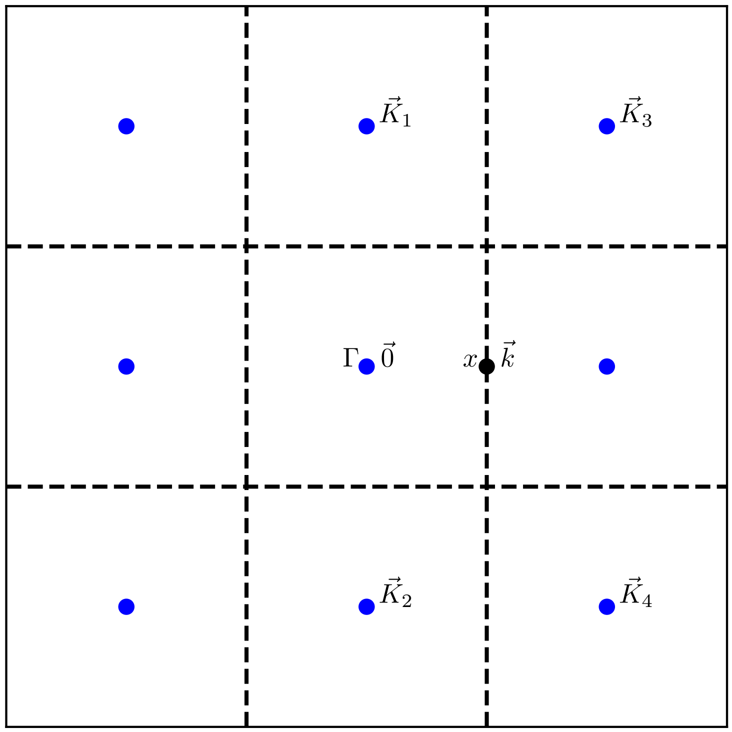
Teorija trdne snovi - domača naloga

Andrej Kolar-Požun

9. marec 2018

1 Naloga

Zanima nas oblika valovnih funkcij višjih vzbujenih stanj ter lastne energije v točki x na robu prve Brillouinove cone kvadratne mreže(glej sliko).



Modre pike predstavljajo vektorje recipročne mreže. Črna pika je točka x, v kateri bom računal razcep. V točki gama smo razcep izračunali že na predavanjih.

2 Reševanje

2.1 Izračun stanj

V približku skoraj prostih elektronov zapišemo našo valovno funkcijo na naslednji način

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}'} C_{\vec{k}-\vec{K}'} e^{i(\vec{k}-\vec{K}')\vec{r}} = \sum_{\vec{K}'} C_{\vec{k}-\vec{K}'} \varphi_{\vec{k}-\vec{K}'} \tag{1}$$

K rešitvi za osnovno in prvo vzbujeno stanje prispevata $\vec{K}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,0)$ in $\vec{K}_2 = (0,0)$, ki je lahko izračunljiva in je ne bomo obravnavali. Zanimala nas bodo naslednja vzbujena stanja, h katerim prispevajo

4 vektorji recipročne mreže:

$$\vec{K}_1 = \frac{2\pi}{a}(0,1)$$
$$\vec{K}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,-1)$$
$$\vec{K}_3 = \frac{2\pi}{a}(1,1)$$
$$\vec{K}_4 = \frac{2\pi}{a}(1,-1)$$

Če pogledamo enačbo (1) in upoštevamo, da za nas velja $\vec{k} = \frac{\pi}{a}(1,0)$, vidimo, da nam bazo rešitev sestavljajo 4 funkcije:

$$\varphi_1(x,y) = e^{i(\vec{k}-\vec{K}_1)\vec{r}} = e^{i\frac{\pi}{a}(x-2y)}$$
$$\varphi_2(x,y) = e^{i(\vec{k}-\vec{K}_2)\vec{r}} = e^{i\frac{\pi}{a}(x+2y)}$$
$$\varphi_3(x,y) = e^{i(\vec{k}-\vec{K}_3)\vec{r}} = e^{i\frac{\pi}{a}(-x-2y)}$$
$$\varphi_4(x,y) = e^{i(\vec{k}-\vec{K}_4)\vec{r}} = e^{i\frac{\pi}{a}(-x+2y)}$$

Sedaj pogledamo v literaturo in dobimo naslednjo tabelo karakterjev, ki ustreza simetrijam našega problema:

	E	C_2	σ_x	σ_y
χ_1	1	1	1	1
χ_2	1	1	-1	-1
χ_3	1	-1	1	-1
χ_4	1	-1	-1	1

Poglejmo kako se pod temi štirimi operacijami grupe spremenijo naše bazne funkcije: Enota deluje trivialno in lahko njeno reprezentacijo nad našimi baznimi funkcijami takoj zapišemo:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

katere karakter je 4.

Za ostale operacije se moramo malce bolj namučiti. Poglejmo si najprej zrcaljenje preko osi $x = \frac{\pi}{a}$. Geometrijsko lahko preverimo, kako ta operacija deluje na naših relevantnih valovnih vektorjih.

$$\sigma_y \vec{k} = -\vec{k}$$
$$\sigma_y \vec{K}_1 = \vec{K}_1$$
$$\sigma_y \vec{K}_2 = \vec{K}_2$$
$$\sigma_y \vec{K}_3 = -\vec{K}_4$$
$$\sigma_y \vec{K}_4 = -\vec{K}_3$$

Hitro sledi še transformacija naših baznih funkcij:

$$\sigma_y \varphi_1 = \varphi_3$$
$$\sigma_y \varphi_2 = \varphi_4$$
$$\sigma_y \varphi_3 = \varphi_1$$
$$\sigma_y \varphi_4 = \varphi_2$$

Sedaj lahko zapišemo matrično upodobitev

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} & & 1 & \\ & & & 1 \\ 1 & & & \\ & 1 & & \end{pmatrix}$$

Karakter je 0.

Ponovimo še za zrcaljenje preko x osi:

$$\begin{aligned} &\sigma_x\vec{k} = \vec{k} \\ &\sigma_x\vec{K}_1 = \vec{K}_2 \\ &\sigma_x\vec{K}_2 = \vec{K}_1 \\ &\sigma_x\vec{K}_3 = \vec{K}_4 \\ &\sigma_x\vec{K}_4 = \vec{K}_3 \\ &\sigma_x\varphi_1 = \varphi_2 \\ &\sigma_x\varphi_2 = \varphi_1 \\ &\sigma_x\varphi_3 = \varphi_4 \\ &\sigma_x\varphi_4 = \varphi_3 \end{aligned}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} & 1 & & \\ 1 & & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \end{pmatrix}$$

Karakter je 0.

Še operacija rotacije za kot π okoli točke $(\frac{\pi}{a}, 0)$

$$\begin{aligned} &C_2\vec{k} = -\vec{k} \\ &C_2\vec{K}_1 = \vec{K}_2 \\ &C_2\vec{K}_2 = \vec{K}_1 \\ &C_2\vec{K}_3 = -\vec{K}_3 \\ &C_2\vec{K}_4 = -\vec{K}_4 \\ &C_2\varphi_1 = \varphi_4 \\ &C_2\varphi_2 = \varphi_3 \\ &C_2\varphi_3 = \varphi_2 \\ &C_2\varphi_4 = \varphi_1 \end{aligned}$$

$$C_2 = \begin{pmatrix} & & & 1 \\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ 1 & & & \end{pmatrix}$$

Karakter je 0.

Opomba: V nalogi sem z operacijami grupe rotiral vektorje v k prostoru, enake rešitve pa bi dobili tudi z rotacijami v koordinatnem prostoru.

Naslednja formula nam bo povedela, na katere upodobitve se razcepi naša upodobitev.

$$c_j = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{n_r} \chi(g_k)\chi^{*(j)}(g_k)p_k \tag{2}$$

V zgornji enačbi predstavlja N število elementov v simetrijski grupi(v našem primeru 4), $\chi(g_k)$ predstavlja karakter naše upodobitve za vsak element grupe g_k, $\chi^{(j)}$ pa karakter ireducibilne upodobitve, ki ga preberemo iz tabele karakterjev. n_r je število razredov, p_k pa število elementov v razredu k. Za naš primer velja kar $n_r = N = 4$ in $p_k = 1$

Ker je za našo upodobitev le karakter enote neničelen dobimo z zgornjo formulo enostavno $c_1 = c_2 = c_3 = c_4 = 1$

Sedaj se lahko lotimo uganjanja naših rešitev. Vemo, da bo rešitev oblike $\Psi = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 + a_3\varphi_3 + a_4\varphi_4$ Poglejmo si najprej rešitev, ki ustreza prvi upodobitvi(c_1)za katero mora (kot lahko razberemo iz tabele karakterjev) veljati, da nam vsaka simetrijska operacija vrne ven isto funkcijo. Očitno je rešitev potem kar $\Psi_1 \propto \varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4$

Poglejmo si zdaj še rešitev, ki ustreza drugi upodobitvi, torej mora veljati

$$C_1\Psi = \Psi$$
$$\sigma_x\Psi = -\Psi$$
$$\sigma_y\Psi = -\Psi$$

Z malo poizkušanja vidimo, da tem pogojem ustreza $\Psi_2 \propto \varphi_1 - \varphi_2 - \varphi_3 + \varphi_4$

Podobno dobimo za ostali upodobitvi rešitvi

$\Psi_3 \propto \varphi_1 + \varphi_2 - \varphi_3 - \varphi_4$

$\Psi_4 \propto \varphi_1 - \varphi_2 + \varphi_3 - \varphi_4$

Če neradi ugibamo rešitve, obstaja še bolj sistematičen postopek. Uporabimo lahko naslednjo formulo, ki velja za enodimenzinalne upodobitve(obstaja tudi posplošitev na večdimenzionalne, a je veliko bolj zapletena):

$$\Psi_{\vec{k}}^{(i)}(\vec{r}) = \sum_{\beta=1}^{n_i} \chi^{(i)}(g_\beta) P(g_\beta) \Psi_{\vec{k}}(r) \tag{3}$$

Kjer na desni strani enačbe za Ψ vstavimo poljubno začetno uganjeno funkcijo

Pa dajmo dobiti funkcije še na ta način, za začetni približek bom vzel kar φ_1

$$\Psi_1 = 1/4 * (+1 * \varphi_1 + 1 * \varphi_2 + 1 * \varphi_3 + 1 * \varphi_4)$$
$$\Psi_2 = 1/4 * (+1 * \varphi_1 + 1 * \varphi_4 + (-1) * \varphi_2 + (-1) * \varphi_3)$$
$$\Psi_3 = 1/4 * (+1 * \varphi_1 + (-1) * \varphi_4 + 1 * \varphi_2 + (-1) * \varphi_3)$$
$$\Psi_4 = 1/4 * (+1 * \varphi_1 + (-1) * \varphi_4 + (-1) * \varphi_2 + 1 * \varphi_3)$$

Torej dobimo isto.

3 Izračun energij

Sledi se izračun energij. Ker so upodobitve enodimenzionalne, vemo da so energije nedegenerirane, izračunal pa bom prav točno koliko so.

V približku skoraj prostih elektronov velja za vsak $\vec{K}$:

$$(\epsilon^0(\vec{k} - \vec{K}) - \epsilon) C_{\vec{k}-\vec{K}} + \sum_{\vec{K}'} C_{\vec{k}-\vec{K}'} U_{\vec{K}'-\vec{K}} \tag{4}$$

Kjer je $\epsilon^0(\vec{k}) = \frac{hbar^2 k^2}{2m}$ in je v našem primeru enak za vse $\vec{K}_i$ $U_{\vec{k}}$ je Fourierova transformacija potenciala. Zaradi simetrije našega problema velja $U_{(k,0)} = U_{(0,k)}$, dodatno pa bom zaradi lažjega računanja rekel še $U_{-\vec{k}} = U^*_{\vec{k}} = U_{\vec{k}}$ Rekel bom, da je v mojem primeru $U_{\vec{k}}$ za $\vec{k} = (\frac{2\pi}{a}, 0)$ enak U_1, za $\vec{k} = (\frac{4\pi}{a}, 0)$ pa U_2. Ostali recimo, da so 0.

Zapišimo zgornjo enačbo v matrični obliki:

$$\begin{pmatrix} \epsilon^0 & U_2 & U_1 & 0 \\ U_2 & \epsilon^0 & 0 & U_1 \\ U_1 & 0 & \epsilon^0 & U_2 \\ 0 & U_1 & U_2 & \epsilon^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{\vec{k}-\vec{K}_1} \\ C_{\vec{k}-\vec{K}_2} \\ C_{\vec{k}-\vec{K}_3} \\ C_{\vec{k}-\vec{K}_4} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} C_{\vec{k}-\vec{K}_1} \\ C_{\vec{k}-\vec{K}_2} \\ C_{\vec{k}-\vec{K}_3} \\ C_{\vec{k}-\vec{K}_4} \end{pmatrix}$$

Lastne vektorje poznamo, če jih vstavimo v zgornjo enačbo dobimo lastne energije ϵ
Naše končne rešitve so

$$\Psi_1 \propto \varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4, E_1 = \epsilon^0 + U_1 + U_2$$
$$\Psi_2 \propto \varphi_1 - \varphi_2 - \varphi_3 + \varphi_4, E_2 = \epsilon^0 - U_1 - U_2$$
$$\Psi_3 \propto \varphi_1 + \varphi_2 - \varphi_3 - \varphi_4, E_3 = \epsilon^0 - U_1 + U_2$$
$$\Psi_4 \propto \varphi_1 - \varphi_2 + \varphi_3 - \varphi_4, E_4 = \epsilon^0 + U_1 - U_2$$