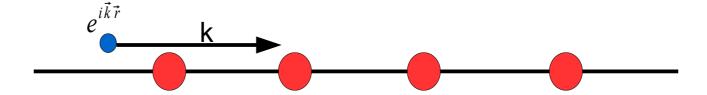
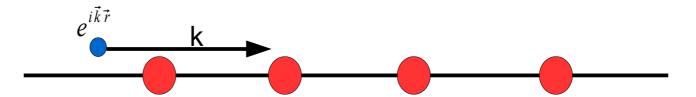


В.Н.Глазков, «Квантовая макрофизика», 23.02.2020

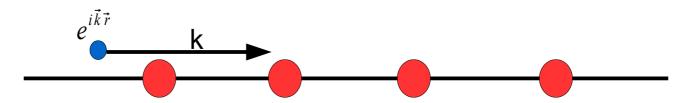






$$\left(\frac{\hat{p}^{2}}{2m} + U(\vec{r})\right)\Psi = E\Psi$$

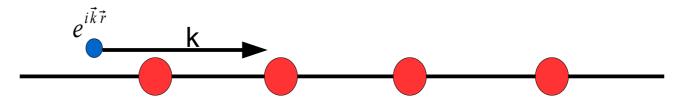
$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{T})$$



$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r})\right)\Psi = E\Psi$$

 $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{T})$ 

плоская волна не будет решением уравнения Шредингера в периодическом потенциале



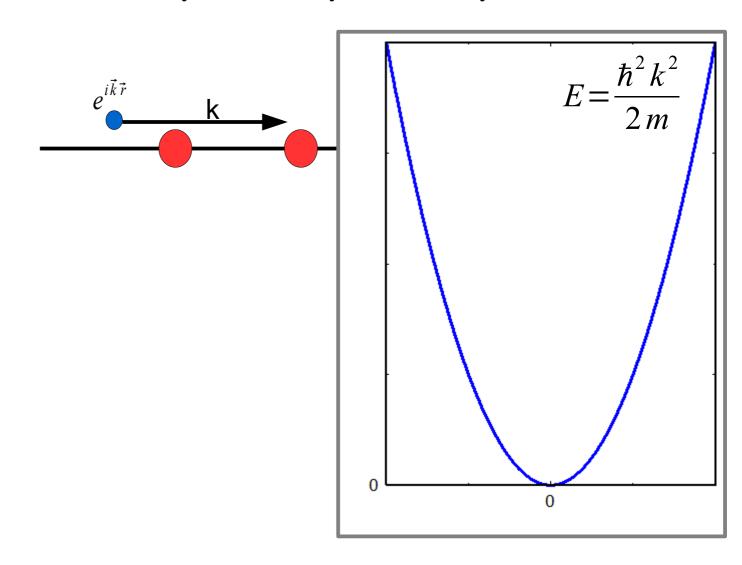
$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r})\right)\Psi = E\Psi$$

 $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{T})$ 

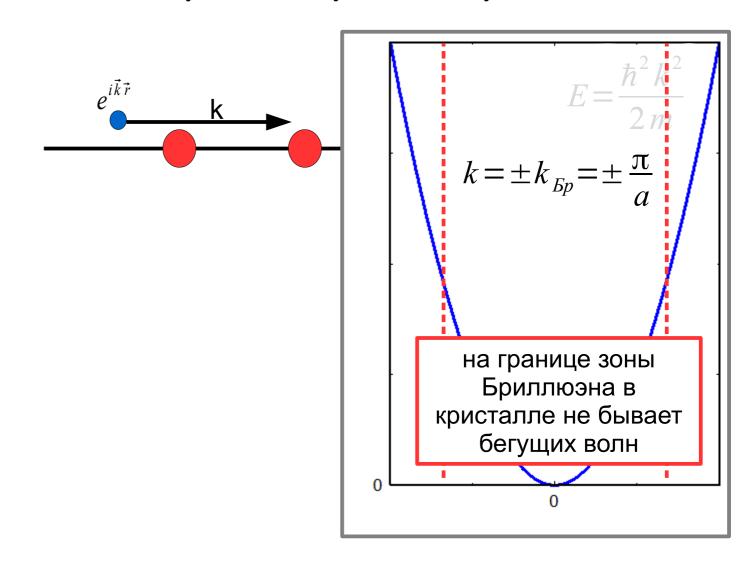
плоская волна не будет решением уравнения Шредингера в периодическом потенциале

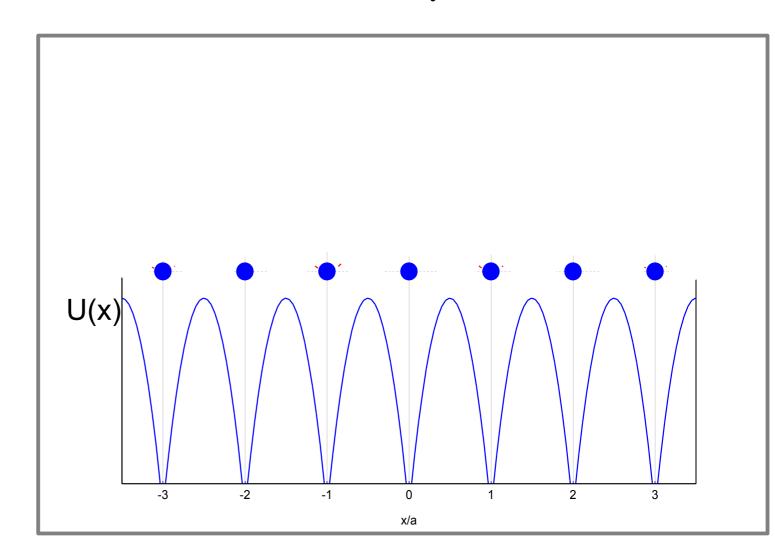
$$E(k) \neq \frac{\hbar^2 k^2}{2 m}$$

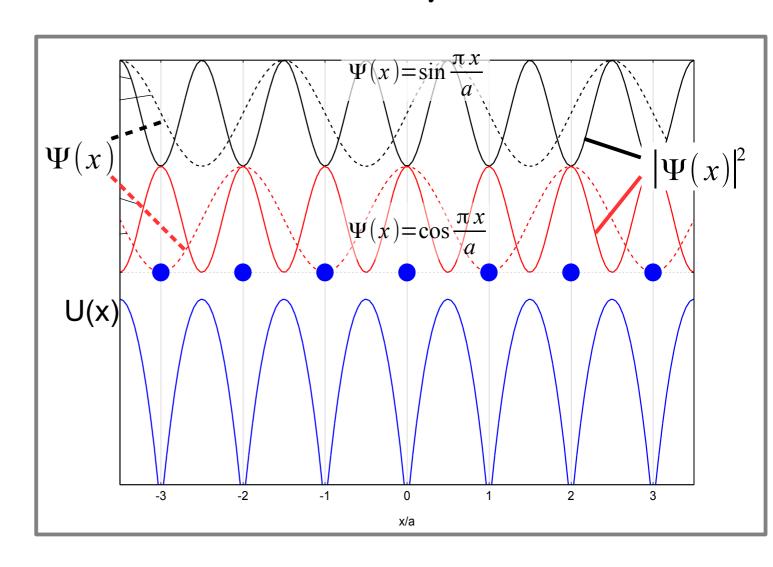
### Спектр электрона в кристалле

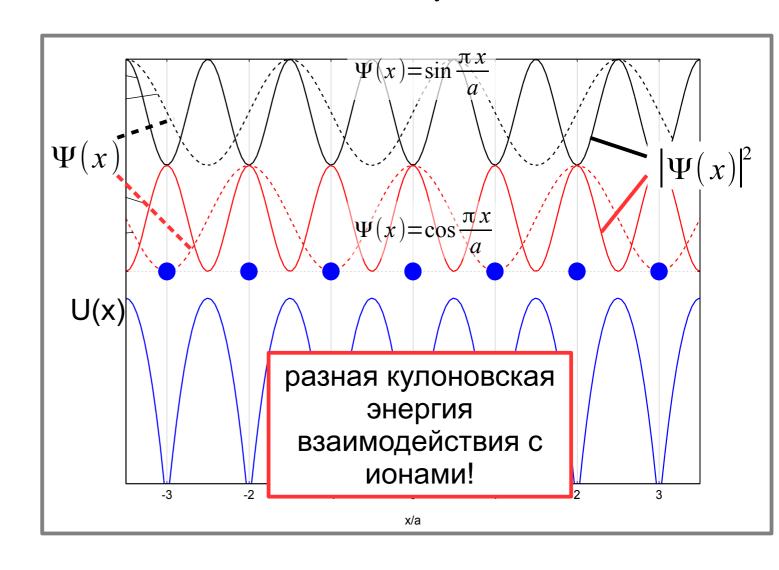


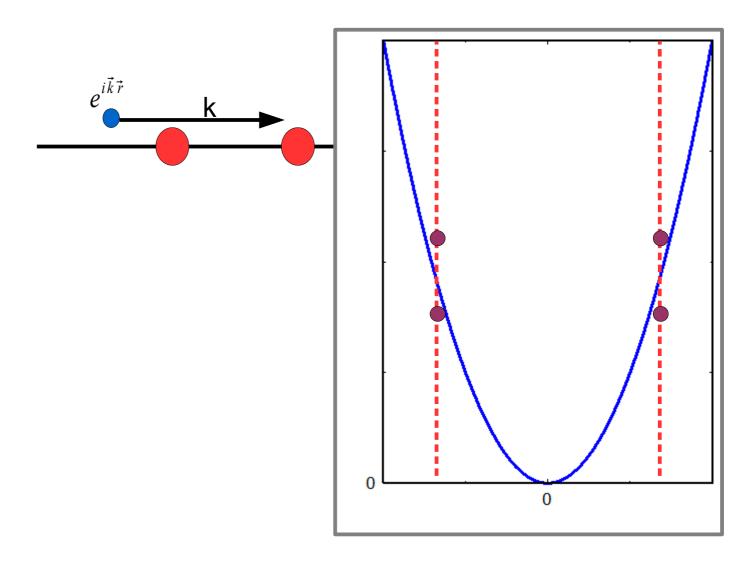
#### Спектр электрона в кристалле

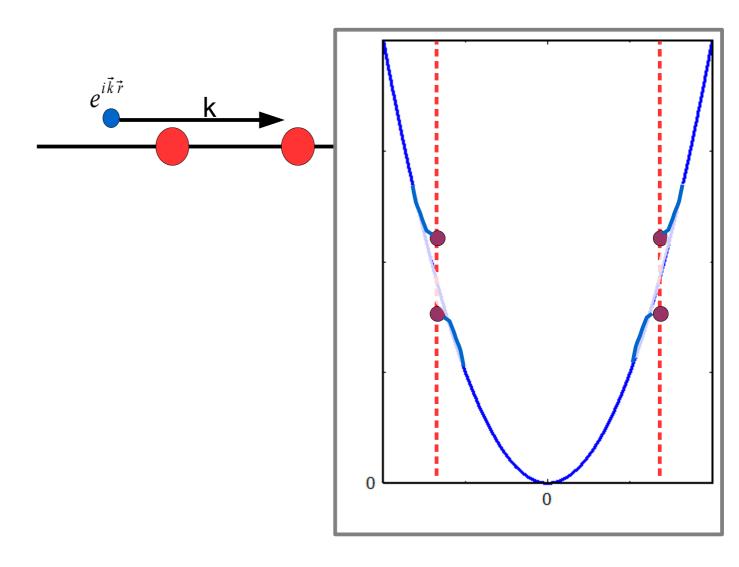


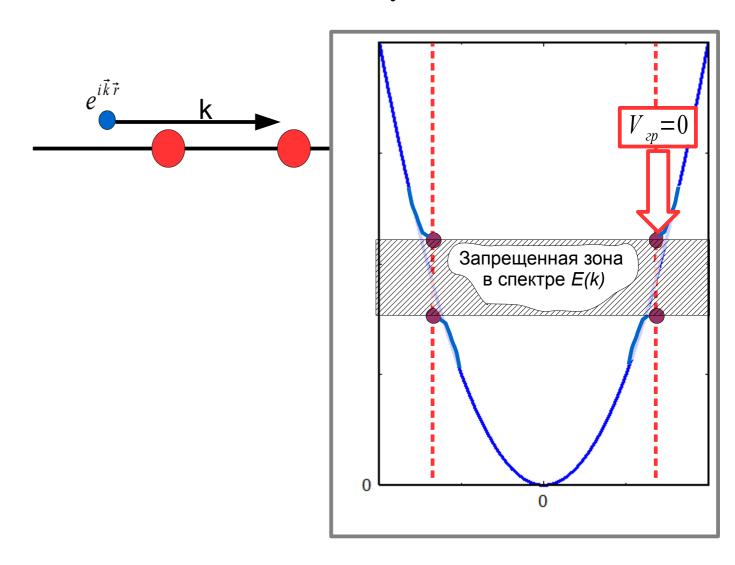












#### Промежуточный вывод

#### Независимо от конкретной модели:

- В периодическом потенциале спектр электрона E(k) перестаёт быть квадратичной параболой
- Возникает чередование разрешённых и запрещённых энергетических зон
- На границе зоны Бриллэна групповая скорость должна обращаться в ноль





периодическое граничное условие  $\Psi(L) = \Psi(0)$ 



периодическое граничное

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

условие 
$$\Psi(L) = \Psi(0)$$
 
$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$
 
$$K = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, ..., \pm N \frac{2\pi}{L}, ...$$



периодическое граничное условие  $\Psi(L){=}\Psi(0)$ 

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

$$K=0$$
  $2\pi$   $2\pi$ 

Периодический потенциал

$$U(x) = \sum_{G} U_G e^{iGx}$$

вектора обратной решётки

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

$$U(x) = \sum_{G} U_{G} e^{iGx}$$

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

$$U(x) = \sum_{G} U_{G} e^{iGx}$$

$$\hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)\right)\Psi =$$

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

$$U(x) = \sum_{G} U_{G} e^{iGx}$$

$$\hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)\right)\Psi =$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_G U_G e^{iGx}\right)\sum_K C_K e^{iKx} =$$

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

$$U(x) = \sum_{G} U_{G} e^{iGx}$$

$$\hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)\right)\Psi =$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_G U_G e^{iGx}\right)\sum_K C_K e^{iKx} =$$

$$= \sum_K C_K \left(\frac{\hbar^2}{2m}K^2 + \sum_G U_G e^{iGx}\right)e^{iKx}$$

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

$$U(x) = \sum_{G} U_{G} e^{iGx}$$

$$\hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)\right)\Psi =$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_G U_G e^{iGx}\right)\sum_K C_K e^{iKx} =$$

$$= \sum_K C_K \left(\frac{\hbar^2}{2m}K^2 + \sum_G U_G e^{iGx}\right)e^{iKx}$$

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

$$U(x) = \sum_{i \in \mathcal{I}} iGx$$

- *K'=K+G* должно входить в исходное разложение волновой функции
- Можно выбрать волновые функции, в которых все волновые вектора разложения отличаются на {G<sub>i</sub>}

$$= \left| -\frac{n}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_G U_G e^{iGx} \right| \sum_K C_K e^{iKx}$$

$$= \sum_K C_K \left( \frac{\hbar^2}{2m} K^2 + \sum_G U_G e^{iGx} \right) e^{iKx}$$

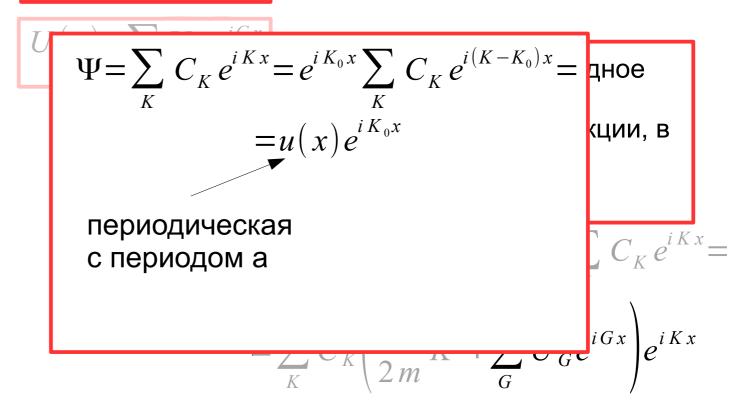
$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$

$$\Psi = \sum_{K} C_{K} e^{iKx} = e^{iK_{0}x} \sum_{K} C_{K} e^{i(K-K_{0})x} =$$
 дное сции, в  $C_{K} e^{iKx} = C_{K} e^{iKx} = C_{K} e^{iKx}$ 

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$



$$\hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Psi(x) = \sum_{K} C_{K} e^{iKx}$$



## Правила отбора и закон сохранения квазиимпульса электрона.

Пример: взаимодействие электрона с модуляцией плотности заряда, связанной с наличием фонона с волновым вектором K  $\hat{V} = A e^{i \vec{K} \vec{r}} + 3.C.$ 

$$\hat{V} = A e^{i\vec{K}\vec{r}} + 3.C$$

## Правила отбора и закон сохранения квазиимпульса электрона.

Пример: взаимодействие электрона с модуляцией плотности заряда, связанной с наличием фонона с волновым вектором K  $\hat{V} = A e^{i \vec{K} \vec{r}} + 3.C.$ 

$$\hat{V} = A e^{i\vec{K}\vec{r}} + 3.C.$$

Теория возмущений: для перехода между состояниями k и k' нужен ненулевой матричный элемент

$$V_{k,k'} = \int \psi_{\vec{k}}^* e^{i\vec{K}\vec{r}} \psi_{\vec{k}} d^3 x$$

## Правила отбора и закон сохранения квазиимпульса электрона.

Пример: взаимодействие электрона с модуляцией плотности заряда, связанной с наличием фонона с волновым вектором K  $\hat{V} = A e^{i \vec{K} \vec{r}} + 3.C.$ 

$$\hat{V} = A e^{i\vec{K}\vec{r}} + 3.C.$$

Теория возмущений: для перехода между состояниями k и k' нужен ненулевой матричный элемент

$$V_{k,k'} = \int \psi_{\vec{k}}^* e^{i\vec{K}\vec{r}} \psi_{\vec{k}} d^3 x$$

$$\psi_k = e^{ikx} u_k(x)$$
  
$$u_k(x) = u_k(x+T)$$

## Правила отбора и закон сохранения квазиимпульса электрона.

Пример: взаимодействие электрона с модуляцией

ПЛОТНОСТІ  $V_{k,k'} = \int u_k u_{k'}^* e^{i(\vec{K} + \vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} d^3 x$ 

Теори состояни

$$V_{k,k'} = \int \psi_{\vec{k}}^* e^{i\vec{K}\vec{r}} \psi_{\vec{k}} d^3 x$$

$$\psi_k = e^{ikx} u_k(x)$$
  
$$u_k(x) = u_k(x+T)$$

## Правила отбора и закон сохранения квазиимпульса электрона.

Пример: взаимодействие электрона с модуляцией

плотности

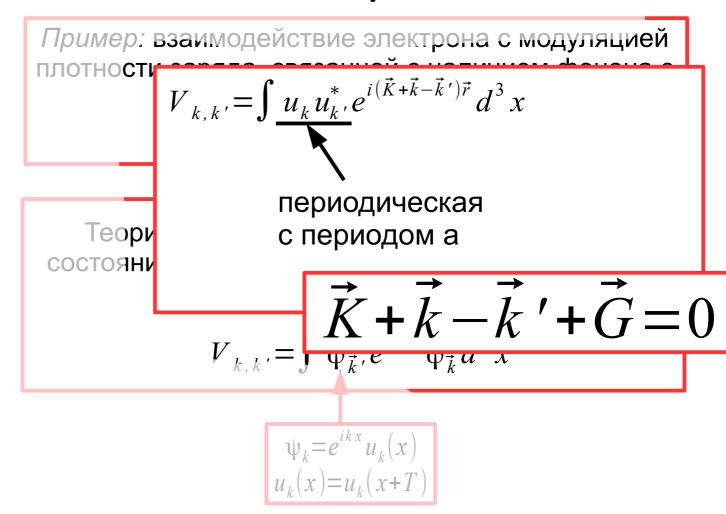
$$V_{k,k'} = \int u_k u_{k'}^* e^{i(\vec{K} + \vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} d^3 x$$

Теори состояни периодическая с периодом а

$$V_{k,k'} = \int \psi_{\vec{k}}^* e^{i\vec{K}\vec{r}} \psi_{\vec{k}} d^3 x$$

$$\psi_k = e^{ikx} u_k(x)$$
  
$$u_k(x) = u_k(x+T)$$

## Правила отбора и закон сохранения квазиимпульса электрона.



### Электроны в кристалле



#### Идеальный газ:

• нет взаимодействия друг с другом и с кристаллом.

#### «Реальная модель»:

• взаимодействие электронов друг с другом считаем подавленным запретом Паули, учитываем только взаимодействие с кристаллом

#### Электроны в кристалле



#### Идеальный газ:

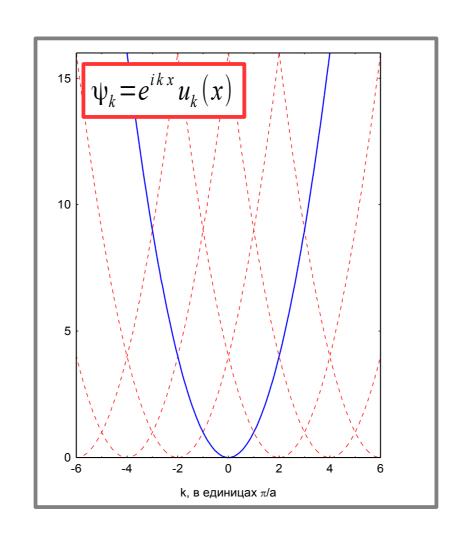
 нет взаимод кристаллом.

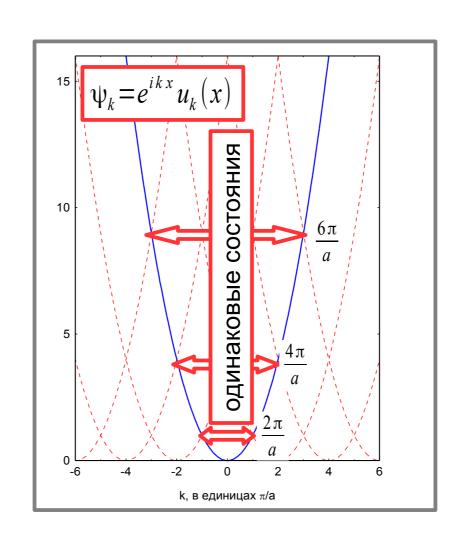
«Реальная модє

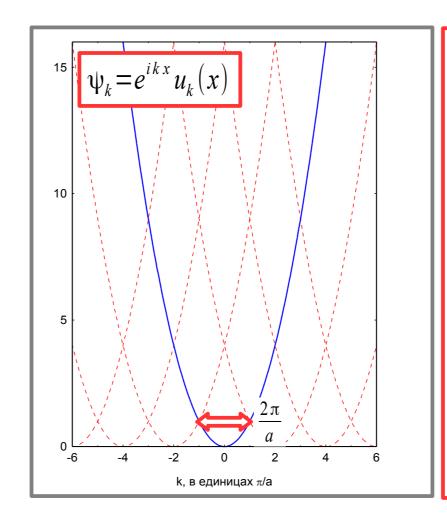
 взаимодейст считаем под учитываем т кристаллом Удобные предельные случаи:

- слабая связь почти свободные электроны
- сильная связь почти локализованные электроны

### Приближение слабой связи







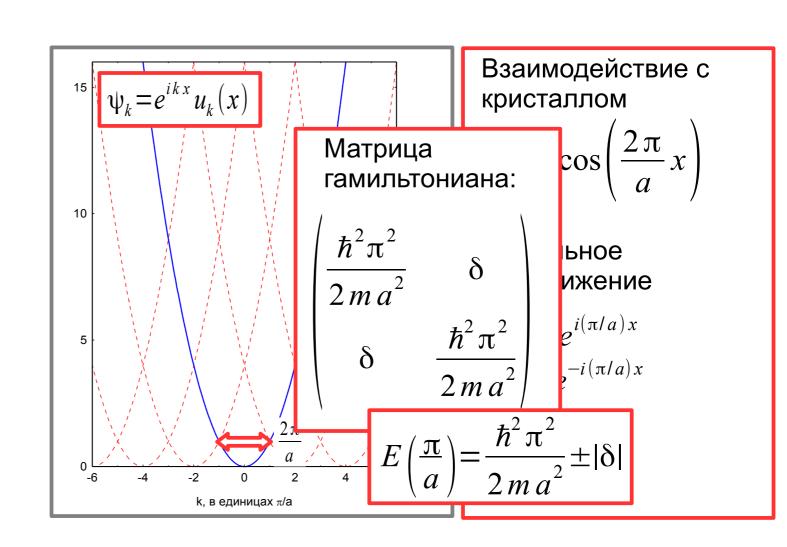
Взаимодействие с кристаллом

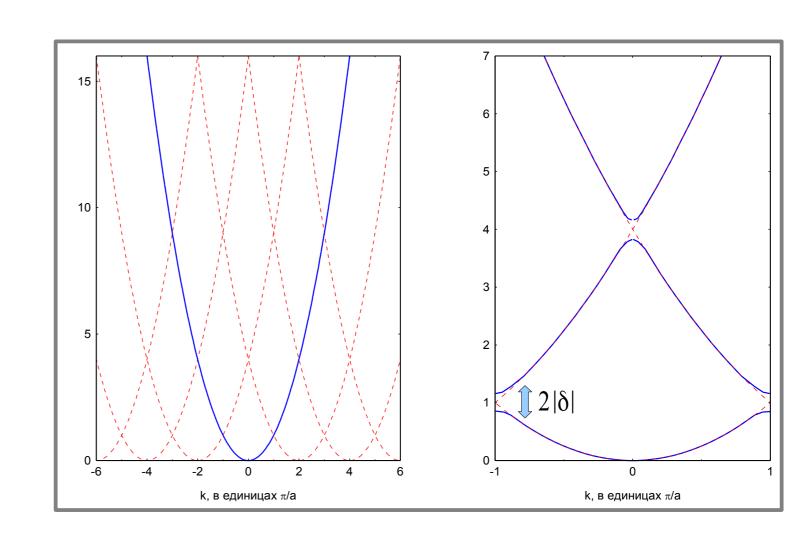
$$U = \delta \cos \left( \frac{2\pi}{a} x \right)$$

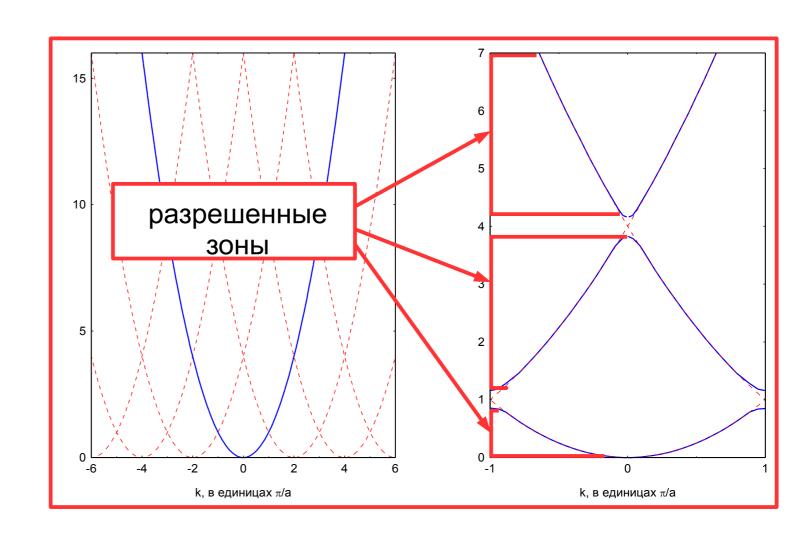
Начальное приближение

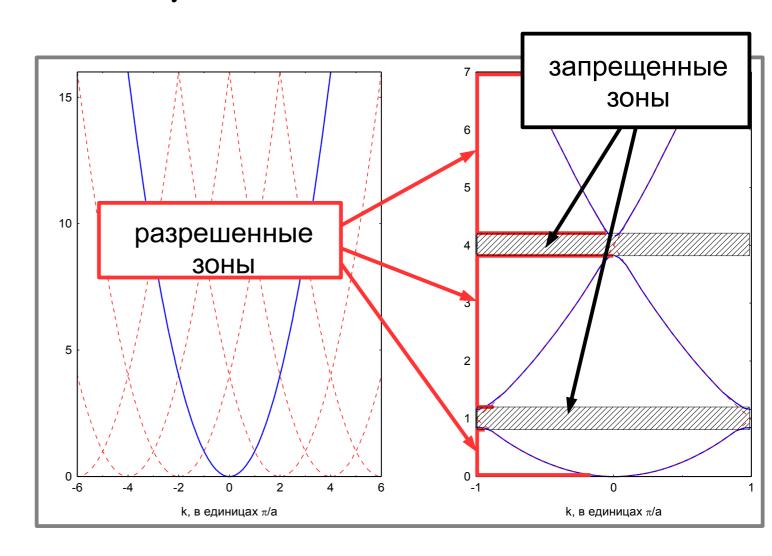
$$\Psi_1 = e^{i(\pi/a)x}$$

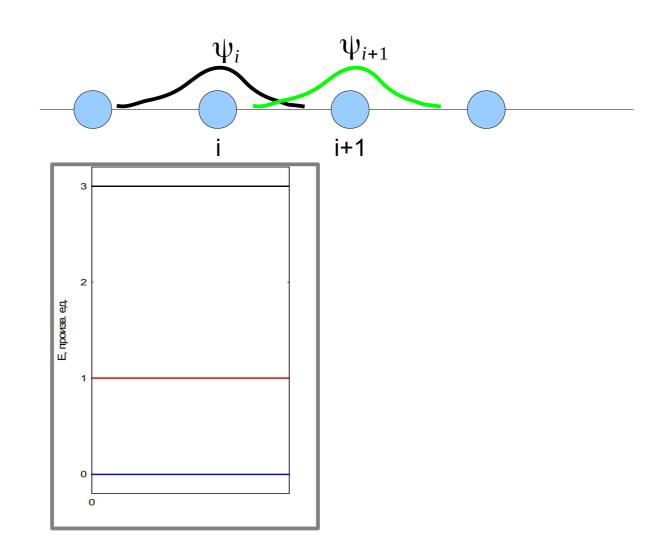
$$\Psi_2 = e^{-i(\pi/a)x}$$

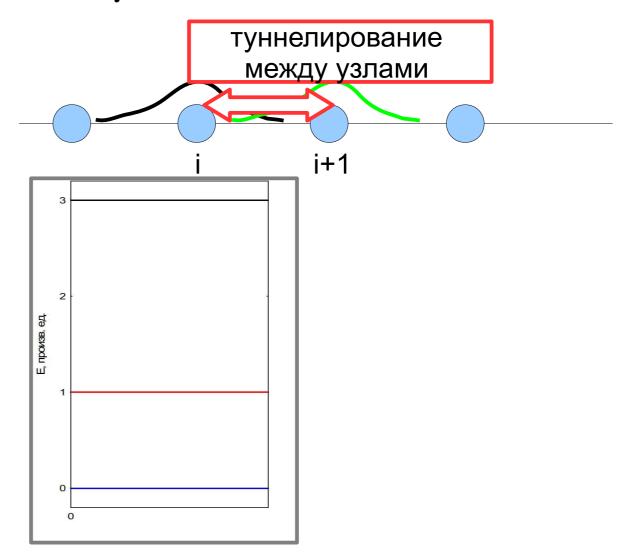


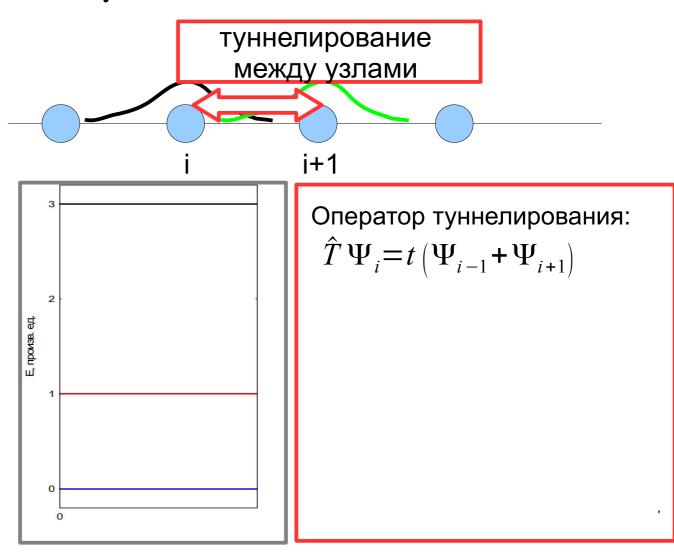


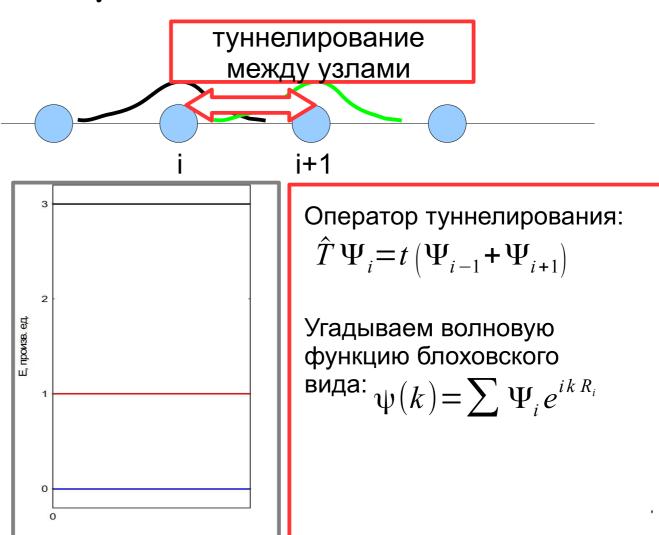


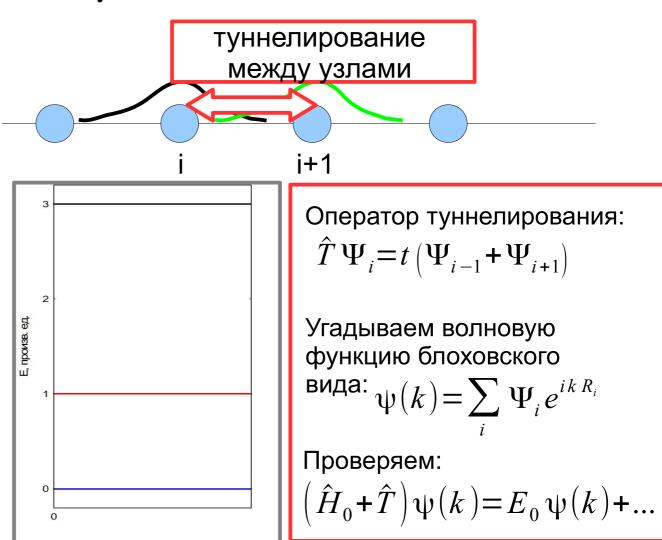


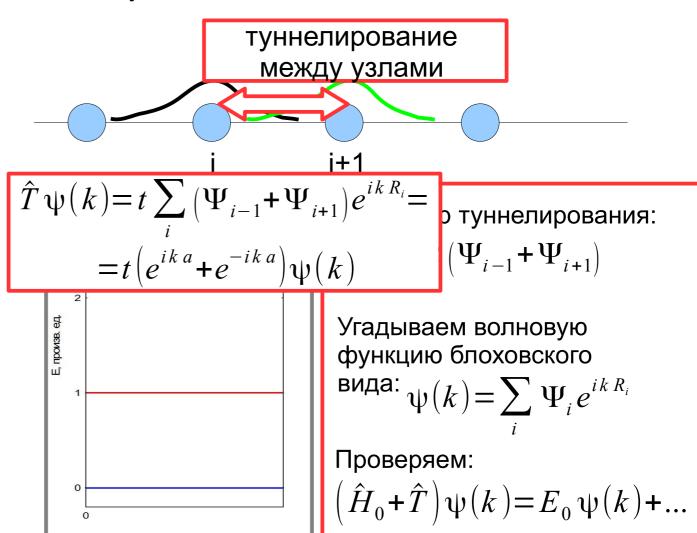


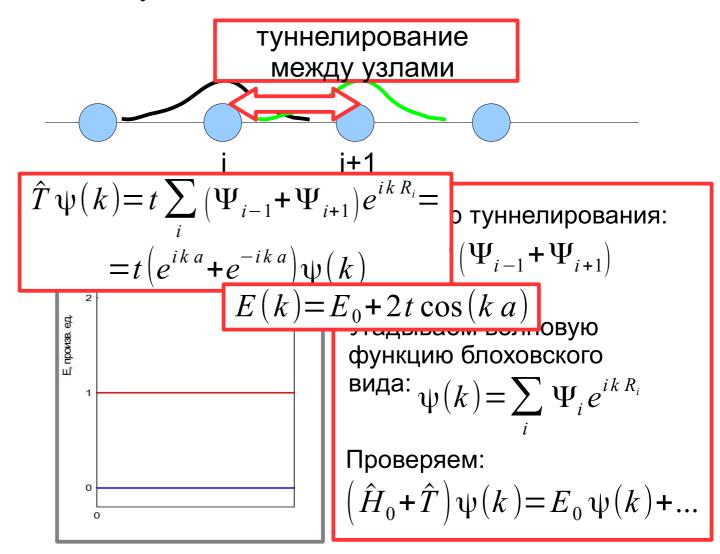


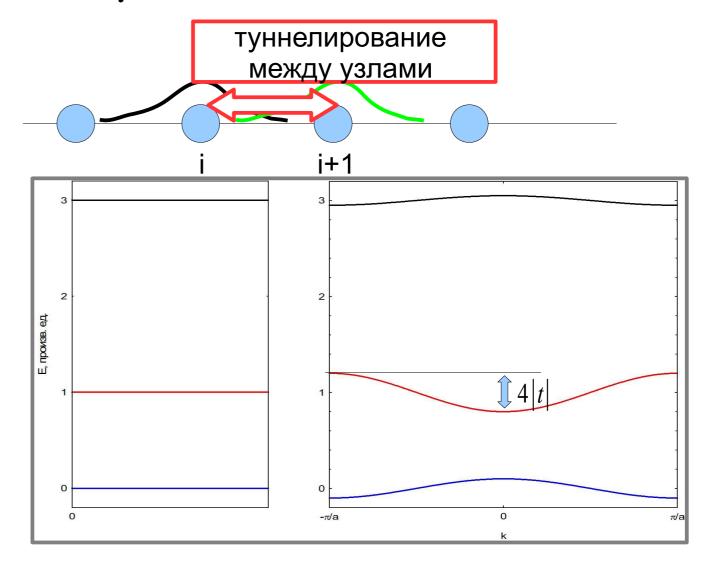


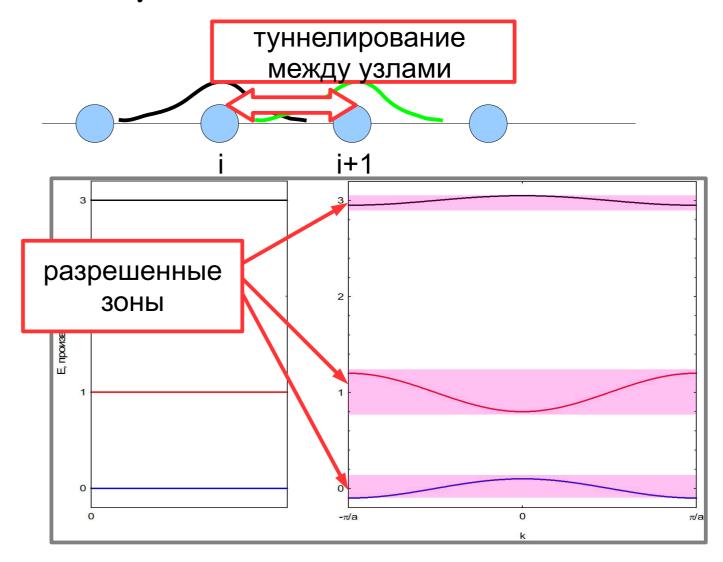


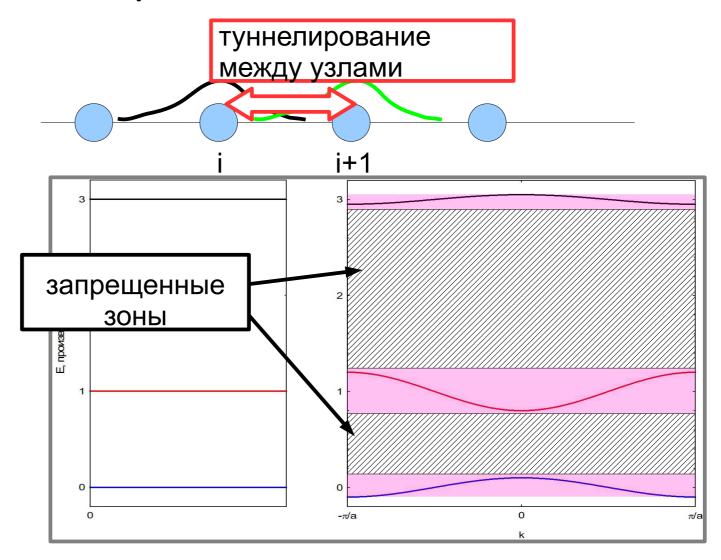




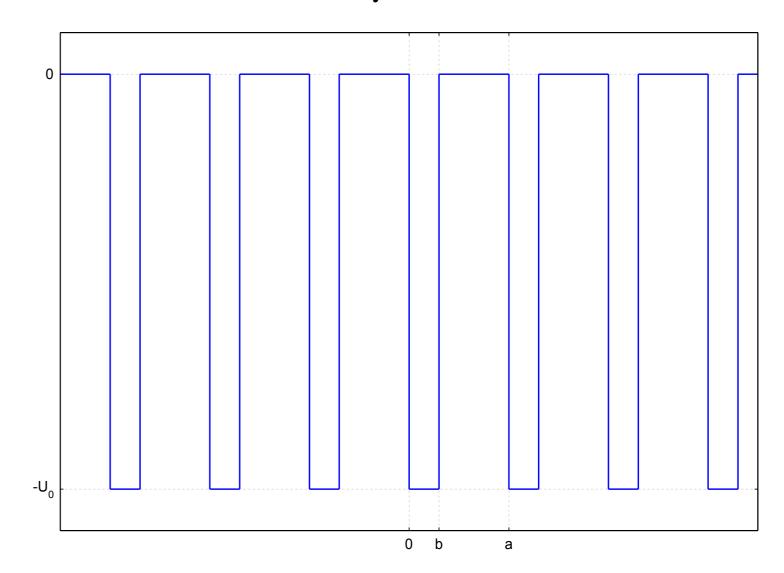




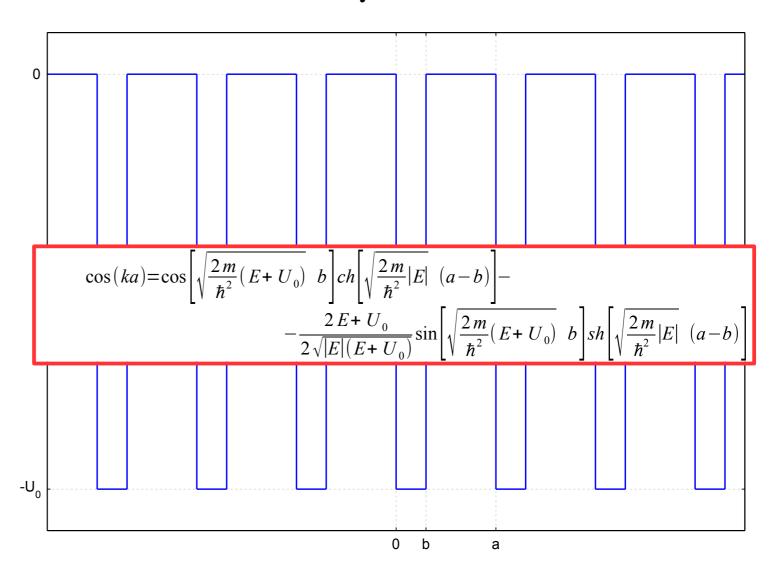




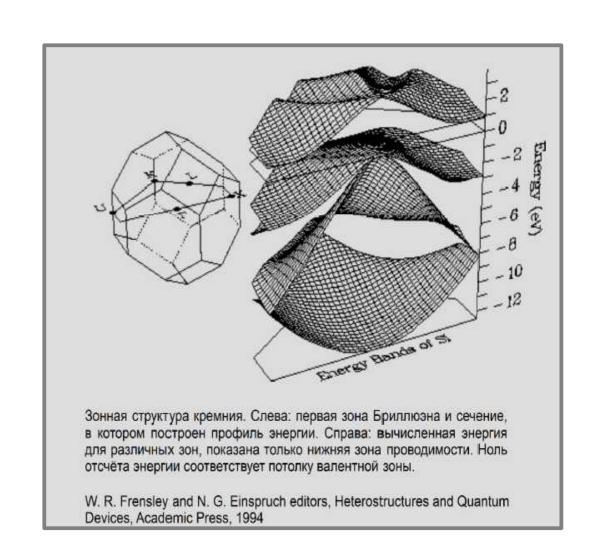
# Модель Кронига-Пени



## Модель Кронига-Пени

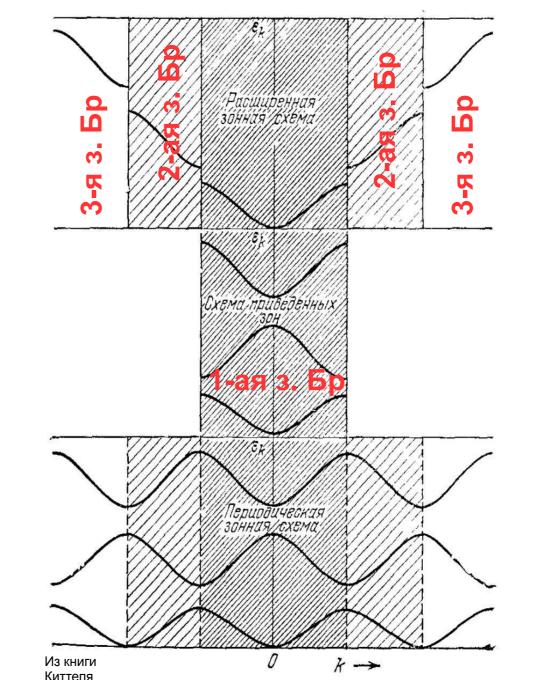


## Трёхмерный случай, кремний



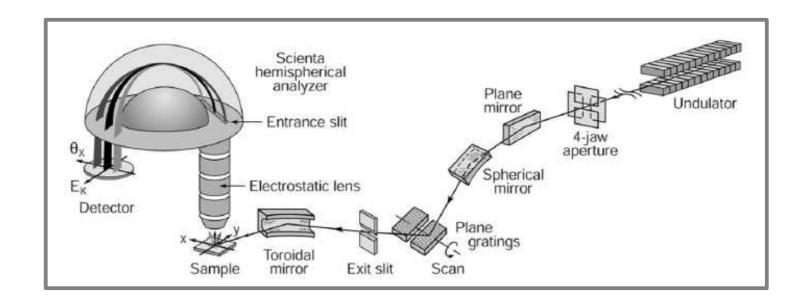
## Промежуточный вывод.

- Состояние электрона характеризуется квазиимпульсом, который может быть приведён в первую зону Бриллюэна.
- В первой зоне Бриллюэна спектр состоит из многих ветвей, включает разрешённые и запрещённые зоны.
- Вид ветвей E(k) определяется потенциалом и может иметь весьма произвольный вид, ширина запрещённых зон может (иногда) зануляться, разрешённые зоны могут перекрываться.
- На границе зоны Бриллюэна групповая скорость обращается в ноль.

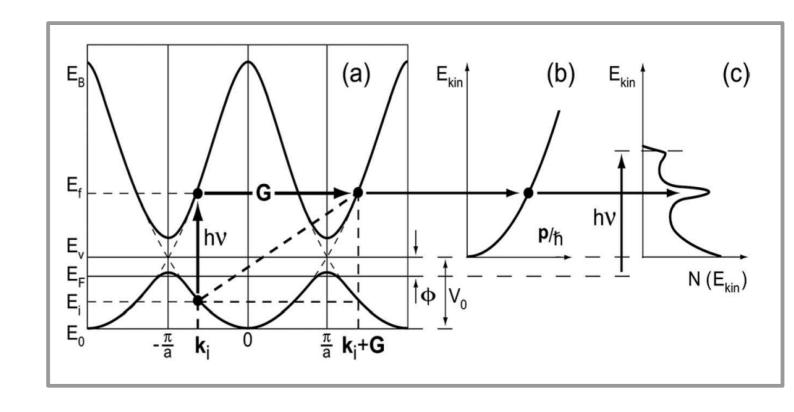


# Схемы зонной структуры

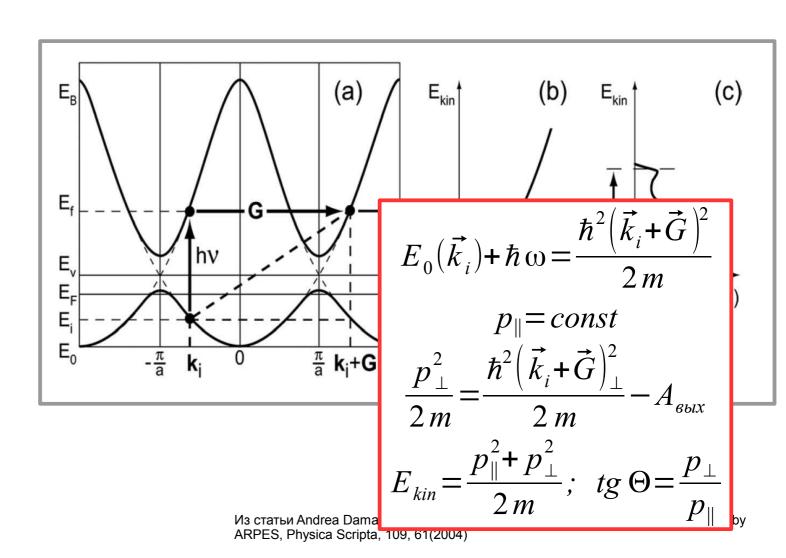
## Как увидеть? ARPES.



## Как увидеть? ARPES.



## Как увидеть? ARPES.



# Заполнение разрешённых зон электронами и связь зонной структуры со свойствами кристалла.

на электронное 
$$\frac{(2\pi)^3}{V}$$

объём 1 з.Бр. 
$$V_{\vec{k}} = (\vec{a}^* \cdot [\vec{b}^* \times \vec{c}^*]) = \frac{(2\pi)^3}{V_{\vec{c}}}$$

# Заполнение разрешённых зон электронами и связь зонной структуры со свойствами кристалла.

на электронное 
$$(2\pi)^3$$
 состояние:

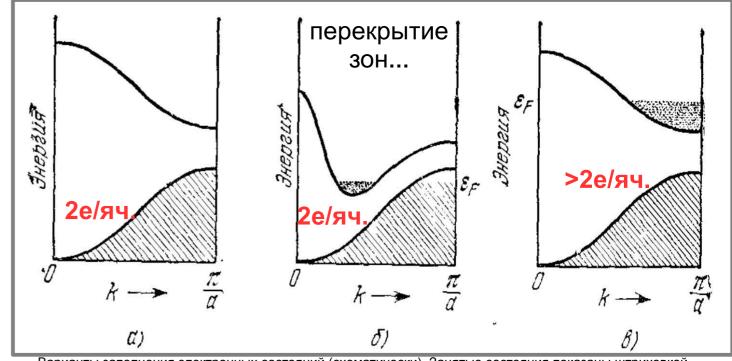
объём 1 з.Бр. 
$$V_{\vec{k}} = (\vec{a}^* \cdot [\vec{b}^* \times \vec{c}^*]) = \frac{(2\pi)^3}{V_{\vec{r}}}$$

Число электронных состояний в зоне  $2\frac{V}{V_{\vec{r}}} = 2N_{_{\mathit{SY}}}$ 

## Случаи разного числа свободных электронов в ячейке.

Число электронных состояний в зоне Бриллюэна

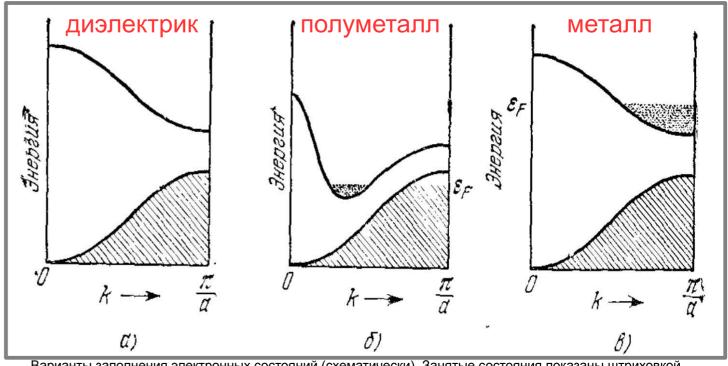
$$2\frac{V}{V_{\vec{r}}} = 2N_{gq}$$



Варианты заполнения электронных состояний (схематически). Занятые состояния показаны штриховкой. (а) Случай полностью заполненной зоны, диэлектрик. (б) Случай перекрывающихся зон, металл или полуметалл. (в) Случай частичного заполнения последней зоны, металл. Из книги Киттеля

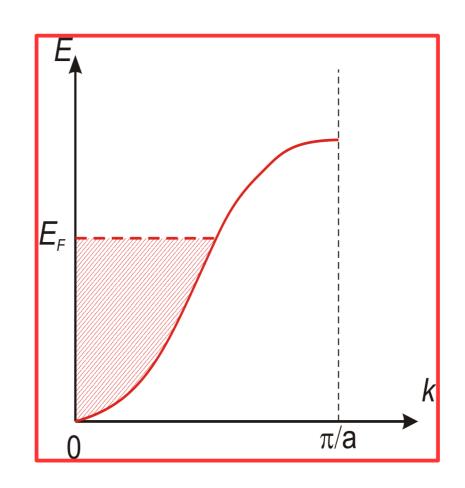
## Случаи разного числа свободных электронов в ячейке.

Число электронных состояний в зоне Бриллюэна

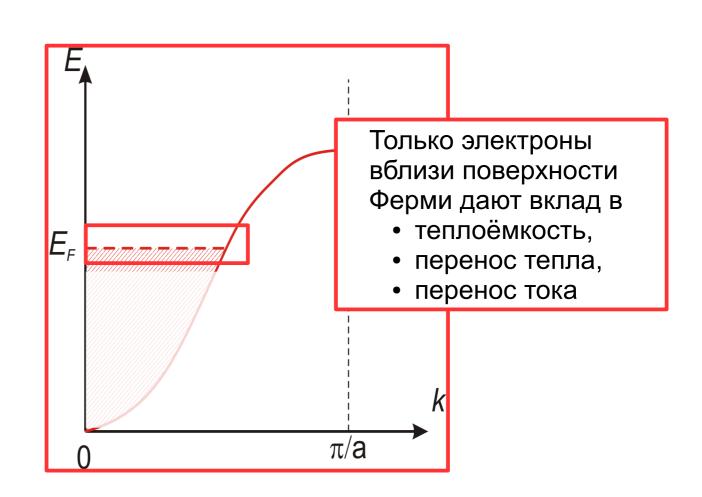


Варианты заполнения электронных состояний (схематически). Занятые состояния показаны штриховкой. (а) Случай полностью заполненной зоны, диэлектрик. (б) Случай перекрывающихся зон, металл или полуметалл. (в) Случай частичного заполнения последней зоны, металл. Из книги Киттеля

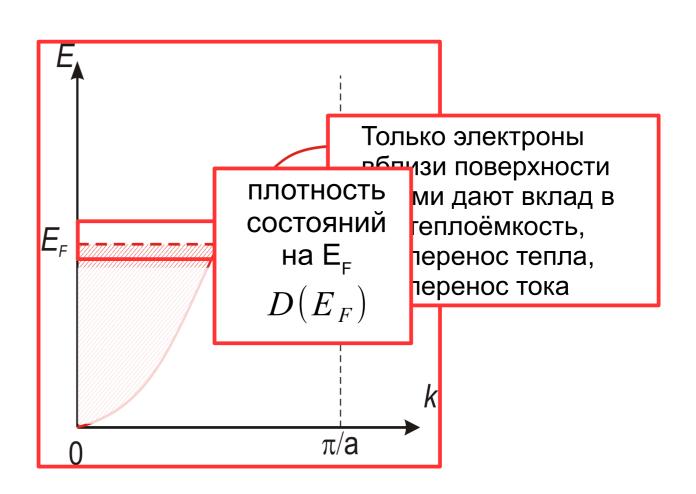
# Зонная структура металла



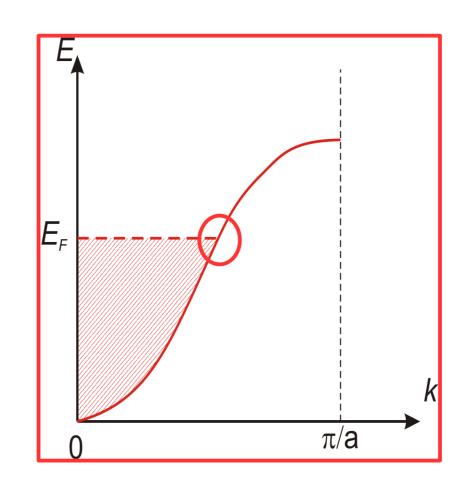
## Зонная структура металла



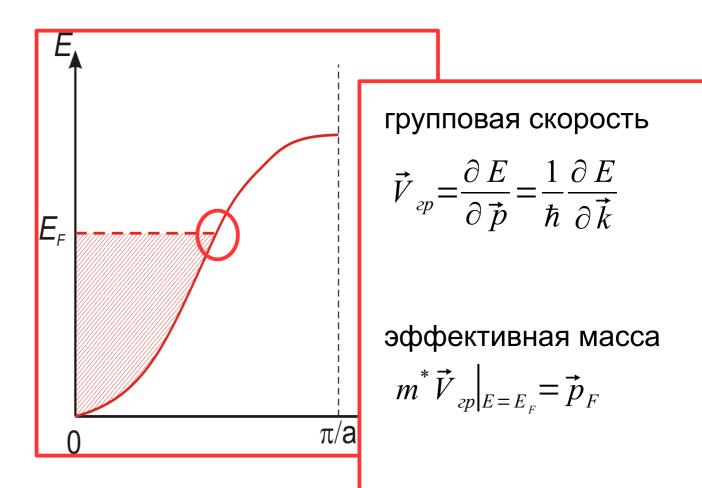
## Зонная структура металла



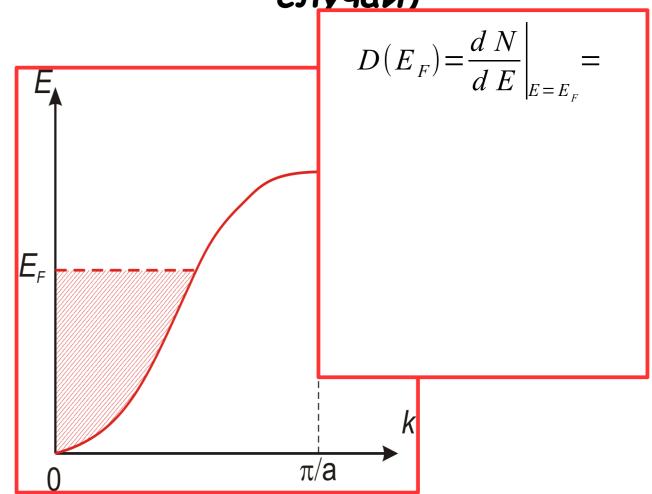
## Динамическая эффективная масса



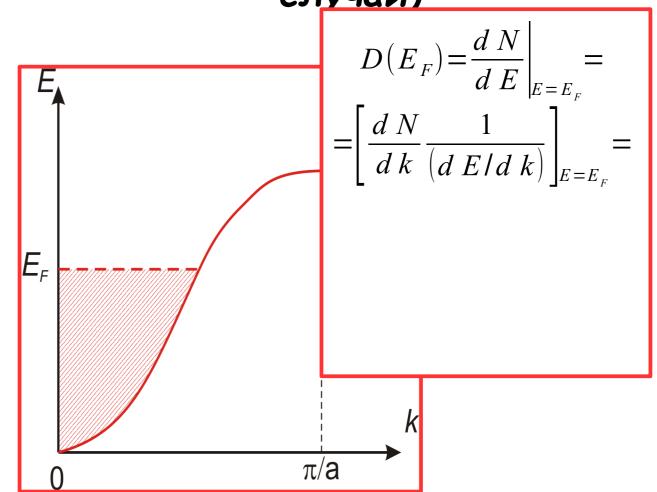
#### Динамическая эффективная масса



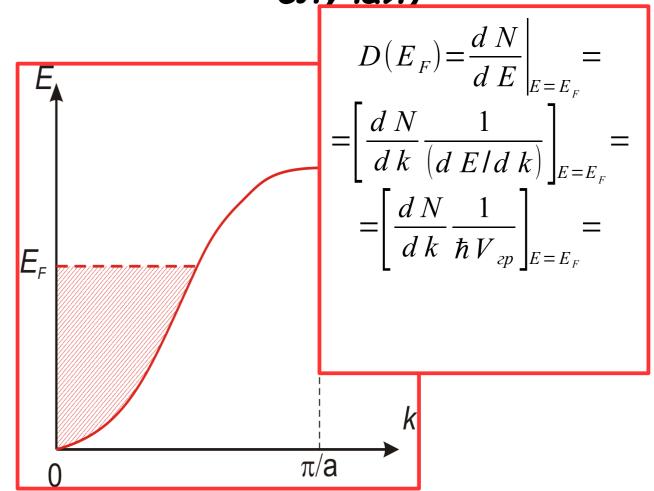
Плотность состояний (изотропный случай)

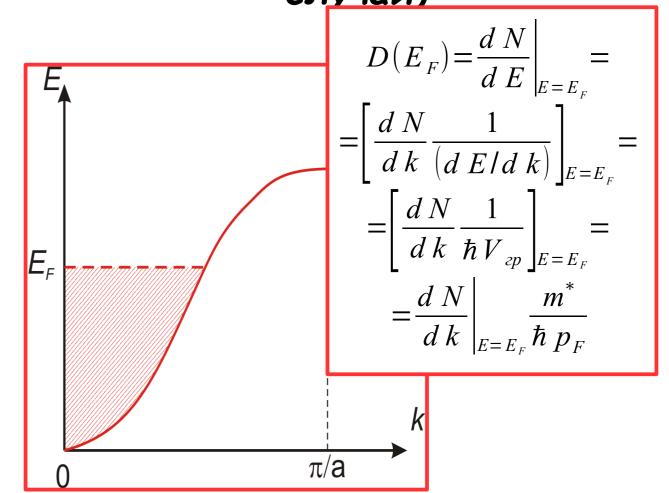


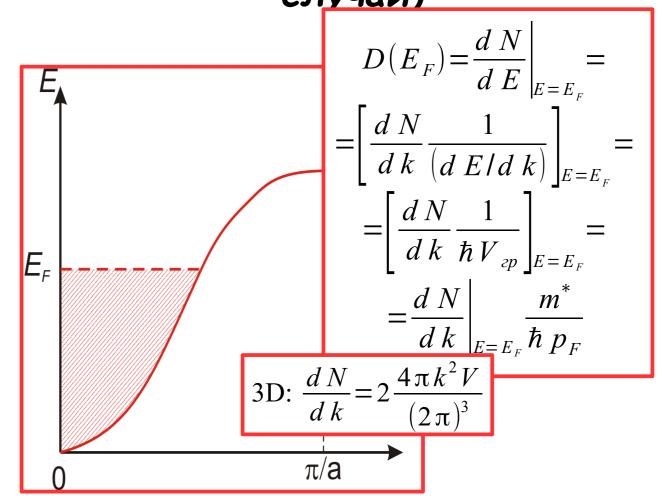
Плотность состояний (изотропный случай)

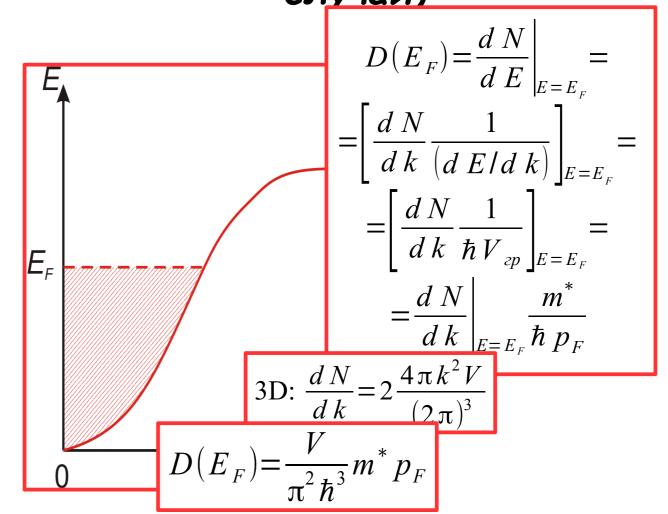


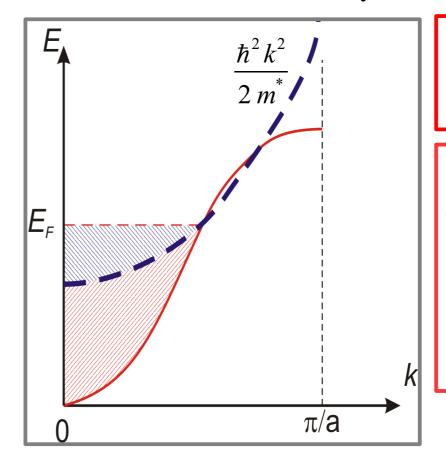
Плотность состояний (изотропный случай)







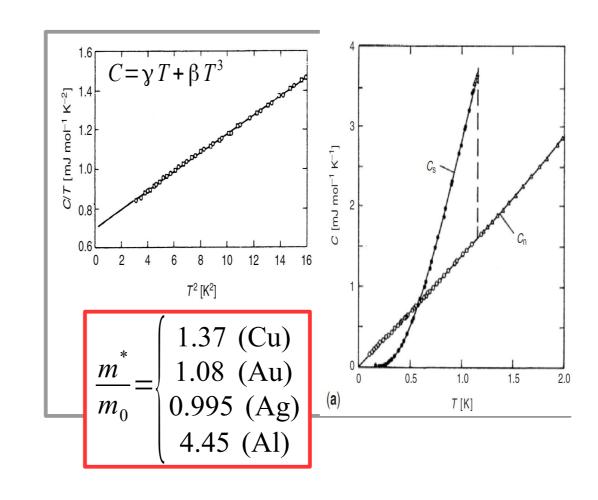




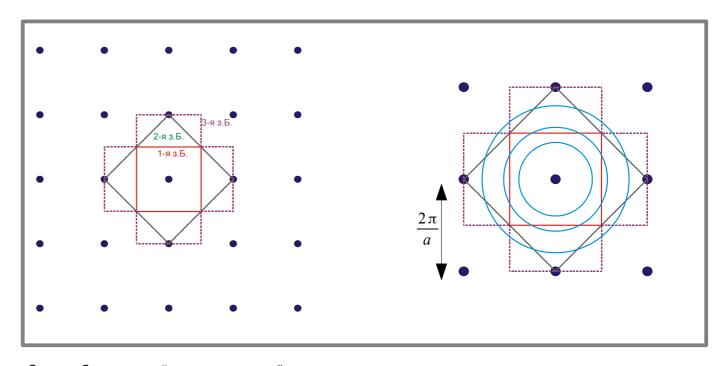
$$D(E_F) = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} m^* p_F$$

Плотность состояний — как для ферми-газа с той же концентрацией электронов, но массой электрона равной m\*

### Воспоминание о теплоёмкости металлов...



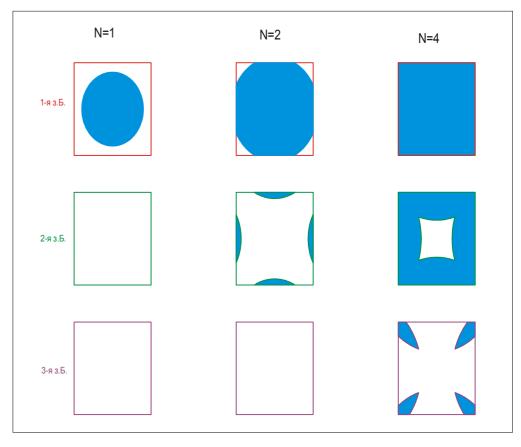
#### Построение поверхности Ферми для металла.



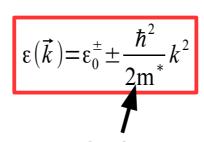
Слева: обратная решётка для двумерной квадратной решётки и построение нескольких первых зон Бриллюэна. Справа: фрагмент обратной решётки и окружности радиуса для случая одного, двух и четырёх электронов на элементарную ячейку.

2D: 
$$k_F = \sqrt{2\pi n} = \frac{\sqrt{2\pi N}}{a}$$

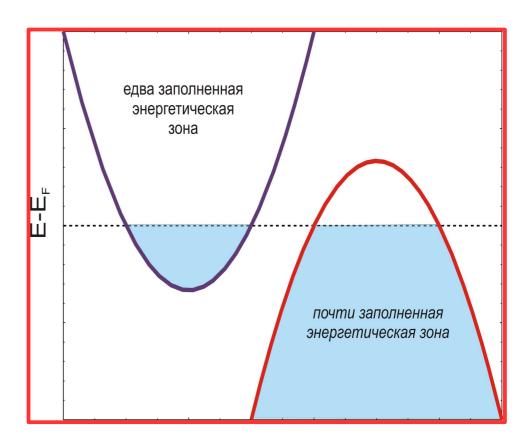
# Построение поверхности Ферми для металла. Модель свободных электронов.

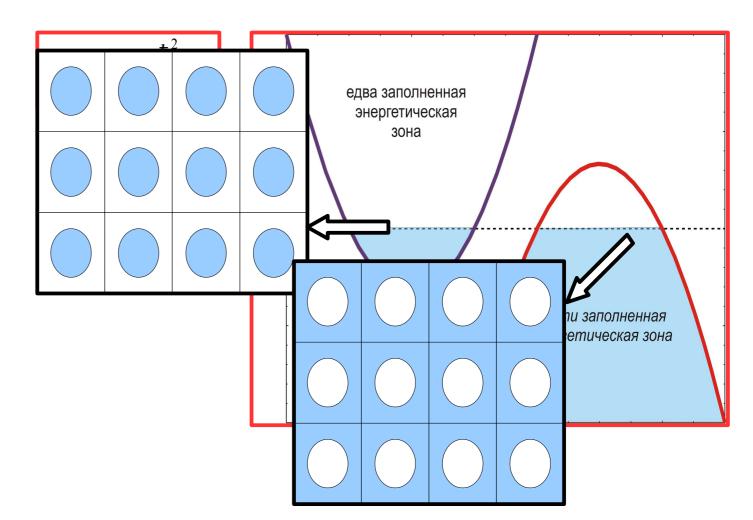


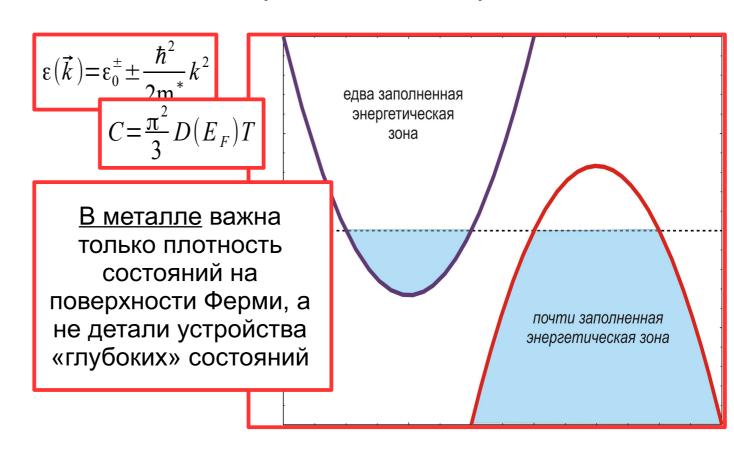
Поверхность Ферми для свободных электронов в схеме приведённых зон для двумерной простой квадратной решётки для разного числа электронов на элементарную ячейку. Заливкой показаны занятые состояния.

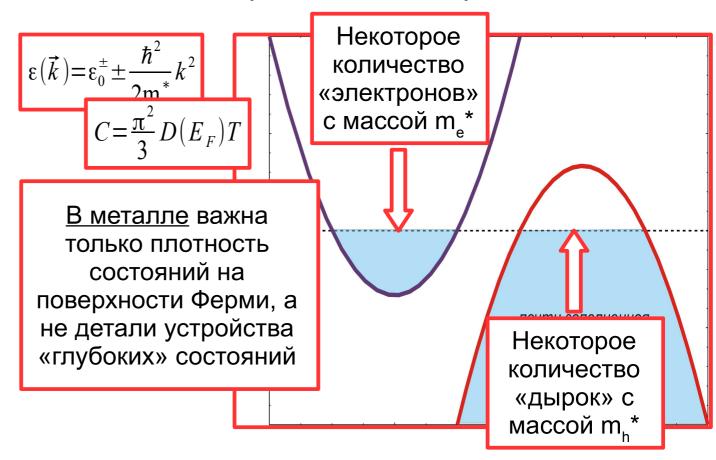


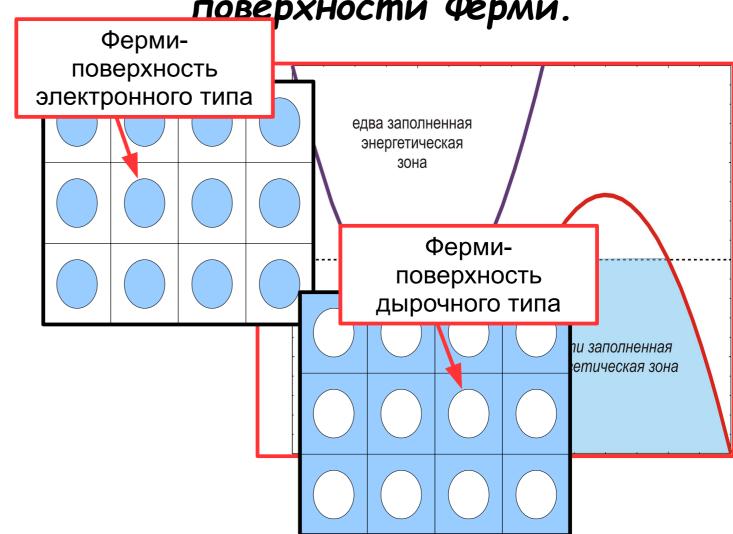
НЕКОТОРАЯ эффективная масса



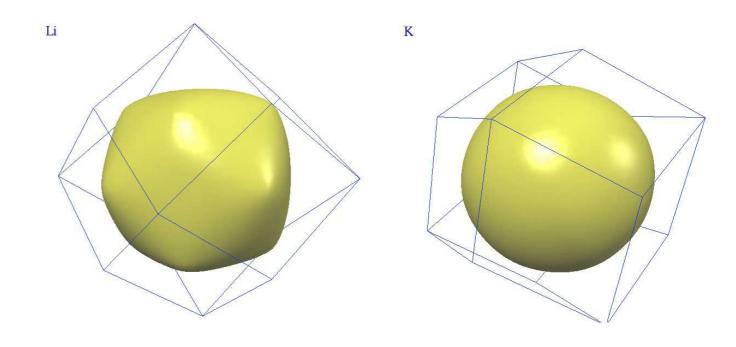








#### Примеры поверхностей Ферми. Щелочные металлы.



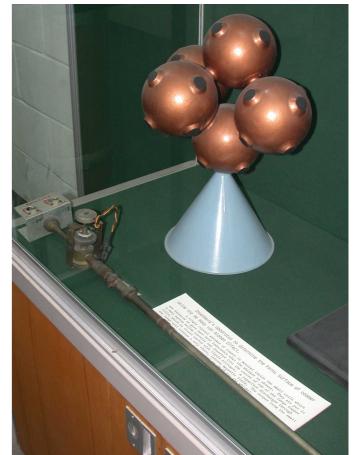
Ферми-поверхности лития (слева) и калия (справа). Тонкими линиями показаны границы первой зоны Бриллюэна.

## Примеры ферми-поверхностей. Си, Au, Ag.



Слева: Модель ферми-поверхности меди из музея Кавендишской лаборатории. Стеклянный многогранник показывает границы первой зоны Бриллюэна. Справа: соединение ферми-поверхностей в периодической зонной схеме. Модель из музея Кавендишской лаборатории.

http://wwwoutreach.phy.cam.ac.uk/camphy/museum/area 7/tour.htm



Только электроны на фермиповерхности «за всё в ответе».

#### «Экзотика»

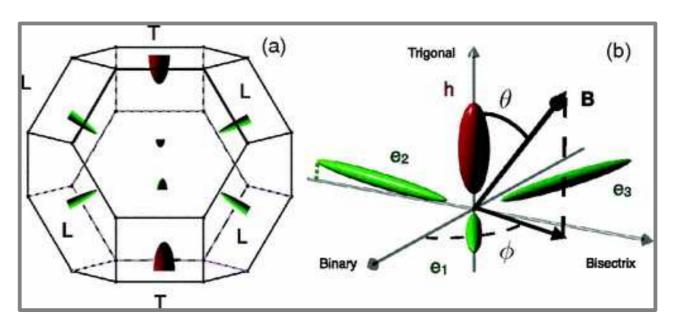


#### алюминий:

- 3 электрона,
- первая зона Бриллюэна заполнена полностью,
- во второй незаполненная область выглядит вот так

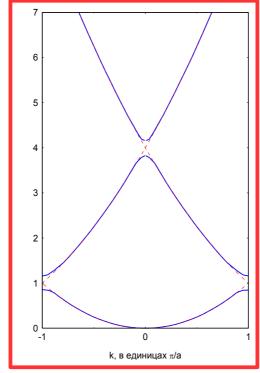
Только электроны на фермиповерхности «за всё в ответе».

#### «Экзотика»



полуметалл висмут — сильно анизотропная поверхность, несколько электронных «карманов»

#### Основное на этой лекции.



- Спектр электрона в кристалле меняется, возникает зонная структура.
- Свойства кристалла зависят от заполнения зон.
  - Ферми-поверхность металлов в реальных кристаллах может быть сложной, но для всех свойств металла важна плотность состояний на уровне Ферми которую можно параметризовать эффективной массой.