

Elektróny v periodickom potenciáli 1

Predpoklady: 1. jednocelkový aproxiim'ciav
2. dokonaly' kryštal

Hlavné riešiť $H\psi = \varepsilon \psi$ kde $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$

A) Vlastnosti potenciálu

periodicita $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$ pre vektory $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$

Fourierov rozvoj: $V(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} V_{\vec{K}} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$

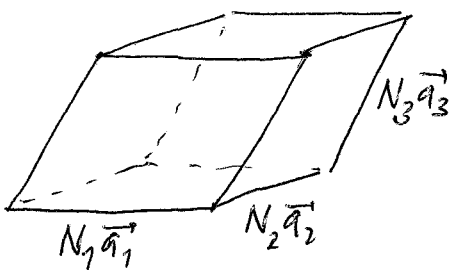
kde $\vec{K} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$

Navyš: $V(\vec{r} + \vec{R}) = \sum_{\vec{K}} V_{\vec{K}} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} \underbrace{e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}}}_{=1} = V(\vec{r})$

Reálny potenciál $V(\vec{r}) \rightarrow \boxed{V_{\vec{K}}^* = V_{-\vec{K}}}$

B) Okrajové podmienky (Born - von Karman)

$N = N_1 N_2 N_3$ počet primitívnych buniek ($\gg 1$)



Ďalšie

$$\psi(\vec{r} + N_1 \vec{a}_1) = \psi(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r} + N_2 \vec{a}_2) = \psi(\vec{r})$$

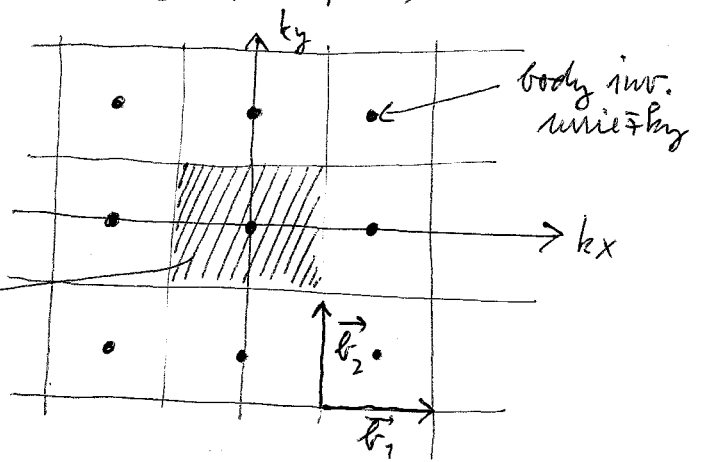
$$\psi(\vec{r} + N_3 \vec{a}_3) = \psi(\vec{r})$$

splnené v b'ovom rovine'ch v'la'

$$\vec{K} = \frac{n_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{n_3}{N_3} \vec{b}_3$$

1. Brillouinova toka

(obsahuje $N = N_1 N_2 N_3$ $\vec{K}$ -bodem)



2
 ③ Blochova veta : máme rovnici $H\psi = \varepsilon\psi$ (1)
 rozvoj $\psi = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

dosaďme : $\sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \sum_{\vec{p}, \vec{K}} V_{\vec{K}} c_{\vec{p}} e^{i(\vec{p}+\vec{K})\cdot\vec{r}} = \varepsilon \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

porovnanie koeficientov pri $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$$\boxed{\varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{K}} V_{\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}} = \varepsilon c_{\vec{k}}} \quad (2)$$

$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

→ disperzný zákon pre elektróny vo vákuu

z rovnice (2) vidno, že spolu s koeficientom $c_{\vec{k}}$ vstupujú
 do rozvoja funkcie ψ aj (a iba) $c_{\vec{k}-\vec{K}}$

$$\rightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}} e^{i(\vec{k}-\vec{K})\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \underbrace{\sum_{\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}}_{\text{periodická funkcia}}$$

$$\rightarrow \boxed{\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})} \quad (3) \quad \text{kde } u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

↓
Blochova veta

④ Existencia fáz : dosadíme (3) do (1)

dosaďme : $\boxed{\left[\frac{\hbar^2}{2m} (-i\vec{\nabla} + \vec{k})^2 + V(\vec{r}) \right] u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{k}) u_{\vec{k}}(\vec{r})} \quad (4)$

→ rovnica pre vlastné čísla; obraz. podm. $u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$

diskrétnu spektrum

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ \varepsilon_n(\vec{k}) &\dots \text{vl. číslo} \end{aligned}}$$

$n = \text{fázový index}$

žiadame $\int d^3r |\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})|^2 = 1 \rightarrow \frac{1}{v_0} \int d^3r |u_{n\vec{k}}(\vec{r})|^2 = 1$

↓
 cell

$v_0 = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ objem jedn. bunky

3) Periodická funkcie $\varepsilon_n(\vec{k})$: platí $\boxed{\varepsilon_n(\vec{k} + \vec{K}) = \varepsilon_n(\vec{k})}$

Nasledujú: ak $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ je riešenie (4) pre $\vec{k}$ s energiou ε

potom $u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}$ je riešenie (4) pre $\vec{k} + \vec{K}$ s rovnakou energiou!

→ možno sa obmedziť na štandardný 1. Brillouinovský trojuholník!

(F) Ortogonalita: $\boxed{\int d^3r \psi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{m\vec{p}}(\vec{r}) = \delta_{nm} \delta_{\vec{k}\vec{p}}}$
(ak $\vec{k}, \vec{p}$ sú v 1. Brillouinovskom trojuholníku) 1.BZ

Dôkaz: $\int d^3r = \sum_{\vec{R}} \int d^3\rho$ $\vec{r} = \vec{R} + \vec{\rho}$

↓
suma cez bunky

↓
integrál cez bunku

$$(*) = \int d^3r \psi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{m\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{R}} e^{i(\vec{p}-\vec{k})\cdot\vec{R}} \int d^3\rho u_{n\vec{k}}^*(\rho) u_{m\vec{p}}(\rho)$$

vieme: (vlastnosť difrakcie) $\boxed{\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\vec{K}} \delta(\vec{q}-\vec{K})}$ → platí pre všetky $\vec{q}$ a meniace $\vec{q}$

analog: $\boxed{\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} = N \sum_{\vec{K}} \delta_{\vec{q}\vec{K}}$ → dôkaz: suma geometrického radu

Po (4) $(*) = \sum_{\vec{K}} \delta_{\vec{p}, \vec{k}+\vec{K}} \frac{1}{v_0} \int d^3\rho u_{n\vec{k}}^*(\rho) u_{m\vec{p}}(\rho)$

ak sledujeme $\vec{p}, \vec{k}$ v 1. BZ → $(*) = \delta_{\vec{p}\vec{k}} \frac{1}{v_0} \int d^3\rho u_{n\vec{k}}^*(\rho) u_{m\vec{k}}(\rho)$

δ_{nm} → ortogonalita
všetkých riešení
rovnice (4)

(G) Wannierove funkcie: lokalizované funkcie oblo uvoľňujúce bodový $\vec{R}$

$$\boxed{w_n(\vec{r}-\vec{R}) \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})}$$

N funkcií N funkcií

inverzná transformácia:

$$\boxed{\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} w_n(\vec{r}-\vec{R})}$$

rozvoj obeh (Blochova)
je vhodné sfaktorišovať
lin. kombinácia
"atomových" funkcií