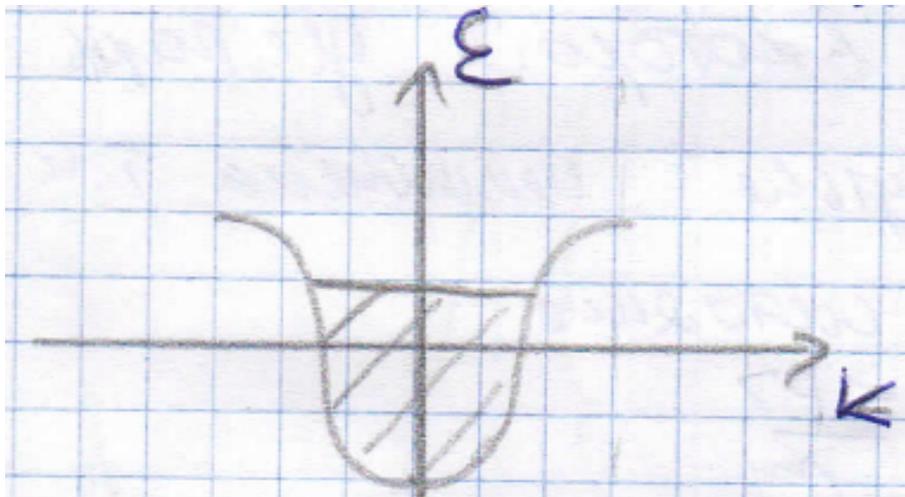
$$\varepsilon_k = -2t \cos(ka)$$

$$k = \frac{-eE_0 t}{\hbar}$$

$$V_k = \frac{2ta}{\hbar} \sin(ka)$$

$$V = -\frac{2ta}{\hbar} \sin\left(\frac{eE_0}{\hbar} at\right)$$

Блоховские осцилляции



$$\langle j \rangle = -e2 \int \frac{dk}{2\pi} U(k) n_F(k) = -e2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} \cdot \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \hbar k} n_F(k)$$

Для случая полнзонных проводников, $n_F = 1$, а значит предыдущий интеграл сводится к следующему виду:

$$-2e \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dx}{2\pi} \frac{\partial x}{\partial \hbar k}$$

Этот интеграл дает просто разность энергий на концах, но $\varepsilon_k = \varepsilon_k + G$, а значит, что по полной зоне, как и по пустой, ток не идет.

Рассмотрим плотность состояния $g(\varepsilon)$:

$$g(\varepsilon) = \frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk} \cdot \frac{dk}{dE}$$

$$\int dk V(u) = \int d\varepsilon \frac{1}{V(\varepsilon)} V(\varepsilon)$$

$$j = -2e \int \frac{dk}{2\pi} \frac{d\varepsilon}{dk} n_F(k) = -2e \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} 1 + 2e \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k^2} \cdot (1 - n(k))$$

— Другой подход к подсчету тока

