

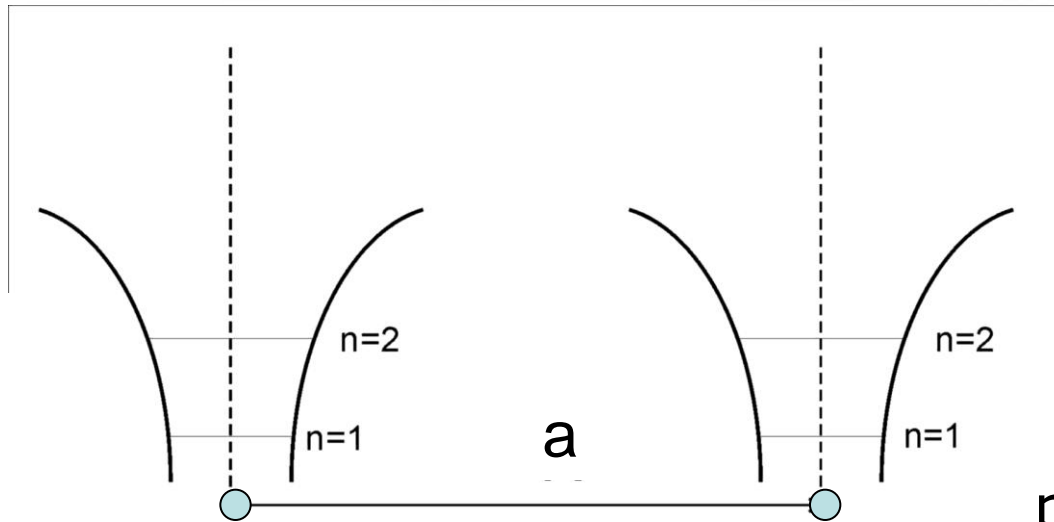


AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

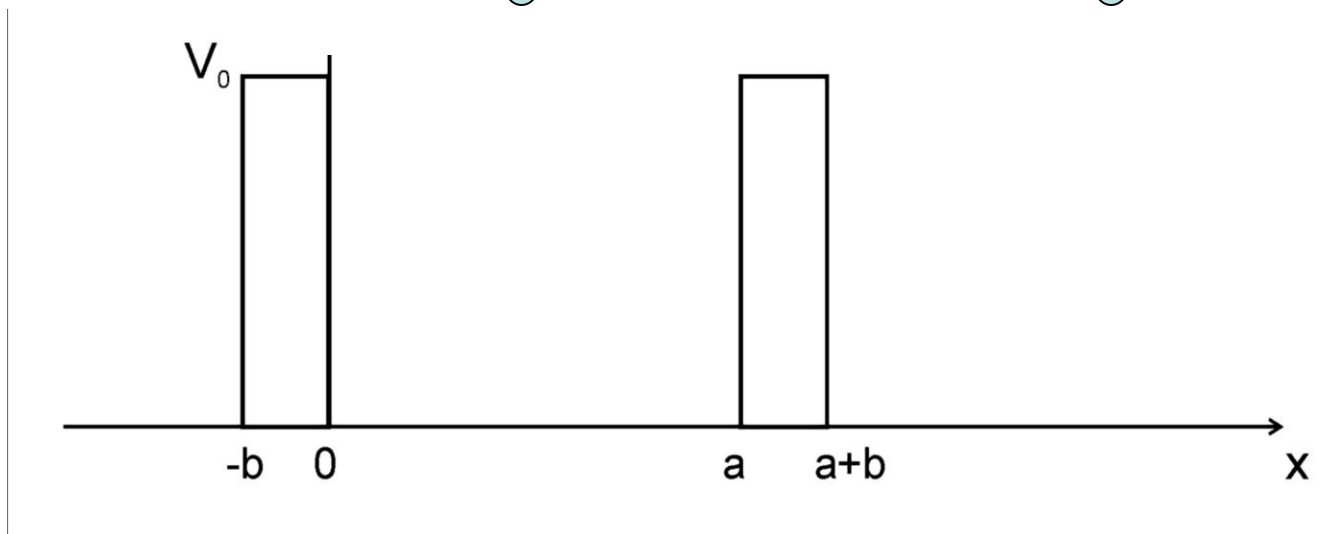
Struktura energetyczna ciał stałych-cd

Przybliżenie periodycznego potencjału sieci krystalicznej

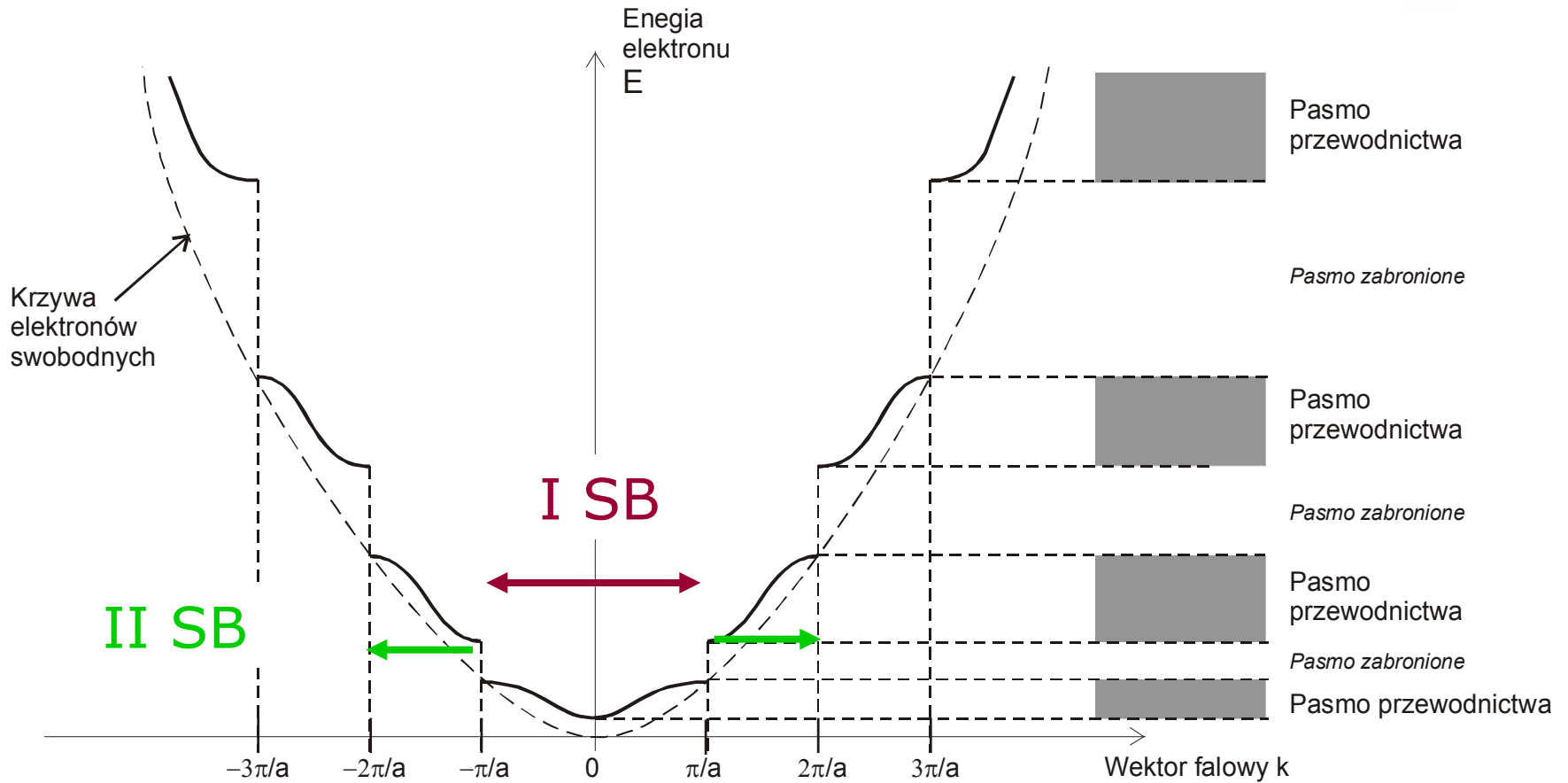
model
Kroniga-
Penneya



potencjał
rzeczywisty



Strefy Brillouina



Nieciągłości funkcji $E = E(k)$ występują dla

$$k = \pm \frac{n\pi}{a}$$

Strefy Brillouina

Dla wartości k zawartych między tymi, w których relacja dyspersji $E(k)$ jest nieciągła, wszystkie wartości własne są dopuszczalne.

Wartości k zawarte między $-\pi/a$ oraz $+\pi/a$ wyznaczają **I-szą strefę Brillouina**.

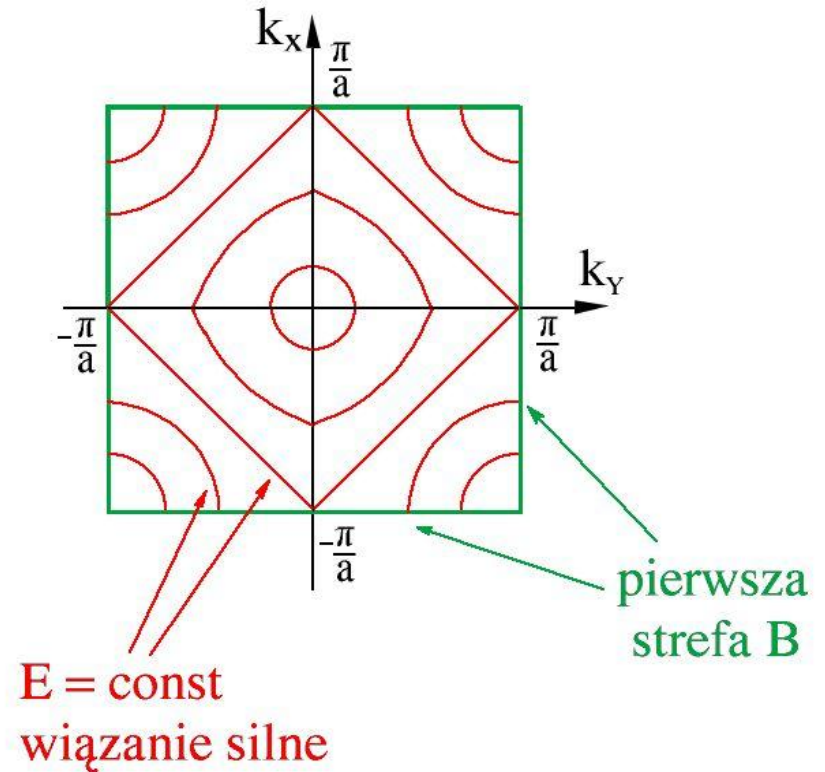
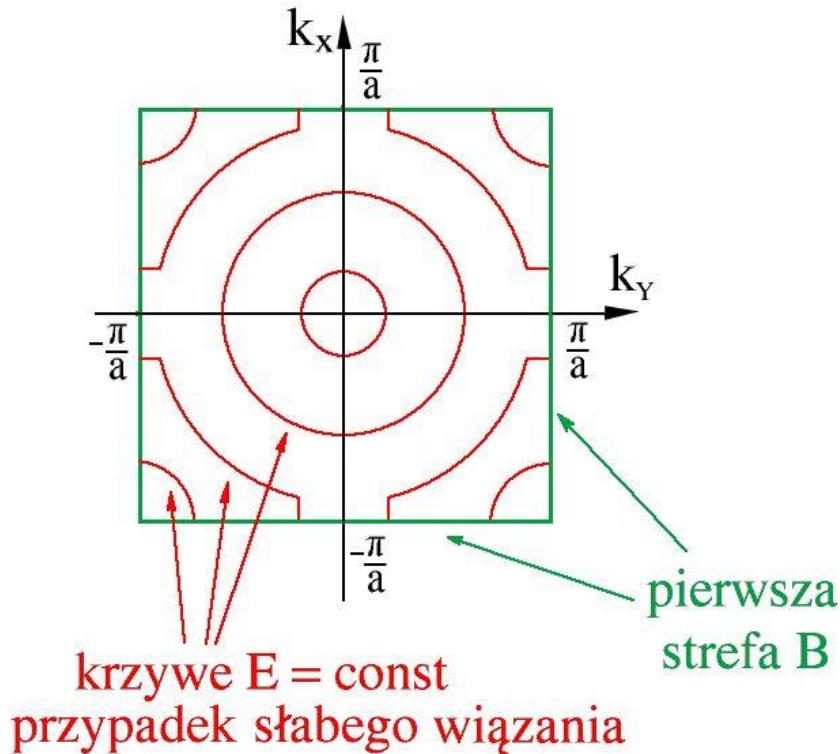
Wartości k zawarte między $+\pi/a$ i $+2\pi/a$ oraz $-\pi/a$ i $-2\pi/a$ wyznaczają **II-gą strefę Brillouina**.

Można wykreślić krzywe stałej energii $E = \text{const}$.

Gdy relacja dyspersji jest kwadratowa ($E \sim k^2$) to krzywe $E = \text{const}$ są kołami. Przykład elektrony swobodne w modelu Fermiego.

Strefy Brillouina

Gdy elektrony poruszają się w polu zmiennego potencjału np. w sieci krystalicznej (potencjał periodyczny) to relacja dyspersji nie jest kwadratowa.



Strefy Brillouina

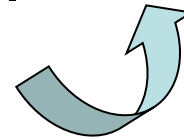
Przerwy pomiędzy wierzchołkiem dozwolonego pasma a dnem następnego wyższego pasma mogą być rozumiane jako wynik odbicia Bragga fali bieżącej opisującej elektron poruszający się w sieci.

Fala odbija się od barier i gdy jest spełniony warunek Bragga:

$$2a = n\lambda$$

występuje interferencja konstruktywna.

Ale $\lambda = \frac{2\pi}{k}$



Otrzymujemy $a = \frac{n\pi}{k}$

Strefy Brillouina

Wartości k , dla których pojawiają się przerwy w $E(k)$ są dokładnie tymi wartościami liczby falowej, dla których długość fali λ spełnia warunki odbicia Bragga.

Przerwy powstają bo istnieją dwa sposoby na to, aby amplituda fali padającej była równa amplitudzie fali odbitej (tworzy się fala stojąca), dla każdej krytycznej wartości k :

$$k = \frac{n\pi}{a}$$

$$\psi = e^{i(\pi/a)x} + e^{-i(\pi/a)x} \propto \cos(\pi x / a)$$



 fala padająca fala odbita

lub

$$\psi = e^{i(\pi/a)x} - e^{-i(\pi/a)x} \propto \sin(\pi x / a)$$

Strefy Brillouina

Przypadki:

$$\psi = e^{i(\pi/a)x} + e^{-i(\pi/a)x} \propto \cos(\pi x / a)$$

$$\psi = e^{i(\pi/a)x} - e^{-i(\pi/a)x} \propto \sin(\pi x / a)$$

różnią się ze względu na położenie węzłów fali stojącej a zatem położenia maksimum i minimum gęstości prawdopodobieństwa $\psi\psi^*$

W pierwszym przypadku ($\cos \pi x/a$) gęstość prawdopodobieństwa będzie maksymalna dla $x=0, \pm a, \pm 2a...$ podczas gdy dla drugiego przypadku ($\sin \pi x/a$) gęstość prawdopodobieństwa w tych punktach będzie równa 0.

Jeżeli punkty te są położeniami barier pomiędzy jonami to elektron będzie odczuwał większe odpychanie w przypadku drugim czyli będzie miał wyższą energię niż w przypadku pierwszym. **Istnieją dwie energie dla tej samej krytycznej liczby falowej k .**

Masa efektywna elektronu w kryształach

Ruch elektronu w zewnętrznym polu elektrycznym jest równoważny propagacji paczki fal.

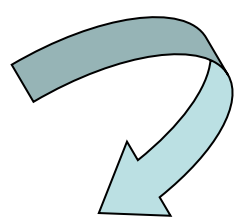
Paczka ta jest utworzona ze stanów leżących w pobliżu dowolnej szczególnej wartości k w pojedynczym paśmie.

Prędkość grupowa tej paczki wynosi:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \hbar^{-1} \frac{dE}{dk}$$

Masa efektywna elektronu w krysztale

W obecności zewnętrznego pola elektrycznego na elektron w krysztale działa siła:

$$\vec{F} = e\vec{\mathcal{E}} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$$


Wyliczamy przyspieszenie jakie uzyskuje elektron pod wpływem działania siły:

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

Otrzymujemy:

$$\frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-2} \frac{d^2 E}{dk^2} F$$

Po przekształceniu:

$$F = \frac{dv_g}{dt} \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

Masa efektywna elektronu w kryształach

$$F = \frac{dv_g}{dt} \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

Zgodnie z drugą zasadą dynamiki Newtona dostajemy definicję masy efektywnej:

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

Masa efektywna m^* uwzględnia siły wewnątrz kryształu a zatem potencjał periodyczny, gdyż wyrażenie $\frac{d^2 E}{dk^2}$ zależy od relacji dyspersji, a ta z kolei od charakteru potencjału.

Masa efektywna

Przykład obliczania masy efektywnej dla elektronu swobodnego.

Dla elektronu swobodnego relacja dyspersji opisana jest wzorem:

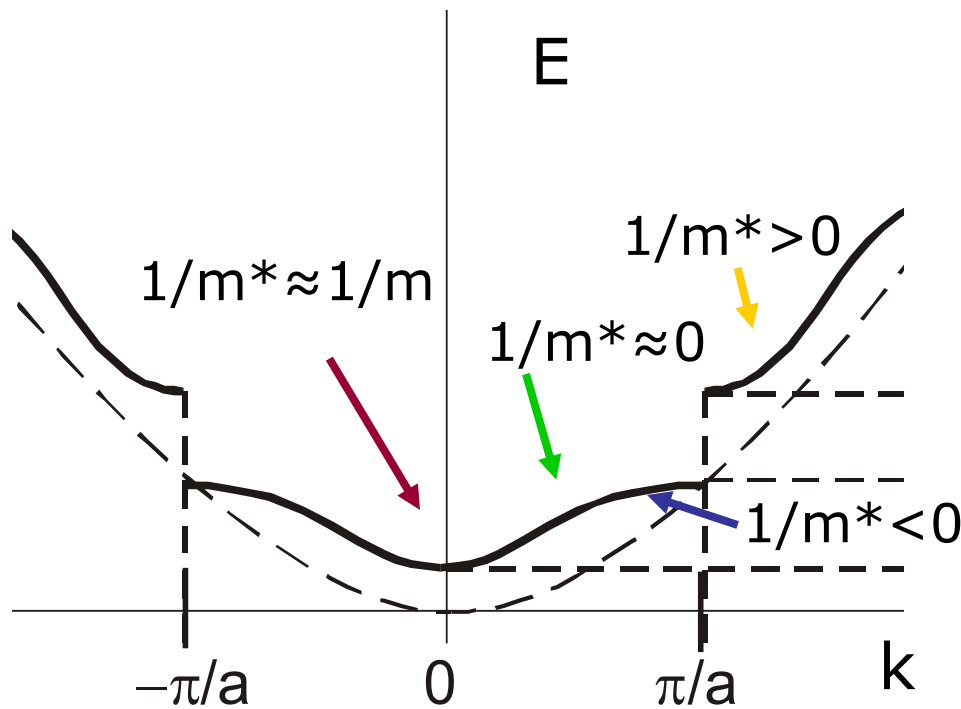
$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

Stąd:

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}$$

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

Masa efektywna elektronu w modelu Kroniga-Penneya



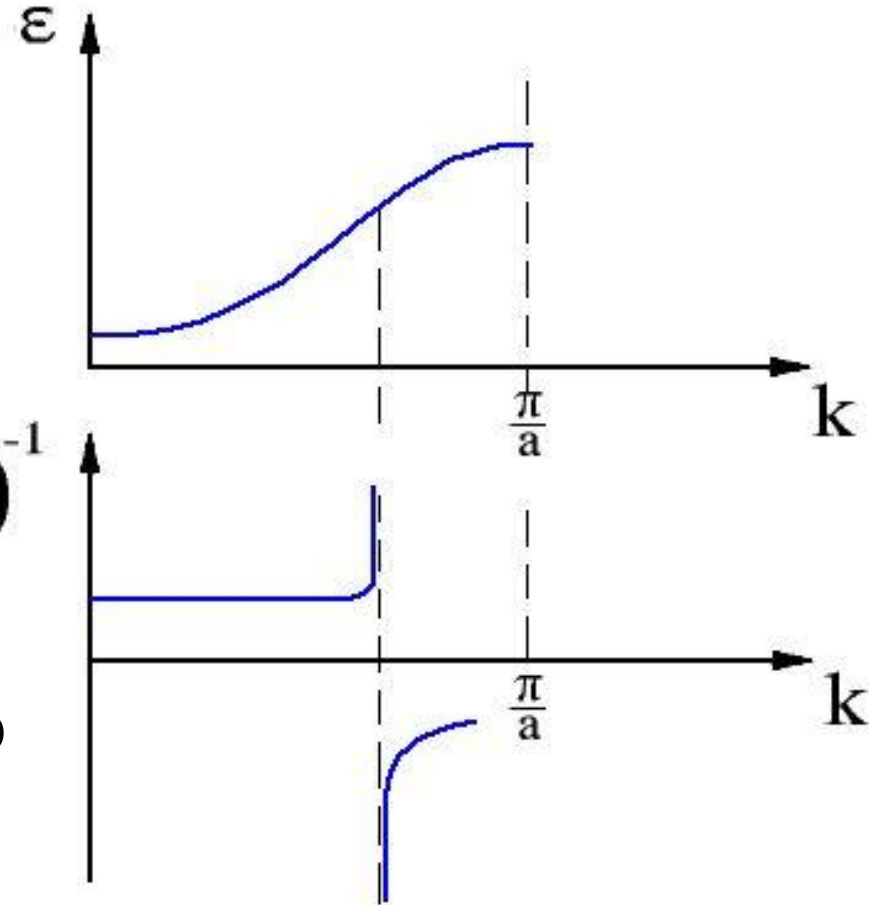
$$1/m^* = \hbar^{-2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)$$

Masa efektywna jest objaśniana reakcją elektronu w kryształach na przyłożone pole elektryczne.

Masa efektywna jest też miarą krzywizny pasma i jest mała gdy E rośnie szybko z k (gęstość poziomów mała)

Masa efektywna elektronu w kryształach

Zależność energii elektronu od wektora falowego k (relacja dyspersji) w pierwszej strefie Brillouina



Zależność masy efektywnej elektronu od wektora falowego k w pierwszej strefie Brillouina