Адиабатическое приближение в твердом теле

- оператор кинетической энергии электронов

- оператор кинетической энергии ядер

- энергия электрон-электронного взаимодействия

- энергия взаимодействия электронов с ядрами

- энергия ион-ион взаимодействия

Основная проблема – макроскопически большое число взаимодействующих частиц => нужно решать УШ с макроскопическим числом неразделяющихся переменных => нужны приближения

Адиабатическое приближение

$m_e << M$ => можно использовать адиабатическую теорию возмущения

электроны

на внутренних оболочках атомов
не участвуют в валентных связях
и не возбуждаются в изучаемых явлениях.
Нет смысла рассматривать в явном виде

Валентные электроны
участвуют в валентных связях
и возбуждаются в изучаемых явлениях
нужно рассматривать в явном виде

Кристалл

Тяжелая подсистема - атомные остовы=ядра+электроны внутренних оболочек

Легкая подсистема – валентные электроны

m_e<<M => электронная подсистема адиабатически следует за ионами (успевает подстраиваться под мгновенное положение ионов)=>энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний электронов можно определять, считая ионы неподвижными

- Базис при фиксированных **R**

R - параметры

ищем базис из стационарных состояний кристалла в виде

умножаем обе части на φ* и интегрируем по **r**

- приводит к неадиабат. поправкам порядка $(m/M)^{1/4} \ll 1$

Пренебрегаем неадиабатическими поправками

- СУШ для ионов во внешнем поле $\varepsilon_e(\mathbf{R})$ =>

=> Можно сформировать базис из $\alpha(\mathbf{R})$ => из произведений $\psi=\alpha\varphi$ можно сформировать базис для кристалла

Задача о состояниях кристалла

Задача о состояниях электронов
В поле неподвижных ядер

Задача о стационарных состояниях ядер
В эффективном среднем поле $\varepsilon_e(\mathbf{R})$, создаваемом электронами

Приближение самосогласованного поля Хартри-Фока для электронной подсистемы кристалла

<u>Надо</u> Найти стационарные состояния электронной подсистемы в поле V(**r**) неподвижных ядер

<u>Проблема</u> та же – из-за взаимодействия между частицами нужно решать УШ с огромным числом неразделяющихся переменных

Приближение самосогласованного поля Хартри-Фока

Базовое предположение: Это приближение состоит в предположении, что каждый электрон, “чувствует” некоторое среднее поле $U_{eff}(\mathbf{r})$, создаваемое всеми остальными электронами, т.е. в замене многоэлектронного взаимодействия некоторым эффективным полем.

Электрон-электронное взаимодействие учитываем путем введения эффективного поля $U_{eff}(\mathbf{r})$, внешнего по отношению к системе электронов.

Система взаимодействующих электронов заменяется на систему невзаимодейсивующих электронов, находящихся во внешнем поле $U_{eff}(\mathbf{r})$

- Одноэлектронный Гамильтониан (Гамильтониан одного отдельно взятого электрона в тех же силовых полях, что и весь газ)

1) Находим одноэлектронные стационарные состояния – состояния одного отдельно взятого электрона, рассмотренного в тех же силовых полях, что и весь газ

- Одноэлектронный спектр и базис из в.ф. одноэлектронных стационарных состояний

2) В стационарном состоянии всей системы в целом каждый из электронов находится в одном из одночастичных стационарных состояний. Поэтому стационарное состояние всего газа в целом однозначным образом задается указанием чисел заполнения всех одночастичных стационарных состояний

Электроны – фермионы => подчиняются принципу запрета Паули => числа заполнения могут принимать только два значения

Как определить самосогласованное поле Ueff?

Простейший вариант – как электростатическое поле, создаваемое средней электронной плотностью

- Поле Хартри

Поле Хартри – самосогласованное поле: определяет одноэлектронные волновые функции и при этом само зависит от этих функций. Должно определяться так, чтобы оно давало волновые функции, приводящие к тому же полю.

Выражение для волновой функции можно определить из вариационного принципа квантовой механики

Наилучшее приближение для волновой функции получается, когда
$\delta\varepsilon=0$ => одноэлектронное уравнение Шредингера

Не учитываем перестановочную симметрию => самосогласованное поле Хартри

Учитываем перестановочную симметрию=> самосогласованное поле Хартри-Фока

обменное взаимодействие

Зонная теория
для
идеального кристалла в отсутствие внешних полей.
Задача Блоха

<u>Надо</u>: одноэлектронные стационарные состояния для случая, когда все атомы находятся в положении равновесия (хорошая нулевая задача)

Идеальный кристалл => поле ионов – периодическое с периодом решетки

Электронейтральность => средняя электронная плотность имеет период решетки => самосогласованное поле – периодическое с периодом решетки

Кристаллическое поле – периодическое с периодом решетки

, если уровень Е - невырожденный

<u>Что будет если уровень энергии Е является вырожденным?</u>

Е вырожден с кратностью s =>

-лин. незав. Решения УШ с энергией Е

Любая линейная комбинация решений – тоже решение с той же энергией

Известна линейно независимая система решений

Выбор такой системы решений – неоднозначный

Нужно подобрать такие коэффициенты в этих линейных комбинациях, чтобы система из s решений (*) была линейно независимой и при этом каждая из функций (*) удовлетворяла условию

- задача диагонализации матрицы

- ОСЛАУ

Вектор **k** определяет закон, связывающий значения волновой функции электрона в точках, отстоящих друг от друга на вектор решетки.
В различных стационарных состояниях эта связь будет разной => Значения вектора **k** в различных состояниях будут отличаться. Поэтому вектор **k** следует рассматривать как квантовое число, характеризующее заданное стационарное состояния.

Можно сформировать базис из волновых функций стационарных состояний, каждая из которых удовлетворяет условию

Обратная решетка

***<u>Def</u>*. G** – вектор обратной решетки

$\Leftrightarrow$

- объем элементарной ячейки

только если

-Периодическая функция с периодом
кристаллической (прямой) решетки

Th Блоха (Bloch). волновая функция стационарного состояния электрона в периодическом поле

Волновая функция Блоха известна, если известна ее периодическая часть.

Найдем уравнение для периодической части функции Блоха

Уравнение для периодической части функции Блоха

- известна, если известна u

Уравнение Шредингера для u

Уравнение для периодической части функции Блоха

Уравнение для периодической части функции Блоха

Уравнение для периодической части функции Блоха

Уравнение Шредингера для электрона в идеальном кристалле, позволяющее найти энергию электрона и периодическую часть функции Блоха

Th Блоха (Bloch). волновая функция стационарного состояния электрона в периодическом поле

Стационарное состояние электрона в периодическом поле кристаллической решетки задается двумя квантовыми числами – волновым вектором Блоха **k** и натуральным индексом (н мер зоны).

- физически полностью эквивалентны

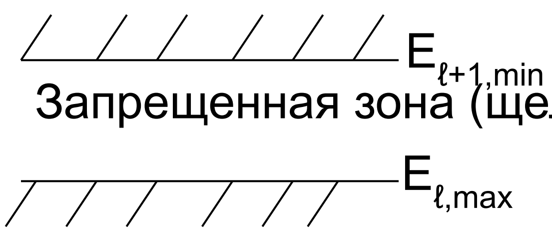
Зона Бриллюэна - область **k**-пространства, включающая в себя все физически различные значения вектора Блох и не содержащая физически эквивалентные его значения

- непрерывна в пределах зоны Бриллюэна

- -ая энергетическая зона

Ситуация I

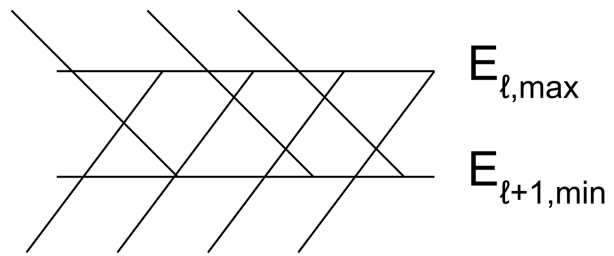
ℓ+1 зона



Запрещенная зона (щель)

ℓ зона

Ситуация II (зоны перекрываются)



Последняя полностью заполненная при T=0 К – валентная зона

Следующая за валентной зонной – зона проводимости

Уникальность свойств полупроводников – следствие наличия щели между валентной зоной и зоной проводимости.

Эффективная масса: невырожденный экстремум

- тензор обратных эффективных масс

-скалярная эффективная масса вдоль оси α

Эффективная масса: невырожденный экстремум

Закон дисперсии вдоль главной оси имеет такой же вид, как и для свободной частицы с соответствующей эффективной массой

Эффективная масса электрона учитывает влияние кристаллической решетки а электрон, и принципиальным образом отличается от гравитационной массы электрона (массы свободного электрона)

1) **Абсолютное значение эффективной массы электрон сильно отличается от его гравитационной массы**

Пример: на дне зоны проводимости GaAs $m^*=0.067m_0$

2) **Эффективная масса может быть не только положительной, но и отрицательной**

Это не антигравитация!!!!

3) **Эффективная масса может быть разной в различных направлениях (обычная ситуация для валентной зоны полупроводника)**

Эффективная масса: невырожденный экстремум

Во многих физических процессов большая часть носителей заряда находится в окрестности экстремумов зон.

В окрестности невырожденного экстремума закон дисперсии электрона можно разложить в ряд Тейлора

- значение энергии в точке экстремума (константа)

- точка экстремума

Эффективная масса: невырожденный экстремум

Гравитационная масса электрона (его масса покоя) является фундаментальной физической константой, тогда как эффективная масса –математический объект, введенный искусственно для упрощения описания дисперсии электрона в твердых телах.

Гравитационная масса введена Богом (Природой), тогда как эффективная масса придумана человеком.

Электрон с эффективной массой – КВАЗИчастица.

kp-метод: основная идея

метод, позволяющий вычислить состояния Блоха в окрестности экстремума зоны

- Гамильтониан для k=0 (точка экстремума) используется как невозмущенный Гамильтониан

- возмущение

Алгоритм расчета:

1) Вычисляем состояния блоха в точке экстремума ***k***=0.
2) Применяя теорию стационарного возмущения, вычисляем состояния Блоха в окрестности экстремума зоны. При этом состояния Блоха в точке экстремума используются как приближение нулевого порядка.

kp-метод: невырожденный экстремум

Невыожденный экстремум => энергия v-ой зоны – невырожденная в точке экстремума (такую энергию имеет только одно стационарное состояние) => используется стационарная теория возмущения

kp-метод: невырожденный экстремум

Периодические части блоховских функция с одинаковым kобразуют ортонормированный набор

- матричный элемент проекции оператора импульса на ось α

kp-метод: невырожденный экстремум

Поправка первого порядка малости ν=μ

Происходит сдвиг точки экстремума

kp-метод: невырожденный экстремум

Поправка второго порядка малости μ ≠ ν

kp-метод: невырожденный экстремум

Эффективная масса определяется матичным элементом оператора импульса в экстремуме

kp-метод: вырожденный экстремум

Используется стационарная теория возмущения при наличии вырождения

F(**r**) – периодическая функция с периодом кристаллической решетки

только если

<u>Def</u>**. G** вектор обратной решетки

$\Leftrightarrow$

Th. *Если* $F(\mathbf{r})=F(\mathbf{r}+\mathbf{n})$, тогда разложение Фурье $F(\mathbf{r})$ содержит только плоские волны с волновыми векторами, совпадающими с векторами обратной решетки

Решеточные суммы

Решеточные суммы