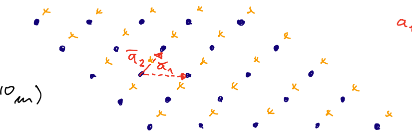
TEORIE PEVNÝCH LÁTEK – GRILL

 # LITERATURA: ANTEČN (ÚVOD DO FYZIKY POLOVODIČŮ – KAPK.–5.)
+ KVAZIČÁSTICE, KVANT. TEČKY/DRÁTKY/...

MODELOVÝ KRYSTAL

– VZDÁLENOSTI MEZI ATOMY – Å (10^{-10} m)



a_1, a_2 ... TRANSLAČNÍ VEKTORY

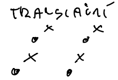
MŘÍŽKOVÉ VEKTORY ... $\bar{a}$

– POSUNUTÍM O TRANSL. VEKTOR (a_1, a_2) → DOSTANU STEJNÝ KRYSTAL (VYPLŇUJE CELÝ PROSTOR)

– SNAŽÍM SE DODRŽOVAT PRAVOTOČIVOST (a_3 MÍŘÍ KOLMO Z NÁKRESNY)

– REÁLNÁ SITUACE → MŮŽE BÝT I TRANSLAČNÍ SYMETRIE S BÁZÍ (TU TVOŘÍ TŘEBA DVA ATOMY – Si)

Si
GaAs

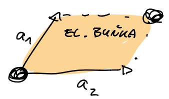


– BÁZE MŮŽE OBSAHOVAT I VÍCE ATOMŮ

– DÍKY PERIODICITĚ: SNAŽÍME SE POPSAT VLASTNOSTI V JEDNOM SEGMENTU (ELEM. BUŇCE)

$$\boxed{\bar{a}_n = \sum_{i=1}^{3} n_i \bar{a}_i}$$

VYJÁDŘENÍ LIBOVOL. TRANSL. VEKTORU



⊕ POTOM MŮŽU PERIODICKY ROZTÁHNOUT A POPSAT CELÝ SYSTÉM

BLOCHŮV TEORÉM

– STACIONÁRNÍ PROCESY V TERMODYN. ROVNOVÁZE

SCH.RCE $\hat{H}\psi_1 = \mathcal{E}_1\psi_1$ (STACIONÁRNÍ)

KIN A POT. SLOŽKA

– ZAVEDENÍ JEDNOELEKTRONOVÉ APROXIMACE
– PRAVIDELNÉ USPOŘÁDÁNÍ NÁBOJOVÝCH HUSTOT → CELÝ KRYSTAL JE POPSÁN PERIOD. POTENCIÁLEM $V(\bar{r})$

– MUSÍ Z LOGIKY PLATIT

$$V(\bar{r}) = V(\bar{r} + \bar{a}_n)$$

$\bar{a}_n$ ... LIBOVOLNÝ TRANSF. VEKTOR
TRANSF. KRYSTAL SÁM NA SEBE

– POTOM CO NAJDU FCI PRO 1e^- → POTOM DALŠÍ A ZREKONSTRUUJ ENERGETICKÉ SPEKTRUM
↓
VEDE NA PÁSOVOU STRUKTURU

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta$$

m_0 ... KLIDOVÁ HM. e^- VE VAKUU

$$\Delta = \nabla\cdot\nabla \qquad \Delta = \sum \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{z^2}$$

$$\psi|r\rangle = \underbrace{e^{i\varphi_n}}_{\text{FÁZOVÝ FAKTOR}} \psi|\bar{r} + \bar{a}_n\rangle$$

– SAMOTNÁ FCE SE POSUNEM NEREPRODUKUJE
– SPLŇUJE POTOM POŽADAVKY NA PERIODICITU

→ JE LIN. FCÍ VEKTORU TRANSLACE

BLOCHŮV TEORÉM

– TVRZENÍ O TOM V JAKÉM TVARU MŮŽEME HLEDAT VLN. FCI

$$\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, u_{\bar{k}}(\bar{r})$$

$\bar{k}$ ... VLNOVÝ VEKTOR
– KVANTOVÉ ČÍSLO
– ODLIŠUJE PRO NÁS JEDN. ŘEŠENÍ

$$\boxed{\hat{H}\psi_{\bar{k}} = \mathcal{E}(\bar{k})\,\psi_{\bar{k}}}$$

u ... PERIODICKÁ JAKO POTENCIÁL

$$u_{\bar{k}}(\bar{r}) = u_{\bar{k}}(\bar{r} + \bar{a}_n)$$

$e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$ ... FÁZOVÝ FAKTOR
– NEPERIODICKÝ

(CHCEME POSUNOUT NA TU NEPOSUNUTOU

$$\psi_k(\bar{r} + a_n) = e^{ik(r + a_n)}\, u_k(\bar{r} + a_n)$$

$$= \underbrace{e^{ik\cdot a_n}}_{\text{FÁZ. FAKTOR}} \underbrace{e^{ikr}\, u_k(\bar{r})}_{\text{NAŠE NEPOSUNUTÁ FCE } \psi(\bar{r})}$$

IF $\bar{k}\bar{a}_n = -\varphi_n$ → ZŘEJMĚ FÁZ. FAKTOR (VL. FCE) ALE ZŮST. VE STEJ. TVARU

– KONSTR. VLN. FCE NENÍ JEDNOZNAČNÁ
– CÍLEM JE TEDY NAJÍT u A VLASTNÍ ENERGIE $\mathcal{E}$

– MUSÍME POPSAT STRUKTURU: Z PŘÍMÉHO DO RECIPROKÉHO PROSTORU

POTENCIÁL: POMOCÍ FOURIEROVY ŘADY

$$V(\bar r) = \sum_{\bar b} V_b \, e^{2\pi i \bar b \cdot \bar r}$$

AMPLITUDY

– PRACUJEME S ROVINNÝMI VLNAMI

RECIPROKÁ MŘÍŽ $\quad b_i = \frac{1}{\Omega_0}(\bar a_j \times \bar a_l)$

i, j, l ... PERMUTACE

i	1	2	3
j	2	3	1
l	3	1	2

3 BÁZOVÉ VEKTORY $\quad \bar b_{\bar n} = n_i \bar b_i$

$\Omega = a_1 \cdot (\bar a_2 \times \bar a_3)$ $\quad$ Ω = OBJEM ZÁKLADNÍ BUŇKY

EINST. SUM. KONV.
– POKUD V SOUČ. STEJNÝ INDEX TAK SE SČÍTÁ OD 1 DO 3

– BUDU POUŽ. PRAVOTOČIVOU (LEVICIT $\varepsilon_{ijk} = 1$)

$\boxed{V_{-b} = V_b^*}$ $\quad$ PROTO I PLATÍ

$$u = u_1 e_1 + u_2 e_2 + u_3 e_3 = \sum_1^3 u_i e_i = u_i e_i$$

$$\bar u \cdot \bar v = \sum_{i=1}^3 u_i e_i \cdot \sum_1^3 v_j e_j = u_i \bar e_i \cdot v_j \bar e_j$$

$$\bar u \cdot \bar v = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 u_i v_j (\bar e_i \cdot \bar e_j) = u_i v_j (\bar e_i \cdot \bar e_j)$$

$$e_i \cdot e_j = \delta_{ij}$$

δ_{ij} = KRONECKEROVO DELTA

$\delta_{ij} = 1 \wedge i = j$

$\delta_{ij} = 0 \wedge j \neq i$

$$\bar u \times \bar v = \sum_{j=1}^3 u_j \bar e_j \times \sum_{k=1}^3 v_k \bar e_k = u_j \bar e_j \times v_k \bar e_k$$

$$= u_j v_k (\bar e_j \times \bar e_k)$$

$$= \varepsilon_{ijk} e_i u_j v_k$$

LEVICIVITŮV SYMBOL

PROTOŽE V 3D $\quad j \times k = i$

$$\varepsilon_{ijk} \begin{cases} +1 & i,j,k \quad 1,2,3 \,;\, 2,3,1 \,;\, 3,1,2 \\ -1 & 3,2,1 \,;\, 2,1,3 \,;\, 1,3,2 \\ 0 & i=j \,;\, j=k \,;\, k=i \end{cases}$$

VEKTOROVÝ SOUČIN

$a(\bar u + \bar v) = a\bar u + \bar v = u + a\bar v$

DISTRIBUTIVNÍ $\quad \bar u \times (\bar v + \bar w) = \bar u \times \bar v + \bar u \times \bar w$

ANTIKOM. $\quad \bar u \times \bar w = -\bar w \times \bar u$

$\bar u \times \bar v = 0 \rightarrow$ POKUD $\bar u \parallel \bar v$

V 3D PRAV. BÁZI $\quad i \times j = k$, $\quad j \times k = i$, $\quad k \times i = j$

2. PŘEDNÁŠKA

$\psi_k(\bar r) = e^{i\bar k\cdot\bar r} u_k(\bar r)$ $\qquad$ $u_k(r+\bar a_n) = u_k(\bar r)$

RECIPROKÉ VEKTORY

$\bar b_{\bar n} = n_i \bar b_i$

$\bar b_i$ ... ZÁKLADNÍ TRANS. VEKTORY RECIP. MŘÍŽE

n_i ... CELOČÍS. VEKTOR

VZTAH $\bar b_i$ a $\bar a_{\bar n}$

$\bar a_{\bar m} = m_i \bar a_i$

⇒ SKAL. SOUČIN $\quad \bar a_j \cdot \bar b_i = \bar a_j \cdot \frac{1}{\Omega_0}(\bar a_\ell \times \bar a_k)$ $\quad$ i,ℓ,k ... CYKL. PERM.

POZOROVÁNÍ: $i \neq j$ ⇒ POTOM j JE SHODNÉ S ℓ or k

⇒ SMÍŠ. $= 0$

$$\boxed{\bar a_j \cdot b_i = \bar a_j \cdot \frac{1}{\Omega_0}(\bar a_\ell \times \bar a_k) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \quad \text{(POTOM CYKL. PERM.)} \end{cases} = \delta_{ij} \quad \text{KRON. DELTA}}$$

$\psi_k(\bar r) = e^{i\bar k\cdot\bar r} u_k(\bar r)$

POZOROVÁNÍ: K LIBOVOLNÉ $\bar k$ ROZŠÍŘÍM O LIB. VEKTOR REC. MŘÍŽE

$$\psi_{\underbrace{k+2\pi\bar b_n}_{k'}} = e^{i(k+2\pi\bar b_n)\cdot\bar r}\, u_{k+2\pi\bar b_n}(\bar r)$$

$$= e^{i\bar k\cdot\bar r}\, \underbrace{e^{i2\pi\bar b_n\cdot\bar r}\, u_{k+2\pi\bar b_n}(\bar r)}_{\tilde u_k(r)}$$

OBĚ JSOU STEJNĚ PERIODICKÉ

$= \tilde\psi_k(r)$

⇒ PŘIČTENÍM DOSTANU TO, ŽE NOVÁ FCE $\tilde u$

$V(r) = \sum V_b\, e^{i2\pi\bar b_n}$ (VIZ VÝŠE)

– TA PERIODICKÁ S PERIODOU KRYSTALU

$V(r) = V(\bar r + \bar a_n)$

KAŽDÁ TATO EXP. JE PERIOD.

KTERÁ DÁ STEJNÉ ŘEŠENÍ PRO k a k'

⇒ JE ZBYTEČNÉ VOLIT k V CELÉM PROSTORU

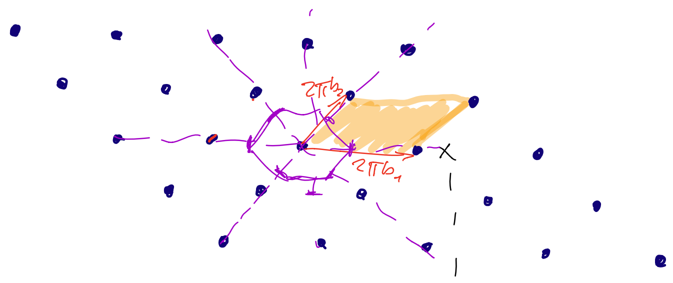
PROTOŽE PŘI CELOČÍS. POSUNUTÍ DOSTANU STRUKTURNĚ STEJNOU ROVNICI SE STEJNÝM VLASTNÍM ČÍSLEM TEDY STEJNOU E

!

⇒ STAČÍ TEDY ZVOLIT POUZE MALOU REPREZENTATIVNÍ OBLAST → REDUKOVANOU OBLAST

– ŘEŠENÍ V TÉTO OBLASTI LZE PERIODICKY ROZTÁHNOUT NA CELÝ PROSTOR (Z HLEDISKA ENERGIE)

RECIPROKÁ MŘÍŽ:



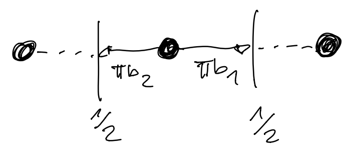
MŮŽU TAK POUŽÍT TUTO BUŇKU

ALE PROBLÉM SE SYMETRIÍ

POUŽIJI JEDNOM $\frac{1}{2}$ VZDÁL. $2\pi b_i$

⇒ 1. BRIL. ZÓNA

PŘI PŘEKROČENÍ $2\pi b_i$ MŮŽU JAKÝKOLIV VEKTOR VEPSAT JAKO $\bar u - 2\pi b_i$ A VRÁTIT TAK ŘEŠENÍ NAZPĚT



⊕ **VÝHODA:**
- JE SYMETRICKÁ V OKOLÍ STŘEDU

$-\pi < \bar{a}_i \cdot k \leq \pi$ $i \in (1,2,3)$

$$\bar{a}_j \cdot \bar{b}_i = \bar{a}_j \cdot \frac{1}{\Omega}(\bar{a}_\ell \times \bar{a}_k) \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$$

POZOROVÁNÍ

$$\pi \cdot b_1 = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

PROTO DEFINUJEME PŘEDPISEM

$< a \leq$ → CHCI MÍT HRANICI ZAHRNUTOU POUZE 1; KDYBY $\leq \leq$ → BYLA BY 2x

$< <$ → NEBYLA BY ZAHRNUTA

NORMOVÁNÍ:

$$\psi_k = \frac{1}{V} e^{i k \cdot r}$$ (ZÁKLADNÍ KURZ)

└ NORMOVACÍ OBJEM V

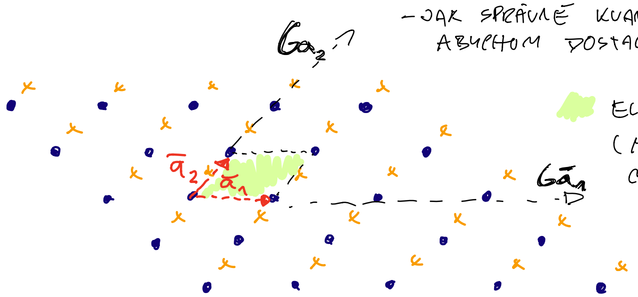
POZOR: PROBLÉM S ORTOGONALITOU

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \delta_{k,k'}$$

- MUSÍME DOCÍLIT TOHO, ABY FCE BYLY ORTONORMÁLNÍ

→ ZAVÁDÍME **BORN-KARMÁNOVY OKRAJOVÉ PODMÍNKY**

- JAK SPRÁVNĚ KVANTOVAT VLN. VEKTOR k ABYCHOM DOSTALI RŮZNÉ ORTOGON. STAVY



ELEMENTÁRNÍ OBLAST (MULTIPLIKACÍ ZREKONST. CELÝ KRYSTAL)

POSTUP: 1) KAŽDÝ VEKTOR a_i VYNÁSOBÍME VELKÝM ČÍSLEM - G (MŮŽE BÝT RŮZNÉ I STEJNÉ PRO OBA VEKTORY)

$Ga_1; Ga_2$ → MAKROSKOPICKÁ OBLAST

2) DODÁME PODMÍNKU:
K JIŽ NE LIBOVOLNÉ, ALE TAKOVÉ, ABY ROVINNÁ VLNA BYLA PERIODICKÁ NA MAKROSKOP. OBLASTI Ga_i

PODM:
- KRYSTAL HODNĚ VELKÝ

TEDY: $e^{ik \cdot r} = e^{ik(r + G\bar{a}_n)}$

$1 = e^{ik \cdot \bar{a}_n G}$

$1 = e^{ik \bar{a}_i G}$

$\bar{a}_n$ ... TRANSL. VEKTORY
$\bar{a}_i$ BÁZOVÉ VEKTOR V PŘÍMÉM PROST.

- POUZE k NEZNÁMÉ OSTATNÍ FIXNÍ

ABY EXPONENCIELA BYLA 1 MUSÍ TO BÝT 2π NÁS. CELÉHO ČÍSLA

$$\Rightarrow \boxed{\bar{k} \cdot \bar{a}_i = \frac{2\pi g_i}{G}}$$

- SKAL. SOUČIN VLN. VEKTORU A LIBOVOL. BÁZ. VEKTOREM MUSÍ BÝT ROVEN 2π KRÁT CELÉ ČÍSLO

⇓

KVANTOVACÍ PODMÍNKA (Z B-K. PODM.)

- TY 2π ZÁR. I NA POLOŽ. FOUR. ŘADY.

MY ZADEFINOVALI POTENCIÁL JAKO

$$V(r) = \int_b V_b e^{2\pi i \bar{b} \cdot r}$$

3) **HODNOTY** g_i

Z DEFINICE REDUKOVANÉ OBLASTI

$$-\pi < \bar{k} \bar{a}_i \leq \pi$$

$\Rightarrow \bar{k} \cdot \bar{a}_i \in (-\pi, \pi\rangle$ A TEDY $\frac{2\pi g_i}{G} \in (-\pi, \pi\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{-\frac{G}{2} < g_i \leq \frac{G}{2} \qquad g_i \in \left(-\frac{G}{2}; \frac{G}{2}\right\rangle}$$

OTÁZKA:
4) KOLIK MÁME RŮZNÝCH HODNOT k?

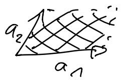
⇒ TOLIK KOLIK g_i ⇒ A TĚCH JE G

- VE VŠECH SMĚRECH TAK MÁME G STAVŮ

$\Rightarrow$ ŘEŠENÍM SR TAK DOSTANEME G^3 ORTONORM. STAVŮ VE KTERÝCH SE MŮŽE NACHÁZET e^-

OTÁZKA:
KOLIK G V MAKROSKOP. OBLASTI?

$\Rightarrow$ NA KAŽDOU OBLAST EL. BUŇKY PŘIPADÁ JEDEN STAV



$\Rightarrow$ V KAŽDÉ OBLASTI TAK MŮŽE BÝT $1\,e^-$ (NEUV. SPIN)

OTÁZKA:
JAK TEDY UMÍSTÍME DO ČÁSTKY POŽ. POČET e^-?
KDYŽ NA 1 ATOM PŘIPADNE 1 e^- (1 ORTONORM. STAV)
(SE SPINEM 2)

ALE ZATÍM JSME POUŽÍVALI POUZE $\underline{1}$ KVANT. ČÍSLO **k**

– NAJDEME PŘÍSLUŠNÉ $u_k(\bar{r})$ PRO KAŽDÉ k

PŘECHOD OD VOLNÉ ČÁSTICE V PER. POT. (S LIBOV. K) K REDUKOVANÉ OBLASTI (OMEZ. POČET K) $\rightarrow$ ALE VZNIKNE VÍCE PÁSŮ A V KAŽDÉM BUDE PŘÍSL. ~~POČET~~ G^3 ELEKTRONŮ

SCHR. RCE

$(T+V)\,\psi_{\bar{k}} = \mathcal{E}(k)\,\psi_k$ $\quad$ ↯ DOSADÍME

PROST. FCE (VYNÁSOBÍ $\psi_{\bar{k}}$)

LAPLACE $\rightarrow$ 2 DER.

(DER. EXP. VYHODÍ ik $\rightarrow$ ROVNOU VYNÁSOBÍME EXP. ČÁST)

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ $\qquad (T+V)\,\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \mathcal{E}(k)\,\psi_k \qquad \psi_{\bar{k}} = e^{i\bar{k}\bar{r}}\,u_k(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_{\bar{k}}(r) + V(\bar{r})\,u_{\bar{k}}(\bar{r}) - \frac{\hbar^2}{m}\,i\left(k\cdot\nabla u_k(\bar{r})\right) + \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\,u_{\bar{k}}(\bar{r}) = \mathcal{E}(k)\,u_k(\bar{r})}_{\text{ŘEŠENÍ PRO VOLNOU ČÁSTICI VE VAKUU}}$$

SCHR. ROVNICE PRO HLEDÁNÍ $u_{\bar{k}}(r)$

PROBLÉM JE V PŘÍTOMNOSTI $V(\bar{r})$ POTENCIÁLU

OTÁZKA: HLEDÁME PRVKY SYMETRIE

1) FUNKCE $u_{\bar{k}}(\bar{r})$; ZKUSIT NAPSAT KOMPL. SDRUŽENOU

$u_{\bar{k}} \rightarrow u^*_{\bar{k}}$

k^2 – ZMĚNA NEUDĚLÁ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u^*_{\bar{k}}(r) + V(\bar{r})\,u^*_{\bar{k}}(\bar{r}) + \frac{\hbar^2}{m}\,i\left(k\cdot\nabla u^*_k(\bar{r})\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\,u^*_{\bar{k}}(\bar{r}) = \mathcal{E}(k)\,u^*_k(\bar{r})$$

$\ominus$ $\quad$ POZOR, i PŘED ( ) $\rightarrow$ – NA +

+ $k \rightarrow -k$ (NEMÁ VLIV)

+ OPĚT NA $\ominus$

$\Rightarrow$ ZMĚNILY SE INDEXY POUZE U VELIČIN CO POČÍTÁM

TEDY
$\Rightarrow$ KDYŽ NALEZNU ŘEŠENÍ (BEZ ZMĚN V BODĚ 1), TAK AUTOMATICKY MÁM I ŘEŠ. PRO $-\mathbf{k}$ **k**

ZÁVĚRY

1) FCE $u_{\bar{k}}(\bar{r}) = u^*_{-\mathbf{k}}(\bar{r})$

2) $\mathcal{E}(k) = \mathcal{E}(-k)$

ad 2) $\Rightarrow$ (VLASTNÍ ENERGIE V K PROSTORU JSOU SUDÉ)

ad 1) $\Rightarrow$ FUNKCE u JE SUDÁ V Re ČÁSTI A LICHÁ V Im ČÁSTI

$\rightarrow$ ZJEDNODUŠUJE VÝP. PÁS. STRUKTUR

POSTŘEH: PROPOJÍME ε S REDUKOVANOU OBLASTÍ

IF k V RED. OBLASTI => ε JE PERIODICKÁ SE STEJNOU PERIODOU JAKO k

TEDY => $\varepsilon(\bar k) = \varepsilon(\bar k + 2\pi \bar b_n)$

=> ε JE SUDÁ V RED. OBLASTI, MIMO NÍ PLATÍ

DOPLNĚNÍ:

- DÍKY B-K. PODMÍNKÁM -> k UŽ NENÍ LIBOVOL. SPOJITÉ, ALE DISKRÉTNÍ

$$k\cdot \bar a_i = \frac{2\pi g}{G}$$ — ALE MNOHO HODNOT

=> TVOŘÍ **KVAZI SPOJITÉ** KONTINUUM

POZN:

HILBERTŮV PROSTOR

- VEKTOROVÝ PROSTOR, VE KTERÉM JE MOŽNÉ MĚŘIT ÚHLY A VELIKOSTI VEKTORŮ A KONSTRUOVAT ORTOGON. PROJEKCE VEKTORŮ NA PODPROSTORY

UNITÁRNÍ BANACHŮV PROSTOR, TEDY ÚPLNÝ VEKTOROVÝ SE SKALÁR. SOUČINEM

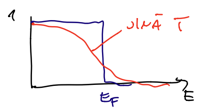
$\forall$ CAUCHY. POSL. MAJÍ LIMITU V PROSTORU

JE NA NĚM SKAL. SOUČIN -> JE TEDY NORMA I METRIKA

$\langle \cdot , \cdot \rangle$

FERMIHO ENERGIE:

- PRAVDĚP. OBSAZENÍ HLADINY DLE E $\quad P = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}}+1}$ $\quad k_B = 10^{-23}\ J/K$
- E_F (0K): NEJVYŠŠÍ OBS. HLADINA PŘI T=0K
  - $\forall$ HLADINY POD NÍ U URČITOSTÍ ZAPLNĚNY
- VÝZNAM CHEMICKÉHO POTENCIÁLU



3. PŘEDNÁŠKA

MINULE 1) ŘEŠÍME SCH. R S PERIOD. POTENC. $\quad H\psi_{\bar k}(\bar r) = \varepsilon(\bar k)\psi_{\bar k}(\bar r)$

2) VLNOVOU FCI HLEDÁME V BLOCH.-TVARU

$$\psi_{\bar k}(\bar r) = e^{i\bar k\cdot\bar r}\, u_k(\bar r)$$

3) HLEDÁME ŘEŠENÍ V „REDUKOVANÉ OBLASTI"
   - KONEČNÁ OBL., OBL. MIMO NI JE POUZE PERIODICKÉ ROZŠÍŘENÍ

POZOR:

ε JE PERIOD. FCE V $\bar k$ PROST

u NENÍ PER. FCE V $\bar k$ PROST

↳ $u_{\bar k}(\bar r)$ MIMO RYCHLE OSCILUJE; u_k TÍM KOMP. TU EXPONENCIELU

4) $\bar k$ JSOU KVAZISPOJITÁ A JE JICH KONEČNÝ POČET
   - NA KAŽDOU ELEMENT. OBLAST VYCHÁZÍ 1 STAV (JEDNO k)
   - SE SPINEM 2

PÁSOVÁ TEORIE

$$\psi_{nk}(\bar r) = e^{i\bar k\cdot\bar r}\, u_{n,k}(\bar r)$$

— V NEKON. DIM HILB. PROSTORU -> ∞ MNOHO ŘEŠ. u PRO KAŽDÉ k

1) k ZAFIXOVÁNO (VIZ VÝŠE) -> PŘIDÁM INDEXOVÁNÍ n -> RŮZNÉ PERIOD. FCE u
   - PRO KAŽDÉ n MÁ u MÁ STEJNÉ VLASTNOSTI (VIZ DEFIN. VÝŠE) (ZEJM. ORTOGONALITY)

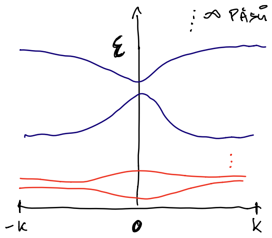
(TADY SPIN. VLIV BY MĚL NAPŘ. V MAG. POLI -ROZŠTĚP.)

$$\hat H \psi_{n,k,\sigma}(\bar r) = \varepsilon_{n,\sigma}(\bar k)\,\psi_{n,k,\sigma}(\bar r)$$

2) PŘIDÁME σ ZA SPIN; SPIN ORBIT. INTERAKCE — VLIV NA PÁS. STRUKTURU (DOPLN. JEVY)

n JE DISKRÉTNÍ, k KVAZISPOJITÉ

VLASTNÍ HODNOTY SHR ROVNICE (PÁSOVÁ STRUKTURA)



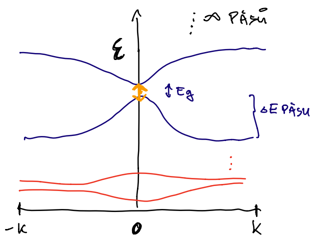
- FCE JSOU SUDÉ - SYMETR.

POZOROVÁNÍ: 1) PÁSY NA NEJNIŽŠÍ E -> TÉMĚŘ PLOCHÉ => ε JE SLABOU FCÍ k

DŮVOD: TYTO STAVY BLÍZKO ATOM. JÁDRA
- OST. ATOMY MAJÍ VLIV
- TÉMĚŘ STEJNÉ JAKO V IZOL. ATOMECH

2) ČÍM VÝŠE TÍM SE PÁSY VÍCE ROZŠIŘUJÍ
- ŠÍŘKA PÁSŮ V ŘÁDECH eV

3) e^- NA VYSOKÉM STAVU — OPUSTÍ ATOM or INTERAGUJE S MŘÍŽKOU A PŘECHÁZÍ NÍŽE



PŘIPOMÍNKA:
- PRO KAŽDÝ PÁS MÁM $2G^3$ STAVŮ (2 ↓ SPIN)
- UMISŤUJI e^-: VÝSTAVBA OD NEJNIŽŠÍHO PÁSU DO VYČERPÁNÍ POČTU e^- (KLASICKÁ VÝSTAVBA)
  - AŽ DO FERMIHO ENERGIE

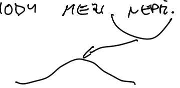
POLOVODIČ:
- POKUD KRYSTAL PLNÉ ZAPLN./PRÁZDNÉ PÁSY → NEVEDE

KOV:
- ČÁST. ZAPLNĚNÝ PÁS: VEDE PROUD

→ BUDEME STUDOVAT VLASTNOSTI e^- V TĚCHTO PÁSECH:

ZAKÁZANÝ PÁS – E_g
– ΔE ... MOŽNÉ STAVY K OBSAZENÍ e^-

– TYPY: – MAX/MIN VALENČ. A VODIV. PÁSU LEŽÍ/NEJSOU PŘI STEJNÉM k
↓
NEPŘÍMÝ POLOVODIČ: Si, Ge
– PROBLÉM S ABS. A ZEJMÉNA EMISÍ
– PŘECHODY MEZI NEPŘ. SE KOMP. FONONEM → ZE ZÁK. ZACH. HYBNOSTI



VALENČNÍ PÁS: – NEJVÍŠE ZAPLNĚNÝ PÁS
VODIVOSTNÍ PÁS: BEZ ELEKTRONŮ

POPIS PÁSŮ
→ DÍKY ROZDÍLNÉ KŘIVOSTI OBTÍŽNÉ
– PŘI STUDIU A EXPERIMENTECH SE POHYBUJEME OKOLO „STŘEDU"

HgCdTe – DIAM./SFALER. STRUKTURA

$Hg_{1-x}Cd_xTe$ $\quad E_g \in (0, 1.5)$ eV $\quad$ $x=1$: 1.51 eV; $x=0.17$: 0 eV; $x<0.17$: INVERZNÍ PÁS. STRUKTURA
↓ +Zn
– ZVYŠUJE E_g (AŽ 2.8 eV)

DIAMANT – ID. IZOLANT (DO KONCE 20. STOL.)
– DNES DIAM. ELEKTRONIKA

TERMÁLNÍ EMISE: – PŘI MALÉM E_g → TEPLO EXCITUJE Z VAL. → VODIV.
– $kT = 25$ meV → ENERGIE PŘI POK. TEPL.

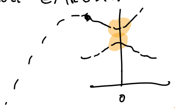
↓

SNAŽÍME SE ZJEDNODUŠIT → **KVAZIELASTICKÁ APROXIMACE**

EFEKTIVNÍ HMOTNOST

PŘÍKLAD: (PŘED)
– SYSTÉM TÉMĚŘ VOL. e^- (BUDE NA PŘ.)
– CRON.-PENNEHO!? MODEL 1D PENNŮ (CVIČ.)

– BLOCHOVA FCE POPISUJE $\forall$ e^-, I Ty NA NIŽŠÍCH ORBITALECH
– ZAJÍMÁ NÁS CHOVÁNÍ V OKOLÍ EXTRÉMŮ



– UVAŽUJME VODIVOSTNÍ PÁS
↓
POKUSÍME SE APROXIMOVAT
→ TAYLORŮV ROZVOJ

$$\mathcal{E}(\bar{k}) = \mathcal{E}(\bar{k}_0) + \underbrace{0}_{\text{1. DER}} + \frac{1}{2}\boxed{\frac{1}{\hbar^2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{3}\frac{\partial^2 \mathcal{E}(\bar{k})}{\partial\alpha\,\partial\beta}\bigg|_{k=k_0}}\hbar^2(\bar{k}-\bar{k}_0)_\alpha(\bar{k}-\bar{k}_0)_\beta + O^3$$

– V EXTRÉMU = 0

① HLEDÁM V EXTRÉMU – $\bar{k}_0$

② PŘIDÁM $\hbar^2$
$[\hbar] = $ Js $\quad [\hbar k] = $ kgm/s → STEJNÝ ROZM. JAKO HYBNOST!

– KINET. E ČÁSTICE: $E_k = \frac{p^2}{2m}$ $\quad$ $p = mv$
$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\frac{p^2}{m^2} = \frac{p^2}{2m}$ ⇒ BUDU SE SNAŽIT PŘIPODOBNIT $\bar{k}$ K m

③ TO MUSÍ MÍT ROZMĚR kg^{-1}

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\mathcal{E}(\bar{k})}{\partial\alpha\,\partial\beta}\bigg|_{k=k_0}$$

JE MATEMATICKY TENZOR (2. ŘÁDU)

$$\boxed{\Rightarrow \text{TENZOR EFEKTIVNÍ RECIPROKÉ HMOTY } (m^{-1})_{\alpha,\beta}}$$

ENERGII TOHO PÁSU POTOM MŮŽEME APROXIMOVAT

$$\boxed{\mathcal{E}(\bar{k}) \doteq \mathcal{E}(\bar{k}_0) + \frac{1}{2}p^\alpha (m^{-1})_{\alpha,\beta}\, p^\beta}$$

$p_\alpha = \hbar(\bar{k}-\bar{k}_0)_\alpha$
↓
KVAZIHYBNOST

#TAYLORŮV ROZVOJ

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \dots + \frac{f^n(a)}{n!}(x-a)^n = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k$$

POKUD MÁ $f(x)$ V OKOLÍ a KONEČ. DERIV. DO $(n+1)$ ŘÁDU

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \dots + \frac{f^n(a)}{n!}(n-a)^n + R_{n+1}^{f,a}(x)$$

#OBECNĚ $R_{n+1}^{f,a}(x) = \frac{1}{n!} \frac{\varphi(x)-\varphi(a)}{\varphi'(c)} f^{(n+1)}(c)(x-c)^n$

LAGR. TVAR ZBYTKU $R_{n+1}^{f,a}(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1}$

CAUCHYHO $R(x) = \frac{1}{n!} f^{(n+1)}(c)(x-c)^n (x-a)$

Př. $g(x) = \frac{e^x}{\cos x}$ v 0

1. $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + O(x^4)$; $\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + O(x^4)$

TENZORY – TENS. NULTÉHO, PRVNÍHO ŘÁDU

- SKALÁRY, VEKTORY
- ALE JSOU I TENSORY VYŠŠÍCH ŘÁDŮ
- NEJČ. 2. ŘÁDU
- OBECNÝ TENSOR 2. ŘÁDU MÁ 3 VEKTOR. SLOŽKY $\bar{T}_1, \bar{T}_2, \bar{T}_3$

$$T_i = \begin{pmatrix} T_{1i} \\ T_{2i} \\ T_{3i} \end{pmatrix} \quad \text{A NÁSL} \quad T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix}$$

$\otimes$... TENZOROVÝ (DIADICKÝ) SOUČIN → SOUČIN 2 VEKT. STEJNÉ DIMENZE (1. SLOUP. 2. ŘÁDKOVÝ)

4. PŘEDNÁŠKA

OPAKOVÁNÍ: 1. $\varepsilon_n(\bar{k}) = \varepsilon_n(\bar{k}_0) + p_\alpha \frac{(m_n^{-1})_{\alpha\beta}}{2} p_\beta$ (V OKOLÍ EXTRÉMU) $p_\alpha = \hbar(\bar{k}-\bar{k}_0)_\alpha$ → KVAZIHYBNOST

- POPIS PÁSOVÉ STRUKTURY V OKOLÍ EXTRÉMU PÁSU (EINS. SUM. KONV.)
- VE VĚTŠINĚ SITUACÍ BUDE NAVÍC $k_0 = 0$ (MIMO Ge, Si → VODIV. PÁS MÁ EXTR. MIMO + MAJÍ VÍCE MINIM

$(m_n^{-1})_{\alpha,\beta}$ ... SYMETRICKÝ TENZOR 2. ŘÁDU

MŮŽU ROTACÍ PŘEVÉST DO DIAG. TVARU

$$\varepsilon_n(\bar{k}) = \varepsilon_n(\bar{k}_0) + \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{3} (m_n^{-1})_{\alpha\alpha} p_\alpha^2$$

TADY JIŽ NENÍ PROBL. SUMACÍ (VE PO DIAG. MATICE)

$$= \varepsilon_n(\bar{k}_0) + \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{1}{(m_n)_\alpha} p_\alpha^2$$

POKUD m_n STEJNÁ VE $\forall$ SMĚRECH $\wedge$ $k_0 = 0$

$$\boxed{\varepsilon_n(k) = \varepsilon_n(0) + \frac{1}{2}\frac{p^2}{m_n}}$$

PŘES SUMACI

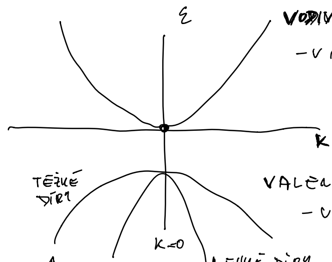
$E_k = \frac{p^2}{2m}$ – Z ČÁSTIC. FYZIKY

m_n ... JE RŮZNÁ V RŮZNÝCH SMĚRECH

m_n ... EFEKTIVNÍ HMOTNOST (NEBO JEN m)

m_0 ... KLID. HMOTN. e^-

- V TEORII POLOVODIČŮ → NEJDŮL. PARAMETR JE ŠÍŘKA ZAK. PÁSU E_g



VODIVOSTNÍ PÁS
- V MODELECH NEJČASTĚJI PARABOLICKÝ

VALENČNÍ
- V EXTRÉMU DOCHÁZÍ ČASTO K DEGENERACI

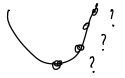
LEHKÉ DÍRY – LIŠÍ SE ZAKŘIVENÍM

MÁ MALOU 2. DER → TEDY m_n JE VELKÁ

VELKÁ 2. DER. → m_n MALÁ

RYCHLOST ČÁSTICE

- S JAKOU RYCHLOSTÍ SE e^- CHOVÁ V DANÉ ČÁSTI PÁSU



PROBLÉM:

- ČÁSTICE POPSÁNA VLN. VEKTOREM A BLOCH. FCÍ → DELOKALIZACE V PROSTORU
- NEPOPISUJE POHYB

PROTO:

VYTVOŘÍME „**VLNOVÝ BALÍK**", JEDNOČÁST. VLNOVÁ FCE ψ

$$\boxed{\Psi(\bar{r},t) = \int \varphi(\bar{k},t)\, \psi_{\bar{k}}(\bar{r})\, d^3k}$$

KDE BLOCH. FCE $\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} u_{\bar{k}}(\bar{r})$

$\int$ NEBO $\sum$ → K KVAZISPOJITÉ

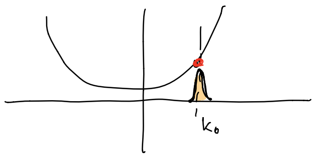
→ TVOŘENÁ LIN. KOMBINACÍ BLOCHOVÝCH STAVŮ

- ZVOLILI JSME JEDEN PÁS, JEDNU ČÁSTICI POPSANÁ VLN. VEKTOREM K

$\boxed{\textbf{OBÁLKOVÁ FUNKCE}}$ $\varphi(\bar{k},t) = f(\bar{k})\, e^{\frac{-it\,\varepsilon(\bar{k})}{\hbar}}$

$f(\bar{k})$ → GAUSS, OBDÉLNÍK, ...

$e^{\frac{-it\,\varepsilon(\bar{k})}{\hbar}}$ → FÁZ. FAKTOR



φ OBS. VLN. VEKTORY NA MALÉM OKOLÍ k_0

- POUZE STAVY CO SE MÁLO LIŠÍ OD k_0

1. APROXIMACE
   - OBÁLKOVÁ FCE DEFINOVANÁ NA MALÉM OKOLÍ k_0
     ⇒ VLNY MAJÍ PODOBNOU FREKVENCI
     $u_{\bar{k}}(\bar{r})$ SE LIŠÍ MÁLO

   DŮSLEDKY: # ENERGII V OKOLÍ TOHO NAŠEHO BODU MOHU APROX. JEDNODUŠÍ FUNKCÍ → PŘÍMKOU (ROZVOJ TAYL. ŘADU POUZE DO 1. (LINEÁRNÍHO) ČLENU)

$$\varepsilon(\bar{k}) = \varepsilon(\bar{k}_0) + \overbrace{(k-k_0)\,\underbrace{\nabla_k}_{\text{GRADIENT PLE } k}\varepsilon(\bar{k})\Big|_{k_0}}^{\text{1. ČLEN TAYLORA}}$$

PŘEDPOKLAD: $u_k(\bar{r})$ POUZE MÁLO ZÁVISLÁ NA K → NAVÍC POKUD SE OMEZÍME JEN NA MALÉ OKOLÍ KOLEM k_0

⇒ U TEDY UVAŽUJI ŽE NEZÁV NA K A DOSADÍM $u_{\bar{k}} \to \underline{\underline{u_{\bar{k}_0}}}$

2. APROXIMACE
   - POKUD ZVOLENÁ FCE NA OKOLÍ k_0 TVOŘÍ MALÝ ROZDÍL V RÁMCI REDUK. ZONY
     → TEDY I KOREKČNÍ FAKTOR NA u_k MALÝ
     → $u_{\bar{k}_0}$ TEDY POTOM MOHU VYSUNOUT PŘED $\underline{\underline{\int}}$

3. APROXIMACE
   - DOPLNÍME $e^{i k_0 \cdot \bar{r}}$ → ABYCHOM OPĚT MĚLI TVAR BLOCH. FCE

$\Psi(\bar{r},t) = \int \varphi(\bar{k},t)\, \psi_{\bar{k}}(\bar{r})\, d^3k$ | $\varphi(\bar{k},t) = f(\bar{k})\, e^{\frac{-it\,\varepsilon(k)}{\hbar}}$ | $\varepsilon(k) = \varepsilon_0(k_0) + (k-k_0)\nabla\varepsilon(k)\Big|_{k_0}$

$\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} u_k(\bar{r})$

$$\Psi(\bar{r},t) = e^{i\bar{k}_0\cdot r}\, \underbrace{u_{k_0}(\bar{r})}_{\text{2. APROX}}\, \underbrace{e^{\frac{-it\,\varepsilon(k_0)}{\hbar}}}_{\text{VYTK. ČLEN CO NEZÁV NA K}} \int f(\bar{k})\, e^{i(\bar{k}-\bar{k}_0)\cdot\left[\bar{r} - t\frac{\nabla\varepsilon(k)|_{k_0}}{\hbar}\right]} d^3k$$

↑ MUSÍM UBRAT $e^{-i\bar{k}_0\cdot r}$

→ + VEZMU $e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$ Z $\psi_{\bar{k}}(r) \Rightarrow e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, e^{-i\bar{k}_0\cdot\bar{r}}$
$\Rightarrow \underline{\underline{e^{i(\bar{k}-\bar{k}_0)\cdot\bar{r}}}}$

POZOROVÁNÍ: # ČAS t: ① $e^{\frac{-it\,\varepsilon(k_0)}{\hbar}}$ → FÁZ. FAKTOR, PŘI HUSTOTĚ PRAVDĚP BUDE $|\;|^2$ A VYMIZÍ

- INF. O VLNOVÉ PODSTATĚ
- NENESE INF. O POHYBU

② $e^{i(\bar{k}-\bar{k}_0)\cdot\left[\bar{r} - t\frac{\nabla\varepsilon(k)|_{k_0}}{\hbar}\right]}$

- SLOŽKA POPISUJÍ POHYB

$t = t_0$ $\quad \dfrac{\nabla\varepsilon(k)|_{k_0}}{\hbar}$ = KONST. FAKTOR $\mathbf{w}$

TEDY $\bar{r} - t\cdot\mathbf{w}$ ⇒ PŘI ZMĚNĚ t SE MĚNÍ $\bar{r}$.

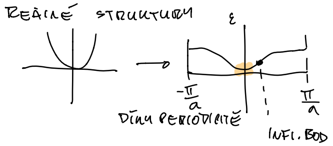
⇒ TENTO FAKTOR ② POPISUJE POHYB BALÍKU V ČASE

$$\boxed{\bar{v} = \frac{\partial\bar{r}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar}\nabla\varepsilon(\bar{k})}$$

- ČÁSTICE S VLN. VEKTOREM $\bar{k}$ SE POHYBUJE RYCHL. $\bar{v}$

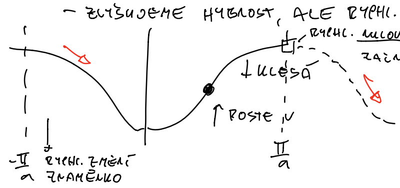
DISKUSE: ① BALÍK SE NEROZPLÝVÁ, PROTOŽE NEUVAŽUJEME DISPERZI V ENERGII → POUŽ. POUZE LIN. ČLEN

② U PARABOLICKÉHO PÁSU → DOBRÝ VÝPOČET REÁLNÉ STRUKTURY



- PRO ČÁSTICE V OKOLÍ EXTRÉMU VŠE DOBŘE FUNGUJE

- K DO INFL. BODU ROSTE → PAK KLESÁ
- ZVYŠUJEME HYBNOST, ALE RYCHL. KLESÁ



⇒ POKUD UDĚLÁM INT. PŘES PERIODU → e^- SE VRÁTIL DO POČ. STAVU
→ NEVEDL BY EL. PROUD → PROBLÉM A V ROZPORU

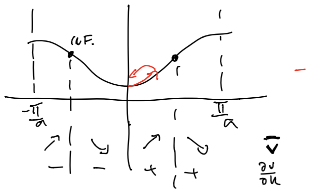
PŮSOBENÍ EL. POLE

$$\bar{F} = q\bar{\mathcal{E}}$$

q … NÁBOJ, $\bar{\mathcal{E}}$ … ENERGIE, CO SE POHYBUJE

$q_{e^-} = -1.602 \cdot 10^{-19}$

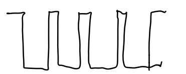
- MATERIÁL VLOŽÍM DO POLE → PŮS. KONST. SÍLA ⇒ ROZPOHYBUJE ČÁSTICE
- POD VLIVEM KONST SÍLY MATERIÁL TEDY NEPOVEDE PROUD



- ALE MATERIÁLY NEJSOU IDEÁLNÍ
  → e^- SE URYCHLUJÍ ALE ZTRÁCÍ ENERGII (FONONY) A OPĚT SE VRÁTÍ ZPĚT DO EXTRÉMU
  → V PODSTATĚ SE LZE OBTÍŽNĚ DOSTAT BÝT K INFLEXU
  ⇒ e^- ZŮSTÁVAJÍ V OKOLÍ MINIMA
  - VYKONÁVÁ KVAZI PERIOD. POHYB V OKOLÍ MINIMA
  → PŘISPÍVÁ K TRANSP. PROUDU
  ⇒ DÍKY ROZPTYLU TAK e^- VEDE EL. PROUD
  - PRO NEKV. VODIČE SE ROZPTÝLÍ DŘÍVE A VEDE TAK HŮŘE

- PŘI ↑ POLÍCH A ↑ KVAL. KRYSTALECH → MOHU SE DOSTAT ZA INFL. BOD

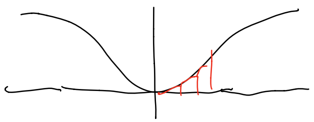
- LZE UDĚLAT NA ZÁKL. SOUSTAVY KVANT. JAM
- NA VRSTEVNATÝCH STRUKTURÁCH GaAs AlGaAs
  - MAJÍ BLÍZKOU MŘÍŽ. KONST



a … NOVÁ PERIODA
→ a BUDE MNOHEM DELŠÍ
⇒ $\frac{\pi}{a}$ BUDE O HODNĚ MENŠÍ

TÍM ZREDUKUJU TU REDUK. OBLAST

→ POKUD BUDE EFEKT. HMOTA STÁLE STEJNÁ, PAK SE PÁS ROZPADNE NA MINIPÁSY

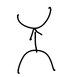


→ VELICE UŽŠÍ S MALOU ENERGII

DŮSL ⇒ PŘI VLOŽ DO POLE DOSÁHNU OKRAJ PÁSU SNADNO

BLOCHOVY OSCILACE – ↗↘↗↘ OSCILACE V RÁMCI TOHO JEDNOHO MINIPÁSU

BLOCHOVY OSCILACE NA MINIBANDU



① – OSVÍTÍM → PŘENESU e^- Z VAL → VODIV
② MÁM PŘILOŽ KONST POLE F
③

e^- UDĚLÁ OSCILACI → ODETEKUJI STŘÍDAVÝ PROUD

- PODLE SÍLY VLOŽ. POLE → URYCH/ZRYCHL. TY OSCILACE → LADÍM FREKVENCI

④ MOHU VOLIT PARAMETRY STRUKTURY + VNĚJŠ. POLE
↓ MOHU PAK LADIT VÝST. OSCILACE → TY JSOU THz
⇒ GENERACE THz FREKVENCE

POHYBOVÁ ROVNICE

- HLEDÁME $\bar{F} = \dot{p} = ma$ (2. NEWTON. ZÁK)

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \bar{v} \cdot \bar{F}$$ (ZÁK. ZACH. E)

→ ZÁV. NA t JELIKOŽ SE TEN BALÍK URYCHLUJE $\mathcal{E}(k(t))$ → POSUN VLN. BALÍKU V k PROSTORU

$$\frac{d\,\mathcal{E}(\vec{k}(t))}{dt} = \nabla_k \mathcal{E}(\bar{k}) \cdot \frac{d\bar{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \mathcal{E}(k) \cdot \bar{F}$$

DER VNĚJŠ. A VNITŘ. FCE

$$\Rightarrow \frac{d\bar{k}}{dt} = \frac{\bar{F}}{\hbar} \quad \Rightarrow \bar{F} = \dot{k}\hbar$$

POD VLIVEM PŮS. SÍLY SE ČÁST. POHYBUJE V $\bar{k}$ PROSTORU DLE

→ ZÁROVEŇ p REPR. $\hbar k$ JAK JSME ODVOZOVALI UŽ VÝŠE (KVAZIHYBNOST)

POZNÁMKY ① EXTRÉM MIMO k_0
$k \to (k - k_0)$ DER. Z $k_0 = 0$
- DÍKY PERIODICITĚ NEVADÍ

– ② MOHU TEDY POUŽ. VZTAHY JAKO V KLAS. MECHANICE

5. PŘEDNÁŠKA

OPÁČKO: – MINULÉ LEKCE – ZJEDNODUŠENÍ POJMU PÁSOVÁ STRUKTURA
– KVAZIKLASICKÁ APROXIMACE
① EFEKTIVNÍ HMOTNOST
② RYCHLOST A POHYBOVÁ ROVNICE
– PRACUJI S $\bar{e}$ JAKO NABIT. ČÁSTICEMI ALE KLASICKY
– NAJDU ODCHYLKY OD KLASICKÉ TEORII KDYŽ $\bar{e}$ NABUDE ↑ ENERGII
– EF. HMOTNOST e^- VE VALENČ. PÁSU JE ZÁPORNÁ → OPAČNÁ DYCH. K HYBNOSTI

DÍRY VE VALENČNÍM PÁSU

– DÍRY → CHYBĚJÍCÍ $\bar{e}$ POD FERMIHO ENERGIÍ
– HUSTOTA STAVŮ $10^{23}/cm^3$ V PÁSU → U POLOVOD. 10^{20}; 10^{19} → JIŽ VYSOKÉ HODNOTY
$10^{15}-10^{16}$ – PRŮM
10^{6} – VYSOKO ODPOR MAT.

– POČET ČÁSTIC ODPOVÍDÁ ODPORU/VODIVOST
↳ MÁME ROZPĚTÍ 15 ŘÁDŮ → ↑ VARIABILITA ⊕

– ZABÝVÁME SE POUZE OBSAZ. STAVY – VE VODIV. PÁSU POUZE MÁLO OBSAZ. STAVŮ
– ALE VALENČNÍ → PRAKTICKY PLNÉ OBSAZ. – NELZE POUŽ. APROX. EFEKT. HMOTY
↓
PROTO ZAVEDU „APROXIMACI DĚR" – NEMUSÍM POČÍTAT PŘES CELÝ PÁS!
– POUZE TY STAVY, KDE $\bar{e}$ NEJSOU → DÍRY

VODIVOSTNÍ PÁS

– VODIVOST

el. náboj, kladná vel. → $1.602\cdot 10^{-19}$; KDYBY ZORNOU NÁB. $\bar{e}$ ZNAM. – ZNAM.

$\bar{J}_k = -e\,\bar{v}_k$ ... PŘÍSPĚVEK K PROUDU OD 1 ELEKTRONU VE VODIV. PÁSU

$[A] = [As \cdot m/s] = [Am]$

PROUDOVÁ HUSTOTA – V MAT. SE V 1 OBJEM. JEDNOTCE POHYBUJE $1e^-$

MNOHO $\bar{e}$: – SČÍTÁME PŘES ∀ STAVY KDE SE $\bar{e}$ VYSKYTUJE

$$\boxed{\bar{j} = -2e \sum_{k} \nu\, \bar{v}_k}$$

(STAVY KDE SE $\bar{e}$ VYSKYTUJE)

– OBECNÝ VZTAH PRO HUSTOTU PROUDU
– MUSÍM PODĚLIT OBJEMEM → VĚTŠINOU NA $1cm^3$

ν ... OBSAZOVACÍ INDEX $\nu \begin{cases} 1 & \text{STAV KDE JE } \bar{e} \\ 0 & \text{NEMÁM } \bar{e} \end{cases}$

$[\bar{j}] = \frac{Am}{cm^3} = A/cm^2$

– ZATÍM NEUVAŽ. SPIN, MOHU K k PŘIDAT INDEX σ PRO ↑↓ SPIN
– POKUD ZAPOMENU SPIN → VYJDE POLOVIČNÍ PROUD
– MOHU ROVNOU PŘIPSAT 2 PRO DEGENERACI

– $\nu_{\bar{k}}$ JSOU V TERMODYN. ROVN. $\bar{e}$ POPSÁNY FERMI-DIR. STATISTIKOU
↓
NAHRADÍME JE PAK FERMI-DIR. ROZDĚL. FCÍ
FD – ZÁV. NA E ELEKTRONU
– RYCHL. JE DLE E
⇓
PŘI TD ROVNOVÁZE $\Sigma = 0$
– PROUD NETEČE
– PŘI PŘIPOJENÍ POLE → ν_k NENÍ FD
⇒ ν_k MUSÍM HLEDAT (ŘEŠENÍM BOLTZ. KIN. ROVNICE)
⇒ PROCHÁZÍ PROUD
– ZÍSKÁME TRANSPORTNÍ KOEFICIENT
– VODIVOST, SEEBECKŮV, ... (TEPL. GRAD)

FERMI-DIRACOVO ROZDĚLENÍ
– SYSTÉM SLOŽ. Z FERMIONŮ – ČÁST. S ANTISYM. VLNOVOU FCÍ A SPIN $\pm 1/2$
– PLATÍ PAULIHO PRINCIP

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$$

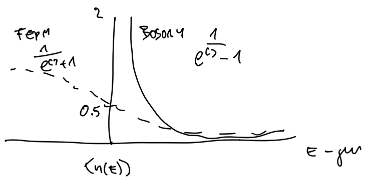
μ .. CHEM. POTENC. \ FERMIHO E

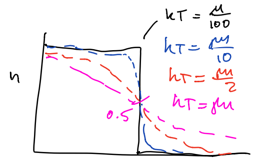
– PRO $E-\mu \ll k_B T$ PŘECHÁZÍ V BOLTZ.

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}}}$$

– PRO BOSONY PŘI ↓ E (JAKO FERMI-DIR.) BOSE-EINST.

$$f_{(BE)} = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}$$





VALENČNÍ PÁS
– PLATÍ OBA VZTAHY

$\bar{J}_{\bar{k}} = -e\,\bar{v}_{\bar{k}}$ $\bar{J} = -e \sum_{k} \nu_{\bar{k}} \bar{v}_k$

– VE VODIV. ν_k BLÍZKÉ NULE, VE VALENČ. $\nu \to 1$

– MUSÍME ODLIŠIT
$\bar{J}_e$ ... VODIV. PÁS PROUD ELEKTRONŮ
$\bar{J}_H$ ... EL. PROUD NESOUCÍ NÁBOJ VE VALENČNÍM PÁSU

VALENČNÍ PÁS: $\bar{J}_H = -e \sum_k \nu_{e\bar{k}} \bar{v}_{\bar{k}}$ VODIVOSTNÍ PÁS: $J_e = -e \sum_k \nu_{e,\bar{k}} \bar{v}_{e,\bar{k}}$

$\nu_{\bar{k}}$ TÉMĚŘ POŘÁD 1

① POROVNÁNÍ $\sum_{\bar{k}} \bar{v}_{\bar{k}} = 0$
$\bar{v}_{\bar{k}} = -\bar{v}_{-k}$

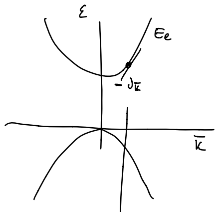
⇒ ZAVEDU OBSAZ. ČÍSLO PRÁZD. STAVŮ $\nu_{H,\bar{k}} = 1 - \nu_{e,\bar{k}}$ ⇒ $\nu_{e,\bar{k}} = 1 - \nu_{H,k}$

$$\Rightarrow \bar{J}_H = \underbrace{-e \sum_{\bar{k}} \bar{v}_k}_{=0} + e \sum_k \nu_{H,\bar{k}} \bar{v}_{\bar{k}} = +e \sum_k \nu_{H,\bar{k}} \bar{v}_{\bar{k}} \quad ①$$

PROTOŽE VE VAL. PÁSU TÉMĚŘ ∀ OBSAZ ∧ $\bar{v}_{\bar{k}} = -\bar{v}_{-k}$, $\Sigma = 0$

EL. PROUD „NESENÝ PRÁZD. MÍSTY VE VAL. PÁSU" ⇒ DÍRAMI

– PRÁZDNÉ STAVY SE BUDOU HROMADIT U VRCHOLU PÁSU → $\bar{e}$ BUDOU KLESAT
↳ MOHU JE POPSAT PARAB. APROXIMACÍ

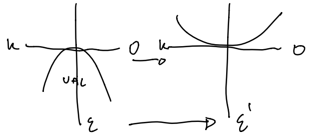


PROBLÉMY ①

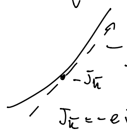
- PRACUJI S ① – ALE POTŘEBUJI PŘEVÉST OD PRÁZDNÉHO STAVU KE HMATAT. ČÁSTICI
- TYTO DÍRY JDOU NAHORU → CHTĚJÍ MÍT VYŠŠÍ E
- MÁ ZÁP. EFEKT. HMOTN. ; POHYBUJE SE PROTI HYBNOSTI

MUSÍM UPRAVIT SYSTÉM
- ABY DÍRY CHTĚLI MINIMALIZOVAT E

① OTOČÍME SYMETRICKY PÁS (VALENČNÍ)

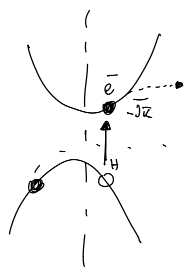


$\varepsilon' = -\varepsilon$

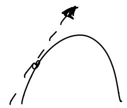


$J_k = -e v_k$
- EL. PROUD TEČE PROTI SMĚRU

- VAL. PÁS: POKUD PLNĚ ZAPLNĚN, TAK PRO $\forall e^-$ S $-k$ NAJDU I S $+k$
  – ODEČTOU → PROUD NETEČE
  POKUD NĚJAKÝ e^- NEPHYBÍ



ALE VYJMU Z VAL. PÁSU $+k$
→ POTOM POUZE TENTO RESP. e^- NESE PROUD
→ PROUD JE STÁLE ZÁPORNÝ (DÍKY SMĚRNICI RYCHLOSTI) !

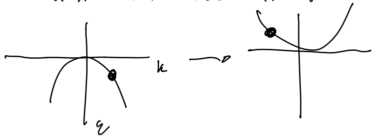


⇒ SMĚR PROUDU JE STEJNÝ PRO DÍRU I e^-

- MUSÍM PO ZAVEDENÍ DĚR RESP. MĚŘITELNÉ VELIČINY
  → PO PŘEKLOPENÍ BY DÍRA MĚLA KLADNÝ SMĚR –

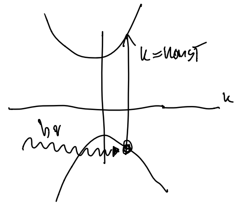
PŘECHOD OD VAL. PÁSU e^- K VAL. PÁSU DĚR

⇒ MUSÍM TEDY PŘEKLOPIT $\vec{k}$ ⇒ ABYCH ZACHOVAL GRADIENT



$\varepsilon' = -\varepsilon$

KVAZIČÁSTICE: e^-: – STEJNÉ VLAST. JAKO VOLNÝ e^- ALE JINÁ m
– VYLDÍME, ŽE I EL. NÁBOJ SE TROCHU MĚNÍ V ZÁV. NA ČÁSTICE (ODSTÍNĚNÍ V NĚKOŠ. POLEM)
h^+: DÍRA ; FERMI-DIRAC (ROVNOVÁHA) ; BOLTZMANN (NEROVN.)



$\frac{\pi}{a} = 10^9$ $a \approx Å$

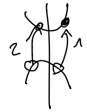
OPT. ZÁŘENÍ – JSOU CCA 100× MENŠÍ NEŽ k

+ZÁK ZACH. HYBNOSTI
- HYBN. FOTONU << HYBN. e^-

} HYBN. e^- PŘI PŘECH VAL. → VOD SE PRAKTICKY NEMĚNÍ!

- PROTO EXCITACE JEN SVISLÝ PŘECHOD

- EXCITACE: * DÍRU A e^- VE VODIV.
  ⇒ 2 ČÁSTICE ; KAŽDÁ NESE PŘÍSPĚVEK ZÁP. EL. PROUDU
- KAŽDÝ FOTON VYGEN. 2 ČÁSTICE, TY MAJÍ STEJNÝ SMĚR PROUDU
  ALE FOTON ABS. NÁHODNĚ
  → * PROUDY SE STATISTICKY VYRUŠÍ



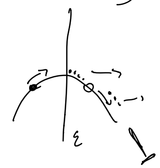
POHYBOVÁ ROVNICE

$$-e\vec{\mathcal{E}} = \vec{F} = \dot{\vec{p}} = \hbar \cdot \dot{\vec{k}}$$

PŘIL. POLE

- PŘILOŽÍM POLE → EL. PROUD SE ZVĚTŠUJE
  ↳ Z DŮVODU ROZPTYLU DOSTANU KONST. STAV PŘI KONST. POLI
  ⇒ STEJNOSM. EL. VODIVOST (VODIV. PÁST)

PŮS. POLE

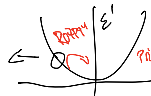


VAL. PÁS – DÍRY SE POSOUVAJÍ TAKTÉŽ DOPRAVA, PROTOŽE TA POZICE e^- BY SE PŘI OBSAZ. ~~TAKTÉŽ~~ ŠLA DOPRAVA

- JENŽE TA DÍRA SE PÁRUJE K JINÉMU e^-

- SYMETRIE DÍRA S e^- VE VAL. PÁSU NENÍ TRVALÁ A ZÁVISÍ NA DYNAMICE SYSTÉMU

↘ NÁSLEDNĚ NA PŘEVRÁC.



– ROZPTYL. PROCES PŘI VEDENÍ JAKO U e^-

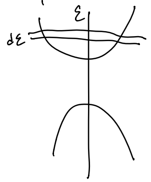
- JDE DOLEVA DÍKY KLADNÉMU NÁBOJI

⊕ OPĚT PŘI PŘEKLOPENÍ MAJÍ DÍRY KLADNOU EFEKT. HMOTNOST (JINAK MODEL PRO e^-, h^+ VE VAL. P. PŘEDP. ZÁPORNOU)

ZDA. 1hod 17min 5 př.

HUSTOTA STAVŮ – VIZ KUNC

UDÁVÁ, KOLIK JE STAVŮ SCHOPNÉ OBSADIT. $\bar{e}$ VE VODIVOST. PÁSU



- KAM SE MŮŽE DOSTAT $\bar{e}$? → ZÁLEŽÍ NA PODMÍNK. PRO DANOU T
- KOLIK $\bar{e}$ TAM BUDE PŘI URČITÉ FERMIHO ENERGII

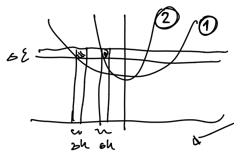
$$n = -e \sum v_{\bar{k}}$$ PROBLÉM: SČÍTÁM PŘES RŮZNÁ $\bar{k}$

- ZJEDNODUŠÍME PŘES HUSTOTU STAVŮ

- VYMEZÍ, KOLIK STAVŮ, KTERÉ PATŘÍ K DANÉ ENERGII $d\varepsilon$

VÝHODY? – ZBAVÍME SE VLNOVÉHO VEKTORU $\bar{k}$ A PRAC. POUZE V ENERGIÍCH

HYPOTÉZA: 2 LÁTKY O STEJNÉ PÁS. STRUKTUŘE, ALE RŮZ. ~~E~~F. HMOTNOST



m_{EFEKT}: ① > ②   HUST. STAVŮ: ② < ①

$\frac{1}{f''}$ ⇒ ② MÁ VYŠŠÍ 2. DER. ⇒ MENŠÍ m_{ef}

BERU PŘES PRŮMĚT k

- PRO STEJNÉ $\Delta\varepsilon$ → U ŠIRŠÍHO ① SE VEJDE VÍCE STAVŮ k NEŽ U ②

⇒ VYŠŠÍ m_{EFF} ⇒ VYŠŠÍ HUST. STAVŮ

$m_1 > m_2$

MODEL TÉMĚŘ VOLNÝCH $\bar{e}$

– CHCEME UKÁZAT ✱ PÁS. STRUKTURY

PŘEDPOKLADY: – KRYSTAL S PERIOD. POTENCIÁLEM
– AMPLITUDY PERIOD. OSCILACÍ JSOU MALÉ
↳ MOHU POUŽÍT PORUCHOVOU TEORII (POUŽIJEME 1, 2. ČLEN)

① PERIODICKÝ POTENCIÁL

ROZKLAD DO FOUR. ŘADY ; Z PŘÍM. PROST. DO AMPL. V RECIPR.

$$V(\bar{r}) = \sum_{\bar{g} \neq 0} V_{\bar{g}}\, e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{g}} \cdot \bar{r})}$$

↳ PERIOD. FCE

$g \neq 0$ or $V_0 = 0$

$\bar{g}$.. CELOČÍS. VEKTOR, INDEX. JEDN. VEKTORY RECIPR. MŘÍŽE

✱ MUSÍ BÝT REÁLNÝ, TEDY $V_g = V^*_{-g}$

+ PŘEDPOKLAD ŽE $V_{\bar{g}}$ JE MALÉ

② BLOCHOVA FCE DO F. ŘADY

$$u_{\bar{k}}(\bar{r}) = \sum_{\bar{h}} a_{\bar{h}}\, e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}} \cdot \bar{r})}$$

$$\psi_{\bar{k}}(r) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} \sum_{h} a_{\bar{h}}\, e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}} \cdot \bar{r})}$$

$$\Delta = \nabla^2 = (2\pi\, \bar{b}_{\bar{h}})^2 a_{\bar{h}}\, e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}} \cdot \bar{r})}$$

③ DOSADÍME DO SCHR. ROVNICE

VLN. FCE $\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, u_{\bar{k}}(\bar{r})$ SCHR. ROVNICE $H\,\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \varepsilon_{\bar{k}}\psi_{\bar{k}}(\bar{r})$

LAPL. $\Delta = \nabla^2$

$(e^{ikr})' = ik\, e^{ikr}$

POZN $e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$ SE VYKRÁTILO

; m ... KLIDOVÁ HMOTN. $\bar{e}$

$i \cdot i = -1$ ⇒ OPĚT +

$$\underbrace{\sum_{\bar{h}} \frac{\hbar^2}{2m}(2\pi\bar{b}_{\bar{h}})^2 a_{\bar{h}}\, e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}}\cdot\bar{r})}}_{\text{2. DER. PŮS. NA } u} + \sum_{\bar{g}\neq 0}\sum_{\bar{h}} V_{\bar{g}}\, a_{\bar{h}}\, e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{g}} + \bar{b}_{\bar{h}})\cdot r} + \underbrace{\sum_{h} \frac{\hbar^2}{m}(2\pi\bar{b}_{\bar{h}})\bar{k}\, a_{\bar{h}}\, e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}}\cdot\bar{r})}}_{\text{SMÍŠ. DER.}}$$

$$\sum_{\bar{h}'}$$

$e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}'}\cdot r)}$

h a h' BĚŽÍ PŘES ∀ CELOČÍS. VEKTORY ⇒ h, h' JE TO JEDNO!

⇒ $e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}}\cdot r)}$

| ZDE $a_{\bar{h}} \to a_{\bar{h}-\bar{g}}$

SMÍŠ. DER.
2 VYPADLE
$e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$ VŠUDE
VYKRÁTILO

$$= \sum_{\bar{h}} \left[\varepsilon_k - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] a_{\bar{h}}\, e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}}\cdot\bar{r})}$$

2. DER e^{ikr}

$$\left(e^{i(k\cdot r)}\right)'' = ik\, e^{ikr} = i^2k^2 e^{ikr} = -k^2 e^{ikr}$$

SPOLU S − U T ⇒ (+) ALE PŘEVOD NAPRAVO)

ZJEDNODUŠENÍ ① MUSÍ PLATIT PRO ∀ r ; JE POUZE V $e^{(\ )}$ KDE $b_h \cdot \bar{r}$
– MOHLI BYCHOM Σ ZRUŠIT, ALE VADÍ NÁM $(b_{\bar{g}} + b_{\bar{h}})\cdot r$ FÁZ. FAKTOR

– MŮŽEME PROVÉST SUBST. $\boxed{\bar{h} = \bar{h}' - \bar{g}}$ h, g ... CELOČÍS. VEKTORY, b ... JSOU SPOJENY LIN. KOMB. CELÝCH ČÍSEL

$$\bar{b}_{\bar{g}} + \bar{b}_{\bar{h}} = \bar{b}_{\bar{g}+\bar{h}}$$

$$\bar{b}_{\bar{g}+\bar{h}} = \bar{b}_{\bar{g}+\bar{h}'-\bar{g}} = b_{h'}$$

h běží přes celočís. vektory

TEDY h, h' JE JEDNO

BUDU MÍT STRUKTURLE STEJNÝ TVAR JAKO $b_h \cdot r$

TEDY VŠUDE JE $\sum_h e^{2\pi i(\bar{b}_{\bar{h}} \cdot \bar{r})}$ → VYKRÁTÍME → MÁME SOUST. ROVNIC PRO KAŽDÉ h ZVLÁŠŤ

2. VERZE PO ZJEDNODUŠENÍ

$$\frac{\hbar^2}{2m}(2\pi \bar{b}_{\bar{h}})^2 a_{\bar{h}} + \sum_{\bar{g}\neq 0} V_{\bar{g}}\, a_{\bar{h}-\bar{g}} + \frac{\hbar^2}{m}(2\pi \bar{b}_{\bar{h}} \cdot k) a_{\bar{h}} = \left(\varepsilon_{k} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) a_{\bar{h}}$$

→ JIŽ NENÍ ZÁVISLOST NA SOUŘADNICI → PRACUJEME POUZE S AMPLITUDAMI

↳ ALE NĚKTERÉ V $\bar{h}$ A JINÉ V $\bar{h}-\bar{g}$

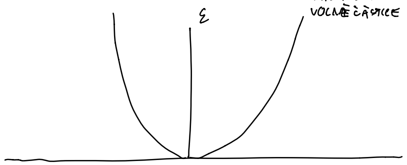
– AMPLITUDA ~ DVOU RŮZ. BODECH

MEZIKROK ÚVAHA

– POKUD $V=0$ ⇒ MÁME VOLNOU ČÁSTICI A ŘEŠENÍ ZNÁME $\boxed{e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}}$ A $\boxed{T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$

$a_0 \neq 0$; $a_{h\neq 0} = 0$ } 1. DŮSL.

PARABOLA VOLNÉ ČÁSTICE



1. DŮSLEDEK (1. DŮSL.)

∄ V NAŠÍ SOUSTAVĚ (KDE $V_{\bar{g}}=0$) BUDEME HLEDAT PODOBNÉ ŘEŠENÍ + a_h ∀ NULOVÉ MIMO a_0

$\bar{b}_{\bar{0}} = 0$

↳ b_0 JE LIN. KOMB. S h A KDYŽ $h=0 \Rightarrow b_h = 0$

$$\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}(2\pi \underset{0}{\bar{b}_{\bar{h}}})^2 a_{\bar{h}}}_{0} + \underbrace{\sum_{\bar{g}\neq 0} V_{\bar{g}}\, a_{\bar{h}-\bar{g}}}_{0} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{m}(2\pi \underset{0}{\bar{b}_{\bar{h}}} \cdot k) a_{\bar{h}}}_{0} = \underbrace{\left(\varepsilon_{k} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) a_{\bar{h}}}_{\text{ŘEŠ. PRO VOLNOU ČÁSTICI}}$$

⇒ ÚLOHA DÁVÁ ŘEŠENÍ POUZE, KDYŽ $a_0 \neq 0$ ❗ A PRO $h \neq 0$ MUSÍ BÝT $a_h = 0$

PROČ?

$\left(\varepsilon_{\bar{h}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) a_{\bar{h}}$ – KDYBY $a_h = 0$ → NEPLATILO BY PRO VOLNOU ČÁSTICI

KDYBY $a_h|_{h\neq 0} \neq 0$

TAK BY TŘEBA

$$\frac{\hbar^2}{m}(2\pi \bar{b}_{\bar{h}} \cdot k) a_{\bar{h}} \neq 0$$

PROTOŽE $b_{\bar{h}}|_{h\neq 0} \neq 0$ A TÍM

BY NEODP. VOLNÉ ČÁSTICI

2. DŮSL. PRO $h=1$: $a_{h_1} \neq 0$; OST. AMP. $= 0$

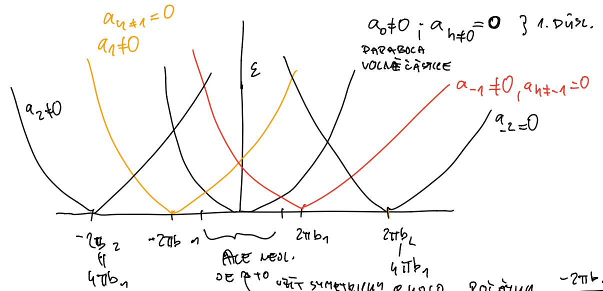
$h=1$:

$$\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}(2\pi \bar{b}_{\bar{h}})^2 a_{\bar{h}}\Big|_{h=1}}_{\neq 0} + \sum_{\bar{g}\neq 0} V_{\bar{g}}\, a_{\bar{h}-\bar{g}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{m}(2\pi \bar{b}_{\bar{h}} \cdot k) a_{\bar{h}}\Big|_{h=1}}_{\neq 0} = \underbrace{\left(\varepsilon_{k} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) a_{\bar{h}}\Big|_{h=1}}_{\neq 0}$$

SEČTU – DOPLNÍM NA ČTVEREC)

$$\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{(2\pi \bar{b}_{\bar{h}} + \bar{k})^2}\, a_{\bar{h}} + \sum_{\bar{g}\neq 0} V_{\bar{g}}\, a_{\bar{h}-\bar{g}} = \varepsilon_k\, a_{\bar{h}}$$

OPĚT ∀ $a_h = 0$ AŽ NA $a_h|_{h=1} \neq 0$ → OPĚT CHCI NULOVAT



JE TO VŠE SYMETRICKY OKOLO POČÁTKU $\frac{-2\pi b_1}{2}$ DO $\frac{2\pi b_1}{2}$

$a_1 \neq 0$ PAK ( )$=0$

KDYŽ $2\pi \bar{b}_1$ TAK

$k = -2\pi b_1$

PARABOLA S MINIMEM V $h = -2\pi b_1$

– MŮŽE BÝT I VE 3D

– JE VIDĚT PERIODICITA OD 0 DO + $2\pi b_1$, ALE

– NA HRANICI JE FCE U JINÁ, ALE ε STEJNÁ

↳ LIŠÍ SE JEN OTÁČIVÝ FAKTOR

1. APROXIMACE

- DOPOSUD ∀ ÚPRAVY BYLY PŘESNÉ !

$V_g \neq 0$ ALE JE MALÉ, POUŽIJI PORUCHOVÝ ROZVOJ

- POKUD SE NĚJAK ZMĚNÍ NĚKTERÁ Z PARABOL → ZMĚNÍ SE DÍKY PERIODICITĚ PŘESNĚ
- NEMUSÍM ŘEŠIT ∀ h ALE JEN PRO SPECIFIC. h

└ BUDU ŘEŠIT ZÁKL. PARABOLU $h=0$ $a_0 \neq 0$

$|a_0| >> |a_{h\neq 0}|$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(2\pi \bar{b}_h + \bar{k}\right)^2 a_h + \sum_{g\neq 0} V_g a_{h-g} = \varepsilon_k a_h$$

V_g JSOU MALÉ

APLIKUJI PORUCHOVÝ POČET

* $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \varepsilon'$ TEDY NEPORUŠ. $E + E'$
* PODSTATNÉ ČLENY ($>>0$) PRO $h=0$

PŮV. PARABOLA

VOLNÁ ČÁSTICE

- URČÍME TEDY BUDE SOUČ. ŘEŠENÍ $\frac{\hbar^2}{2m}k^2 a_h = \varepsilon_k a_h$

TO $\varepsilon' \cdot a_h$ JE MALÉ A POTOM TEDY VYPADNE

* MALÉ V 1. ŘÁDU (PRO ∀ h)

$$\sum_{g\neq 0} V_g a_{h-g}$$

└ POKUD PŘÍSP. a_{h-g} BUDE NENULOVÝ

(SUMA BUDE MÍT PŘÍSPĚVEK

$\Rightarrow h = g \Rightarrow a_0 \Rightarrow \sum_{g=h} V_h a_0$

⇒ ZDE Z TEDY MÁ VLIV POUZE 1 SČÍTANEC S a_0 !

— OSTATNÍ ZANEDBÁM

$$a_h = -\frac{V_h a_0}{\frac{\hbar^2}{2m}\left(2\pi\bar{b}_h + \bar{k}\right)^2 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = -\frac{V_h a_0}{\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(2\pi \bar{b}_h\right)^2 + 4\pi \bar{b}_h \cdot \bar{k}\right]}$$

↓ ITERACE JEDNÁ NATOSTI 1.

OSTATNÍ BY BYLY JEŠTĚ O ŘÁD VYŠŠÍ

↓ DOSADÍM DO u_k MÁ MÁME VLNOVOU FUNKCI !

HLEDÁME ε

① MÁME a_h (PRO ZÁKL. PARABOLU)

② DOSADÍME DO

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(2\pi \underset{\downarrow 0}{\bar{b}_h} + \bar{k}\right)^2 a_h + \sum_{g\neq 0} V_g a_{h-g} = \varepsilon_k a_h$$

$h=-g$

A POLOŽÍME $h=0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k)^2 a_0 + \sum_{g\neq 0} V_g \cancel{a_0} V_{-g} \cdot \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(2\pi \bar{b}_{-g}\right)^2 + 4\pi(-1)\underbrace{\bar{b}_g}_{b_{-g}}\bar{k}\right]} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}a_0 + \varepsilon' \cancel{a_0}$$

V MOCNINĚ $b_{-g}^2 = b_g$

+ $a_0 \neq 0$ A TEDY

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{g\neq 0} V_g V_{-g} \cdot \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(2\pi \bar{b}_g\right)^2 + 4\pi(-1)\bar{b}_g \cdot \bar{k}\right]} = \varepsilon'}$$

DOSTALI JSME KOREKCI K PŮVODNÍ PARABOLE

$V_g^* = V_{-g}$

$$\boxed{\varepsilon' = -\frac{2m}{2\pi\hbar^2}\sum_{g\neq 0}\frac{|V_g|^2}{\pi(\bar{b}_g)^2 - (\bar{b}_g\cdot\bar{k})}}$$

KOREKCE K ENERGII PARABOLY

- DÍKY SDRUŽENOSTI PŘES KOMPL. V_g^* VYJDE Z REÁLNÉ
- Z PERIODICITY VÍME, JAK SE ZMĚNÍ ∀ PARABOLY

DISKUSE:

POČÁTEK $k=0$

$$\varepsilon' = -\frac{2m}{2\pi\hbar^2}\sum_{g\neq 0}\frac{\overbrace{|V_g|^2}^{>0}}{\underbrace{\pi(\bar{b}_g)^2}_{>0} - (\bar{b}_g\cdot\bar{k})}$$

→ ENERGIE POKLESLE

- NEZÁVISLE NA POTENCIÁLU SE ENERGIE SNÍŽÍ
- DOPLNĚNÍ PERIOD. POTENCIÁLU SNÍŽÍ E

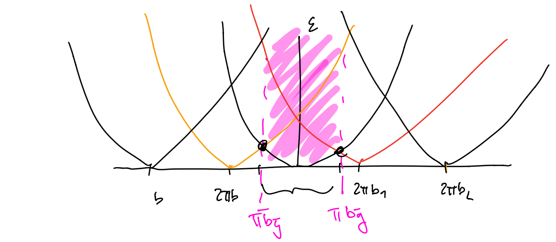
⇓ STABILIZUJE TO PEVNOU L. (V MINIMECH)

ZÁVISLOST NA VLN. VEKTORU $\bar{k}$

$k = \pi \bar{b}_g$ ⇒ DOSTANU SINGULARITU ! VIZ OBRÁZEK

- OKRAJ REDUKOVANÉ OBLASTI

↓ OPTIMÁLNÍ INTERVAL PERIOD. OBLASTI



- APROXIMACE TÉMĚŘ VOL. e^- DÁ INFORMACE O SYMETRII A TVARU PÁS. STRUKTUR
- LIMIT MÁ ALE U URČENÍ KONKRÉTNÍCH ENERGIÍ

SINGULARITY • – MÁM $\varepsilon' \xrightarrow[\text{JDE DO}]{} \infty$

⇒ – VYŘEŠILI JSME CHOVÁNÍ MIMO TY SINGULARITY
  - POUŽILI JSME a_0 JE VELKÉ A OSTAT. MALÉ
  - V PRŮSEČÍKU ALE PRŮSEČÍK DVOU KTERÉ MAJÍ VELKÉ JINÉ KOEF. $a_0, a_1, \ldots$

BUDU UVAŽOVAT SOUČ. VELKÉ 2 KOEFICIENT

$\Rightarrow \sum_{g=0} V_g a_{h-g}$ VYHODÍ 2 SČÍTANCE ⇒ SOUSTAVA 2. ROVNIC

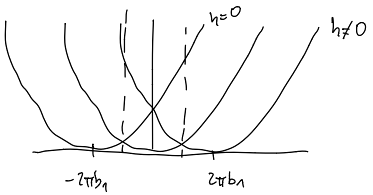
⇒ ODVODÍME CHOVÁNÍ SOUSTAVY V OKOLÍ PRŮSEČÍKU

PŘEDNÁŠKA 7

OPÁČKO: $\left[\varepsilon(\bar k) - \frac{\hbar^2}{2m}(\bar k + 2\pi \bar b_{\bar h})^2\right] a_h - \overbrace{\sum_{g\neq 0} V_g a_{\bar h - \bar g}}^{\text{POUZE 2 VELKÉ SČÍTANCE } a_0,\ a_{h''}\ (\text{PRŮSEČÍK})} = 0$

① NALEZLI JSME OPRAVU K VLN. FCI V RÁMCI PORUCH. POČTU + VZOREC PRO KOREKCI ENERGIE

$$\varepsilon' = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\sum_{g\neq 0}\frac{|V_g|^2}{\pi(b_g)^2 - (\bar b_g \cdot \bar k)}$$



$|a_0|, |a_{h''}| \gg |a_{h'}|$

$h' \neq 0$
$h' \neq h''$

① PRO $h=0 \Rightarrow g=0$ ABY BYLO a_0 A TEDY $V_g = V_0 = 0$

$$h=0: \quad \underbrace{\left[\varepsilon(\bar k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right] a_0}_{M_{1,1}} \ \underbrace{- \sum_{g=0} V_0 a_0}_{0} \ \underbrace{- V_{\bar h''} a_{\bar h''}}_{M_{1,2}} = 0 \qquad \text{PRO } h=0$$

② KDYŽ $h-g=h'' \wedge h=0 \Rightarrow g=-h''$

① $h''-g=0 \Rightarrow g=h''$ ② $h''-g=h'' \Rightarrow g=0 \to V_g = V_0 = 0$

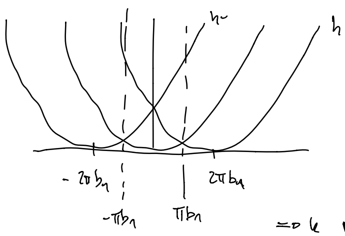
$$h=h'': \quad \underbrace{\left[\varepsilon(\bar k) - \frac{\hbar^2}{2m}(\bar k + 2\pi \bar b_{\bar h''})^2\right] a_{\bar h''}}_{M_{2,2}} - \underbrace{V_{h''} a_0}_{M_{2,1}} \underbrace{- \sum V_0 a_{h''}}_{0} = 0$$

– HLEDÁME VLASTNÍ ČÍSLA A VL. VEKTOR 2×2 MATICE

$$\overleftrightarrow{M}\,\vec a = 0 = \begin{pmatrix} \varepsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & -V_{h''} \\ V_{\bar h''} & \varepsilon(k) - \frac{\hbar^2}{2m}(\bar k + 2\pi \bar b_{\bar h''})^2 \end{pmatrix} \qquad \vec a = (a_0, a_{h''})$$

– ABY MĚLA ŘEŠENÍ: $\det M = 0$

$$\left[\varepsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right]\cdot\left[\varepsilon(k) - \frac{\hbar^2}{2m}(\bar k + 2\pi \bar b_{\bar h''})\right] - \overbrace{(-V_{h''})(V_{h''})}^{|V_{h''}|^2} = 0$$

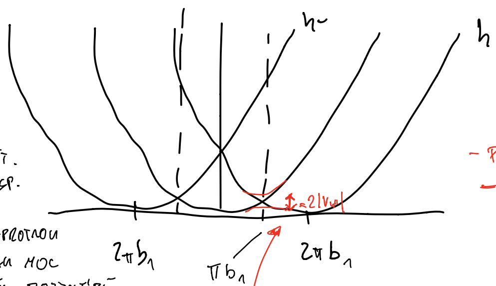


POKUD POSUNU $k \to$ PRŮSEČÍKU NAJDE DOSADÍM

⇒ k V PRŮSEČÍKU JE BLÍZKÉ $-\pi b_{h''}$

ANTICROSSING EFFECT

- POKUD JE PŘÍT. PORUCHOVÝ PŘÍSP. ($V_{\bar h''}$)
- PÁSY SE NEPROTNOU
- $V_{\bar h''}$ URČÍ, JAK MOC SE PRŮSEČÍK ROZTRHNE



– PÁSY SE ROZTRHNOU → ANTICROSSING EFECT

PRO $k = -\pi b_{h''}$ $\quad M_{11} = \varepsilon(-\pi b_{h''}) - \frac{\hbar^2(-\pi b_{\bar h''})^2}{2m}$

$$M_{22} = \varepsilon(-\pi \bar b_{\bar h''}) - \frac{\hbar^2}{2m}\Big(\underbrace{-\pi b_{h''} + 2\pi b_{h''}}_{\pi b_{h''}}\Big)^2$$

$$\boxed{\begin{aligned} &M_{11}M_{22} - (V_{h''})^2 \\ &\Delta\varepsilon(\pi b_{-h''}) = 2|V_{\bar h''}| \end{aligned}}$$

– POKUD $|V_{h''}|^2 = 0$ → PRŮSEČÍK BY ZŮSTAL → PÁSY ~~DE~~GENEROVANÝ

↓ $|V_{h''}| \neq 0$
JINAK DOJDE KE ŠTĚPENÍ → TO JE ÚMĚRNÉ $|V_{h''}|$

DODATEK:

① ČÍM VÍCE PRŮSEČÍKŮ → TÍM VÍCE ROVNIC → SPOLU ROSTE STUPEŇ SOUSTAVY

② $$\varepsilon' = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\sum_{g\neq 0}\frac{|V_g|^2}{\pi(\vec b_g)^2+(\vec b_g\cdot\vec k)}$$

– PŘÍTOMNOST PRŮSEČÍKŮ → JMENOVATEL → 0 → SINGULARITA

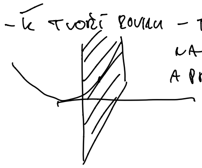
$(\pi \vec b_g + \vec k)\cdot \vec b_g \approx 0$ **PODMÍNKA, ŽE**
– VLNOVÁ FCE MÁ ALESPOŇ 2 KOEF. Z ROZVOJE NEZANEDBATELNÉ

– SINGULARITA NASTANE, KDYŽ VLNOVÝ VEKTOR SPLŇ. PODM.

↓ REPREZENTUJE **DIFRAKČNÍ PODMÍNKU**
POKUD SE $\vec k$ POTKÁ S b_h → ODIFRAKTUJE DO JINÉHO SMĚRU
– TO JE TEN PŘECHOD V TÉMĚŘ DEGENER. BODĚ

KDY JE SPLNĚNA?
1D – BOD
3D – ROVINA

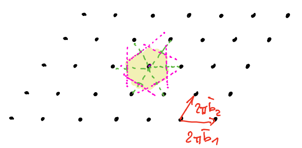
– $\vec k$ TVOŘÍ ROVINU – TA JE ⊥ NA OSU K A PROCH. BODEM



– VIDÍME PÁSY → TO JSOU OSTATNÍ KOMPONENTY DO VEDL. SMĚRŮ → DO ∀ 3 OS

1. BRILLUINO ZONA

RECIPROKÝ PROSTOR



– VŠE
1. BRILLUINOVA ZONA
– REPREZENTUJE NETRIVIÁLNÍ VLN. VEKTORY
– MIMO NÍ UŽ SE OPAKUJÍ
– ZACHOVÁVÁ SYMETRII RECIPR. PROST.

OPÁČKO: DOKONČILI JSME KAP. 4; NYNÍ KAP. 5 → DEFEKTY...

– PŘIMÍSENÉ **CIZÍ ATOMY** V MŘÍŽCE
– DO Si (4VAL. ē): As (5ē)
  – NADPOČETNÝ ē PŘEBYTEČNÝ; NENÍ VÁZÁN V KOVALENTNÍ VAZBĚ
  – DONOR → ē SE UVOLNÍ A JDE DO VODIV. PÁSU **n-TYP**
–
  Ga, P .. 3ē
  – 1ē CHYBÍ; PRÁZDNÉ MÍSTO → AKCEPTOROVÝ STAV
  – CHCE ē – OTEVŘENÁ → DÍRA
  VNĚJŠÍ ZDROJ → AKCEPTOR. STAV

– SMĚSNÝ POLOVODIČ GaAs
  – MOHOU NASTAT VARIACE PRVKŮ (CHYBÍ ē)
  LOKÁLNÍ MŘÍŽKA SE LOKÁLNĚ DEFORMUJE

– ANTISIDE EFECT – NA MÍSTO PRVKU 1. PŘIJDE ATOM 2 (NA POZICI Ga PŘIJDE As)

– MIMO MŘÍŽKU
  – INTERSTICIÁLNÍ DEFECT
  – JE MEZI ATOMY
  – VĚTŠINOU POLOHY

– DISLOKACE – LINIOVÝ DEFEKT

– POHYB
– KMITY MŘÍŽE – ATOMY SE NENACHÁZÍ V NEHYBNÝCH POZICÍCH

WARNIÉRŮV TEORÉM

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi_i(\vec r)+(V+\overset{\text{DEFEKT}}{U})\psi_i(r)=\varepsilon_i\phi_i(r)$$ SCHR. ROVNICE

VLNOVÁ FCE KTEROU HLEDÁME V NAŠEM PORUŠENÉM SYSTÉMU
KLIDOVÁ HM. ē

POZOROVÁNÍ: – BEZ U ⇒ ŘEŠENÍM JSOU BLOCHOVY FUNKCE
– PŘEDPOKLÁDÁME, ŽE U JE BODOVÁ PORUCHA A ŽE SE MĚNÍ POMALU
– ROVNICE NEMÁ TRANSLAČNÍ INVARIANCI

ZAVEDEME WARNIEROVU FCI

$$\boxed{\varphi(\vec r-\vec a_n)=\frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec k}^{\text{V 1. BRIL. ZONĚ}} e^{-i\vec k\cdot\vec a_n}\psi_{\vec k}(\vec r)}$$

NORMOVACÍ KONSTANTA $N=G^3$

BLOCHOVA VLNA $\psi_{\vec k}(\vec r)=e^{i\vec k\cdot\vec r}u_{\vec k}(\vec r)$

N... POČET EL. CEL V RÁMCI JEDNÉ BORN-K. CELY

$$\boxed{\varphi(\bar r-\bar a_{\bar n}) = \frac{1}{\sqrt N}\sum_{\bar k} e^{-i\bar k\cdot\bar a_{\bar n}}\,\psi_{\bar k}(\bar r)}$$

→ ROVINNÁ VLNA

$\psi_k(\bar r) = e^{i\bar k\cdot\bar r}\,u_{\bar k}(\bar r)$ BLOCH. FCE V ID. KRYSTALU PRO 1 PÁS

POZOR

- PRACUJEME S 1 PÁSEM
- KAŽDÝ PÁS MÁ VLASTNÍ W. FCI; VAL. ZUČÁST, VODIV. ZUČÁST

$$\varphi(\bar r-\bar a_{\bar n}) = \frac{1}{\sqrt N}\sum_k e^{-i\bar k\cdot\bar a_{\bar n}}\, e^{ik\cdot\bar r}\,u_k(r) = \frac{1}{\sqrt N}\sum_k e^{i\bar k\cdot(r-a_n)}\,u_{\bar k}(r)$$

- BEZ $u_{\bar k}$ BY DÁVALO DELTA FUNKCI V a_n !

W. FCE JE ORTONORMÁLNÍ

ORTONORMALITA W FCÍ – KDYŽ a_n a a_m → DOSTANU $\delta_{n,m}$

$$\int \varphi^*(r-a_n)\,\varphi(r-a_m)\,d\tau$$

→ INT. PŘES B-K. CELU

$$= \frac1N\sum_{k,k'} e^{i(\bar k\cdot\bar a_{\bar n}-\bar k'\cdot\bar a_m)}\underbrace{\int \psi^*_{\bar k}(r)\,\psi_{\bar k'}(\bar r)\,d\tau}_{\delta_{k,k'}}$$

FÁZ. FAKTOR

+ VÍME, ŽE BLOCHOVY FCE JSOU ORTONORM.

⇒ V $\sum$ MŮŽEME $\forall$ k' PŘEPS. NA k — PROTOŽE KDYBY $k\neq k'$ ⇒ $\delta=0$

$$= \frac1N\sum_k e^{ik\cdot(a_n-a_m)}$$

IF $n=m$ ⇒ $e^{ik(\;)}=1$ A SČÍTÁME PŘES $\forall$ CELY ⇒ $\sum = N$, $= \frac{N}{N} = 1$

IF $n\neq m$ ⇒ $e^{ik(\;)}$ = PERIOD. FCE $= \frac{0}{N} = 0$

$$\Rightarrow\quad f(\quad) = \delta_{n,m}$$

TEDY W FCE JSOU ORTONORMÁLNÍ

$\psi_{\bar k}(\bar r) = \frac{1}{\sqrt N}\sum_{\bar n} e^{i\bar k\cdot\bar a_{\bar n}}\,\varphi(\bar r-\bar a_{\bar n})$ ZPĚTNÁ TRANSFORMACE

BLOCHOVA FCE — Z W. FCE → BLOCHOVA

⇒ JELIKOŽ BLOCHOVY FCE TVOŘÍ ÚPLNÝ SYST. ⇒ W FCE TAKY

FCE $\phi_i(r)$ Z Š.R. MŮŽEME HLEDAT JAKO LIN. KOMB. $\varphi_i(\bar r)$

$$\boxed{\phi_i(\bar r) = \sum_{\bar n} f_i(\bar a_{\bar n})\,\varphi(\bar r-\bar a_{\bar n})}$$

→ ROZVOJ. KOEFICIENT

→ CELOČÍS. VEKTOR n, LOKALIZOVANÝ NA JEDN. BODECH

→ BUDEME POČÍTAT $\boxed{\langle\varphi_{\bar n}|\hat H-\varepsilon_i|\phi\rangle = 0}$

- INDEXUJEME n, n'

$$\sum_{\bar n'} f_i(\bar a_{\bar n'})\int \varphi^*(\bar r-\bar a_{\bar n})\Big[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta}_{\mathrm{I}} + V + \underbrace{U-\varepsilon_i}_{\mathrm{II}}\Big]\varphi(\bar r-\bar a_{\bar n'})\,d\tau = 0$$

NEZÁV. NA SOUŘ. — $\hat H$ NEPORUŠ. KRYSTALU — PŘES B-K. CEL

→ HLEDÁME $f_i(\bar a_{n'})$ A VLASTNÍ ENERGII ε_i

(1) VÍME JAK $\hat H$ PŮS. NA BLOCH. FCI → PROTO W. FCI VYJÁDŘÍME JAKO BLOCH

(2) PŘEDP., ŽE U SE MĚNÍ ZVOLNA A TEDY U JE KONST. V RÁMCI LOKALIZACE W. FCE — $U=$ KONST

(I) SPOČTEME VÝRAZ PRO $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$

VYUŽIJEME: W. FCE VYJÁDŘÍ POMOCÍ BLOCH. VLN (JAKO U DŮK. ORTOGON.)

$$0 = \frac1N\sum_{n'} f_i(\bar a_{\bar n'})\sum_{k,k'} e^{i(\bar k\cdot\bar a_n-\bar k'\cdot\bar a_{\bar n'})}\underbrace{\int\psi^*(\bar k)\underbrace{\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Big]}_{H_0}\psi(k')\,d\tau}_{\varepsilon(k')\,\delta_{kk'}}$$

$$0 = \frac1N\sum_{n'} f_i(\bar a_{\bar n'})\sum_k e^{i\bar k\cdot(\bar a_{\bar n}-\bar a_{\bar n'})}\underbrace{\varepsilon(k')\,\delta_{kk'}}_{\varepsilon_k}$$

NEPORUŠENÁ FCE – UDRŽENA PÁS. STRUKTURA DÍKY $\varepsilon(k')$ PRO DANOU BLOCH. FCI ⇒ OPĚT $k=k'$

TRIK:
- NAŠE ROVNICE NELOKÁLNÍ V PROSTORU
- SČÍTÁME PŘES n, n' – OBĚŽÍ CELÝM KRYSTALEM
- VĚTŠINA ε JE DALEKO OD DEFEKTU

(1) – HLEDÁME FCE VÝZNAMNÉ OVLIV. DEFEKTEM – LOKALIZ. HLAVNĚ NA DEFEKTU

⇒ $f_i(\;)$ BUDE TEDY VÝZNAMNÁ JEDNOM V BLÍZK. DEFEKTU

(2) SUBS: $\bar m = \bar n - \bar n'$

$$0 = \frac1N\sum_m f_i(\bar a_{\bar n}-\bar a_{\bar m})\sum_k e^{i\bar k\cdot\bar a_{\bar m}}\,\varepsilon_k$$

③ **POSUNOVACÍ OPERÁTOR**
– NA „HEZKOU FCI"

↓ ALE JEN FCE x; MÁ $\forall$ DER. SPOJITÉ, ...

$$f(x-y) = e^{-y\frac{\partial}{\partial x}} f(x)$$

$$e^{-y\left(\frac{\partial}{\partial x_1}+\frac{\partial}{\partial x_2}+\frac{\partial}{\partial x_3}\right)} \quad \text{v 3D}$$

– MÁM fci x A CHCI VIDĚT JAK VYPADÁ V BODĚ $x-y$

ALA TAYLOR. ROZVOJ

④ PŘEDPOKLÁDÁME, ŽE U SE MĚNÍ POMALU
⇒ I FCE ROZVOJ. KOEF SE MĚNÍ POMALU

$f(\bar a_{\bar n} - \bar a_{\bar m})$ MĚNÍ SE POMALU A MŮŽEME PROPOJIT MEZI CELAMI ≈ KVAZISPOJITÁ

OBECNOVÁ FUNKCE

DŮL. PŘEDPOKLAD W. TEORÉMU
– MŮŽU NAHRADIT PROST. FCÍ SOUŘADNIC

$$f_i(\bar a_{\bar n} - \bar a_{\bar m}) = e^{\overbrace{-a_{\bar m}}^{\text{POSUNUTÍ}}\cdot\overbrace{\nabla_{a_{\bar n}}}^{\text{DERIV}}} f_i(a_n)$$

JE 3D. PROTO SKAL. SOUČIN

NELOKÁLNÍ PROBLÉM ODSTRANĚN!
↓
ZBAVILI JSME SE NELOKALITY

$$\Rightarrow \; O = \frac{1}{N}\sum_m e^{-a_{\bar m}\cdot\nabla_{a_n}} f_i(a_n) \sum_k e^{i\bar k\cdot\bar a_{\bar m}} \varepsilon_k$$

II SPOČTEME VÝRAZ PRO $U-\varepsilon_i$

PŘEDPOKLAD: – U SE MĚNÍ POMALU ; $U=\text{KONST}$
– VYUŽITÍ ORTOGONALITY

$$\int \varphi^*(U-\varepsilon_i)\varphi = \delta_{nn'}$$

$+\sum_{n,n'}$ VYUŽITÍ

$$\text{II} = f_i(\bar a_{\bar n})\left(U(\bar a_{\bar n}) - \varepsilon_i\right)$$

$$\text{I} + \text{II} = \Big[\underbrace{\frac{1}{N}\sum_{\bar m,\bar k} \varepsilon_k e^{i\bar a_{\bar m}\cdot(\bar k - \frac{1}{i}\nabla_{\bar a_{\bar n}})}}_{\varepsilon(-i\nabla)} + U(\bar a_{\bar n}) - \varepsilon_i\Big] f_i(\bar a_{\bar n}) = 0$$

ALE MY MÁME I PŘES a_n : $f_i(a_n)$ DÁVÁ DOHROMADY → VÝRAZ

POZOROVÁNÍ: – FCE JE LOKÁLNÍ

MEZIKROK

$\oslash = \varepsilon(-i\nabla)$ — LZE PŘEPSAT

– ROZMĚROVÉ SOUHLASÍ $\quad [k] = \frac{1}{m} \quad [-i\nabla_r] = m$
– MÍSTO $\bar k \to -i\nabla_r$

– NAMÍSTO $\bar a_{\bar n} \to \bar r$; – JE TOTIŽ JEDNO, KDE JE POČÁTEK
– ∇ MŮŽ. JAK NA PROSTOR a_n TAK PROST. SOUŘ. $\bar r$ → JE TO JEDNO

DŮKAZ MEZIKROKU: – POKUD $\varepsilon(-i\nabla) = \oslash$, TAK POKUD PŮS. NA NĚJAKOU FCI TAK MUSÍME DOSTAT STEJNÝ VÝSL.

– APLIKUJEME NA ROVINNÉ VLNY

VZORKOVÁ FCE $\quad g = e^{i\bar q\cdot\bar r}$

$$\varepsilon(-i\nabla): \quad -i\nabla\cdot e^{i\bar q\cdot\bar r} = \underbrace{-i\cdot i\bar q}_{q}\, e^{iq\cdot r}$$

$$= \varepsilon(q)$$

$$\varepsilon\left[\frac{1}{N}\sum_{m} \varepsilon(k)\, e^{i\bar a_m\cdot(\bar k - \frac{1}{i}\nabla_{\bar a_{\bar n}})}\right] : \frac{1}{N}\sum_{\bar m,\bar k}\varepsilon(k)\, e^{i\bar a_m\cdot(\bar k - q)} \Rightarrow \text{OPĚT DOSTANU } \delta_{k,q}$$

⇒ JEDINÝ NENULOVÝ SČÍTANEC q A N SE VYKRÁTÍ S DELTA FCÍ (VIZ ORTOGON.)

$$= \varepsilon(q)$$

⇒ OPERÁTORY JSOU IDENTICKÉ

⇒ W. FCE

$$\boxed{\left[\underbrace{\varepsilon(-i\nabla)}_{\text{PÁSOVÁ STRUKTURA}} + \underbrace{U(\bar r)}_{\text{PORUCHOVÝ POTENCIÁL OD PORUCHY}}\right] f_i(\bar r) = \varepsilon_i f_i(\bar r)}$$

– STACION. – STEJNÉ JAKO STAC. S. R.

\# PRO PARABOLICKOU STRUKTURU

$$\varepsilon(-i\nabla): \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \to -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = \frac{+(i)^2\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\nabla$$

$k \to -i\nabla$

– DOSTANU Z TOHO KIN. ENERGII!
– TEDY PRO KRYSTAL BEZ DEFEKTU → POPSÁN JAKO VOLNÉ POHYB. e^- → TEDY ROVINNÁ VLNA

- $\bar{e}$ SE POTOM TEDY ROZPTÝLOVAL

ATOM DONOR. TYPU
- OKOLO TOHO NAŠEHO KLAD. DEFEKTU U SE POTOM TEDY POHYBUJE TEN VOLNÝ e^-

BODOVÝ ⊕ NÁBOJ + VOLNÝ e^- → DOSTANU Š.R. ATOMU VODÍKU

$\mathcal{E}(-i\nabla)$ → KIN. E
$U(r)$ → COUL. INTERAKCE

→ VEZMU TEDY ROVNICI ATOMU VODÍKU A MÁME ŘEŠENÍ S MALÝMI ÚPRAVAMI:

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
↳ MÍSTO KLIDOVÉ EF. HMOTN.

$U(r)$ ... NE PERMITIVITU VAKUA ALE PERMIT. PROSTŘEDÍ

⇒ DOSTANU TAK ENERGII $\bar{e}$ U DONOR ATOMU

PŘEDNÁŠKA 10

W. ROVNICE

$$\left[\mathcal{E}(-i\nabla)+U(\bar{r})\right] f_i(\bar{r}) = \mathcal{E}_i f_i(\bar{r})$$

POUŽITÍ:

#VÝPOČET DONOROVÝCH STAVŮ
GaAs + P/Si → DONOR STAV

$U(\bar{r})$ ... JE TVOŘEN 1 PŘEBYT PROTONEM

- PŘI ↓T: $\bar{e}$ BUDE U MATEŘ. ATOMU ; PRO VYŠŠÍ T → TERMICKY SE ODPOJÍ

$\mathcal{E}(-i\nabla)$ ... ENERGIE PÁSU $\quad \mathcal{E}(k)$ ... PARABOL. $\quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \mathcal{E}(\bar{k})$
m ... EF. HMOTN.

$$\left[\begin{array}{l} \mathcal{E}(\bar{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \mathcal{E}(-i\nabla) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \end{array}\right.$$

$$U(\bar{r}) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r|\bar{r}|}$$
↳ JE TO V MATERIÁLU

⇒ STEJNÁ JAKO POT. E U ATOMU VODÍKU AŽ NA ε_r

→ ŘEŠENÍ BUDE STEJNÉ JAKO ATOM VODÍKU SE ZMĚNOU m, ε_r

Z WIKI: ATOM H_2 $\quad E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \quad E_1 = -13.6\ eV$

$m = m_0 m^*$
↳ EF. HMOTN.
m^* ... PŘEVODNÍ KOEFICIENT

$E_0 \sim \frac{m}{\varepsilon^2} \qquad E_0 = -1R_y \cdot \frac{m^*}{(\varepsilon_r)^2} = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar}\cdot\frac{m^*}{(\varepsilon_r)} =$

TÍMTO ČLENEM TO POUZE MODIFIKUJ

$= -13.6\cdot 10^{-3}\ eV$

Z PRAXE:
- TYPICKÁ $m_{EF} = 0.1\, m_0$
  $m^* \approx 0.1$ ↳ POUZE ŘÁDOVĚ
- $\varepsilon_r \approx 10$

$\frac{0.1}{100} = 0.001 = 10^{-3}$

- VAZEBNÍ ENERGIE ELEKTR NA DONORU $\approx -13.6\cdot 10^{-3}\,eV \approx$ 13 meV
- POROVNÁNÍ S TEPL. KMITY
  $k_B T = 25\ meV$

⇒ ELEKTRON SE TEDY NA DONORU MOC NEDRŽÍ

BOHRŮV POLOMĚR $\quad a_B \quad a_0^* = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m e^2}$
REDUK. BOHR. POLOM.

STEJNĚ JAKO NAHOŘE

$a_B^* = a_0^* \cdot \frac{\varepsilon_r}{m^*} = a_0^* \cdot 100 \approx 0.5 \cdot 100$
$\approx 5\ nm$

$a_B \sim \frac{\varepsilon}{m}$

U VODÍKU ca 0.5 Å

- ÚROVEŇ LOKALIZACE $\bar{e}$ NA PROTONU
- MŘÍŽK. KONST JE TYPICKY NĚKOLIK nm

⇒ RYCHLOST ZMĚNY ; VLN. FCE SE MĚNÍ ŽE KLESNE NA $\frac{1}{e}$ NA NĚKOLIKA nm ; TROCHU V ROZPORU S PŘEDP. POMALU SE MĚNÍCÍHO U ; JE TO HRANIČNÍ

#AKCEPTOROVÝ STAV
- NE TOLIK PŘÍJEMNÉ

① TĚŽKÉ DÍRY MAJÍ VYŠŠÍ m_{EF} (AŽ 1)
- ČÍM JE STAV HLUBŠÍ, TÍM JE STAV LOKALIZOVANĚJŠÍ

POTOM BOHR. POLOMĚR JE SROVNATELNÝ S MŘÍŽK. KONSTANTOU
⇒ U SE TEDY MĚNÍ RYCHLE
⇒ PROBLÉM S ORTONORMALITOU

PROTO PRO VALENČNÍ PÁS PROBLÉM ⇒ POUŽÍVAJÍ SE JINÉ MODELY

② VRCHOL VAL. PÁSU JE DEGENEROVANÝ (LEŽÍ KDY)
- LEHKÉ / TĚŽKÉ DÍRY
- A MY DEFIN. W FUNKCE PRO KAŽDÝ ZVLÁŠŤ

- MUSELI BYCHOM DEFINOVAT 2 POZPÍC. ÚLOHY
  A MĚLI BYCHOM PŘEKRYVOVÉ ČLENY
  ↓ BUDOU SPOLU W FCE INTERAGOVAT

KVANTOVÉ STRUKTURY (VIZ. CVIČENÍ)

- I U KVANT. JAM APLIKUJEME STEJNĚ > „OKRAJOVÝM ČLENEM"

JINÉ PÁSY

- OBDOBNĚ JAKO PARABOLA, ALE ZNAČNĚ SLOŽITĚJŠÍ

Si, Ge … NEPŘÍMÉ PŘECHODY; $\bar{k}$ MÁ MINIMUM MIMO POČÁTEK → POMOCÍ SOUŘ. COŽ NENÍ PROBLÉM, ALE MUSÍM UVAŽOVAT RŮZNÉ m_{ef} V ZÁV. NA SMĚRU

↓ JINÝ PROBLÉM: MAJÍ VÍC MINIM, e^- SE TAM MŮŽE ROZPTYLOVAT

MAG POLE - LZE POUŽÍT

$\bar{p} \to \bar{p} - e\bar{A}$ $\bar{A}$ … VEKT. POTENCIÁL

- PŘEVODU V HYBNOSTI
- VLOŽÍM DO W ROVNICE

$$p = \hbar k \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$-i\nabla \to -\frac{e\bar{A}}{\hbar}$$

$$\to \frac{p}{\hbar} \to \frac{p}{\hbar} - \frac{e\bar{A}}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e\bar{A}}{\hbar}$$

↓ VEDE NA LANDAUOVY HLADINY

VIZ. CVIČENÍ

→ W FCE:

- ŘEŠENÍ PŘÍMĚSOVÝCH STAVŮ RŮZ. PŮVODU
- HLAVNĚ <u>MĚLKÝCH</u> STAVŮ

POPIS PORUŠENÝCH STAVŮ

- W. ROVNICE: POMALÁ ZMĚNA $U(\bar{r})$
- NYNÍ: RYCHLÁ ZMĚNA $U(\bar{r})$, LOKALIZOVÁN V OBLASTI 1 EL. BUŇKY ↗ < 1nm

PŘEDPOKLADY:

- SILNĚ LOKALIZOVANÝ DEFEKT (NĚKOLIK Å)
- RYCHLÁ ZMĚNA $U(r)$
- KOMPLIKOVANĚJŠÍ VÝPOČTY
- BUDEME HLEDAT PŘÍMÝM ROZVOJEM DO BLOCHOVÝCH VLN

$$\phi_i(\bar{r}) = \sum_{\bar{k}'} \underbrace{f_i(\bar{k}')}_{\text{ROZVOJ. FCE}} \psi_{\bar{k}'}(\bar{r}) \approx \sum_{\bar{k}'} f_i(\bar{k}')\, e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} u_{\bar{k}}(r)$$

$$(H_0 + U)\,\phi_i(\bar{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\bar{r})$$

↑ NEPORUŠ. HAMILT. + ↑ PORUCHA

POSTUP: ① ZLEVA VYNÁS. ψ^* A ZINTEGR. $\langle \psi_k | H_0 + U | \phi_i \rangle$

$$\int \psi_{\bar{k}}^*(\bar{r})\,(H_0 + U)\,\phi_i(\bar{r})\,d\tau = \varepsilon_i \int \psi_{\bar{k}}^*(\bar{r})\,\phi_i(\bar{r})$$

→ HLEDÁM ε_i; f_i

② DOSADÍM ZA ψ, ϕ

ČLEN S H_0; $\psi_{\bar{k}}^*(r)\, H_0\, \psi_{k'}(r)$ → ORTOGONÁLNÍ A ZŮSTANE ZE SUMACE OPĚT JEN $k' = k$

$$\varepsilon(\bar{k})\, f_i(\bar{k})$$

ČLEN S U; Σ NEZMIZÍ → U JE OBECNĚ LIBOVOLNÝ

$$\sum_{\bar{k}'} f_i(\bar{k}') \int \psi_{\bar{k}}^*(\bar{r})\, U\, \psi_{\bar{k}'}(r)\, d\tau$$

PRAVÁ - OPĚT ZŮSTANE PRO k

$$\varepsilon_i\, f_i(\bar{k})$$

TEDY:

$$\underbrace{\varepsilon(\bar{k})\, f_i(\bar{k})}_{\text{ZNÁME PÁS. STR. NEPOR}} + \underbrace{\sum_{\bar{k}'} f_i(\bar{k}') \int \psi_{\bar{k}}^*(\bar{r})\, U\, \psi_{\bar{k}'}(r)\, d\tau}_{\text{PROBLEMAT. ČLEN VÁŽE OBÁLK. FCI V } \bar{k} \text{ S OBÁLK. FCÍ V OST. BODECH } k'} = \underbrace{\varepsilon_i f_i(\bar{k})}_{\text{ZNÁME}}$$

TRIK 1: - $U(r)$ SE MĚNÍ RYCHLE A NENULOVÉ V MALÉ OBLASTI
- PŘEDP. ŽE 1 DEFEKT A UMÍSTÍM DO POČÁTKU

BLOCH: $\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, u_k(r)$

→ PRO e^- S NIŽŠÍ E SE MĚNÍ POMALU (S MALOU E A I MALÉ k)
- RYCHLE KMITÁ JEN u_k
- NA TOM MALÉM PROSTORU → $e^{(\ )}$ SE TÉMĚŘ NEMĚNÍ
+ VYSOKÁ LOKALIZOVATELNOST ⇒
+ JSEM POLOŽIL U DO POČ. ⇒ $r=0 \Rightarrow e^0 = 1$

NAHRADÍM

$\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = u_{\bar{k}}(\bar{r})$

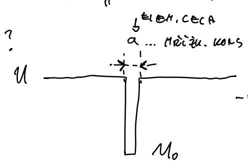
TRIK 2 ZANEDBÁME U JAKO FCI $\bar{k}$ (DÍKY LOKALIZ.)

→ $U(\bar{r})$

⇒ $\int (\quad)$ BUDE NA $\bar{k}$ NEZÁVISLÝ

→ ZOVUDE JAKO NĚJAKÁ „EFEKTIVNÍ" HODNOTA

OZNAČÍM $\frac{U_0}{N}$ PROČ?



U_0 ... STŘ. HODN. POTENC. V RÁMCI 1 EL. CELY
N ... POČET EL. CEL $\qquad N = G^3$ (BORN-K. PODM)

PROTOŽE B. FCE JSOU NORMOVANÉ

TRIK 3

$$\varepsilon(\bar{k})\, f_i(\bar{k}) + \sum_{\bar{k}'} f_i(\bar{k}') \overbrace{\underbrace{\int \psi_{\bar{k}}^*(\bar{r})\, U\, \psi_{\bar{k}'}(r)\, d\tau}_{\frac{U_0}{N}}}^{A} = \varepsilon_i f_i(\bar{k})$$

$$\boxed{f_i(\bar{k}) = \frac{A}{\varepsilon_i - \varepsilon(\bar{k})}}$$

K ČEMU JE TO DOBRÉ?

⇒ DOSADÍM $f_i(\bar{k})$

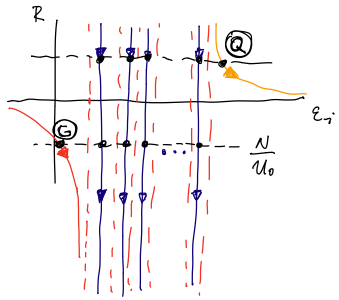
$$A = \sum_{k'} f_i(\bar{k}') \int \psi_k^*(r)\, U\, \psi_{k'}(r)\, d\tau = \sum \frac{A}{\varepsilon_i - \varepsilon(\bar{k})} \frac{U_0}{N}$$

$$\Rightarrow A = \sum_{k'} \frac{A}{\varepsilon_i - \varepsilon(k')} \frac{U_0}{N} \qquad A \neq 0$$

$$R(\varepsilon_i) = \frac{N}{U_0} = \sum \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon(k')}$$

RESOLVENTA (GREENOVA VĚTA/FCE)

→ NEBUDEME ŘEŠIT ANALYTICKY → ALE GRAFICKY



1 JSEM POD ENERGIÍ PÁSU
$\varepsilon(\bar{k}') > \varepsilon_i$
$\varepsilon_i - \varepsilon(\bar{k}') < 0$

2 ε_i ROSTE A BLÍŽÍM SE K SINGULARITĚ (DOSÁHNU NEJNIŽŠÍ HODNOTY V PÁSU)

3 NEPATRNĚ ZVĚTŠÍM → VYSKOČÍ DO ∞
$\varepsilon_i - \varepsilon(\bar{k}') > 0$ ALE HODNĚ MALÉ
A

4 ALE HNED ZASE NARAZÍME NA DALŠÍ STAV → DALŠÍ SINGULARITA A JDU DO $-\infty$

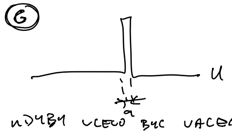
OPAKUJE SE, AŽ DO $N = G^3$ (POČET STAVŮ
⇓
TOLIK PŘÍMEK

5 BLÍŽÍM SE HORNÍ HRANĚ
$\varepsilon_i > \varepsilon(\bar{k}')$
$\varepsilon_i - \varepsilon(k') > 0$
→ POSLEDNÍ STAV

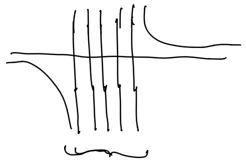
ZÁVĚRY?
- PRŮSEČÍKY $\frac{N}{U_0}$ S || OR ⌒ ‿ JSOU ŘEŠENÍ
- VĚTŠINA ŘEŠ. JE UVNITŘ PÁSU
VYJMA G → TO JE TEN NÁŠ LOKALIZOVANÝ STAV KDE SE ZACHYTÍ NÁŠ e^-
→ LEŽÍ POD HRANOU PÁSU
- HYPERBOLU TVOŘÍ VELKÝ POČET SČÍTANCŮ $\varepsilon(\bar{k}')$
- PŘISPÍVAJÍ ∀ SČÍTANCE → JE JICH N

JAKO DONOROVÉ POD HRANOU
- MÁM HODNĚ LOKAL. STAV V PŘÍM. PROST. ⇒ POTŘ. HODNĚ STAVŮ Z NEPŘÍMÉHO

⇒ MŮŽEME TAK HRUBĚ ODHADNOUT PŘÍSL. ENERGII
- POKUD MÁME PŘITAŽLIVÝ POTENCIÁL G
→ KDYŽ MÁM ODPUDIVÝ?
- ∃ STAV Q
- NAD PÁSEM (JAKO KDYBY VLEVO BYL VALENČNÍ PÁS)



- KOLIK RŮZNÝCH ŘEŠENÍ JSME NALEZLI?

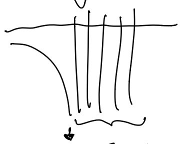


$6^3 = N$ stavů

stavů je stále stejně !

- přítomností defektu došlo k přenormování vln. fcí (přestavbě)
- systém již není periodický (díky defektu)
- nevznikne nový pás, ale jeden se odštěpí a zbytek se přeskupí !

1 defekt



$1 + 6^3 - 1$

⇒ čím více defektů, tím více stavů se odštěpí a zbytek přeuspořádá

⇒ defekt tedy stavy nepřidává !

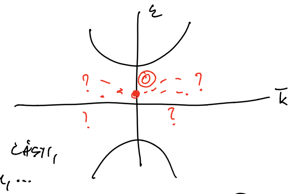
- počet stavů (celkový) je stejný (z B-K. podm)

mělký donor – stav odštěp. od vodiv. pásu

11. Přednáška

Opáčko: – poruchy v krystalu – porucha transl. symetrie
- defekty energeticky výrazně vzdálené od pásu
  - → hluboké
- donor/akceptor (subs. atom)
  - → obvykle tvoří mělké stavy – (W teorém)
    - delokalizován v širokém okolí (jednotky nm)
    - energie málo liší od pásu

- Hluboké defekty
  - stále diskutabilní původ
  - tyto stavy silně lokalizován



  - pro defekty není $\bar{k}$ dobrým kvant. číslem
    - → nevíme zda je pouze u části, jaký je tvar přím. pásu, ...
  - můžeme přelést třeba do tvaru bloch. vln (zachová ortogonalitu)
    - → ale nevíme od kterého (VAL/VOD) se odvíjí
    - je pravděp. tvořen superpozicí obou

- pro ten e^- v bodě ⓪ → stav je lokaliz a můžeme si předs. jako úzkou kvant. jámu
  - ale bariéra je vzdál od dna vodiv. pásu
  - e^- nemůže tunelovat mimo defekt (+ lokal)
- stav se po obsazení elektronem zatéž posune v důsledku deformace okolí právě tím lokaliz. e^-

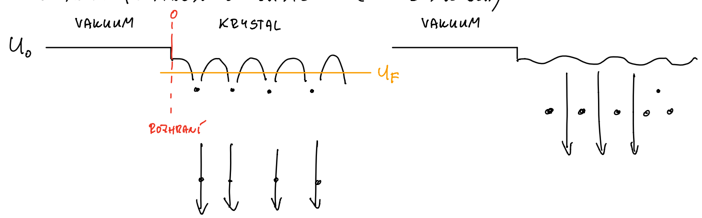
! $\boxed{\text{⇒ z termálních měření proto dostaneme jinou E defektu než z optických}}$

Koncentrace defektů

- mělké příměsi → ladím při přípravě
- hluboké
  - nežádoucí; silně rekombinující
  - rekombinační centra → snižují dobu lifetime
  - pravděp přímé mezipás. rekombinace → nízká

POVRCH

- PERIODICITA PROSTŘEDÍ JE ČÁSTEČNÁ (VE 2 SMĚRECH)



$U_F < U_0$: BĚŽNÁ SITUACE
$U_0 > U_F$: KRYSTAL BY BYL NESTABILNÍ; ELEKTRONY BY ODCHÁZELY

TAMMOVA TEORIE:

- DOPLŇUJE POVRCH
- IDENTIFIKUJEME NOVÉ TYPY STAVŮ SPOJENÉ S TÍMTO PŘECHODEM

BLOCHOVA VLNA → VYTVOŘÍM STOJATOU VLNU ; KOLMOU NA ROZHRANÍ

$\bar{k}$, $-\bar{k}'$ $\qquad \bar{k} = -\bar{k}'$

- VZNIKNOU NOVÉ STAVY LOKALIZOVANÉ POUZE V ROZHRANÍ
- JE JICH E JE NIŽŠÍ NEŽ U_0 A JE TLUMEN SMĚREM DO KRYSTALU

$e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$ A VLN. VEKTOR BUDE $\in \mathbb{C}$ $\quad \bar{k} = \bar{k}' + i\bar{k}''$

IF $k'' > 0$ → DOSTANU TLUMENÝ PŘÍSPĚVEK

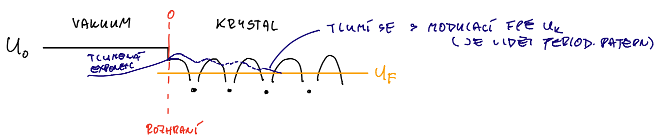
⇒ PRO ∞ KRYSTAL BY NEŠLO (NESPLNILI BYCHOM KVANT. PODM.)

- JEN DÍKY NESPOJITOSTI → SEŠÍVACÍ PODM.

STAVY POPSÁNY KOMPLEXNÍM VLNOVÝM VEKTOREM

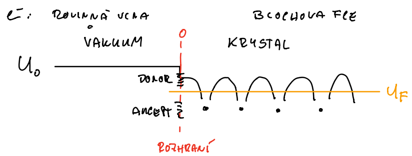
⇒ **TAMMOVY STAVY**

- LOKALIZOVANÝ NA ROZHRANÍ NA POVRŠÍCH POLOVODIČŮ



- TAMMOVY STAVY OBTÍŽNĚ DETEKOVATELNÉ
- SAMY OKRAJOVÉ ATOMY NEMAJÍ VAZEB. SOUSEDA → ALE JSOU ↑ REAKTIVNÍ
  - ↳ POVRCHOVÁ PERIODICITA JE 4 NARUŠENA
- NAVÍC POVRCH ABSORBUJE VOLNÉ ATOMY → * NOVÝCH VAZEB

- * NOVÝCH STAVŮ NA ROZHRANÍ AKCEPTOR/DONOR → VEDE ROZLIŠIT



POZNÁMKA:

- U TĚMĚŘ VOL. ē: SPLNĚNÍ DIFR. PODM. ; DEFINICE OKRAJE 1. BZ

$$\bar{b}_g \cdot (\pi \bar{b}_g + \bar{k}) \approx 0$$

- INTERAKCE ē S PEVNOU LÁTKOU → ē NASTŘELÍM (EL. MIKROSKOP)
- ē VE VAKUU: ē POPSÁN ROVINNOU VLNOU $\xrightarrow{\text{TRANSFORMUJE SE}}$ DO FCÍ REPREZ. KRYSTAL
  - ↳ PŘEPÍŠU DO SUPERPOZICE BLOCH. VLN
    - TY MAJÍ RŮZNÉ VLAST. (JINÁ E, JINÁ RYCHLOST)
- ē PROCHÁZÍ MATERIÁLEM A POSTUPNĚ HO POPISUJÍ RŮZNÉ BLOCHOVY VLNY
  ⇒ SUPERPOZICE (SADA PŘÍSPĚVKŮ) NA VÝSTUPU

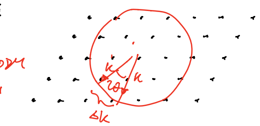
ē RYCHLE ZTRÁCÍ ENERGII PO VSTUPU DO KRYSTALU
- MNOHO RŮZNÝCH MECHANISMŮ

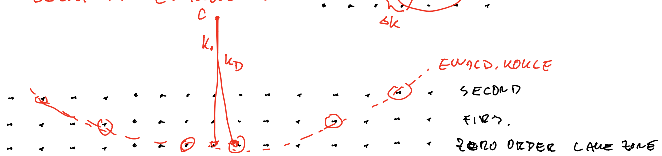
$$\bar{b}_g \cdot \underbrace{(\pi \bar{b}_g + \bar{k})} \approx 0$$

PRO SPLNĚNÍ $\pi \bar{b}_g + \bar{h}$ → SILNÝ DIFRAKČNÍ PÍK
ALE I OSTATNÍ MAXIMA JSOU VIDĚT DÍKY ROZPTYLU

EWALDOVA KONSTRUKCE

- SILNĚ DIFRAKTUJÍ POUZE BODY LEŽÍCÍ NA EWALDOVĚ KOULI





- v el. mikroskopu
  - e^- mají $\Uparrow E \Rightarrow$ Ew. koule $\Uparrow$ poloměr
  - difr. maxima: Ew. koule se dotýká několika difr. maxim
    - mnoho bodů
    - ta nejvyšší se nedotýká nebo dále se neprokreslí
- splníme difr. podmínku natolik přesně, že budou difr.

$\bar{e}$ po výstupu z materiálu: - superpozice Bloch. vln

STATISTIKA:

- jak se projeví stavy přím./poruchy vůči E_F
  - \# prázdné nad E_F (donory ⊕; hluboké akceptory)
    - neobsazují $\bar{e}$
  - \#
- jak spočítat polohu E_F?
  - předp: obj. krystal s defekty
  - pomocí „rovnice elektr. neutrality"
    - makrosk. krystal musí být neutrální
    - pokud máme náboje na donorech, musíme komp.

$$n + \sum_A N_A^- = p + \sum_D N_D^+$$

n ... konc. $\bar{e}$ ve vodiv. pásu; konc. ⊖ záp. nab. akceptorů

p ... konc. děr ve val. pásu; ⊕ klad. nab. donory

Dosadím energie konc.

⇓ dostaneme E_F; z E_F můžu zjistit zda p-, n-typ, obsazenost pásů

- obtížně analyticky řešitelné (díky hlubokým defektům)
- pro nedeg. n, p → Fermiho E v exp.

DEGENERAČNÍ FAKTOR

- jak popsat statistiku $\bar{e}$ obsaz. def. stavy?
- na donoru může sedět $\bar{e}$ se spinem $+\frac{1}{2}$ i $-\frac{1}{2}$

E_D ... energ. donoru; sedí $\bar{e}$ na stavu s $\pm\frac{1}{2}$
- systém s proměnným počtem částic

$$e^{-\beta(E_D - E_F)} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

energie defektu

\# není $\bar{e}$: 1

\# sedí $\bar{e}$: E_D

$$Z = 1 + \underbrace{2e^{-\beta(E_D - E_F)}}_{\text{sedí } \bar{e}}$$

není $\bar{e}$

2 spiny
- syst. 2x degen. přes spin

donor nabitý → $\bar{e}$ není $\quad Z = 1$

$$p^+ = \frac{1}{1 + 2e^{\beta(E_F - E_D)}}$$

- podobné jako Fermi-Dir.
- až na 2 → **DEGENERAČNÍ FAKTOR**
  - repr. počet stavů které na donoru existují

pravd. nabit. stavu

$1 - p^+$ = pravděp. že stav je neutr.

- $E_F \gg 0$: klesá a $p^+ \to 0$

při výpočtu záleží na zvolení nuly (většinou na dně vodiv. pásu)

→ E_D potom záporné

JAK U VALENČNÍHO PÁSU?
- lehké/těžké díry → 4x degenerovaný (2x spin + orbit. moment)

E_c

E_D

E_F

E_A

E_v

akceptory: energie E_A; 4x degener.
- mohou udělat dvě energ. hladiny hodně blízké 2x degen.
- složité
- uvažujem tedy 4x deg.
  - ve 4 konfig.

donory: 2

akceptory: 4 (někdy i 2 s uvaž. že se rozštěpí a buď splyne zpět s vodiv. nebo odvede nahoru)

$$Z = 1 + 4e^{\beta(E_A - E_F)}$$

počet neutr. nab. stavů nad val. pás.

hluboké stavy? → těžko popsatelné; složité degen. koef.

$$Z = V + W e^{\beta(E_A - E_F)}$$

blízké

– STAVY V E_g: NEJSOU NOVÉ! JSOU TO ODŠTĚPENÉ STAVY;

↓ CELK. POČET POŘÁD STEJNÝ

KVAZIČÁSTICE V PL

(HUSTOTA STAVŮ, EXCITONY, THOMAS-F. MODEL STÍNĚNÍ)

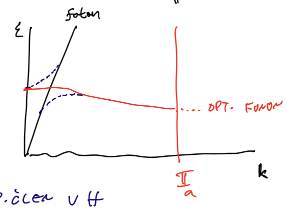
POLARITON – FONONOVÝ / EXCITONOVÝ

– KVAZIČÁST. SLOŽENÁ Z FOTONU ŠÍŘÍCÍ SE PL A „EXCITACÍ" ŠÍŘÍCÍ V PL

① FOTON PRONIKNE DO PL
↳ MÁ E ZÁV. NA $\vec{k}$

② MOHOU SE VYSKYT. KVAZIČÁST. NAPŘ. OPT. FONON

③ DOJDE K PROVÁZÁNÍ (SKRZE INTER. ČLEN V H V MODELU TÉMĚŘ VOL. e^-)



④ * SLOŽENÁ ČÁSTICE → FONONOVÝ POLARITON
– V TOM ÚZK. INTERVALU k → VELICE RYCHLÁ VÝMĚNA FOTON–FONON
NEMŮŽEME SNADNO ROZLIŠIT

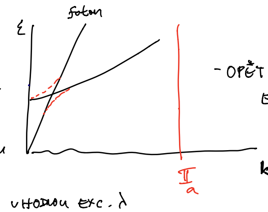
POLARITON SE ALE ŠÍŘÍ LÁTKOU ZNAČNĚ POMALEJI NEŽ SVĚTLO

* ÚZKÝ ZAKÁZANÝ PÁS → NAJDU V ABSORP. SPEKTRU

EXCITON

– ABS. FOTON: e Z VALEN. → VODIV.; * PÁR e^-–DÍRA
– ALE CO PŘÍPAD KDY JSME TĚSNĚ POD HRANOU PÁSU

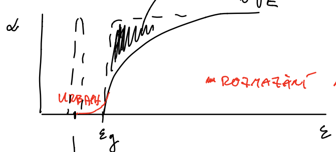
– * VÁZANÝ STAV e^-–DÍRA
– ENERGIE VAZBY PODOBNÁ JAK E VAZBY NA DONORU
– MŮŽE SE POHYBOVAT MŘÍŽKOU



– OPĚT SILNÁ ABSORPCE
EXCITONOVÝ POLARITON

MOŽNOSTI VZNIKU ① ZVOLÍM VHODNOU EXC. λ
② EXCITUJI NAD GAP → e^- SE ZRELAXUJÍ DO DNA VODIVOST. PÁSU, h^+ NA VRCHOL VALENČ. $\underbrace{}_{\text{PROVÁŽÍ SE}}$

– BĚŽNÁ VAZB. E ≈ 10 meV

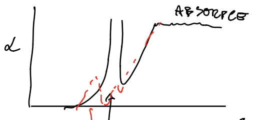


ROZMAZÁNÍ NA ROZPTYLU; URBACHOVA HRANA

$E < E_g - E_{ex}^{(0)}$

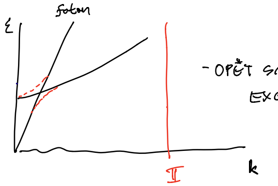
→ MÁM MOŽNOST GENEROVAT EXCITONY (POD E_g)

- NA 2 μm VZORKU



- EXCITON MŮŽE MÍT I VYŠŠÍ STAVY
  - TY SE CHYTÍ DO ABS. HRANY → RYCHLÝ NÁRŮST
  - UŽ TEDY NE $\sim\sqrt{E}$

  → PROMLOUVÁ TEDY DO ABS. NA HRANĚ PÁSU

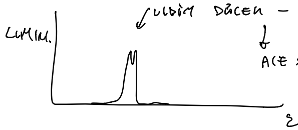


- OPĚT SILNÁ ABSORPCE
  EXCITONOVÝ-POLARITON

  ↓ TEN ALE MŮŽE BÝT VYZÁŘEN
  - A PŘÍMO NA ENERGII POLARITONU

  ↙ VIDÍM DÁLEJ — POLARITON ABS.

  ↓ ALE SLABÝ



MAGNON (330 KITTEL)

- MUSÍ BÝT V LÁTCE MAG. MOMENTY
- POLOVODIČE I KOVY
→ KVAZIČÁSTICE MAG. VLNY

TY SPOLU INTERAGUJÍ

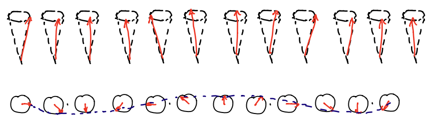
$E_1 < E_2$

$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \qquad \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$ ↙ EXCITOVANÝ 1 e^-

a

- JE VÝHODNÉ ABY MĚLI STEJNOU ORIENT.

⇒ NEMUSÍ ALE MÍT ∀ STEJNÝ SMĚR ⇒ PRECESUJÍ



- PŘES DIPOL. MOM. SE ŠÍŘÍ VLNA

ENERGIE
$$U = -2J \sum_{p=1}^{N} \bar{S}_p \cdot \bar{S}_{p+1}$$
↓ SKAL. SOUČIN

J... MATICOVÝ ELEM. INTERAKCE MEZI 2 SOUS. SPINY NA 1D ŘETÍZKU

p.. POŘAD. ČÍSLO ATOMU; ŘETÍZEK UZAVŘENÝ KRUH O N ATOMECH

+ PLATÍ B-K. PERIODICITA

→ SPINY (VEKTORY MAG. ORIENTACE)

POZN: ① ∀ SPINY STEJNÝM SMĚREM ⇒ $\boxed{U = -2JN|S|^2}$ ↙ VELIKOST ∀ STEJNÉ

NEJNIŽŠÍ ENERGIE

② JAKÁ JE ENERGIE 1. EXCIT. STAVU — 1 SPIN JE DOLU
- 2 PŘÍPADY ZMĚNÍ ZNAMÉNKO (2 SOUČINY)

$$U_1 = U_0 + 8J|S|^2$$

MÍSTO $-2J|S|^2$ BUDE $+2J|S|^2$

- JEDEN ZMIZÍ A DRUHÝ PŘIBUDE

⇒ $-4J|S|^2$

+ LEVÝ/PRAVÝ SOUSED

⇒ $-8J|S|^2$

③ HLEDÁME POHYB. ROVNICI ŠÍŘENÍ EXCITACE V ŘETÍZKU SPINŮ

DISPERSNÍ RELACE MAGNONŮ

MAG. MOMENT $\mu_p = -\mu_B g \bar{S}_p$

→ BOHRŮV MAGNETON
- PŘIBLIŽNĚ MAG. MOM. ELEKTRONU

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9{,}27 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{J \cdot T^{-1}}$$

g... G FAKTOR; CHARAKT. MAG. MOMENT Z POHLEDU S

- PŘEDPOKLAD: - MAG. POLE TVOŘENO OKOLNÍMI ČÁSTICEMI (SOUS.)

$p-1 \leftarrow p \rightarrow p+1$

- U DIPOLU KLESÁ $\frac{1}{r^3}$ → OBOJE $\frac{1}{8}$ ⇒ MŮŽEME ZANEDBAT

MAG. POLE
$$\bar{B}_p = \frac{-2J}{g\mu_B}(S_{p-1} + S_{p+1}) \quad \wedge \quad U = -\bar{\mu}_p \cdot \bar{B}$$

IF ∀ SPINY STEJNĚ OV OPAČNĚ ALE ROVNOBĚŽNĚ → OK

MY ALE PŘEDP. PRECESI → ROZORIENTACE

Z KLASICKÉ MECHANIKY
$$\boxed{\hbar \dot{S}_p = \bar{\mu}_p \times \bar{B}_p}$$

$\hbar\, dS_p/dt =$

$$\frac{d\bar{S}_p}{dt} = \left(\frac{-g\mu_B}{\hbar}\right)\bar{S}_p \times \bar{B}_p = \frac{2J}{\hbar}(\bar{S}_p \times \bar{S}_{p-1} + \bar{S}_p \times S_{p+1})$$

SPIN - ORBIT. MOMENT

KARTÉZSKÉ SOUŘ., SPINY MÍŘÍ DO z

$$\frac{dS_p^x}{dt} = \frac{2J}{\hbar}\left[S_p^y(\underbrace{S_{p-1}^z + S_{p+1}^z}_{2S}) - S_p^z(S_{p-1}^y + S_{p+1}^y)\right]$$

$\Rightarrow$ S POUŽ. CYKL. ZÁMĚNY MOHU I OSTATNÍ y, z

– VIDÍME PROVÁZANÉ SLOŽKY → TO VEDE K PRECESI

#PŘEDPOKLAD:

– KDYŽ VEKTORY PRECEDUJÍ, TAK POUZE MÁLO OD HLAVNÍHO PRŮMĚTU

$\Rightarrow$ KLESÁ S $\cos x$ $\Rightarrow$ PRŮMĚT DO z SE MĚNÍ MÁLO

$\Rightarrow$ ZA TEN S^z MOHU DOSADIT KONSTANTU A VYTKNU

$$\frac{dS_p^x}{dt} = \frac{2J|S|}{\hbar}\left[2S_p^y - S_{p-1}^y - S_{p+1}^y\right]$$

ANALOGICKY

$$\frac{dS_p^y}{dt} = \frac{2J|S|}{\hbar}\left[2S_p^x - S_{p-1}^x - S_{p+1}^x\right]$$

$$\frac{dS_p^z}{dt} = 0 \quad \text{(DÍKY NAŠÍ APROXIMACI)}$$

#DOSTALI JSME TEDY SOUST. ROVNIC

→ POUŽIJEME OBDOBNÉ JAKO U FONONŮ V ŘETÍZKU

– ŠÍŘENÍ ROVINNÉ VLNY

$$S_p^{\{x,y\}} = \{u,v\}\exp[i(pka - \omega t)]$$

u, v … KONSTANTY

a … MŘÍŽ. KONST

↓ DOSADÍM

$$\frac{dS_p^{(x)}}{dt} = \left(u\exp[i(pka-\omega t)]\right)' = u(-\omega)i\exp(\;)$$

$$\Rightarrow \quad -i\omega u\Big|_{p=0} = \frac{2J|S|}{\hbar}\left[2e^{0} - e^{-ika} - e^{ika}\right)v = \frac{4JS}{\hbar}(1-\cos ka)v$$

$$-i\omega v\Big|_{p=0} = -\frac{2J|S|}{\hbar}\left(2 - e^{-ika} - e^{ika}\right)u = -\text{''}-(1-\cos ka)u$$

$$\begin{vmatrix} i\omega & (4JS/\hbar)(1-\cos ka) \\ -(4JS/\hbar)(1-\cos ka) & i\omega \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\hbar\omega = 4JS^2(1-\cos ka)} \quad \wedge \quad \boxed{v = iu}$$

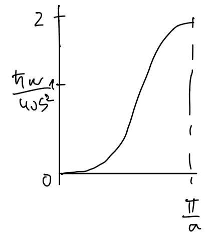
CHYBA VYUČ. – MÁ BÝT 2

#VLASTNOSTI

– SPIN PRECEDUJE

– A VLNA SE V SYSTÉMU ŠÍŘÍ S RŮZNOU FREKVENCÍ

– ENERGIE



– V POROVNÁNÍ S AKUST. FONONEM (TAM E ROSTE LINEÁRNĚ OD POČÁTKU)

– ENERGIE TU VYCHÁZÍ Z 0, ALE KVADRATICKY

– PŘI ZAVEDENÍ BORN.-KARM. PODM. $\Rightarrow$ PLATÍ PERIODICITA

– SICE KLASICKY ODVOZEN, ALE SPLŇUJE KVANTOVÁNÍ

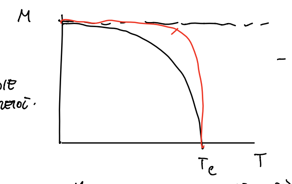
DŮSLEDKY:

– MAGNONY SE PROJEVÍ V TEPL. ZÁV. MAGNETIZACE LÁTKY

↓

$\delta u = 8J|S|^2$ … ENERGIE NA 1 PŘETOČ.

↕



– MAT. JE DO T_c FERO A PAK PARAMAG.

– FÁZ. PŘECHOD 2. DRUHU

– Z VÝPOČTU BY TAK M MĚLO KLESAT POMALU A NÁSL. RYCHLE KLESNOUT DO T_c

$\Rightarrow$ TO ALE V ROZPORU S EXP.

$$\hbar\omega = 4JS^2(1-\cos ka)$$

→ TEPRVE MAGNONY S NEJKR. VLN. DÉLKOU JSOU SCHOPNY PŘETOČIT SPIN

– MAGNONY S DELŠÍ VLN. DÉLKOU NENESOU DOST. E

– JELIKOŽ MÁME MAGNONY CO NESOU ↓E → MŮŽE JE EXCITOVAT UŽ PŘI ↓T

→ ALE MÁLO MAGNONŮ S ↑E A NATY POTŘ. ↑T

– POKLES NA POČÁTKU JE DÁN TÍM, ŽE SE ODCHYLUJÍ OD z A TÍM PORUŠUJÍ NAŠI APROXIMACI

$\Rightarrow$ M KLESÁ S T OD ZAČÁTKU

PREDN. POSLEDNÍ

PLASMONY

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \nabla E = 0$$

44:46
NOV. 20

MODEL TÉMĚŘ VOLNÝCH $\bar{e}$
- $\bar{e}$ SE POHYBUJÍ VOLNĚ; MALÝ VLIV PERIOD. POTENC.

PŘIBLÍŽENÍ SILNĚ VÁZANÝCH ELEKTRONŮ

- TÉMĚŘ VOLNÉ $\bar{e}$: DOBRÝ POPIS VALENČNÍCH $\bar{e}$; VLIV NA CHEM VAZBU, ELEKTR. VLASTNOSTI, ...
- JAKÝM ZPŮSOBEM ŘEŠIT $\bar{e}$ NA NIŽŠÍCH HLADINÁCH. VELKÝ VLIV COULOMB. POTENCIÁLU
- $\bar{e}$ LOKALIZOVÁN MNOHEM BLÍŽE ATOMU V PEVNÉ LÁTCE

- $\bar{e}$ LOKALIZOVÁN U ATOMU → ZAČNU U ATOMU

IZOLOVANÝ ATOM

$\bar{e}$ V ATOMU; ATOMOVÝ POTENCIÁL; V TOM JE ZAHRNUTA I INTERAKCE S OSTATNÍMI $\bar{e}$ V ATOMU

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_0(\bar{r}) + U(\bar{r})\,\psi_0(r) = \mathcal{E}_0\psi_0$$

- IZOLOVANÉ ATOMY → MAJÍ STEJNOU ENERGII $\mathcal{E}_0$
- KE KAŽDÉMU ATOMU PŘÍSLUŠÍ $\bar{e}$ KTERÝ JE U NĚJ LOKALIZOVÁN
- PRO ZJEDNODUŠENÍ UMISŤUJI DO POČ. SOUŘADNIC ⇒ $U(\bar{r})$ JE SYMETRICKÉ OKOLO POČÁTKU

SPLN. PERIOD. PODM n-TÝ ATOM
$U(\bar{r}-\bar{a}_{\bar{n}})$ → PRO TRANSLACI ROVNICE STEJNÁ; JEN $U(\bar{r}) \to U(\bar{r}-\bar{a}_{\bar{n}})$, $\psi(r) \to \psi(\bar{r}-\bar{a}_{\bar{n}})$
→ SADA VLASTNÍCH ENERGIÍ STEJNÁ

- BORN-KARM. PERIODICITA
N... POČET ATOMŮ $N=G^3$

PRO PERIODICKÝ KRYSTAL
- $\psi(\bar{r})$ MUSÍ SPLŇOVAT PERIOD. PODM
- POTENCIÁL ATOMU MÁ VELKÝ PŘÍSP. NA VLASTN. $\bar{e}$ A MALÝ NA OSTATNÍ

$$\psi(\bar{r}) = \sum_{\bar{n}} c_{\bar{n}}\,\psi_0(\bar{r}-\bar{a}_{\bar{n}})$$

ZDE ZATÍM NEMÁM KVANT. ČÍSLO

ABYCH DOSTAL VLN. FCI VE TVARU BLOCH TEORÉMU MUSÍ $c_{\bar{n}}$ JE ROVINNÁ VLNA $e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_{\bar{n}}} = c_n$

TÍMTO DOSTANU DO ROVNICE $\bar{k}$

$$\psi(\bar{k}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\underbrace{\sum_{\bar{n}} e^{i\bar{k}\cdot(\bar{a}_{\bar{n}}-\bar{r})}\psi_0(\bar{r}-\bar{a}_{\bar{n}})}_{u_{\bar{k}}(\bar{r})\ \dots\ \text{PERIOD. FCE S PERIODOU } \bar{a}_{\bar{n}}}$$

$\bar{r} = r' + \bar{a}_{\bar{n}}$

- POŽERE SE; POTŘEBUJI KVŮLI SPRÁVNÉMU TVARU

⇒ MÁME NYNÍ TEDY VLNOVÉ FCE
→ HLEDÁME: ① TVAR VLNOVÉ FCE
② VLASTNÍ ENERGIE HAMILTONIÁNU

$$\mathcal{E}_k = \frac{\langle\psi_k|H|\psi_k\rangle}{\langle\psi_k|\psi_k\rangle}$$

→ BUDEME PARAMETRIZOVAT
HLEDAT E ZÁKL. STAVU

MÁME
$H_0 = T + U(\bar{r})$ ATOMOVÝ — LOKAL. V OKOLÍ POČÁTKU
$H = T + V(\bar{r})$ CELOKRYSTALOVÝ — PERIODICKÝ POTENC.

POUZE PŘIBLIŽNĚ
$$V \doteq \sum_{\bar{n}} U(\bar{e}_n)$$
ATOMOVÉ POTENCIÁLY JEDNOTL. ATOMŮ
→ DELOK. POTENCIÁL PERIODICKÝ V CELÉM KRYSTALU

- ZAVEDEME POMOCNÝ VEKTOR $\bar{e}_{\bar{n}} = \bar{r} - \bar{a}_{\bar{n}}$ (ABYCHOM NEPŘEPISOVALI)

① ŘEŠÍME $\dfrac{\langle\psi_k|\hat{H}|\psi_k\rangle}{\langle\psi_k|\psi_k\rangle}$ → $\hat{H}$ PŮS NA ψ_k POTÉ ZLEVA ψ_k A ZINTEGRUJEME

$$\psi = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\sum_{\bar{n}} e^{i\bar{k}\cdot(\bar{r}-\bar{a}_{\bar{n}})}\psi_0(\bar{r}-\bar{a}_{\bar{n}})$$

② BLOCHOVA

$$H\psi = T\psi + e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\sum_{\bar{n}}\Big\{\big[V(\bar{r}) - \underbrace{U(\bar{e}_n)}_{\text{VZNOSNÁ NULA}}\big]e^{i\bar{k}\cdot\bar{e}_n}\psi_0(\bar{e}_n) + U(\bar{e}_n)e^{i\bar{k}\cdot\bar{e}_n}\psi_0(\bar{e}_n)\Big\}$$

T SPOL. S

DÁVÁ NEPORUŠENÝ HAMILTONIÁN

$$T\psi + \sum_{\bar{n}} U(\bar{e}_n)e^{i\bar{k}\cdot\bar{e}_n}\psi_0(\bar{e}_n)$$

⇒ VHODNÉ DOPLNĚNÍ VZNOSNÉ NULY NÁM TAK ZJEDNODUŠÍ PRÁCI U TÉ KIN. ENERGIE

TOTO ψ JE OPĚT
- TA KIN. ENER PŮS. POUZE NA ψ_0
- 4 DÁM PŘÍSL. SČÍTANCE DOHROMADY

TÍM

$$= \mathcal{E}_0\sum_{\bar{n}}\underbrace{e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_{\bar{n}}}}_{c_{\bar{n}}}\psi_0(\underbrace{r-\bar{a}_{\bar{n}}}_{\bar{e}_n}) + e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\sum_n\big[V(\bar{r}) - U(\bar{e}_n)\big]e^{i\bar{k}\cdot\bar{e}_n}\psi_0(\bar{e}_n)$$

VLASTNÍ ATOMOVOU ENERGII $\bar{e}$ V ATOMU

NOVÁ PŘEDN.
24.11.20

OPÁČKO:
$$\psi(\bar{r}) = \sum_n e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_{\bar{n}}}\psi_0(\bar{r}-\bar{a}_{\bar{n}})$$
VLASTNÍ 1 ATOM FCE LOKALIZ. NA ATOMU V $\bar{a}_{\bar{n}}$ A ψ_0 JE TAM LOKALIZOVANÉ

HLEDÁME VLN. FCI V TOMTO TVARU

MUSEL JSEM OINDEXOVAT KVŮLI ROZLIŠENÍ m, n

$$\mathcal{E} = \frac{\langle\psi_k|H|\psi_k\rangle}{\langle\psi_k|\psi_k\rangle}$$

$$\hat{H}\psi = \mathcal{E}_0\,\psi(\bar{r}) + \sum_{\bar{n}} e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_{\bar{n}}}\big[V(\bar{r}) - U(\bar{e}_n)\big]\psi_0(\bar{e}_{\bar{n}})$$

PŮS ψ_k ; PŮS ψ_k ZLEVA

$\bar{e}_{\bar{n}} = \bar{r} - \bar{a}_n$

$\bar{m}, \bar{n}$ ... CELOČÍS. VEKTORY

FÁZ. FAKTORY (NEZ. NA SOUŘ.)

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \frac{\sum_{\bar{m},\bar{n}} e^{i\bar{k}\cdot(\bar{a}_{\bar{n}}-\bar{a}_{\bar{m}})}\int\psi_0^*(\bar{e}_{\bar{m}})\big[V(\bar{r}) - U(\bar{e}_{\bar{n}})\big]\psi_0(\bar{e}_{\bar{n}})\,d\tau}{\sum_{m,n} e^{i\bar{k}\cdot(\bar{a}_{\bar{n}}-\bar{a}_{\bar{m}})}\int\psi_0^*(\bar{e}_{\bar{m}})\psi_0(\bar{e}_{\bar{n}})\,d\tau}$$

INTEG. PŘES KRYSTAL (BORN-KARM. CELA) — MAKROSKOP ALE KONEČNÁ

POZOROVÁNÍ: VÝSL. $\mathcal{E}$ SE BUDE VLNIT OKOLO PŮVODNÍ $\mathcal{E}_0$

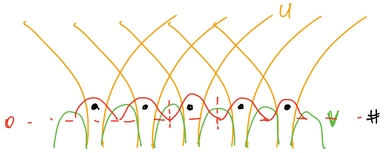
MEZIKROK ① $\bar{a}_{\bar{n}} - \bar{a}_{\bar{m}} = \bar{a}_{\bar{n}-\bar{m}}$

② MOHU POSUNOUT $\bar{n}$ A K NĚMU NAJDU $\bar{m}$ TAK, ABY $\int$ VYŠEL STEJNĚ
→ PROTOŽE BĚŽÍ PŘES CELÝ KRYSTAL
⇒ MOHU POMINOUT JEDNU SUMU → DÍKY SPÁROVÁNÍ
→ ZVOLÍM VZORKOVACÍ ATOM V POČÁTKU ($m \to 0$) A VŮČI NĚMU SPOČTU $\int$ $\bar{a}_{\bar{m}}$ VYPADNE; $\bar{e}_{\bar{m}} \to \bar{r}$

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \frac{\sum_n e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_n} \int \psi_0^*(\bar{r})\,[V(\bar{r}) - U(\bar{\rho}_n)]\,\psi_0\,\bar{\rho}_n\,d\tau}{\sum_n e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_n} \int \psi_0^*(\bar{r})\,\underbrace{\psi_0(\bar{\rho}_n)}_{\text{posunutá}}\,d\tau}$$

vln. fce v počátku

MEZIKROK: ilustrace potenciálů



Lokalizovaná vlnová fce lokálně u atomu

V... periodický

U... neperiodický

ALE pro vlnovou fci lokalizovanou na atomu se potenciály liší málo

① APROXIMACE

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \frac{\sum_n e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_n} \int \psi_0^*(\bar{r})\,[V(\bar{r}) - U(\bar{\rho}_n)]\,\psi_0\,\bar{\rho}_n\,d\tau}{\sum_n e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_n} \int \psi_0^*(\bar{r})\,\psi_0(\bar{\rho}_n)\,d\tau}$$

použiji nejvýzn. příspěvek $n=0$

→ evidentně nejvíce přispívá fce v bodě $n=0$, kde $\psi_0(\bar{\rho}_n) \to \psi_0(\bar{r})$

$e^0 = 1$

pokud fce ψ_0^*, ψ_0 normovány ⇒ jmenovatel $= 1$

jmenov $= 1$

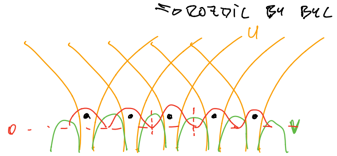
díky malému překryvu vln. fcí na různých atomech

- jeden velký příspěvek — ostatní sčítance přispívají málo
- ale fce MUSÍ být lokalizovány
- pokud zasahují do okolí (model téměř vol. e^-) jako např. kovalent. vazby → nejde

② APROXIMACE čitatele

$$\sum_n e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_n} \int \psi_0^*(\bar{r})\,[V(\bar{r}) - U(\bar{\rho}_n)]\,\psi_0\,\bar{\rho}_n\,d\tau$$

- pokud $n=0$: velký příspěvek součinu, ale v počátku se $V(r)$ a U prakticky překrývají → by ⇒ rozdíl by byl MALÝ
- dva sous. atomy → malý přísp. součinu, ale velký rozdíl V a U



- my z té $\sum$ vybereme pouze nejbližší sousedy ⇒ ψ_0 pořád dobrý příspěvek (jen ty sčítance kde nelze zanedbat. příspěvek
- řeším v **1D**

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \sum_n e^{i\bar{k}\cdot\bar{a}_n} \int \psi_0^*(\bar{r})\,[V(\bar{r}) - U(\bar{\rho}_n)]\,\psi_0(\bar{\rho}_n)\,d\tau$$

beru $n=0$, $n=1$, $n=-1$

$$= \mathcal{E}_0 + \underbrace{\overbrace{\int \underbrace{|\psi_0(\bar{r})|^2}_{\text{hustota pravděp.}} [V(\bar{r}) - U(\bar{r})]\,d\tau}^{n=0}}_{=-C} + \left(e^{ika} + e^{-ika}\right) \underbrace{\int \psi_0^*(\bar{r})\,[V(\bar{r}) - U(\bar{r}-\bar{a})]\,\psi(\bar{r}-\bar{a})\,d\tau}_{-A}$$

a_1, a_{-1}; $\bar{a} = (a_1, 0, 0)$

jak se změní energie díky sousedům

- kdyby nebyly $V(\bar{r}) \to U(r)$ ⇒ celý člen vypadne

$$\Rightarrow \boxed{\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 - C - 2A\cos(ka)} \;!$$

⇒ vymizel vlnový vektor, pouze příspěvek k energii (offset)

- při stabilizaci krystalu ⇒ pokles energie a ten $\int$ je záporný

$\mathcal{E}_0 - X$ ⇒ snížím E systému ! KOHEZNÍ ENERGIE

$-C$ ... ale tento model popisuje silně váz. e^- ⇒ ne ty co tvoří vazbu, takže část. s otazníkem

⇒ některý e^- jsou stlačeny natolik, že by raději byly dále od jádra a systémově E snižují ty valenční e^-

$$\boxed{\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 - C - 2A\cos(ka)}$$

- šířka pásu od $-2A$ do $2A$ ⇒ $4A$
  → velký překryv vln. fcí → roste A

POZOROVÁNÍ: # teprve započtením překryvu vln. fcí na růz. atomech ⇒ * pásové struktury

- při uvaž. pouze příspěvku jsme dostali $-C$ (offset)

$\psi(r-a)$ má nenul. překryv s $\psi(\bar{r})$ v počátku

velká vzdál. atomů → energie dané atom. fcemi — diskrétní

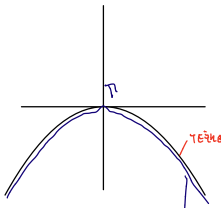
přiblížení ⇒ překryv → rozštěpení → * pás

e^- co jsou hluboko → ↑ lokalizace → ↓ překryv → úzké pásy blízko k atom. fcím $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0$

- čím výše → roste C & A ⇒ velký překryv

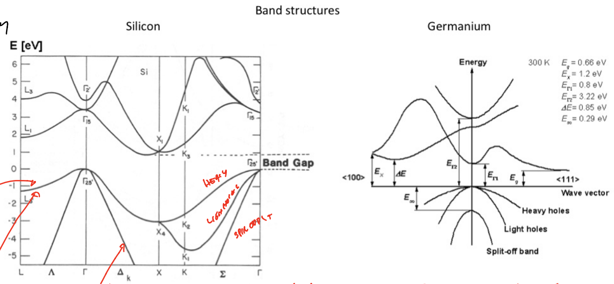
– TAM SE ALE VÍCE HODÍ MODEL SLABĚ VÁZ. e^-

REÁLNÉ PÁSOVÉ STRUKTURY

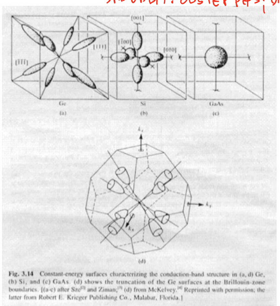


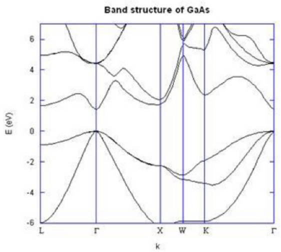
TĚŽKÉ DÍRY

– LEHKÉ DÍRY
– POKUD ↑ SYM
↓
PRAKTICKY SE PŘEKRÝVAJÍ

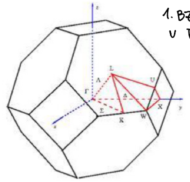


SPIN ORBIT. ODŠTĚP. PÁS, DÍRY 4 DEGEN. SE V Γ PRAKT. POTKÁVAJÍ





Γ ... STŘED BZ
L ... STŘED ⬡
X ... STŘED ◇
K ... HRANA
W ... ROH



1. BZ. KRYSTALU V DIAMANT. STRUKTUŘE

– VĚTŠINA POLOVODIČŮ – KRYST. { Si, Ge (DIAMANT); SFALERIT; WURTZIT
↓
ŠESTEREČNÁ SOUSTAVA AlAs

– ALE JSOU NEPŘÍMÉ ⇒ POUŽITÍ BINÁRNÍCH POLOVOD. (PŘ. GaAs)
GaAs ... ATOMY VE STEJ. MÍSTECH JAKO Si (TAM JSOU 2 ATOMY V ZÁKL. BUŇCE)

– ALE OPĚT DIAM. STRU
KUB. PROS. CENTR. S BÁZÍ
ČILI TAM JE BÁZE
O 2 ATOMECH