

## Неделя №4

### Зонная структура

Драчов Ярослав  
Факультет общей и прикладной физики МФТИ

25 марта 2021 г.

#### 3.38.

*Решение.* По определению групповой скорости

$$V = \frac{\partial E}{\partial p}.$$

$$V_y = \frac{\varepsilon_0 a}{\hbar} \sin\left(\frac{p_y a}{\hbar}\right) = 0 = V_z, \quad V_x = \frac{\varepsilon_0 a}{\hbar} \sin \frac{5\pi}{6} = \frac{\varepsilon_0 a}{2\hbar}.$$

Ускорение

$$\frac{dV}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{\partial E}{\partial p} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{p=p+\frac{dp}{dt}\Delta t} - \left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{p=p}}{\Delta t}.$$

По определению

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{dp_z}{dt} = 0, \quad \frac{dp_y}{dt} = \frac{He \varepsilon_0 a}{c} \frac{1}{2\hbar}.$$

$$\frac{dV_y}{dt} = \frac{He \varepsilon_0^2 a^3}{c} \frac{1}{2\hbar^3},$$

соответственно

$$\frac{dV_x}{dt} = \frac{dV_z}{dt} = 0.$$

#### 3.85.

*Решение.* Ответом в задаче будет

$$E = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_0} + E_F = E_F + 4,61 \text{ эВ},$$

так как красной границе фотоэффекта соответствует «выбивание» электрона с уровня Ферми.

ГЦК-решётка означает четыре атома на элементарный куб. У серебра один электрон проводимости на атом. Это значит, что на элементарный куб приходится четыре электрона. Концентрация электронов  $n = 4/a^3$ , для импульса Ферми пользуемся известным выражением

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{12\pi^2}}{a}.$$

Откуда имеем

$$p_F = \hbar k_F = 1,26 \cdot 10^{-24} \frac{\text{кг} \cdot \text{м}}{\text{с}}$$

и соответственно

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m} = 5,44 \text{ эВ.}$$

Добавляя расстояние от уровня Ферми до уровня свободного электрона 4,61 эВ, получим ответ  $E = 10,05 \text{ эВ}$ .

### 3.57.

*Решение.* Во втором металле закон дисперсии в той же системе координат имеет вид:

$$E_{\Pi} = \frac{p_x^2}{2m_x^*} + \frac{p_y^2}{2m_y^*} + \frac{p_z^2}{2m_z^*}$$

(из-за поворота локальных осей кристалла движение вдоль оси  $X$  теперь характеризуется эффективной массой  $m_y$  и наоборот).

Перейдём к вычислению закона преломления. Пусть в области I был электрон с импульсом  $(p_x, p_y, 0)$ , после прохождения границы в области II он перейдёт в состояние с импульсом  $(p_{xI}, p_{yI}, 0)$ . Поскольку испускания или поглощения фононов и других неупругих процессов нет, энергия сохраняется, то есть:

$$\frac{p_x^2}{m_x^*} + \frac{p_y^2}{m_y^*} = \frac{p_{xI}^2}{m_y^*} + \frac{p_{yI}^2}{m_x^*}.$$

Другая сохраняющаяся величина это  $p_x = p_{xI}$ . Данный закон сохранения квазиимпульса связан с тем, что система трансляционно инвариантна вдоль направлений  $Ox$  и  $Oz$ . Соответственно

$$p_{yI} = \sqrt{p_x^2 \left(1 - \frac{m_x^*}{m_y^*}\right) + p_y^2 \frac{m_x^*}{m_y^*}}.$$

Данные выражения для импульсов решают задачу.

Найдём закон преломления. Пусть электрон падал под углом  $\alpha$  (отсчитываем от нормали к поверхности раздела, то есть от оси  $Y$ ),  $\text{tg } \alpha = p_x/p_y$ , а вылетел под углом  $\beta$ ,  $\text{tg } \beta = p_x/p_{yI}$ . Тогда, выражая всё через  $p_x$  и подставляя в закон сохранения энергии, имеем:

$$\frac{1}{m_x^*} + \frac{\text{ctg}^2 \alpha}{m_y^*} = \frac{1}{m_y^*} + \frac{\text{ctg}^2 \beta}{m_x^*}.$$

$$\frac{\text{ctg}^2 \alpha - 1}{m_y^*} = \frac{\text{ctg}^2 \beta - 1}{m_x^*}.$$

$$\frac{1}{m_y^*} \frac{\cos 2\alpha}{\sin^2 \alpha} = \frac{1}{m_x^*} \frac{\cos 2\beta}{\sin^2 \beta}.$$

Откуда

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} \sqrt{\frac{\cos 2\beta}{\cos 2\alpha}} = \sqrt{\frac{m_x^*}{m_y^*}}.$$

Асимптотика при малых углах

$$\frac{\alpha}{\beta} = \sqrt{\frac{m_x^*}{m_y^*}}.$$

#### 4.54.

*Решение.* Основное свойство кристаллов — их трансляционная симметрия. Поэтому для описания кристалла можно воспользоваться следующим приёмом: взять кристалл конечных размеров и транслировать его для получения кристаллов произвольных размеров. При этом размер этого кристалла (т. н. основная область) должен быть выбран так, чтобы сохранилась трансляционная симметрия, т. е. на основных направлениях трансляции укладывалось целое число элементарных (примитивных) ячеек. При этом набег фазы волновой функции электрона вдоль соответствующего направления будет кратен  $2\pi$ . Это приводит к дискретным значениям проекций квазиимпульса в зоне Бриллюэна, определяемым размерами основной области кристалла. Поскольку размер зоны Бриллюэна однозначно определяется размерами примитивной ячейки, число разрешённых значений квазиимпульса в зоне Бриллюэна равно числу примитивных ячеек. Если кристалл графена состоит из  $N$  атомов, а в примитивной ячейке графена содержится два атома, то число разрешённых значений будет равно  $N/2$ . Каждому значению квазиимпульса, как следует из закона дисперсии, соответствует два уровня энергии: один в валентной зоне, другой — в зоне проводимости. Поэтому число мест для электронов с учётом спинового вырождения будет равно  $2 \cdot 2 \cdot N/2 = 2N$ . Из них  $N$  мест будет в валентной зоне и  $N$  — в зоне проводимости. Т. к. на один атом приходится по одному «свободному» электрону, то всего делокализованных электронов будет  $N$ . При нулевой температуре электроны занимают наинизшие энергетические состояния, поэтому вследствие симметричного характера спектра вся валентная зона будет заполнена, а зона проводимости будет пустой. Таким образом для указанного вида спектра химический потенциал графена, отсчитываемый от уровня энергии электрона в атоме, равен нулю и уравнение для определения формы ферми-поверхности имеет вид

$$1 + 4 \cos p_x a \cos \frac{p_y a}{\sqrt{3}} + 4 \cos^2 \frac{p_y a}{\sqrt{3}} = 0.$$

Т. к.  $\cos \frac{p_y a}{\sqrt{3}} \neq 0$ , то уравнение можно переписать так:

$$-4 \cos p_x a = 4 \cos \frac{p_y a}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\cos \frac{p_y a}{\sqrt{3}}}.$$

Согласно неравенству о среднем арифметическом и среднем геометрическом, правая часть уравнения  $\geq 4$  при  $\cos \frac{p_y a}{\sqrt{3}} > 0$ , либо  $\leq -4$  при  $\cos \frac{p_y a}{\sqrt{3}} < 0$ .

Поскольку левая часть уравнения ограничена  $-4 \leq 4 \cos p_x a \leq 4$ , то равенство возможно только если одновременно

$$\begin{cases} \cos p_x a = 1 \\ \cos \frac{p_y a}{\sqrt{3}} = -\frac{1}{2} \end{cases} \text{ или } \begin{cases} \cos p_x a = -1 \\ \cos \frac{p_y a}{\sqrt{3}} = \frac{1}{2} \end{cases},$$

откуда

$$\begin{cases} p_x a = 2\pi m \\ \frac{p_y a}{\sqrt{3}} = \pm \frac{2}{3}\pi + 2\pi s \end{cases} \text{ или } \begin{cases} p_x a = \pi + 2\pi n \\ \frac{p_y a}{\sqrt{3}} = \pm \frac{1}{3}\pi + 2\pi l. \end{cases}$$

Подставляя данные, получаем, что

$$\begin{cases} p_x = \frac{4\pi\hbar}{3b}m \\ p_y = \pm \frac{4\pi\hbar}{3\sqrt{3}b} + \frac{4\pi\hbar}{\sqrt{3}b}s \end{cases} \text{ или } \begin{cases} p_x = \frac{2\pi\hbar}{3b} + \frac{4\pi\hbar}{3b}m \\ p_y = \pm \frac{2\pi\hbar}{3\sqrt{3}b} + \frac{4\pi\hbar}{\sqrt{3}b}l. \end{cases}$$

Отбирая только те значения квазиимпульса, которые попадают в первую зону Бриллюэна, получаем уравнение прямых линий в  $\mathbf{p}$ -пространстве:

$$\begin{cases} p_x = 0 \\ p_y = \pm \frac{4\pi\hbar}{3\sqrt{3}b} \end{cases} \text{ или } \begin{cases} p_x = \pm \frac{2\pi\hbar}{3b} \\ p_y = \pm \frac{2\pi\hbar}{3\sqrt{3}b}. \end{cases}$$

Пересечение указанных линий даёт вершины шестиугольника. Таким образом, поверхность Ферми графена состоит из шести точек и её площадь равна нулю.

Как видно из закона дисперсии, для любого направления в обратном пространстве кроме диагоналей шестиугольника, на границе зоны Бриллюэна возникает щель (запрещённая зона) в спектре электронов. Она максимальна в середине сторон шестиугольника и уменьшается в стороны вершин, где исчезает вовсе (зона проводимости соприкасается с валентной зоной). С точки зрения своих электронных свойств, графен можно считать либо бесщелевым полупроводником, либо полуметаллом с нулевым перекрытием зон.

**Т4-2.**

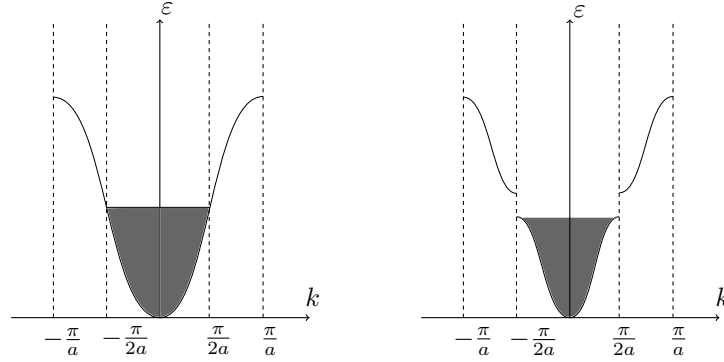


Рис. 1: Схема заполнения электронных состояний до (слева) и после (справа) димеризации цепочек

*Решение.* В исходной цепочке один электрон на примитивную ячейку и первая зона Бриллюэна одномерной цепочки оказывается заполнена ровно на половину — поэтому это и будет проводником (металлом). После димеризации объём, занимаемый электронами в  $k$ -пространстве не меняется, а

первая зона Бриллюэна уменьшается вдвое. Изменение периодичности кристалла приводит к появлению дополнительного вклада в создаваемый им потенциал с периодом  $2a$ , этот вклад мал в силу малости смещения ионов и может быть учтён в рамках приближения слабой связи.

Точный расчёт задач не требуется, но результат применения приближения слабой связи очевиден — на границе новой зоны Бриллюэна образуется разрыв спектра и запрещённая зона. При этом вблизи границы энергия электронов из нижней ветви станет ещё немного ниже. В результате суммарная кинетическая энергия электронов понизится. Таким образом, в этом фазовом переходе выигрыш в энергии возникает за счёт уменьшения суммарной кинетической энергии электронов и оказывается, что в одномерном случае он всегда больше проигрыша в упругой энергии при деформации (проигрыш  $\propto \delta^2$ , выигрыш  $\propto \delta^2 \ln \delta$ ).

После димеризации нижняя энергетическая зона окажется заполнена полностью и система станет диэлектриком.

#### Т4-3.

*Решение.* Для простой кубической решётки обратная решётка также простая кубическая с периодом  $2\pi/a$ . Фермиевский волновой вектор  $k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n} \approx 3,09/a < \pi/a$ , поэтому ферми-сфера полностью уместается в первой зоне Бриллюэна. В силу слабости взаимодействия (по условию) искажением ферми-поверхности от идеальной сферической формы пренебрегаем.

В силу слабости взаимодействия электронов с периодическим потенциалом кристалла изменение спектра можно считать слабым, запрещённые зоны узкими и за исключением непосредственной окрестности границ зоны Бриллюэна можно считать спектр квадратичным

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Импульс кванта света в УФ-диапазоне много меньше фермиевского, поэтому в рамках приведённой зонной схемы переход происходит «вертикально» — без изменения импульса электрона. Мы можем добавить вектор обратной решётки, чтобы перейти к расширенной или периодической зонной схеме. Необходимо после такого перехода «вверх» на  $\hbar\omega$  и «вбок» на  $\mathbf{G}$  попасть на квадратичный спектр с минимальным приростом энергии. Очевидно, что минимальному изменению энергии будет соответствовать смещение на вектор обратной решётки минимальной длины, например,  $(2\pi/a; 0; 0)$  из точки в  $k$ -пространстве  $(-k_F; 0; 0)$ . Так как  $k_F$  всё же близко к границе зоны Бриллюэна, то и оттранслированная точка оказывается близка к границе:

$$\frac{2\pi}{a} - k_F \approx \frac{3.19}{a}.$$

Отсюда искомая энергия кванта

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \left( \frac{2\pi}{a} - k_F \right)^2 - k_F^2 \right) = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \left( \frac{(2\pi)^2}{(3\pi^2)^{2/3}} - 2 \frac{2\pi}{(3\pi^2)^{1/3}} \right) \approx \\ &\approx 0,068 E_F = 0,2 \text{ эВ} . \end{aligned}$$

Это энергия кванта ИК-диапазона, она существенно меньше типичных значений работы выхода для металла.