

Øving 7

Veiledning: Fredag 7. mars
Innleveringsfrist: Tirsdag 11. mars

Bragg-refleksjon, energibånd og energigap

Med periodiske grensebetingelser i fritt-elektron-modellen fant vi at elektronene kunne beskrives med plane bølger

$$\psi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

med tilhørende energier

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Med andre ord, elektronene kan ha alle mulige verdier $E > 0$. Tilstedeværelsen av ionegitteret gjør imidlertid at fritt-elektron-modellen blir for enkel, og dersom Schrödingerligningen løses med et periodisk potensial, dvs periodisk $E_p(\vec{r})$, vil en finne *energibånd*, dvs intervaller med *tillatte* energiverdier, adskilt av *energigap*, dvs intervaller med *forbudte* energiverdier.

Vi skal ikke på noen måte forsøke å bevise at det periodiske potensialet vil gi opphav til energibånd og energigap. Imidlertid skal vi se på en en-dimensjonal krystall og sannsynliggjøre at energibånd og -gap kan assosieres med *Bragg-refleksjon*, som dere kjenner fra bølgefysikken.

La oss først repetere hva Bragg-refleksjon er: Anta at plane bølger reflekteres av en krystallstruktur der atomene er ordnet lagvis, med avstand d mellom atomlagene. Dersom både innkommende og reflektert bølge danner en vinkel θ med de ulike planene med atomlag, vil forskjellen i tilbakelagt veilengde for reflekterte bølger fra to naboplan være $2d \sin \theta$. Konstruktiv interferens får vi dersom denne veilengdeforskjellen tilsvarer et helt antall av den innkommende bølgens bølgelengde λ , dvs

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad ; \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots$$

[Se f.eks. Alonso og Finn, kap. 35.7 for flere detaljer.]

På tilsvarende vis kan vi forestille oss at elektronbølger kan reflekteres av ionegitteret og interferere konstruktivt for spesielle verdier av elektronets bølgelengde.

a) Vi betrakter elektroner som plane bølger $\exp(ikx)$ i et en-dimensjonalt gitter (langs x -aksen) med N atomer og avstand a mellom atomene. Vis at konstruktiv interferens (dvs Bragg-refleksjon) mellom bølger som reflekteres av to naboatomer vil opptre når bølgetallet er

$$k = n \frac{\pi}{a} ; \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots$$

b) La oss se nærmere på tilfellet $n = \pm 1$. Stasjonære (dvs: tidsuavhengige) tilstander kan settes sammen av slike plane bølger som reflekteres fram og tilbake i krystallen. Da får vi *stående bølger*, og de to mulighetene i 1 dimensjon er

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{a} \\ \psi_2(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{\pi x}{a}\end{aligned}$$

Her er $L = Na$, slik at begge bølgefunksjonene er normert. Tegn opp litt av det endimensjonale gitteret med ioner i posisjon $0, \pm a, \pm 2a$ etc. Skisser i samme figur elektronets sannsynlighetstetthet $|\psi_j(x)|^2$ for de to stående bølgene ($j = 1, 2$) og dessuten for fri-partikkel-løsningen $\psi_0(x) = \exp(ikx)/\sqrt{L}$.

c) De tre tilstandene $\psi_j(x)$ ($j = 0, 1, 2$) i punkt b) vil ha forskjellige energier E_j . Ranger disse tre energiene innbyrdes, med utgangspunkt i at vi har en tiltrekkende Coulomb-vekselvirkning mellom elektronet og ionegitteret.

d) Fri-partikkel-løsningen ψ_0 vil ikke representere en gyldig løsning for bølgetall $k = \pm\pi/a$ (og heller ikke for $k = \pm 2\pi/a$ etc). Med andre ord, den tilhørende fri-partikkel-energien $E_0 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$ er ikke en tillatt energi for et elektron i et periodisk potensial; den ligger i det forbudte *båndgapet*. De to stående bølgene, derimot, er tillatte tilstander, og de tilhørende energiene E_1, E_2 representerer toppen av første tillatte bånd og bunnen av andre tillatte bånd. (Fikk du til punkt c), vet du også hvilke av disse energiene som

tilsvarer det ene og det andre!) Dermed må vi ha et båndgap som spenner over et energiintervall

$$E_g = |E_1 - E_2|$$

Anta at størrelsen på båndgapet ved $k = \pm\pi/a$ er $E_g = E_0/4$, og at toppen av laveste bånd ligger like langt under E_0 som bunnen av neste bånd ligger over E_0 . Anta dessuten at fritt-elektron-modellen er en god tilnærmelse unntatt i nærheten av $k = \pm\pi/a, \pm2\pi/a, \dots$. Under disse forutsetningene, skisser $E(k)$ i intervallet $-3\pi/2a < k < 3\pi/2a$.

[Tips: For en gitt verdi av k vil elektronets hastighet være gitt som $v = \hbar^{-1}\partial E(k)/\partial k$. Ettersom tilstandene ψ_1 og ψ_2 ved $k = \pm\pi/a$ er stående bølger, kan du kanskje resonnerer deg fram til hva *helningen* til $E(k)$ må være i $k = \pm\pi/a$?]