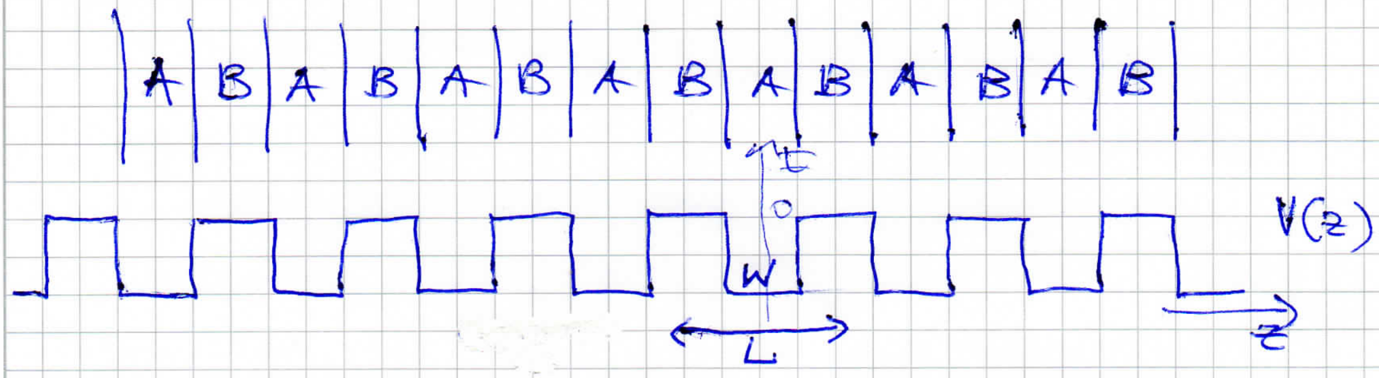
STRUKTURA ELEKTRONOWA SUPERSIECI

SUPERSIECI – technologicznie ważne nanostruktury



Periodyczny potencjał: $V(z+nL) = V(z)$
$n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$

$$V(z) = -V_0 \sum_n \theta\left(\frac{w}{2} - |z - nL|\right); \quad w < L$$

Potencjał Kroniga-Penney'a $\qquad \theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right)\psi(z) = E\psi(z)$$

$$\psi(z+nL) \overset{?}{=} \psi(z) \qquad \text{NIE!}$$

$$\psi(z+nL) = e^{iknL}\psi(z)$$

$$\psi(z) = e^{ikz}u_k(z)$$ gdzie

$u_k(z)$ jest periodyczna

$u_k(z+nL) = u_k(z)$

Jakie wartości może przyjmować wektor falowy k?

Weźmy N – całkowita liczba komórek elementarnych (duża liczba)

$$\left.\begin{aligned} \psi_k(z+NL) &= \psi_k(z) \\ \psi\left(z+\frac{N}{2}L\right) &= \psi\left(z-\frac{N}{2}L\right) \end{aligned}\right\} e^{ikNL} = 1$$

$e^{ikNL} = 1 \iff kNL = 2\pi n \qquad n = 0, \pm 1, \ldots$

$k = \frac{2\pi}{L}\frac{n}{N} \qquad n = -\frac{N}{2} \to k = -\frac{\pi}{L}$

$n = \frac{N}{2} \to k = \frac{\pi}{L}$

$k \in]-\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L}]$ STREFA BRILLOUINA

pamiętamy N jest duże więc punkty k leżą gęsto w przedziale $]-\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L}]$

Tylko te punkty definiują wektor falowy

weźmy $n' = \frac{N}{2} + 1$ i policzmy odpowiadający wektor falowy $k' = \frac{2\pi}{L}\frac{1}{N}\left(\frac{N}{2}+1\right) = \frac{\pi}{L} + \frac{2\pi}{NL} =$

$$= \underbrace{-\frac{\pi}{L} + \frac{2\pi}{NL}}_{k_1 \in BZ} + \frac{2\pi}{L}$$

$+ \frac{2\pi}{L}$

$e^{ik'NL} = e^{ik_1NL} e^{i2\pi N} = e^{ik_1NL}$

Punkty k' i k_1 są równoważne (opisują ten sam stan)

<u>Ogólnie</u>: punkt k i punkt $k + \frac{2\pi}{L}n$ $\quad n = 0, \pm 1, \pm 2$ są równoważne

Punkty $G_n := \frac{2\pi}{L} \cdot n$ – wektory sieci odwrotnej

b – prymitywny wektor sieci odwrotnej $b = \frac{2\pi}{L}$

$R_n := n \cdot L$ – wektory sieci

$a = L$ – wektor prymitywnej translacji $a \cdot b = 2\pi$

W 1D $R_n G_m = 2\pi l$ gdzie $l = mi$

Zanim przystąpimy do omawiania metod rozwiązania równ. masy efektywnej dla periodycznego potencjału (równania Schrödingera) przeanalizujmy przypadek supersieci opisanej potencjałem $V_0 \to 0$

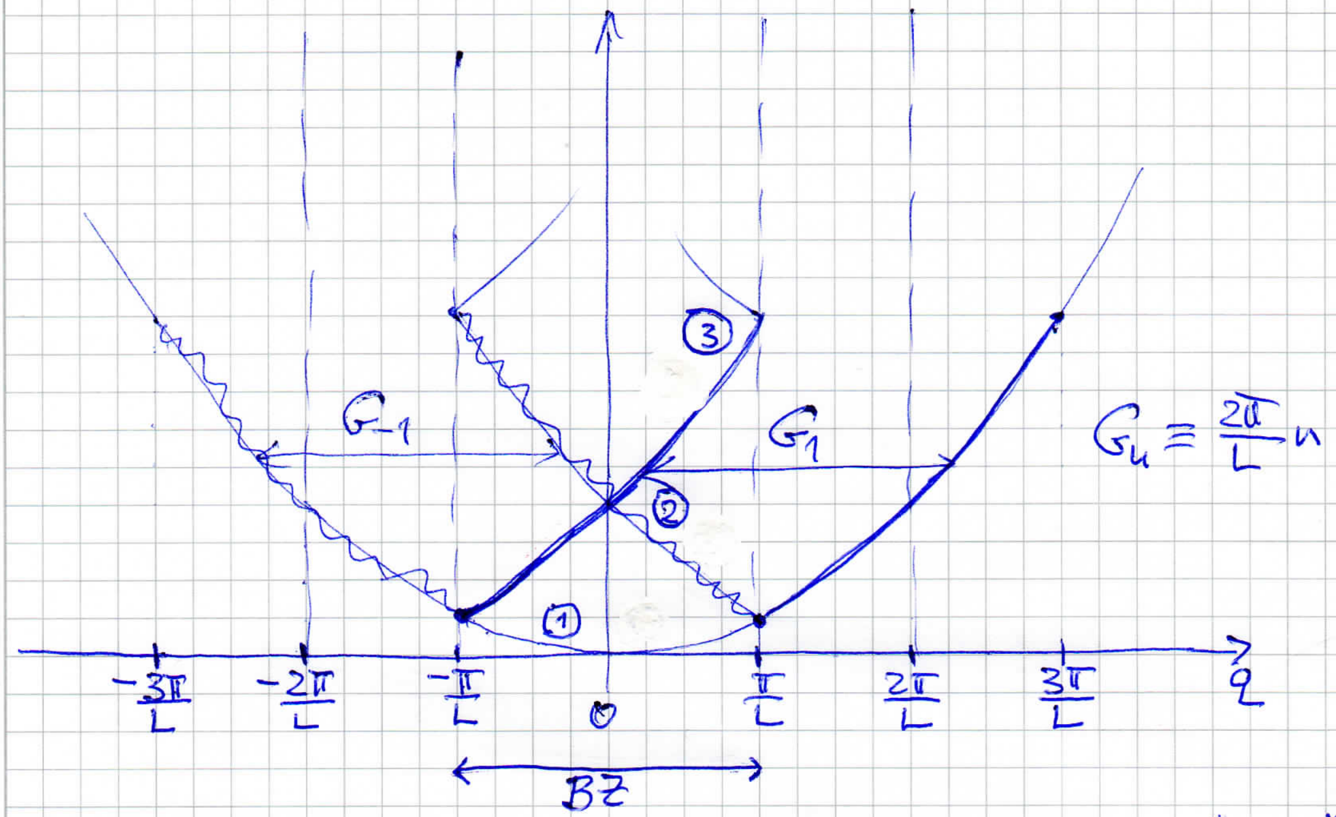
Analiza pustej sieci
potencjał stały (równy 0) ale uwzględniamy periodyczność sieci

$V_0 = 0$ – przypadek swobodnych elektronów

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}\varphi = E\varphi$$

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{iqz} \qquad \Omega = NL, \quad q \in]-\infty, \infty[$$

$$E \equiv \varepsilon_q = \varepsilon(q) = \frac{\hbar^2}{2m^*} q^2$$



			n
Pasmo (1)	$\varepsilon_1^0(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$	$k \in BZ$	0
Pasmo (2)	$\varepsilon_2^0(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k + G_{-1})^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k - \frac{2\pi}{L}\right)^2$		-1
Pasmo (3)	$\varepsilon_3^0(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k + G_1)^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k + \frac{2\pi}{L}\right)^2$		1

Funkcje własne

		n
Pasmo (1)	$\psi_1^0(k) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ikz}$	0
Pasmo (2)	$\psi_2^0(k) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(k+G_{-1})z}$	-1
Pasmo (3)	$\psi_3^0(k) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(k+G_1)z}$	1

~~Wektor~~ Mamy tyle ~~wektorów~~ pasm, co wektorów G_n

Zwróćmy uwagę, że

$$\psi^0_n(k) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ikz} \underbrace{e^{iG_n z}}_{\text{periodyczna funkcja } u_n(z)}$$

$$u_n(z+n'L) = e^{i\frac{2\pi}{L}n(n'L+z)} = e^{iG_n z} e^{i2\pi n n'} = e^{iG_n z} = u_n(z)$$

Co się dzieje, jeżeli włączymy teraz słaby potencjał periodyczny?

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\psi + V(z)\psi = E\psi$$

Dla słabego potencjału możemy zastosować rachunek zaburzeń!

- Najpierw dla stanów niezdegenerowanych

$$\varepsilon^0_G(k) \neq \varepsilon^0_{G'}(k)$$

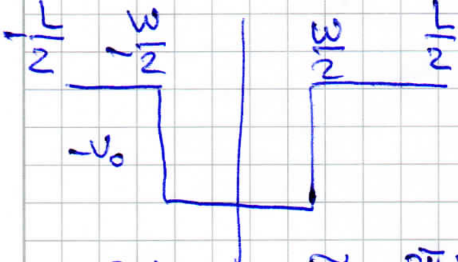
$$\varepsilon_n(k) = \varepsilon^0_n(k)$$

$$\varepsilon_G(k) = \varepsilon^0_G(k) + \langle \psi^0_{Gk} | V(z) | \psi^0_{Gk} \rangle + \sum_{G' \neq G} \frac{|\langle \psi^0_{Gk} | V(z) | \psi^0_{G'k} \rangle|^2}{\varepsilon^0_G(k) - \varepsilon^0_{G'}(k)}$$

$$\langle \psi^0_{Gk} | V(z) | \psi^0_{G'k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int dz\, e^{-i(k+G)z} V(z) e^{i(k+G')z} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{L/2} dz\, e^{i(G'-G)z} V(z) =$$

$$= \frac{1}{L} \int_{-L/2} dz\, e^{i(G'-G)z} V(z) \equiv \tilde{V}(G-G')$$



$$\tilde{V}(G) = -\frac{V_0}{L} \int_{-w/2}^{w/2} dz\, e^{-iGz} = -\frac{2V_0}{LG} \sin\frac{Gw}{2}$$

$$\tilde{V}(G) = \tilde{V}\left(\frac{2\pi n}{L}\right) = \tilde{V}_n = -V_0 \frac{\sin \pi \frac{w}{L} n}{\pi n}$$

$$\tilde{V}(G=0) = \tilde{V}_0 = -V_0 \frac{w}{L}$$

Szereg perturbacyjny jest zbieżny $\left| \frac{\sin \pi \frac{w}{L} n}{\pi n} \right| \xrightarrow[n \to \infty]{} 0$

Obserwujemy przesunięcie stanów niezdegenerowanych.

Przypadek stanów zdegenerowanych

$$\varepsilon^0_G(k) = \varepsilon^0_{G'}(k)$$

i) $k = \frac{\pi}{L}$ Band ① i Band ② $G=0$ & $G=G_{-1}$

ii) $k=0$ Band ② i Band ③; $G=G_{-1}$ & $G=G_1$

Stosujemy teorię zaburzeń pierwszego rzędu dla stanów zdegenerowanych

$$\psi_k = \alpha\psi^0_{Gk} + \beta\psi^0_{G'k}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\psi^0_{Gk} = \varepsilon^0_{Gk}\psi^0_{Gk}$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon^0_{Gk} + \langle\psi^0_{Gk}|V(z)|\psi^0_{Gk}\rangle, & \langle\psi^0_{Gk}|V(z)|\psi^0_{G'k}\rangle \\ \langle\psi^0_{G'k}|V(z)|\psi^0_{Gk}\rangle, & \varepsilon^0_{G'k} + \langle\psi^0_{G'k}|V(z)|\psi^0_{G'k}\rangle \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix} = \varepsilon\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}$$

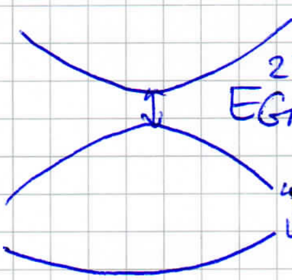
$$\begin{bmatrix} \varepsilon^0_{Gk} + \tilde{V}(0) - \varepsilon, & \tilde{V}(G'-G) \\ (\tilde{V}(G'-G))^*, & \varepsilon^0_{G'k} + \tilde{V}(0) - \varepsilon \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix} = 0$$

$$\varepsilon' = \varepsilon - \tilde{V}(0)$$

Równanie własne daje energię

$$\varepsilon'_\pm(k) = \frac{1}{2}(\varepsilon^0_{Gk} + \varepsilon^0_{G'k}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\underbrace{\varepsilon^0_{Gk} - \varepsilon^0_{G'k}}_{\approx 0} + 4|\tilde{V}(G-G')|^2}$$

$$\varepsilon_{GAP}(k) = \varepsilon'_+ - \varepsilon'_- = 2|\tilde{V}(G-G')|$$



$$E^{23}_{GAP} = \frac{V_0\left|\sin\frac{2\pi W}{L}\right|}{2\pi}$$

$$E^{12}_{GAP} = \frac{V_0}{\pi}\sin\pi\frac{W}{L}$$

$$E^{23}_{GAP} < E^{12}_{GAP}$$

Jak rozwiązać problem struktury elektronowej supersieci numerycznie?

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) \rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = \varepsilon\psi(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2}{dx^2} + 2ik\frac{d}{dx} - k^2\right) + V(x)\right] u_k(x) = \varepsilon u_k(x)$$

u_k funkcja periodyczna zadana na odcinku $[0, L]$

Proszę zwrócić uwagę na zmianę środka układu współrzędnych do tych rozważań

mieliśmy	$-\frac{L}{2}$	$\frac{L}{2}$
mamy	0	L
numery punktów	$0, \dots$	$N-1$

Stosujemy metodę różnic skończonych na N punktach

$u_k \equiv \phi \qquad x_j = j \cdot \Delta x \qquad \Delta x \equiv h$ (używane na poprzednim wykładzie)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{\phi(j+1) + \phi(j-1) - 2\phi(j)}{(\Delta x)^2} + ik\frac{\phi(j+1) - \phi(j-1)}{\Delta x} - k^2\phi(j)\right] +$$

$$+ V(j)\phi(j) = \varepsilon\phi(j)$$

$j = 0, 1, \dots, N-1$

Mamy N równań ale występują w wyrażeniu wartości funkcji ϕ dla dla punktu x_{-1} oraz x_N leżące poza odcinkiem $[0, L]$

Nakładamy więc na te punkty następujące warunki brzegowe (PERIODYCZNE)

$$\phi(x_{-1}) \equiv \phi(-1) = \phi(N-1)$$

$$\phi(x_N) \equiv \phi(N) = \phi(0)$$

Jednorodny układ równań można zapisać w formie macierzowej

$$\bar{H}\bar{\phi} = \varepsilon\bar{\phi}$$

gdzie $\bar{\Phi} = \begin{bmatrix} \phi(0) \\ \vdots \\ \phi(N-1) \end{bmatrix}$ jest wektorem

a macierz $\bar{\bar{H}}$ ma następujące niezerowe elementy macierzowe

$$H_{nl} = \begin{cases} \frac{+\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{2}{(\Delta x)^2}+k^2\right)+V(n) & \text{dla } n=l \\ \frac{-\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{1}{(\Delta x)^2}\pm\frac{ik}{\Delta x}\right) & \text{dla } n=l\pm 1 \\ \frac{-\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{1}{(\Delta x)^2}+\frac{ik}{\Delta x}\right) & \text{dla } n=0,\ l=N-1 \\ \frac{-\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{1}{(\Delta x)^2}-\frac{ik}{\Delta x}\right) & \text{dla } n=N-1,\ l=0 \end{cases}$$

Rozwiązanie zagadnienia własnego, (komputer) daje energię $E_n(k)$, czyli strukturę pasmową oraz funkcje własne.

→ ćwiczenia

KONIEC WYKŁADU 4