UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

Jernej Mravlje

Razcep elektronskih pasov v približku šibkega potenciala na primeru kvadratne mreže

Domača naloga za predmet Fizika trdne snovi

Ljubljana, 2005

Kazalo

1 Uvod

V kristalu vlada zvezna translacijska simetrija, zato je po Blochovem izreku splošna rešitev Schrödingerjeve enačbe produkt ravnega vala in funkcije, ki je sebi enaka ob premiku argumenta za poljubni vektor Bravaisove mreže[1]

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}); \qquad u_{n\vec{k}}(\vec{R}+\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad \forall \vec{R} \in \mathrm{B.M.} \tag{1}$$

Zaradi periodičnosti lahko funkcijo $u_{n\vec{k}}$ razvijemo po Fourierovih komponentah

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_i c_{n\vec{k}^i} e^{-\vec{K}_i\cdot\vec{r}}$$

Trivialna limita (ko je periodični potencial ničen) Schrödingerjeve enačbe so kar ravni valovi

$$\phi_i(\vec{r}) = e^{i(\vec{k}-\vec{K}_i)\cdot\vec{r}} \tag{2}$$

z energijami $\epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}} = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}-\vec{K})^2$, kjer je $\vec{k}$ vzet v prvi Brillonovi coni, $\vec{K}$ pa poljubni vektor recipročne mreže. V nalogi se ukvarjamo s primerom šibkega potenciala, ko je periodični potencial neničelen a mali. V tem primeru se v prvem približku energijski pasovi ne premaknejo, razen blizu točk v recipročnem prostoru, kjer se m pasov križa (tj. v točkah z degeneracijo)

$$\epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_1} = \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_2} = ... = \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_m}.$$

V točkah, kjer se to zgodi (to je tam, kjer je več recipročnih vektorjev hkrati enako oddaljenih), pride do razcepa pasov. Tam je rešitev v prvem redu približno kar linearna kombinacija tistih funkcij ϕ_i, za katere so vektorji recipročne mreže $\vec{K}_i$ enako oddaljeni od izbranega valovnega vektorja $\vec{k}$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{i\in\deg} c_{\vec{k}-\vec{K}_i}\phi_i(\vec{r}). \tag{3}$$

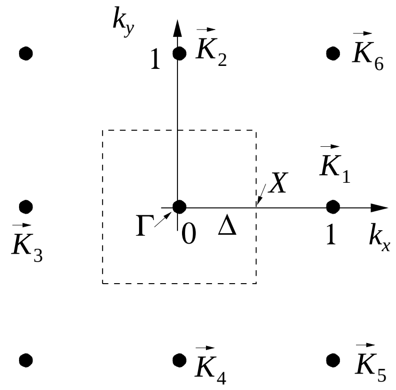
Koeficiente v linearni kombinaciji $c_{\vec{k}-\vec{K}_i}$ in energije rešitev določajo enačbe

$$\epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_i} c_{\vec{k}-\vec{K}_i} + \sum_{j=1}^{m} U_{\vec{K}_j-\vec{K}_i} c_{\vec{k}-\vec{K}_j} = \epsilon c_{\vec{k}-\vec{K}_i}; \quad \text{za} \quad i=1,...,m, \tag{4}$$

ki jo z definicijama $\epsilon^0_{ij} = \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_i}\delta_{ij}$ in $U_{ij} = U_{\vec{K}_j-\vec{K}_i}$ prepišemo v matrično obliko

$$(\underline{\underline{\epsilon}}^0 + \underline{\underline{U}})\underline{c} = \epsilon\underline{c}, \tag{5}$$

[1] Tekst ni kompleten. Za pojasnila v zvezi s teorijo trdne snovi glej [1], za pojasnila v zvezi s teorijo grup glej [2]



Slika 1: Recipročna kvadratna mreža. Označene so 1. Brillonova cona, točki Γ ($\vec{k} = 0$), X ($\vec{k} = 0.5\vec{K}_1$) in linija Δ, ki ju povezuje. Označen je tudi koordinatni sistem za valovne vektorje. V točki Γ so štirje najbližji sosedi (ti določajo energijo vzbujenega stanja) $\vec{K}_1, ..., \vec{K}_4$, v točki X pa $\vec{K}_6, \vec{K}_2, \vec{K}_4$ in $\vec{K}_5$

se pravi v reševanje problema lastnih vrednosti.

Z upoštevanjem simetrij, ki jih ima mreža v točki $\vec{k}$, se iskanje lastnih vrednosti in lastnih vektorjev poenostavi. V primeru, ko je Hamiltonova funkcija invariantna na simetrijske operacije neke grupe, imajo vektorji, ki pripadajo istim nerazcepnim upodobitvam grupe enake lastne energije. To v našem primeru pomeni, da v točki s simetrijo S, matrika $\underline{\underline{\epsilon}}^0 + \underline{\underline{U}}$ v pravi bazi razpade na kvadratne bloke z dimenzijami matrik nerazcepnih upodobitev grupe S. Teorija grup je sistematičen način za iskanje take baze.

V nalogi si bomo ogledali razcep prvega vzbujenega stanja v točkah Γ in X recipročne kvadratne mreže (Slika 1).

2 Razcep prvega vzbujenega stanja v točki Γ

V točki Γ je degeneracija prvega vzbujenega stanja štirikratna. Energije $\epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}}$ so v točki Γ enake za štiri najbližje sosede v recipročni mreži (zaradi jedrnatosti zapisa tu in v nadaljevanju izberemo enote tako, da je $2\pi/a = 1$, kjer je a razdalja med najbližjimi sosedi – z drugimi besedami: dolžine merimo v enotah $a/2\pi$):

$$\vec{K}_1 = (1,0), \quad \vec{K}_2 = (0,1), \quad \vec{K}_3 = (-1,0), \quad \vec{K}_4 = (0,-1),$$

Tabela 1: Tabela karakterjev grupe C_{4v}.

C_{4v}	E	C_2	$\{C_4, C_4^{-1}\}$	$\{\sigma_x, \sigma_y\}$	$\{\sigma_d, \sigma_d'\}$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1	-1
Γ_3	1	1	-1	1	-1
Γ_4	1	1	-1	-1	1
Γ_5	2	-2	0	0	0

saj so ti vsi enako oddaljeni od točke Γ. Približek za valovno funkcijo (3) je v tej točki

$$\psi = \sum_{i=1}^{4} c_i e^{-i\vec{K}_i\cdot\vec{r}},$$

kjer smo opustili eksplicitni zapis argumenta funkcije in definirali $c_i = c_{\vec{0}-\vec{K}_i}$.

2.1 Grupa C_{4v}

Simetrijska grupa vektorja $\vec{0}$ (točke Γ) je kar polna simetrijska grupa kvadratne mreže – grupa C_{4v}. Grupa C_{4v} vsebuje 8 elementov v petih ekvivalenčnih razredih: identični element E, rotacijo za π C_2, rotaciji za $\pm\pi/4$ $\{C_4, C_4^{-1}\}$, zrcaljenji čez premici y in x $\{\sigma_x, \sigma_y\}$ in zrcaljenji prek simetral med koordinatnima osema $\{\sigma_d, \sigma_d'\}$. Grupa vsebuje 5 nerazcepnih upodobitev (v splošnem velja, da je število neekvivalentnih nerazcepnih upodobitev enako številu ekvivalenčnih razredov) od katerih so 4 enodimenzionalne in 1 dvodimenzionalna. S tem je zadoščeno tudi splošni zvezi, da je namreč vsota kvadratov dimenzij nerazcepnih upodobitev enaka moči grupe.

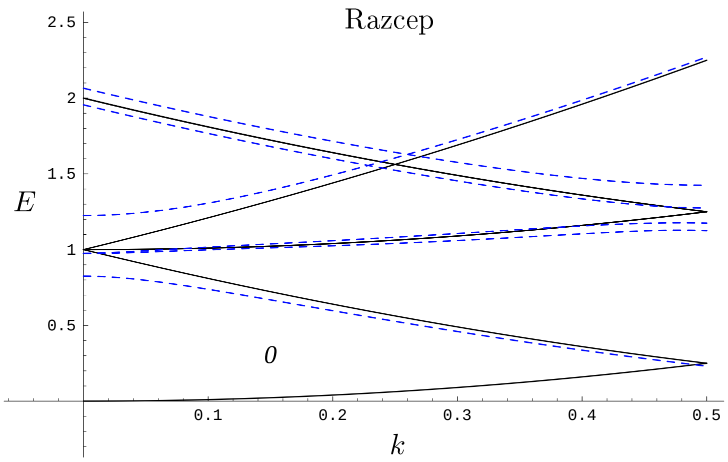
2.2 Matrični zapis

Problem (5) se v tem primeru prepiše v iskanje lastnih vrednosti matrike

$$\begin{pmatrix} \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_1} & U_1 & U_2 & U_1 \\ U_1 & \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_2} & U_1 & U_2 \\ U_2 & U_1 & \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_3} & U_1 \\ U_1 & U_2 & U_1 & \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_4} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Tu smo upoštevali, da sta si lahko zaradi simetrije le dve Fourierovi komponenti medsebojno različni

$$U_{\vec{K}_1-\vec{K}_2} = U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} = U_{\vec{K}_4-\vec{K}_4} = U_{\vec{K}_4-\vec{K}_1} = U_1, \quad \text{in}$$



Slika 2: Najnižjih nekaj elektronskih pasov (polna črta) in njihov (črtkana črta). V točki Γ ostane srednji pas dvojno degeneriran. V točki X se degeneracija odpravi.

$$U_{\vec{K}_1-\vec{K}_3} = U_{\vec{K}_2-\vec{K}_4} = U_2$$

Problem lastnih vrednosti bi lahko sedaj v principu rešili direktno z diagonalizacijo matrike. Teorija grup nam omogoči, da lastne vektorje poiščemo sistematično.

2.3 Izračun

Namesto funkcij tipa e^{ix} izberimo za bazo raje realne valovne funkcije $\sin x$ in $\cos x$ in zgradimo na tej bazi inducirano upodobitev naše grupe s predpisom $T(g)\psi(\vec{r}) = \psi(g^{-1}\vec{r})$. Napravimo tu le primer. Upodobitev elementa C_4 zgradimo s predpisom

$$C_4: \quad x \to y, \quad y \to -x$$

Rezultat je:

$$T(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Podobno zgradimo upodobitev ostalih elementov grupe. Za našo nadaljno obravnavo je dovolj le izračun karakterjev upodobitve, ki jih navajam v Tabeli 2. Zdaj uporabimo zvezo

Tabela 2: Tabela karakterjev inducirane upodobitve T.

T	E	C_2	$\{C_4, C_4^{-1}\}$	$\{\sigma_x, \sigma_y\}$	$\{\sigma_d, \sigma_d'\}$
χ	4	0	0	2	0

$$m_\alpha = \frac{1}{[g]} \sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)*} \chi_p, \tag{7}$$

kjer je z $[g]$ označena moč grupe, s $\chi_p^{(\alpha)}$ karakter elementa v ekvivalenčnem razredu p nerazcepne upodobitve α, χ_p pa element v ekvivalenčnem razredu p upodobitve, katere razcep nas zanima. Število m_α določa kolikokrat se določena nerazcepna upodobitev pojavi v razcepu naše upodobitve. Ugotovimo, da upodobitev T razpade na dve enodimenzionalni in eno dvodimenzionalno upodobitev

$$T = \Gamma_1 \otimes \Gamma_3 \otimes \Gamma_5$$

Poiščimo sedaj funkcije, ki napenjajo posamezno upodobitev. Pri tem si bomo pomagali s premislekom o simetrijah. Enodimenzionalno identično upodobitev Γ_1 napenja vektor, ki je na vse operacije znotraj grupe invarianten. Tak je

$$\tilde{\psi}_1 = \cos x + \cos y$$

Upodobitev Γ_3 napenja vektor, ki ob zamenjavi $x \leftrightarrow y$ spremeni predznak,

$$\tilde{\psi}_2 = \cos x - \cos y.$$

Dvodimenzionalno upodobitev pa napenjata funkciji (edini, ki sta še na voljo!), ki sta linearno neodvisni s ψ_1 in ψ_2,

$$\tilde{\psi}_3 = \sin x$$

$$\tilde{\psi}_4 = \sin y$$

Za izračun lastnih energij, ki pripadajo tem vektorjem je najlažje zapisati vektorje ψ_i v izvirni bazi ϕ_i, in jih pomnožiti z matriko 6 npr.

$$\psi_1 = (\exp(ix)+\exp(iy)+\exp(-ix)+\exp(-iy))/2 = (1,1,1,1)/2 \quad E_1 = 2U_1+U_2$$

$$\psi_2 = (1,-1,1,-1); \quad E_2 = U_2 - 2U_1$$

$$\psi_3 = (1,0,-1,0); \quad E_3 = -U_2$$

$$\psi_4 = (0,1,0,-1); \quad E_4 = -U_2$$

Tabela 3: Tabela karakterjev grupe C_{2v}.

C_{2v}	E	C_2	σ_x	σ_y
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1
Γ_3	1	-1	1	1
Γ_4	1	-1	-1	1

3 Razcep prvega vzbujenega stanja v točki X

Grupa vektorja, ki kaže v točko X je grupa C_{2v}. Mreža v točki X namreč ni invariantna na rotacijo za $\pi/4$ okrog štirištevne osi (glej tudi Sliko 1).

3.1 Grupa C_{2v}

Abelovo grupo C_{2v} sestavljajo štiri elementi, ki so, kot za Abelove grupe splošno velja, vsak v svojem ekvivalenčnem razredu. Karakterji nerazcepnih upodobitev grupe C_{2v} so zbrani v Tabeli 3:

3.2 Matrični zapis

Problem (5) tu podaja matrika

$$\begin{pmatrix} \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_6} & U_1 & U_3 & U_2 \\ U_1 & \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_2} & U_2 & U_3 \\ U_3 & U_2 & \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_4} & U_1 \\ U_2 & U_3 & U_1 & \epsilon^0_{\vec{k}-\vec{K}_5} \end{pmatrix},$$

kjer simetrija dovoljuje tri različne Fourierove komponente

$$U_{\vec{K}_6-\vec{K}_2} = U_{\vec{K}_5-\vec{K}_4} = U_1 \quad U_{\vec{K}_6-\vec{K}_4} = U_{\vec{K}_5-\vec{K}_5} = U_2 \quad \text{in}$$
$$U_{\vec{K}_2-\vec{K}_4} = U_{\vec{K}_6-\vec{K}_5} = U_3$$

3.3 Izračun razcepa

Enako kot prej zapišemo inducirano upodobitev na prostoru vektorjev

$$\phi_{\vec{K}} = e^{i(\vec{k}-\vec{K})\cdot\vec{r}},$$

le da je v točki X $\vec{k} = (1/2, 0)$, zato so bazične funkcije zdaj

$$\phi_1 = e^{i(\frac{x}{2}+y)}, \quad \phi_1 = e^{-i(\frac{x}{2}+y)}, \quad \phi_1 = e^{i(\frac{x}{2}-y)}, \quad \phi_1 = e^{-i(\frac{x}{2}-y)} \qquad (8)$$

Tabela 4: Tabela karakterjev inducirane upodobitve T.

T	E	C_2	$\{C_4, C_4^{-1}\}$	$\{\sigma_x, \sigma_y\}$
χ	4	0	0	0

Tudi zdaj je ugodno delati z realnimi linearnimi kombinacijami vektorjev (8). Če tvorimo vektorje

$$\tilde{\psi}_1 = \cos(\frac{x}{2} + y) + \cos(\frac{x}{2} - y)$$

$$\tilde{\psi}_2 = \cos(\frac{x}{2} + y) - \cos(\frac{x}{2} - y)$$

$$\tilde{\psi}_3 = \sin(\frac{x}{2} + y) + \sin(\frac{x}{2} - y)$$

$$\tilde{\psi}_4 = \sin(\frac{x}{2} + y) + \sin(\frac{x}{2} - y)$$

vidimo, da se vsak transformira kot svoja enodimenzionalna upodobitev grupe C_{2v}. Upodobitev v tem primeru razpade na štiri enodimenzionalne:

$$T = \Gamma_1 \otimes \Gamma_2 \otimes \Gamma_3 \otimes \Gamma_4,$$

česar ni težko preveriti tudi tako, da eksplicitno konstruiramo inducirano upodobitev, s katero dobimo Tabelo 4 in potem uporabimo zvezo (7).

4 Razcep na liniji Δ

Degeneracija na liniji Δ je dvakratna (= točke na liniji Δ so enako oddaljene od dveh Braggovih ravnin), primer, ki smo ga obdelali že na ravni dodiplomskega študija z rezultatom, da je razcep enak $2|U_{\vec{K}}|$, kjer je $\vec{K}$ vektor, ki povezuje ravnini v recipročnem prostoru (v tem primeru $\vec{K} = \vec{K}_2 - \vec{K}_4$).

Literatura

[1] N. W Ashcroft in N. David Mermin: *Solid state physics*, Saunders College Publishing, Orlando, 1976

[2] J. P. Elliot in P. G. Dawber: *Symmetry in Phyisics*, MacMillan Publishers, London 1979