### Неделя 4. Зонная структура.

### Задача 3.1 (на семинар)(!решена в задачнике с опечаткой в окончательном ответе!)

Задача про оценку ширины зоны в периодической цепочке прямоугольных квантовых ям.

Решена в задачнике. Решение оценочно, но корректно. Задача полезна методически. При её обсуждении можно ещё раз напомнить про модель Кронига-Пенни, которая точно решается в курсе теоретической физики. Постановка задачи и результат модели Кронига-Пенни для

курсе теоретической физики. Постановка задачи и результат модели Кронига-Пенни для цепочки прямоугольных ям рассматриваются на лекции.

В окончательном ответе

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 e^2}{2ma^2} \exp\left(-\frac{\sqrt{2m}U_0}{\hbar}d\right) = \frac{\hbar^2 e^2}{\hbar} = \frac{\hbar^2 e^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 e^2}{2ma^2}$$

### Задача Т.4.1 (на семинар)

Оценить, с точки зрения зонной структуры будут ли диэлектриком или металлом следующие вещества: медь, алмаз, висмут.

Комментарий: Для решения задачи нужна информация о структуре решёток этих элементов. Решётка алмаза давалась на лекции — это ГЦК решётка с базисом из двух атомов. Кристаллическая решётка меди тоже ГЦК (период 3.61Å), но с единственным атомом в базисе (поэтому иногда говорят, что в кристалле меди атомы меди образуют плотно пакованную кубическую решётку). Решётка висмута (в его основной структурной модификации) — ромбоэдрическая (длина трансляции 4.75 Å, угол 57.2°) с базисом из двух атомов. Кристаллическая структура алмаза, меди и примитивная ячейка висмута показаны на

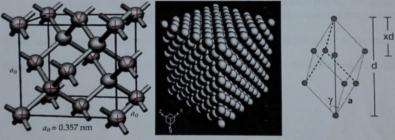


Рисунок 8 Слева направо: структура алмаза, меди и элементарная ячейка висмута

 ${\cal B}$  кристалле спектр электронов меняется — на границе зоны Бриллюэна должна зануляться составляющая групповой скорости, нормальная к границе. В результате непрерывный спектр свободных электронов  $E=\frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m}$  разбивается на ветви, разрывы между которыми образуют запрещённые зоны. В трёхмерном случае разные ветви спектра могут перекрываться по энергии. Кроме того, при формировании зон из р и d электронов зонная структура может частично сохранять вырождение по проекции момента импульса, «унаследованное» от электронов.

В представлении приведённой зонной схемы все ветви могут быть отображены в первую зону Бриллюэна. Объём первой зоны Бриллюэна равен  $(2\pi)^3/V_{npuu}$ , где  $V_{npuu}$  — объём примитивной элементарной ячейки. При периодических граничных условиях на одно уникальное состояние в k-пространстве приходится объём  $(2\pi)^3/V$ , где V — объём кристалла. С учётом спинового вырождения получаем, что на каждой ветви энергетического спектра есть  $(2V)/V_{npuu} = 2N_{npuu}$  уникальных состояний для электронов, где  $N_{npuu}$  — число примитивных ячеек в образце. Отметим, что ровно такой же ответ получился бы и для двумерного и одномерного случая.

Заполнение зонной структуры электронами однозначно связано с классификацией металлдиэлектрик. Если в веществе имеются частично заполненные зоны, то слабое электрическое поле сможет перераспределить электроны и возникнет ток, то есть это металл. Если все зоны полностью заполнены, то перестройка распределения электронов по зонам приобретает конечную «цену» - необходимо сообщить энергию, равную ширине запрещённой зоны, слабое поле не может вызвать ток носителей, и мы имеем дело с диэлектриком.

славое поле не может вызвать ток посителей, и али илеста установ числе валентных электронов Таким образом, с точки зрения зонной картины, при нечётном числе валентных электронов на примитивную элементарную ячейку вещество будет металлом, чётном — диэлектриком. Это простое рассуждение предполагает, что энергетические зоны (ветви спектра)заполняются поочерёдно (не перекрываются), что вообще говоря неверно в реальных соединениях, где перекрытие зон является скорее правилом, чем исключением.

#### В итоге:

- Медь один валентный электрон на примитивную ячейку металл.
- Алмаз 2 четырехвалентных атома на примитивную ячейку (структура алмаза обсуждается на лекциях), т.е. 8 электронов – диэлектрик.
- Висмут представляет из себя более сложный пример. На атом приходится 5 валентих электронов, 2 атома на ячейку – должен быть диэлектриком, но верхние зоны (проводимости и валентная) перекрываются и висмут оказывается полуметаллом.

Уже пример с висмутом показывает, что простые соображения работают не всегда.

Комментарий: рассмотрение упрощено, предполагает невырожденность образующихся зон.

$$V_{0}=0$$
  $V_{0}=0$   $V_{$ 

e/13 = \$ 1,35 = 0,15 Задача на комплексное применение знаний об обратном пространстве и распределении

Кубическая ячейка ОЦК решётки не является примитивной и содержит два эквивалентных атома - центральный и угловой. Поэтому расстояние между ближайшими атомами в условии это половина главной диагонали куба и  $d = \sqrt{3}a^2/4 = a\sqrt{3}/2$ 

Из того, что закон дисперсии квадратичный, следует, что поверхность Ферми предлагается считать сферической (для щелочных металлов оправдано, на лекции показываются примеры).

Натрий является элементом первой группы, то есть в нём приходится один валентный электрон на атом. Значит в «море» электронов проводимости будет по два электрона от каждой ячейки объёмом  $a^3$  . Электронные состояния двукратно вырождены по спину.

Каждой ячейки объёмом 
$$a^3$$
. Электронные состояния двукратно вырожен быть импульс Ферми при такой концентрации электронов: 
$$2 \times \frac{4\pi}{3} p_F^3 \times \frac{1}{(2\pi \hbar)^3} = \frac{2}{a^3}$$
Получаем: 
$$\omega_c = \frac{eH}{mc}$$

$$p_F = \frac{\sqrt{3}}{2d} \times \hbar (6\pi^2)^{1/3}$$

В задаче спрашивается про среднюю энергию, которая, как известно из задачи 3.13, есть 3/5 от фермиевской

Итого имеем ответ как в задачнике:  $(E) = 0.6 \frac{3h^{2}}{8d^{2}m} (6\pi^{2})^{2D} = \frac{18 + 1}{8(174)^{1/2}} \frac{3}{3} = \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{2} = \frac{2\pi}{a^{2}}$   $= \frac{1}{3} \cdot 2^{-1} \cdot 13 \cdot 1 \cdot 1 = 8 \cdot 6$   $S = \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{2} = \frac{2\pi}{a^{2}}$ 

# Задача 3.35 (на семинар)(!решение в задачнике, есть комментарии!)

адача о построении ферми контуров (2D) для закона дисперсии  $E(k) = -\epsilon_0(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$  с одним электроном на атом на простой квадратной решётке. Нахождение распределения скоростей по контурам.

Conkxa + cont, a=0 2 con kx+t, a con kn-16, =0

Задача разобрана в задачнике. Нужна, чтобы продемонстрировать, как отличие закона дисперсии от квадратичного искажает форму Ферми-поверхности.

Комментарий 1: Решение задачи стоит предварить построением обратной решётки, чтобы было понятно как считается площадь первой зоны Бриллюэна.

Комментарий 2: В этой задаче (и родственных задачах в задачнике) не совсем корректно

 $K_{x} + K_{y} = \frac{\pi}{4} (1 + 2 m)$   $|K_{x}|, |K_{y}| \le \frac{\pi}{4}$   $|K_{x}| \le \frac{\pi}{4}$ 

говорится «в силу симметричного характера спектра половинное заполнение спектра соответствует  $E_F$  = 0 ». При этом вид симметрии не уточняется — например квадратичный спектр тоже симметричный. Дело в том, что область с E < 0 занимает половину площади первой зоны Бриллюэна и соответственно эти состояния и окажутся заполнены при T=0 . Именно это свойство спектра важно. Например, при произвольной трансформации заданного спектра  $E'(\vec{k}) = F(\vec{k}) E(\vec{k})$  , где множитель  $F(\vec{k}) > 0$  , но меняется произвольно, форма dp = e[r, F] поверхности Ферми не изменится, хотя всякая «симметрия» будет потеряна.  $\mathcal{E}(p) = \frac{p_{\chi}}{z_{w_{\chi}}} + \frac{p_{\chi}}{z_{w_{\chi}}} + \frac{p_{\chi}}{z_{w_{\chi}}}$ Задача 3.38 (на дом)

E(max = c) простой кубической решёткой и законом дисперсии  $E(k) = \epsilon_0 (3 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a) - \cos(k_z a))$  помещён во внешнее магнитное поле H , направленное вдоль оси z. Найти скорость и ускорение электрона c квазиимпульсом  $p=5\pi\hbar I(6a)$  , направленным вдоль оси x . Использовать  $\frac{dp}{dt}=\frac{e}{c}[\vec{V}\times\vec{H}]$ 

 $=\tilde{c}(\ell_1H_2-H_3\ell_2)-\tilde{j}(\ell_2H_2-\ell_3H_3)+\tilde{\kappa}(\ell_2H_3-\ell_3H_3)$  — скорость электрона в твёрдом теле не связаны соотношением p = mV.

$$V_x = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin \frac{5\pi}{6} = \frac{\epsilon_0 a}{2\hbar}$$

Ускорение

$$\frac{dV}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{\partial E}{\partial p} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\frac{\partial E}{\partial p}\Big|_{p = p + \frac{dp}{dt} \Delta t} - \frac{\partial E}{\partial p}\Big|_{p = t}}{\Delta t}$$

пача заставляет вспомнить, что квазнимпулье и скорости при заставляет вспомнить, что квазнимпулье и скорости при заставляет вспомнить, что квазнимпулье и скорости при заставляет вспомнить, что квазнимпулье и скорости 
$$V = \frac{\partial E}{\partial p}$$
.  $V_y = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(p_y a/\hbar) = 0 = V_z$  о определению групповой скорости  $V = \frac{\partial E}{\partial p}$  .  $V_y = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(p_y a/\hbar) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar} \sin(\frac{p_y a}{\hbar}) = 0 = V_z$  о определению  $V_z =$ 

По определению:  $\frac{dp_x}{dt} = \frac{dp_z}{dt} = 0$ ,  $\frac{dp_y}{dt} = \frac{He}{c} \frac{\epsilon_0 a}{2\hbar}$   $\omega \int_{0}^{\infty} e^{-\frac{t}{c}} \left(\int_{0}^{\infty} \frac{H_x}{m_y} - \int_{0}^{\infty} \frac{H_x}{m_z}\right)$   $\omega \int_{0}^{\infty} e^{-\frac{t}{c}} \left(\int_{0}^{\infty} \frac{H_x}{m_z} - \int_{0}^{\infty} \frac{H_x}{m_z}\right)$   $\omega \int_{0}^{\infty} e^{-\frac{t}{c}} \left(\int_{0$ 

$$\frac{dV_y}{dt} = \frac{He}{c} \frac{\epsilon_0^2 a^3}{2 \hbar^3} ,$$

$$dV_z = dV_{\pm} = 0$$

$$\frac{dV_{\pm}}{dt} = \frac{dV_{\pm}}{dt} = 0$$

 $\lambda_0 = 2680\,A$ . Оценить (6 эв) положение она зоны проволимента относительно выпута.

Массу электрона принять равной массе свободного электрона.  $-i\omega\left(-\omega^2 + \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{H_2}{\omega_1}\right) - \frac{e}{c} \frac{H_3}{\omega_2}\left(\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{H_3}{\omega_2} + i\omega \frac{e}{c} \frac{H_3}{\omega_2}\right) - \frac{e}{c} \frac{H_3}{\omega_2}\left(i\omega \frac{e}{c} \frac{H_4}{\omega_2}\right) - \frac{e}{c} \frac{H_3}{\omega_2}\left(i\omega \frac{e}{c} \frac{H_4}{\omega_2}\right) - \frac{e}{c} \frac{H_4}{\omega_2}\left(i\omega \frac{e}{c}\right) + \frac{e}$ 

Данная задача на комплексную проверку знаши 
$$\omega^2 - \frac{e^2}{(-\frac{H_x}{m_y})^{m_z}} + \frac{H_x^2}{m_x m_y} + \frac{H_x^2}{m_x m_y} = 0$$

$$\omega_{x} = \frac{e}{c} \frac{H}{\sqrt{m_{x} m_{x}}} \qquad \omega_{y} = \frac{e}{c} \frac{H}{\sqrt{m_{x} m_{x}}} \qquad \omega_{z} = \frac{e}{c} \frac{H}{\sqrt{m_{x} m_{y}}}$$

Ответом в задаче будет  $E = \frac{2 \, \pi \, \hbar \, c}{\lambda_0} + E_F = E_F + 4.61 \, \mathrm{s} B$  , так как красной границе фотоэффекта соответствует «выбивание» электрона с уровня Ферми.

 $\Gamma$ ЦК - 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  $n=\frac{4}{a^3}$  , для импульса Ферми пользуемся известным выражением  $k_F = \sqrt[3]{3 \, \pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{12 \, \pi^2}}{a}$  откуда имеем  $p_F = \hbar \, k_F = 1.26 \cdot 10^{-24} \, \kappa z \cdot m/c$  и соответственно

 $E_F = \frac{p_F^2}{2m} = 5.44 \, 9B \quad .$ 

Добавляя расстояние от уровня Ферми до уровня свободного электрона 4.61 эВ, получим ответ E = 10.05 эВ .

Комментарий (А.О.Раевский, В.Н.Глазков): Интересно сравнить найденное положение дна зоны проводимости и уровня Ферми с энергией ионизации одиночного атома серебра, равной 7.57эВ. То есть положение дна зоны относительно уровня электрона в вакууме оказывается ниже (по энергии) положения уровня энергии 5s электронов в изолированном атоме, из которых эта зона построена. Положение же уровня Ферми оказывается выше уровня энергии 5s электронов. Если вспомнить результат приближения сильной связи, в этом нет ничего удивительного: в приближении сильной связи уровень «размывается» в зону симметрично, так что дно зоны проводимости оказывается ниже «родительского» уровня. С другой стороны, можно отметить, что при расчёте зонной структуры зоны, образуемые более высокими оболочками (6s и бр, например), могут начать перекрываться, что уменьшит расстояние между «родительским» уровнем зоны проводимости и началом непрерывного спектра. Возможно, этот эффект в случае серебра (серебро — хороший металл с одним электроном на атом, то есть с половинным заполнением зоны проводимости, в приближении сильной связи уровень Ферми совпадал бы с «родительским» уровнем) частично ответственен за то, что уровень Ферми оказывается выше уровня 5s электронов в изолированном атоме.

## Задача 3.57 (на дом)( !ошибка в ответе задачника!)

Плоскость (Oxz) отделяет металл с законом дисперсии  $E_1 = \frac{p_x^2}{2m_x^*} + \frac{p_y^2}{2m_x^*} + \frac{p_z^2}{2m_z^*}$  от

точно такого же металла, повёрнутого на  $\pi/2$  относительно оси Oz. Найти закон дисперсии в другом металле и закон преломления электронных волн на границе для электронов, движущихся в плоскости Oxy.

Комментарий: Задача иллюстрирует то, что эффективная масса электрона может быть анизотропной и даёт пример краевого эффекта. Описываемая граница двух металлов может реализовываться как граница кристаллографических доменов в реальном кристалле.

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

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

(из-за поворота локальных осей кристалла движение вдоль оси X теперь характеризуется эффективной массой т, и наоборот)

Перейдём к вычислению закона преломления

Пусть в области 1 был электрон с импульсом  $(p_z, p_y, 0)$  , после прохождения границы в области II он перейдёт в состояние с импульсом  $(p_{zl}, p_{yl}, 0)$  . Поскольку испускания или поглощения фононов и других неупругих процессов нет, энергия сохраняется, то есть:

$$\frac{p_{s}^{2}}{m_{s}^{*}} + \frac{p_{y}^{2}}{m_{y}^{*}} = \frac{p_{sl}^{2}}{m_{y}^{*}} + \frac{p_{yl}^{2}}{m_{s}^{*}}$$

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

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

Данные выражения для импульсов решают задачу.

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

$$\frac{1}{m_{x}^{*}} + \frac{ctg^{2}\alpha}{m_{y}^{*}} = \frac{1}{m_{y}^{*}} + \frac{ctg^{2}\beta}{m_{x}^{*}}$$

$$\frac{ctg^{2}\alpha - 1}{m_{y}^{*}} = \frac{ctg^{2}\beta - 1}{m_{x}^{*}}$$

$$\frac{1}{m_{y}^{*}} \frac{\cos 2\alpha}{\sin^{2}\alpha} = \frac{1}{m_{x}^{*}} \frac{\cos 2\beta}{\sin^{2}\beta}$$

Откуда

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} \times \sqrt{\frac{\cos 2\beta}{\cos 2\alpha}} = \sqrt{\frac{m_s^*}{m_y^*}}$$

асимптотика при малых углах

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

Внимание: ответ отличается от задачника перевёрнутой дробью под корнем. Такое поведение правильно. Если  $m_{z}^{*} > m_{y}^{*}$ , то по закону сохранения энергии при почти нормальном (вдоль Ү) падении импулье должен увеличиться по модулю, что при сохранении тангенциальной компоненты означает, что направление распространения ещё больше «прижимается» к нормали, то есть α>β.

### Задача 4.54 (на дом)(!решена в задачнике!)

Разобранная верно в задачнике задача про Ферми поверхность графена. Примечательна ответом: Ферми поверхность стягивается в точку и имеет нулевую площадь.

Комментарий: в решении используются слова про «симметрию спектра» («вследствие симметрии спектра вся валентная зона будет заполнена, а вся зона проводимости останется пустой»). Эти слова не совсем корректны — не ясно о какой симметрии речь. Реально важен тот факт, что валентная зона и зона проводимости не пересекаются и тогда из имеющегося числа электронов следует полное заполнение валентной зоны.

### Задача Т.4.2 (на дом)

Однородная цепочка (период а) одновалентных атомов формирует одномерный проводник. Известно, что при некоторой температуре в такой цепочке происходит фазовый переход (пайерлсовский переход) при котором атомы поочерёдно смещаются влево и вправо вдоль цепочки (смещение n-ого атома  $u_n = \delta(-1)^n$ ,  $\delta \ll a$ ) и период цепочки удваивается (цепочка димеризуется). В рамках приближения слабой связи объяснить, почему энергия электронов в димеризованной цепочке ниже, чем в однородной? Как изменятся проводящие свойства системы после димеризации?

<u>Комментарий:</u> задача на комплексное использование знаний о формировании зонной структуры при учёте взаимодействия электронов с периодическим потенциалом и связи заполнения зон с проводимостью материала (см. Т.4.1)

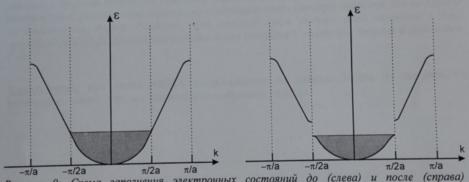


Рисунок 9: Схема заполнения электронных состояний до (слева) и после (справа) димеризации цепочек.

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 к-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 задачей 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 (просто для сведения: проигрыш  $\propto \delta^2$ , выигрыш  $\propto \delta^2 \ln \delta$ ).

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

Комментарий по решению: вычисление точного ответа не такое сложное и посильное для студентов, предоставляется по запросу. Задача может быть легко развёрнута в интересный вопрос по выбору, примеры экспериментального наблюдения такого перехода известны.

### Задача Т.4.3 (на дом)

При фотоэффекте в металле возможно резонансное увеличение фототока, если после поглощения кванта света электрон попадёт точно на следующую ветвь спектра: такой электрон может распространяться в кристалле на большое расстояние и вероятность того, что электрон достигнет поверхности, сохранив избыточную энергию, увеличивается. Эта возможность используется в методе ARPES для изучения спектра электронов в металле. Считая взаимодействие электронов с кристаллом слабым, определить для металла с простой кубической решёткой минимальную энергию кванта света, для которой такой процесс резонансного перехода на следующую ветвь спектра возможен для электрона на поверхности Ферми. Считать, что каждый атом отдаёт один электрон в зону проводимости, эффективная масса равна массе свободного электрона, энергия Ферми равна 3 эВ.

Комментарий: про метод ARPES рассказывается на лекции. Задача на комплексное применение знаний о ферми-поверхности и обратной решётке.

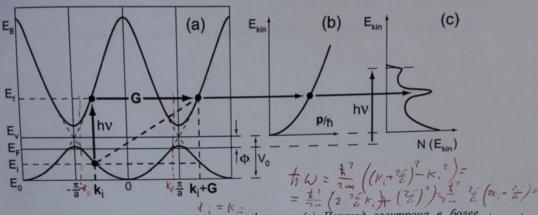


Рисунок 10: Схема резонансного поглощения фотона. (а) Переход электрона в более высокую энергетическую зону в представлении периодической зонной схемы. (b) Квадратичный спектр электрона в вакууме. (c) Схема распределения фотоэлектронов по энергии с резонансным пиком. Обозначения:  $E_0$  - дно зоны проводимости,  $E_i$  - энергия исходного состояния электрона,  $E_f$  - энергия конечного состояния электрона,  $E_f$  - уровень Ферми,  $E_v$  - положение нуля энергии электрона в вакууме, G - вектор обратной решётки, h v - энергия фотона. Из статьи Andrea Damascelli, Probing the Electronic Structure of Complex Systems by ARPES, Physica Scripta, 109, 61(2004).

Для простой кубической решётки обратная решётка также простая кубическая с периодом  $\frac{2\pi}{a}$ . Фермиевский волновой вектор  $k_F = \sqrt[3]{3\pi^2}n \approx \frac{3.09}{a} < \frac{\pi}{a}$ , поэтому ферми-сфера полностью умещается 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  $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\pi}$ .

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 схемам (рисунок 10). Необходимо после такого перехода «вверх» на  $\hbar \omega$  и «вбок» на 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 к-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

A=2,8,8

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2}{2\,m} \Biggl( \Biggl( \frac{2\,\pi}{a} - k_F \Biggr)^2 - k_F^2 \Biggr) = \frac{\hbar^2\,k_F^2}{2m} \Biggl( \frac{(2\,\pi)^2}{(3\,\pi^2)^{2/3}} - 2\frac{2\,\pi}{(3\,\pi^2)^{1/3}} \Biggr) \approx 0.068\,E_F = 0.2\,\text{э}B \qquad . \ \, \text{Это энергия}$$

B=1,421

$$1 + 4 \cos \frac{P_4 G}{\sqrt{3}} \left( \cos \frac{P_4 G}{\sqrt{3}} + \cos \frac{P_4 G}{\sqrt{3}} \right) = 0$$

$$-4 \cos \frac{P_4 G}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\cos \frac{P_4 G}{\sqrt{3}}} < -4 \text{ when } \cos \frac{P_4 G}{\sqrt{3}} < 0$$

$$\begin{cases} cos \beta_x a = 1 \\ cos \beta_y a = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

$$uuu \begin{cases} cos \beta_x a = -1 \\ cos \beta_y a = \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} P_{x}a = 2\pi m \\ P_{x}a = \pm 2\pi + 2\pi R \end{cases} \quad \text{with} \quad \begin{cases} P_{x}a = \pi + 2\pi R \\ P_{y}a = \pm \frac{\pi}{3} + 2\pi R \end{cases}$$

$$\begin{cases} P_{x} = \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{1} = \frac{4\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{1} = \frac{4\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{2} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{3} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{4} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{5} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{7} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{4\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{2\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{2\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{2\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{2\pi t}{3\ell} & \text{with} \\ P_{8} = \frac{2\pi t}{3\ell} + \frac{2\pi t}{3\ell$$

$$\begin{cases} P_{x} = 0 \\ P_{y} = \pm \frac{4\pi t}{3\sqrt{3} \ell} \end{cases} \text{ (ctp 58 H3 150)} \begin{cases} P_{x} = \pm \frac{2\pi t}{3\ell} \\ P_{y} = \pm \frac{2\pi t}{3\sqrt{3} \ell} \end{cases}$$

P=1,47% 8 \$ 6=2 (4.55) E=0  $SE(SP_{x}, SP_{y}) = \pm A \frac{3\ell}{2\pi} |SP_{x}^{2} + SP_{y}^{2} = \pm C^{*}SP$   $C^{*} = \frac{3SE}{2SP} = A \cdot \frac{3\ell}{2\pi} = 10^{6} \text{ cass/c} = 10^{6} \text{ rass/c}$   $dN_{p} = 2 \frac{S^{2}}{(25\pi)^{3}} = 2 \frac{S^{2}}{2\pi} (4\pi)^{3}$   $\frac{dN_{p}}{dSE} = |SE| \qquad SE \rightarrow 0 \frac{dV_{p}}{dSE} \rightarrow 0.$