

www.phys.nsu.ru

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

**Физический факультет
Кафедра физики полупроводников**

**СБОРНИК ЗАДАЧ ПО ТЕОРИИ
ТВЕРДОГО ТЕЛА**

(учебное пособие)

Новосибирск

2012

Авторы

Л.С. Брагинский, Л.И. Магарилл, М.М. Махмудиан,
А.Г. Погосов, А.В. Чаплик, М.В. Энтин.

Учебно-методическое пособие подготовлено в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ на 2009–2018 г.г.

Рецензент: проф. Г.Л. Коткин

© Новосибирский государственный университет, 2012

© Л.С. Брагинский, Л.И. Магарилл,
М.М. Махмудиан, А.Г. Погосов, А.В. Чаплик,
М.В. Энтин, 2012

В учебном пособии представлены задачи по теории твердого тела. Пособие в значительной степени ориентировано на одноименный лекционный курс, читаемый студентам физического факультета Новосибирского Государственного университета. Однако эти задачи могут быть использованы в других курсах: по физике сплошных сред, физике полупроводников, низкоразмерным системам, нанoeлектронике.

Многие задачи пособия являются оригинальными, часть снабжена решениями, указаниями или ответами. Одной из целей предмета является введение студентов в научную работу. Чтобы стимулировать самостоятельность студентов, мы намеренно не приводим решение ряда задач. Кроме того, такие задачи могут быть использованы в семестровых заданиях и контрольных работах. Некоторые из задач ориентированы на будущих теоретиков. Часть задач имеет исследовательскую направленность. Их решение авторам задачника неизвестно - оно может послужить в качестве основы научной публикации. Такие задачи могут быть использованы при постановке курсовых или дипломных работ.

Для решения задач необходимо понимание основ теоретической физики: механики, квантовой механики, теории поля, статистической физики, электродинамики, физической кинетики. Для удобства использования задачника часть ключевых разделов снабжена краткими теоретическими введениями.

В процессе решения некоторых задач необходимо активное использование компьютерных программ для численных и аналитических вычислений. В дальнейшем мы предполагаем создание электронной версии пособия, в частности, с помощью имеющихся систем аналитических вычислений, которые позволят реализовать громоздкие выкладки и расчеты, а также проверку полученных выражений в режиме дистанционного обучения.

Целевая аудитория: Студенты 4-6 курсов НГУ специальностей: физика полупроводников, физика твердого тела, физика низких температур, теоретическая физика, квантовая оптика и др., студенты НГТУ и других университетов. Кроме того, задачник может использоваться при подготовке аспирантов по специальностям физика конденсированных сред, физика полупроводников, квантовая оптика.

Некоторые общие обозначения

В некоторых формулах $\hbar = 1$. Проверьте размерности!

В пределах задачника иногда используются ряды Фурье, иногда интегралы Фурье. Использование ряда Фурье базируется на пересчете состояний в кристалле большого размера $L_x \times L_y \times L_z = V$,

$L_x = a_x N_x, L_y = a_y N_y, L_z = a_z N_z, L \rightarrow \infty$. Обычно используются периодические граничные условия. Кристалл как бы замыкается в тор, у которого плоскости $(x, y, 0)$ и (x, y, L_z) отождествляются (аналогично для других плоскостей). Переход от рядов к интегралам осуществляется с помощью формулы

$$\sum_{\mathbf{k}} \dots = \frac{V}{(2\pi\hbar)^d} \int \dots d^d k$$

m - эффективная масса электрона.

M - масса иона (атома).

$\omega(\mathbf{k})$ - частота фонона.

$d = 1, 2, 3$ - размерность системы.

$U(\mathbf{r}), U(\mathbf{k}) = \int U(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^d r$ - потенциальная энергия взаимодействия электронов между собой или с заряженными примесями и ее фурье-образ. В объемном кристалле в отсутствие экранировки

$U(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\chi r}, U(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{\chi k^2}$. Взаимодействие двух зарядов, расположенных на плоскости имеет такой же вид в координатном представлении, а фурье-образ его по плоским координатам имеет вид

$U(\mathbf{k}) = \frac{2\pi e^2}{\chi k}$. Здесь, однако, в качестве диэлектрической проницаемости выступает диэлектрическая проницаемость окружающей двумерную пленку среды. Если среды сверху и снизу разные, то в качестве χ выступает полусумма соответствующих диэлектрических проницаемостей.

1. Симметрия кристалла.

- 1.1. Найти элементы группы симметрии квадрата, прямоугольника, равносторонней трапеции, ромба, куба, параллелепипеда, правильного тетраэдра.
- 1.2. Расшифруйте обозначения точечных групп: T_d , C_{6v} , C_{2h} , S_4 , D_3 , $\bar{4}3m$.
- 1.3. Найти элементарные трансляции решеток: квадратной, прямоугольной, треугольной, простой кубической, грани- и объемноцентрированной кубической, решетки алмаза.
- 1.4. Какие из перечисленных решетки являются решетками с базисом?
- 1.5. Какие порядки поворотной симметрии совместимы с трансляционной группой кристалла?
- 1.6. Показать, что кристалл, имеющий четыре оси третьего порядка, образующие попарно четырехгранные углы, есть кристалл с кубической решеткой.
- 1.7. Показать, что не может существовать простая пространственная решетка с гексагональной плотной упаковкой.

2. Тензоры в кристалле.

Чтобы найти связь компонент тензора, можно провести над ним все преобразования группы симметрии и приравнять преобразованный тензор к исходному. Более аккуратный способ дает теория представлений групп.

- 2.1. Найти связь компонент симметричного тензора 2 ранга в кубическом кристалле, кристалле с точечной группой C_{6v} .
- 2.2. То же самое для тензора 4 ранга, симметричного по парам индексов и внутри пар.
- 2.3. То же самое для симметричного по всем индексам тензора 3 ранга в GaAs.
- 2.4. Какие тензоры 3 ранга, антисимметричные по всем индексам, возможны в изотропной системе?
- 2.5. Возможен ли такой тензор в двумерной системе?

- 2.6. Тензор проводимости дает линейную связь вектора плотности тока с вектором электрического поля. Найти связь компонент тензора проводимости в изотропной системе, в кубическом $\bar{4}3m$ и гексагональном кристаллах.
- 2.7. То же самое в присутствии магнитного поля. Рассмотреть случаи магнитного поля, направленного вдоль осей симметрии кристалла и произвольного магнитного поля.
- 2.8. Тензор холловской проводимости определяется первым членом разложения тензора проводимости по магнитному полю. Найти связь его компонент в предыдущей задаче.
- 2.9. Тензор магнетопроводимости определяется вторым членом разложения тензора проводимости по магнитному полю. Найти связь его компонент в задаче 7.
- 2.10. Энергия деформированного твердого тела квадратична по тензору деформации $u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$, где u_i смещение атомов в точке \mathbf{x} . Написать общее выражение для энергии деформированного твердого тела. Каковы свойства симметрии тензора упругости C_{ijkl} , входящего в это выражение?
- 2.11. Найти связь компонент тензора упругости C_{ijkl} в изотропном стекле, кубическом кристалле, в решетке с группой S_6 .

3. Энергия связи твердых тел, упругость, силовая матрица.

Атомы, из которых построена кристаллическая решетка, притягиваются на больших расстояниях и отталкиваются на малых. Притяжение обусловлено силами Ван-дер-Ваальса на расстояниях, много больших размера атома и обменом электронами на расстояниях, соизмеримых с атомным. На еще меньших расстояниях преобладает кулоновское отталкивание ядер и повышение энергии электронных оболочек за счет фермиевского отталкивания электронов. Часто для описания взаимодействия атомов используют модельный по-

тенциал Ленарда-Джонса $U(r)=-a/r^6+b/r^{12}$. При достаточно низкой температуре атомы выстраиваются в кристаллическую решетку, минимизируя ее энергию. Полная энергия кристалла равна

$$\sum_{nn'} U(\mathbf{r}_n + \mathbf{u}_n - \mathbf{r}_{n'} - \mathbf{u}_{n'}).$$

Здесь \mathbf{r}_n -равновесное положение n атома, \mathbf{u}_n -его смещение из положения равновесия. Номер атома включает номер его ячейки и номер внутри ячейки. В d -мерном пространстве номер ячейки задается d целыми числами. Условие равновесия требует, чтобы:

а) сила на каждый атом равнялась нулю:

$$\sum_{n'} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_n} U(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) = 0;$$

б) Энергия была минимальна в положении равновесия.

$$\frac{1}{2} \sum_{nn'} u_{n,i} u_{n',j} \frac{\partial^2}{\partial x_{n,i} \partial x_{n',j}} U(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) > 0.$$

Здесь $x_{n,i}$ и $u_{n,i}$ - i -я координата n -го атома и его смещение, соответственно. Условие положительной определенности квадратичной формы по $u_{n,i}$ эквивалентно положительности всех собственных чисел силовой матрицы

$$A_{n,i;n',j} = \frac{\partial^2}{\partial x_{n,i} \partial x_{n',j}} U(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}).$$

Кристалл построен из одинаковых атомов с потенциалом взаимодействия $U(r)=-a/r^6+b/r^{12}$. Найти: а) период решетки б) энергию связи в) коэффициенты силовой матрицы в) модули упругости. Параметры выразить через сумму ионных радиусов. Результат выразить в виде бесконечных сумм. Для аналитической оценки взять 2 координационных сферы. Найти суммы точно с помощью компьютера. Параметры и атомов и решеток найти в интернете. Рассмотреть кристаллы:

3.1. Одномерную цепочку атомов.

3.2. Двумерный кристалл –графен.

- 3.3. Простой кубический.
- 3.4. ОЦК.
- 3.5. ГЦК.
- 3.6. ГПУ.
- 3.7. Трехмерные ковалентные кристаллы - алмаз и кремний.
- 3.8. То же самое для ионного кристалла NaCl. Потенциал взаимодействия атомов $U(r)=-e^2/r+k/r^6$.

4. Фононы.

В общем случае уравнение малых колебаний решетки – это система уравнений Ньютона для всех атомов:

$$M_n \frac{d^2}{dt^2} u_{n;i} = -A_{n;i;n';j} u_{n';j}.$$

Здесь массы атомов (ионов) M_n , вообще говоря, различны.

В простейшем виде фононы демонстрируются на основе нормальных колебаний периодических систем из масс, связанных пружинками. Эта модель адекватно описывает колебания решетки, в которой учитывается взаимодействие только ближайших атомов. Квантование колебаний осуществляется с помощью гамильтониана системы с многими степенями свободы. Полная волновая функция и гамильтониан системы атомов зависят от координат $u_{n;i}$. Гамильтониан состоит из кинетической

$$T = \sum_{n;j} \frac{p_{n;j}^2}{2M_n}$$

и потенциальной $\frac{1}{2} \sum_{n;i;n';j} A_{n;i;n';j} u_{n;i} u_{n';j}$ энергий. После перехода к

нормальным координатам гамильтониан разбивается на сумму независимых вкладов, отвечающих отдельным нормальным координатам:

$$H = \sum_{l,k} \left(\frac{p_{l,k}^2}{2M_l} + \frac{M_l \omega_{l,k}^2}{2} u_{l,k}^2 \right).$$

l, \mathbf{k} -мода и волновой вектор нормальных колебаний, $u_{l,\mathbf{k}}$ и $p_{l,\mathbf{k}}$ - нормальная координата и соответствующий импульс (операторы). Повышающие и понижающие операторы для этих осцилляторов $b_{l,\mathbf{k}}^+$ и $b_{l,\mathbf{k}}$ - операторы рождения и уничтожения фононов. С помощью них гамильтониан переписывается в представлении вторичного квантования как

$$H = \hbar \sum_{l,\mathbf{k}} \omega_{l,\mathbf{k}} (b_{l,\mathbf{k}}^+ b_{l,\mathbf{k}} + 1/2).$$

Полная энергия кристалла есть

$$E = \sum_{l,\mathbf{k}} \hbar \omega_{l,\mathbf{k}} (n_{l,\mathbf{k}} + 1/2),$$

где $n_{l,\mathbf{k}}$ -номер возбужденного состояния соответствующей моды колебаний (число заполнения фононов). В тепловом равновесии $n_{l,\mathbf{k}}$ определяется функцией Планка:

$$n_{l,\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{l,\mathbf{k}}/T} - 1}.$$

Волновая функция всей системы атомов $\Phi(\{u_{l,\mathbf{k}}\})$ зависит от всех координат атомов. Она представляется произведением волновых функций для отдельных нормальных координат:

$$\Phi(\{u_{l,\mathbf{k}}\}) = \prod_{l,\mathbf{k}} \varphi_{n_{l,\mathbf{k}}}(u_{l,\mathbf{k}}).$$

По другому ее можно записать с помощью операторов рождения

$$\Phi(\{u_{l,\mathbf{k}}\}) = \prod_{l,\mathbf{k}} (b_{l,\mathbf{k}}^+)^{n_{l,\mathbf{k}}} \prod_{l,\mathbf{k}} \varphi_0(u_{l,\mathbf{k}}).$$

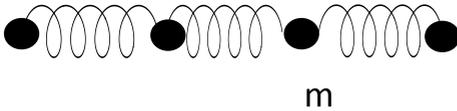


Рис.1. Периодическая решетка из одинаковых атомов.

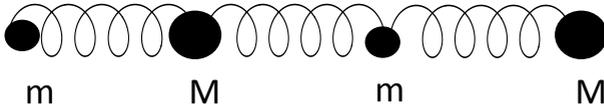


Рис.2. Периодическая решетка с чередующимися атомами.



Рис.3. Периодическая решетка с примесным атомом.

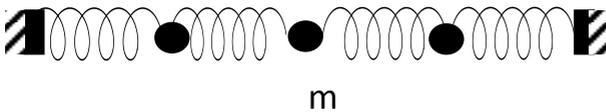


Рис.4. Периодическая решетка с нулевыми граничными условиями.

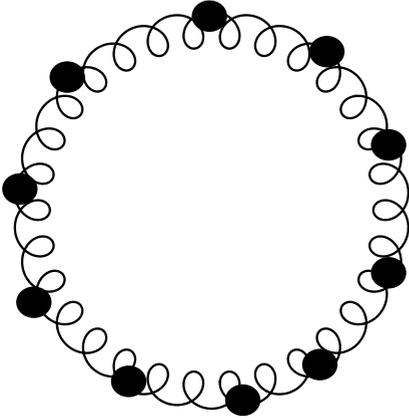


Рис.5. Периодическая решетка из N атомов с циклическими граничными условиями $u_{N+1} = u_N$.

- 4.1. Определить собственные моды (фононный спектр) одномерной цепочки (Рис. 1), состоящей из атомов массы m , соединенных одинаковыми пружинками, жесткость которых равна α .
- 4.2. Определить фононный спектр одномерной цепочки (Рис. 2), состоящей из чередующихся атомов массы m и M , соединенных одинаковыми пружинками.
- 4.3. Масса M одного из атомов упругой цепочки, рассмотренной в задаче 1, отличается от других ($M \neq m$) (Рис.3). Как это влияет на фононный спектр? При каких условиях возникает локализованное состояние?
- 4.4. Рассмотреть задачу о рассеянии упругой волны $\exp(ikz)$ на атоме примеси, рассмотренной в предыдущей задаче.
- 4.5. Рассмотреть задачи 2–3, предполагая все атомы одинаковыми, а жесткость одной из пружинки отличающейся от жесткости других.
- 4.6. Определить собственные моды квадратной и кубической решеток, составленных из атомов массы m соединенных одинаковыми пружинками, жесткость которых равна k .
- 4.7. В моделях, рассмотренных в задачах 1 и 5, определить плотность фононных состояний и фононную теплоемкость.
- 4.8. Найти спектр цепочки из N атомов с

- а) неподвижными граничными атомами $n=1$ и $n=N$
- б) со свободными граничными атомами $n=1$ и $n=N$.
- в) с периодическими граничными условиями $u_{N+1} = u_1$.

Каково взаимное соотношение частот колебаний?

- 4.9. Найти фононный вклад в энергию кристалла в гармоническом приближении. Исследовать пределы низкой и высокой температур.
- 4.10. Найти теплоемкость ангармонического осциллятора. Потенциал взаимодействия $U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4$.
- 4.11. Написать функцию Гамильтона для колебаний одномерной цепочки в континуальном приближении.
- 4.12. Вывести в том же приближении уравнение колебаний.
- 4.13. Найти спектр поперечных колебаний натянутой струны.
- 4.14. Найти спектр поперечных колебаний ненапрянутой струны.
- 4.15. Найти теплоемкость натянутой струны.
- 4.16. Найти теплоемкость ненапрянутой струны.
- 4.17. Вычислить средний квадрат смещения атома в решетке. Проанализировать сходимость результата для $T=0$ и при конечной температуре для различных размерностей d системы. Показать, что в двумерной и одномерной решетках $\langle u^2 \rangle$ расходится, откуда следует невозможность существования дальнего порядка в одном и двух измерениях.
- 4.18. Построить гамильтониан в приближении вторичного квантования для упругой цепочки.
- 4.19. Найти длину пробега фононов в линейной цепочке с изотопическим примесным атомом
- 4.20. Найти коэффициент теплового расширения кристалла для двухатомной модели: как меняется с температурой среднее расстояние между атомами, взаимодействующими по закону $-\frac{a}{r^6} + \frac{b}{r^{12}}$. Найти вначале разложение потенциала вблизи минимума до четвертого порядка, затем вычислить $\langle x \rangle$ в классической модели и с учетом квантования.
- 4.21. Найти коэффициент теплового расширения кристалла в модели акустических фононов при помощи вторично-квантованного гамильтониана.

- 4.22. В континуальном приближении найти уравнение колебаний и спектр простого кубического кристалла, алмазоподобной решетки. Найти скорости звуковых волн. Использовать приближение ближней связи.
- 4.23. Та же самая задача для простого кубического при учете взаимодействия по диагонали.
- 4.24. Та же задача для ГПУ. ГПУ состоит из слоев атомов, построенных в треугольную решетку. Каждый следующий слой сдвинут таким образом, чтобы его атомы находились над центром равностороннего треугольника, образованного атомами предыдущего слоя.
- 4.25. То же для решетки алмаза. Решетка алмаза построена из двух гранецентрированных кубических подрешеток, сдвинутых относительно друг друга по диагонали на $\frac{1}{4}$ диагонали.
- 4.26. То же для NaCl. Этот кристалл имеет кубическую решетку с чередующимися ионами Na^+ и Cl^- .
- 4.27. То же для двумерной треугольной вигнеровской решетки.
- 4.28. Пользуясь критерием Линдемана (в точке плавления кристалла средний квадрат смещения атомов составляет приблизительно 0,2 от постоянной решетки) найти температуру плавления двумерного треугольного вигнеровского кристалла в классическом приближении.
- 4.29. Решить ту же задачу в пределе низких температур, когда средний квадрат амплитуды нулевых колебаний электронов сравняется с 0.02 периода решетки.
- 4.30. Найти фононный спектр и теплоемкость графена.
- 4.31. Показать, что вероятность упругого рассеяния рентгеновских лучей на кристалле пропорциональна фактору Дебая-Уоллера $\left| \left\langle e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(x)} \right\rangle \right|^2$ Здесь \mathbf{K} -волновой вектор, передаваемый рентгеновскими квантами, \mathbf{u} – координата ядра. Рассмотреть случай высоких температур (классические атомы).
- 4.32. То же. Квантовый случай. Рассмотреть предыдущую задачу в представлении вторичного квантования.
- 4.33. Будучи жестко закреплено, ядро ^{57}Fe излучает гамма-квант энергии $\hbar\omega = 14.4$ кэВ. Найти сдвиг энергии гамма-кванта, испускаемого свободным ядром за счет его отдачи. Каково соот-

ношение этого сдвига с естественной шириной линии 10^7с^{-1} ?
Каково уширение частоты за счет эффекта Допплера?

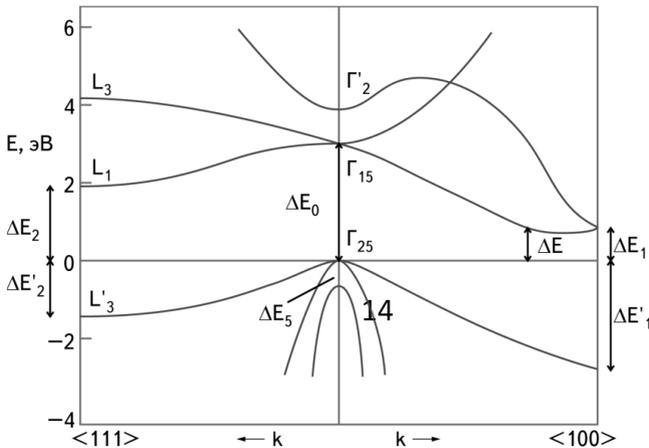
- 4.34. Ядро находится в параболическом потенциале. Выразить вероятность процесса с испусканием n колебаний ядра через вероятность процесса при неподвижном ядре и амплитуду перехода $\langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{u}} | f \rangle$. Здесь \mathbf{K} -волновой вектор гамма-кванта, \mathbf{u} – координата ядра, i и f - начальное и конечное состояния ядра. Найти вероятность перехода. Найти вероятность испускания гамма-кванта без отдачи (эффект Мессбауэра). Считать, что в начальный момент ядро находилось в основном колебательном состоянии и в конце процесса остается в том же состоянии.
- 4.35. С помощью разложения по нормальным координатам и предыдущей задачи найти величину вероятности процесса испускания гамма-кванта в кристалле при нулевой температуре.

5.Статистика электронов.

- 5.1. В приближении свободных электронов найти энергию Ферми в одновалентном металле с простой кубической решеткой. Постоянная решетки $a=2\text{А}$.
- 5.2. Найти электронную теплоемкость в предыдущей задаче.
- 5.3. Спектр электронов в одной из долин многодолинного кубического полупроводника (например, кремнии) описывается выражением

$$5.4. \varepsilon_e(\mathbf{p}) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_x} + \frac{(p_z - p_0)^2}{2m_z}.$$

- 5.5. Электронные долины в кремнии направлены вдоль направлений $(1,0,0)$ и эквивалентных. Минимумы отстоят от края



ячеек Бриллюэна. (Смотри рис.6.). Найти плотность состояний N_c .

Рис.6. Схема зонной структуры кремния. Параметры равны

$$\Delta E = 1,12 \text{ эВ}, \Delta E_0 = 3,4 \text{ эВ}, \Delta E_1 = 1,2 \text{ эВ},$$

$$\Delta E_2 = 1,9 \text{ эВ}, \Delta E_1' = 3,1 \text{ эВ}, \Delta E_2' = 2,2 \text{ эВ},$$

$$\Delta E_5 = 0,035 \text{ эВ}.$$

5.6. То же самое для германия. Минимумы зоны проводимости направлены вдоль (1,1,1) и находятся на краю ячеек Бриллюэна.

5.7. Спектр дырок в полупроводнике (например, кремнии) описывается выражением

$$\varepsilon_{l,h}(\mathbf{p}) = (A+B)p^2 \pm \sqrt{(A-B)^2 p^4 + C^2(p_x^2 p_y^2 + p_x^2 p_z^2 + p_y^2 p_z^2)}$$

Плюс и минус соответствуют легким (l) и тяжелым (h) дыркам. Найти полную N_v и парциальные N_l и N_h плотности состояний в невырожденном газе дырок. Результат выразить в виде максимально упрощенного интеграла. Вычислить интеграл численно.

5.8. Найти концентрацию электронов и дырок в собственном кремнии. Энергетическая щель $E_g = 1.12$ эВ.

5.9. Найти электронную теплоемкость собственного кремния.

5.10. Найти концентрацию электронов в кремнии n-типа с донорными примесями глубиной E_d и концентрацией N_d . Вычислить концентрацию электронов при температурах 4К, 70 К, 300К для $E_d = 0.07$ эВ и $N_d = 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

5.11. Показать, что ни при каких условиях в модели невзаимодействующих электронов невозможно существование вырожденного полупроводника, то есть не выполнены условия $\mu > 0$ и $\mu \gg T$. (энергия отсчитывается от края зоны проводимости).

5.12. Одноосная деформация вдоль оси (1,0,0) u_{11} раздвигает минимумы вдоль той же оси и поперек ее на величину $(\lambda_1 - \lambda_2)u_{11}$. Как изменится плотность состояний в зоне про-

водимости при такой деформации? Примесный уровень доноров следит за положением наинизшей долины. Считая, что подвижность электронов не зависит от расщепления долин, определить деформационный коэффициент сопротивления n – кремния под действием одноосной деформации.

6. Зонная структура твердого тела. Теорема Блоха.

- 6.1. Показать, что в пустом кристалле можно построить состояния, удовлетворяющие теореме Блоха $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ с произвольным вектором прямой решетки \mathbf{a} .
- 6.2. Показать, что в кристалле существуют стационарные состояния *не удовлетворяющие* условию $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.
- 6.3. Показать, что производная от энергии электрона по нормальной компоненте квазиимпульса обращается в ноль на границе зоны Бриллюэна. В каком случае это утверждение неверно?
- 6.4. Найти вектора прямой и обратной решетки простой квадратной решетки.
- 6.5. То же для решетки графена, простой кубической решетки и решетки алмазна.
- 6.6. Построить три первых зоны Бриллюэна квадратной и прямоугольной (соотношение сторон 1:2) решеток и решетки графена.
- 6.7. Построить поверхности Ферми в модели свободных электронов для предыдущих задач при валентности атомов от 1 до 5.
- 6.8. Модель Кронига-Пенни $V(x) = \beta \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x + na)$. Получить уравнение для энергетического спектра. Проанализировать предел $\beta > 0$, $\beta < 0$, $ka \ll 1$, $ka \gg 1$. Найти ширины разрешенных и запрещенных зон эффективную массу в центре и на границе зоны Бриллюэна. Найти связь энергии с квазиимпульсом в запрещенных зонах.

7. Метод сильной связи.

В методе сильной связи волновая функция электрона в кристалле сводится к комбинации атомных волновых функций

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n u(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)$$

Говоря вкратце, для коэффициентов c_n получается система алгебраических уравнений $(\varepsilon_n - \varepsilon)c_n + \sum t_{nm} c_m = 0$, где n нумерует атом в решетке, ε_n - уровни атомов, t_{nm} - матричный элемент

перескока с атома на атом, экспоненциально падающая с расстоянием между атомами. По этой причине из амплитуд перескока можно оставить только ближайшие соседи. В решетке из одинаковых атомов все $\varepsilon_n = \varepsilon_0$, для решеток с одним атомом на элементарную ячейку $t_{nm} = t$ для соседей и нулю для всех остальных пар атомов.

Имеются две другие формы метода сильной связи. Это гамильтониан в узельном представлении $H = \sum_n \varepsilon_n c_n^* c_n + \sum_{nm'} (t_{nm} c_n^* c_{m'} + t_{n'n} c_{n'}^* c_n)$ и вторично-квантованный гамильтониан

$$H = \sum_n \varepsilon_n a_n^+ a_n + \sum_{nm'} (t_{nm} a_n^+ a_{m'} + t_{n'n} a_{n'}^+ a_n),$$

выраженный через операторы рождения и уничтожения электрона на узле. В присутствии сильного магнитного поля с вектор-потенциалом \mathbf{A} амплитуда перехода приобретает дополнительную фазу

$$t_{nm} \rightarrow t_{nm} e^{i \int_{r_n}^{r_{m'}} \mathbf{A} d\mathbf{r}}.$$

Метод трансфер-матрицы.

Этот метод удобен для решения одномерных задач в слоистых средах, в частности, для решения задач об электронных и фоновых состояниях в одномерных решетках. В областях, где решетка сохраняет периодичность, общее стационарное решение может быть записано в виде $c_n = ae^{ikn} + be^{-ikn}$.

После перехода через примесь, барьер, решение приобретает вид

$$c_n = a' e^{ikn} + b' e^{-ikn}.$$

Трансфер-матрица связывает между собой вектора (a, b) и (a', b') :

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \hat{t} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

В многослойных задачах общее решение находится перемножением трансфер-матриц. Связанные состояния соответствуют решению с мнимым отрицательным k слева и мнимым положительным –справа, то есть

$$\hat{t}_{22} = 0.$$

- 7.1. Сравнить модель Кронига-Пенни с методами сильной и слабой связи.
- 7.2. Уравнение Матье. Электрон в периодическом потенциале $V(x) = V_0 \cos(2\pi x / a)$. Получить зоны в пределе сильной и слабой связи.
- 7.3. Вывести выражение для гамильтониана сильной связи в представлении вторичного квантования
- 7.4. Вывести систему уравнений на амплитуды вероятности нахождения на атомах в модели сильной связи.
- 7.5. В цепочку сильной связи вставлен чужеродный атом, уровень энергии которого отличается от энергии на соседних атомах. В приближении сильной связи определить условия возникновения и энергию локализованного состояния. Решить задачу о рассеянии на таком атоме.

- 7.6. Найти энергию локального уровня в одномерной цепочке δ -функций с вакансией:

$$U(x) = -g \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x + n \cdot a), \quad n \neq 0.$$

- 7.7. Найти закон дисперсии электрона в приближении сильной связи для одномерной цепочки с базисом из двух одинаковых атомов.

- 7.8. Найти закон дисперсии в модели

$$\hat{H} = E_0 a_n^+ a_n + (t_1 a_n^+ a_{n+1} + t_2 a_n^+ a_{n+2} + \text{h.c.})$$

При каких соотношениях между параметрами возможно образование боковой долины?

- 7.9. Найти закон дисперсии в модели

$$\hat{H} = E_0 (a_n^+ a_n + b_n^+ b_n) + t_1 (a_n^+ a_{n+1} + \text{h.c.}) + t_2 (b_n^+ b_{n+1} + \text{h.c.})$$

- 7.10. Найти спектр прямоугольной решетки в модели сильной связи. Рассмотреть предел квадратной решетки.

- 7.11. Найти спектр графена в модели сильной связи.

- 7.12. Найти ширину разрешенной зоны в модели сильной связи в алмазе либо гранецентрированной либо объемноцентрированной кубической решетке.

- 7.13. Найти интеграл перекрытия для водородоподобного основного состояния атома с энергией 5 эВ и расстояния между атомами 3А.

- 7.14. С помощью теоремы Блоха найти распределение токов и напряжений в цепочке емкостей и индуктивностей на рис. 7

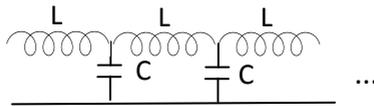


Рис.7 к задаче 7.14

8. Приближение эффективной массы.

Эффективная масса m_j определяется как обратный тензор к тензору вторых производных от энергии квазичастицы по квазиимпульсу:

$$\left(\frac{1}{m}\right)_{ij} = \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_i \partial p_j},$$

$$\left(\frac{1}{m}\right)_{ij} m_{jk} = \delta_{ik}.$$

В экстремумах простых зон тензор эффективных масс перестает зависеть от направления импульса. В таких точках

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m}\right)_{ij} p_i p_j.$$

В кристалле с высокой симметрией и точках зоны Бриллюэна с высокой симметрией m_{jk} вырождается в скаляр: $m_{ij} = m\delta_{ij}$ и

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = p^2 / 2m.$$

- 8.1. Найти симметрию и независимые компоненты тензора эффективных масс электронов вблизи основных минимумов зоны проводимости кремния и германия, направленных вдоль направлений (1,0,0) для кремния и (1,1,1) германия.
- 8.2. Определить эффективные массы в модели Кронига-Пенни.
- 8.3. Найти эффективные массы вблизи конической точки в графене.
- 8.4. Показать, что на границе зоны Бриллюэна существуют критические точки, в которых одна из масс положительна, а вторая - отрицательна.
- 8.5. Найти эффективные массы в модели сильной связи для прямоугольной решетки в экстремумах зон.

9. Слабая связь. к-р теория возмущений.

к-р теория возмущений базируется на двух основных идеях. Во-первых, это стационарная теория возмущений для группы близких уровней. Во-вторых, это способ найти состояния электронов в точке \mathbf{k} зоны Бриллюэна, если известно состояние в некоторой особой точке \mathbf{k}_0 , к которой \mathbf{k} близка. Пусть гамильтониан имеет матричный вид

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & \varepsilon_2 & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & \varepsilon_3 \end{pmatrix}$$

и состояния 1 и 2 близки по энергии и далеки по энергии от состояния 3, а возмущение V мало: $|\varepsilon_2 - \varepsilon_1| \ll |\varepsilon_3 - \varepsilon_1|$, $V \ll |\varepsilon_3 - \varepsilon_1|$. В этом случае для описания состояний, построенных из состояний 1 и 2 можно пренебречь всеми блоками матрицы, кроме строк 1 и 2 и собственные состояния получаются из обрезанной матрицы 2×2 . В качестве нулевого приближения в k -р теории возмущений выбирается центр ячейки Бриллюэна или симметричная точка на ее границе. Гамильтонианом возмущения является величина $\mathbf{k} \mathbf{p}_{mn} / m$, а в качестве исходных состояний в полупроводнике выбирают, в частности, потолок валентной зоны и зоны проводимости. Именно эти состояния относительно близки друг к другу. В центре ячейки для кубического кристалла матричный элемент импульса отличен от нуля только между разными зонами. При этом одно из состояний скалярно, а другое должно быть векторным.

- 9.1. В приближении пустой решетки построить зоны Бриллюэна и спектр для одномерной решетки. Для простой квадратной решетки без базиса. Для гексагональной треугольной решетки. Для решетки алмаза (с помощью системы аналитических вычислений, например, Mathematica). Для гранецентрированной и объемноцентрированной кубических решеток.
- 9.2. Построить гамильтониан и найти спектр в дырочной зоне кубического полупроводника с центром инверсии в пренебрежении спином и анизотропией. То же самое с учетом анизотропии
- 9.3. То же самое в кубическом полупроводнике без центра инверсии (гамильтониан линеен по k)
- 9.4. То же самое, что в задаче 1 в изотропном приближении в зоне, построенной из состояний с моментом $j = 3/2$ $3/2$.

- 9.5. Спектр имеет точку двукратного вырождения на границе зоны Бриллюэна. Получить энергетические зоны в окрестности этой точки.

10. Поверхностные состояния в кристалле.

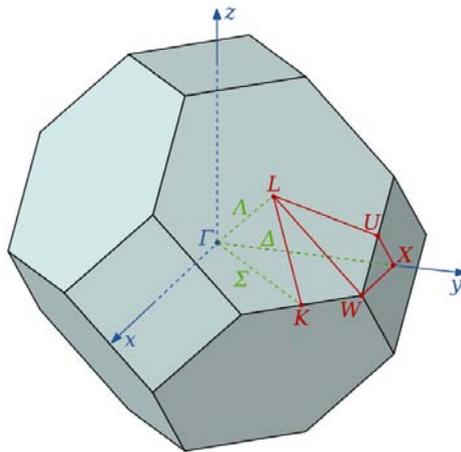
Подобно примесным состояниям, любое нарушение периодичности кристалла может приводить к возникновению состояний, пространственно привязанных к области нарушенной периодичности. К таким нарушениям принадлежат дислокации и поверхность кристалла. Состояния, образующиеся вблизи поверхности, называются поверхностными состояниями.

- 10.1. Показать, что в одномерной конечной решетке сильной связи с одинаковыми атомами отсутствуют поверхностные состояния.
- 10.2. Найти поверхностные состояния в одномерной полубесконечной решетке сильной связи с одинаковыми атомами, в которой уровень крайнего атома и амплитуда перехода на него отличаются от остальных. Найти критерии существования поверхностного состояния.
- 10.3. Показать, что полное число состояний в зоне не меняется при возникновении поверхностного состояния.

11. Особенности Ван-Хова.

Особенности Ван-Хова возникают в плотности состояний фононов или электронов в точках экстремумов зон или в точках особенностей электронного или фононного спектров. Они характеризуются размерностью системы, типом экстремума (максимум, минимум, седловые точки). Особенности Ван-Хова проявляются в термодинамических свойствах, возникновении локализованных состояний, поглощении света.

- 11.1. Найти поведение плотности состояний фононов для вблизи экстремумов спектра $\omega(\mathbf{k}) = sk$. Рассмотреть одно- дву- и трехмерные случаи.
- 11.2. Найти поведение плотности состояний фононов для вблизи экстремумов спектра $\omega(\mathbf{k}) = \omega_0 + a_{ij}k_i k_j$. Рассмотреть одно- дву- и трехмерные случаи. Привести к диагональному виду. Исследовать разные пределы.
- 11.3. Рассмотреть аналогичные особые точки для электронов и электронной плотности состояний.
- 11.4. Гранецентрированная кубическая решетка имеет зону Бриллюэна изображенную на рис. Какое минимальное число экстремумов существует в ячейке? Каково их вырождение?



- 11.5. Одной из критических точек является так называемый «нестинг». При нестинге спектр для определенной энергии перестает зависеть от импульса по определенному направлению. Показать, что нестинг существует а) в спектре графена в модели сильной связи; б) в квадратной решетке. Найти эффективные массы на линии нестинга. Найти поведение плотности состояний графена вблизи конической точки и точки нестинга.
- 11.6. Найти электронную теплоемкость в графене, когда уровень Ферми лежит вблизи конической точки или точки нестинга.

12. Взаимодействие электронов с фононами.

Взаимодействие электронов с колебаниями решетки происходит из-за того что при деформации в гамильтониане появляются слагаемые, зависящие от смещения атомов от равновесных положений. Так, при однородном изменении постоянной решетки энергии экстремумов зон в моделях сильной и слабой связи меняются. При деформации решетки полярного кристалла помимо этого появляются дальнедействующие электрические поля.

- 12.1. Найти деформационный потенциал в модели Кронига-Пенни в пределе слабой связи.
- 12.2. Найти деформационный потенциал в модели Кронига-Пенни в пределе сильной связи.
- 12.3. Найти деформационный потенциал в модели сильной связи в простой кубической решетке.
- 12.4. Найти деформационный потенциал в модели сильной связи в простой квадратной решетке.
- 12.5. Записать деформационный потенциал в модели сильной связи, предполагая атомы недеформируемыми, а матричные элементы переходов электронов между атомами решетки зависящими от деформации.
- 12.6. Записать гамильтониан электрон-фононного взаимодействия в приближении сильной связи, предполагая ампли-

туду перехода между атомами n и $n+1$ одномерной решетки сильной связи равной $t = t_0 + \beta(q_n - q_{n+1}) + \gamma(q_n - q_{n+1})^2$

- 12.7. Определить изменение сопротивления собственного кубического полупроводника при одноосной деформации, всесторонней деформации.
- 12.8. В одномерной цепочке сильной связи в трехмерном пространстве, считая волновые функции отдельного атома $\exp(-r/a)/r$.
- 12.9. В графене с теми же волновыми функциями.
- 12.10. Поляризация P_i в кубическом пьезоэлектрике пропорциональна его деформации $P_i = \lambda_{ijk} u_{jk}$. Найти гамильтониан взаимодействия деформации с электронами.

13. Экранировка и статические потенциалы в полупроводнике.

Заряженная примесь, внедренная в твердое тело со свободными электронами, вызывает перераспределение электронной плотности вокруг нее. Равновесная концентрация свободных электронов в классическом приближении есть

$$n(\mathbf{r}) = 2 \int \frac{1}{e^{(\varepsilon(\mathbf{p}) + e\varphi(\mathbf{r}) - \mu)/T} + 1} \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d}$$

Распределение потенциала описывают уравнением Пуассона

$$\chi \Delta \varphi = -4\pi e \delta(r) - 4\pi e (n(r) - n).$$

Здесь χ - диэлектрическая проницаемость среды. Предполагается, что на бесконечности кристалл электронейтрален, и $n(\infty) = \text{const} = n$.

Обычно предполагают, что потенциал, вызванный примесью мал и по нему концентрацию можно разложить. При $T \rightarrow 0$

$$n(\mathbf{r}) \approx \nu(\mu) e\varphi(\mathbf{r}),$$

$$\nu(\mu) = 2 \int \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu) \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d}.$$

Здесь $\nu(\mu)$ - плотность состояний электронов на уровне Ферми, двойка перед интегралом связана со спиновым вырождением. При высокой температуре, в больцмановском случае, $n(\mathbf{r}) \approx ne\varphi(\mathbf{r})/T$. На масштабах, соизмеримых с длиной волны электрона связь концентрации с потенциалом становится нелокальной (см. задачу 13.6.).

При большой величине потенциала связь концентрации с потенциалом оказывается нелинейной. Такая ситуация осуществляется, в частности, при экранировке слоями пространственного заряда в полупроводнике. Примеры - слой Шоттки, р-п переход, инверсионный слой. В таких системах потенциал зависит от одной координаты. При низкой температуре в слое Шоттки и р-п переходе осуществляется предельно сильная экранировка - слой обеднения, в котором отсутствуют носители вообще. В слоях сильного обогащения и инверсии плотность заряда носителей определяется числом

состояний под уровнем Ферми для электронов $\rho = e \int_0^{\mu} \nu(\varepsilon) d\varepsilon$ и над

уровнем Ферми для дырок.

- 13.1. Найти потенциал заряженной примеси в полупроводнике с больцмановским газом.
- 13.2. Найти распределение потенциала в р-п переходе, образованном резким контактом области п-типа при $x > 0$ с областью р-типа при $x < 0$.
- 13.3. На границе полупроводника с металлом химический потенциал электронов равен уровню Ферми металла. В ряде случаев это приводит к образованию слоя, обедненного электронами. Найти толщину слоя обеднения и потенциал в нем.
- 13.4. К поверхности п- полупроводника через тонкий диэлектрик приложено большое положительное напряжение. Найти потенциал и распределение электронов в слое обогащения. Рассмотреть случаи невырожденного и вырожденного электронного газа.
- 13.5. Найти емкость слоев пространственного заряда задач 13.3. и 13.4.

- 13.6. Найти выражение для поляризаационного оператора в металле, дающего связь наведенной концентрации с потенциалом $n_1(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}')$.
- 13.7. Найти потенциал заряженной примеси в металле с учетом квантовых эффектов.
Указание: использовать связь наведенной концентрации с потенциалом из предыдущей задачи.
- 13.8. Найти распределение потенциала в слоях обеднения и обогащения в случае линейной экранировки. Указание: подобно задаче 2.
- 13.9. Найти распределение потенциала в слое обеднения (сильное обеднение). Указание: подобно задаче 2.
- 13.10. Найти распределение потенциала в классическом слое обогащения в пределе сильного обогащения. Указание: $n = n_0 \exp(-e\varphi / kT)$, $e\varphi < 0$, $-e\varphi \gg kT$.
- 13.11. Найти распределение потенциала вокруг линейной заряженной дислокации (обеднение).
- 13.12. Найти потенциал заряженной примеси в двумерном слое с учетом экранировки двумерными классическими электронами и его двумерный фурье-образ.
- 13.13. Примесь расположена на расстоянии от двумерного слоя. Найти ее потенциал.

14. Примесные состояния.

Нарушение периодичности кристалла может приводить к возникновению локализованных состояний. Одним из наиболее известных видов таких состояний являются мелкие водородоподобные состояния. Они возникают в полупроводнике, один атом которой заменен примесью с валентностью на единицу больше или меньше основного. Локализованное состояние на таком атоме формируется из зонных волновых функций вблизи экстремумов зон, поэтому в роли массы носителя выступает эффективная масса. Для донора (заряд иона +1) это электроны из минимума зоны проводимости, для акцептора (заряд иона -1) - это дырки из потолка валентной зоны. Кулоновское взаимодействие носителя с ионом модифицируется самим полупроводни-

ком, в результате чего уменьшается обратно пропорционально диэлектрической проницаемости среды χ по сравнению со взаимодействием в пустом пространстве.

- 14.1. Найти энергию водородоподобного состояния в полупроводнике с изотропной массой.
- 14.2. По теории возмущений найти поправку к энергии основного состояния, связанную со слабой анизотропией масс в полупроводнике со спектром $\frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + \frac{p_z^2}{2m_z}$.
- 14.3. Решить ту же задачу с произвольной анизотропией с помощью вариационного принципа.
- 14.4. Водородоподобная примесь находится на поверхности полупроводника с изотропным спектром. Найти уровни энергии.
- 14.5. В трехмерной решетке сильной связи имеется примесь замещения, исходный атомный уровень которой отличается от остальных атомов на величину β . Показать, что энергия связанного состояния в кристалле может быть выражена через функцию Грина в узельном представлении $G_{\nu\nu'}(\varepsilon)$, $\nu = (n_x, n_y, n_z)$ обозначает номер узла:

$$\beta G_{00}(\varepsilon) = 1.$$

С помощью известного спектра найти уровень примеси в простой кубической решетке в приближении сильной связи.

- 14.6. С помощью вариационного принципа найти основное состояние заряженной примеси в полупроводнике с конечной концентрацией свободных электронов (больцмановский и вырожденный случаи).
- 14.7. Показать, что при увеличении концентрации электронов примесный уровень исчезает. При нулевой температуре найти критическую концентрацию перехода (переход Андерсена-Мотта). Найти зависимость концентрации свободных электронов от концентрации примесей.

15. Кинетика электронов.

Кинетику электронов в твердом теле принято описывать с помощью кинетического уравнения. В рамках этого уравнения вводится функция распределения электронов по импульсам и координатам $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$, дающая вероятность найти электрон в определенном интервале фазового пространства $d^3 p d^3 r$, $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) d^3 p d^3 r$. В отсутствие диссипативных процессов $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ подчиняется уравнению Лиувилля

$$\frac{d}{dt} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = 0.$$

Полную производную $\frac{d}{dt}$ в уравнении Лиувилля можно выразить через частные производные по координате и импульсу

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{d\mathbf{p}}{dt} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}},$$

где $\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})$ - скорость электрона, $\varepsilon(\mathbf{p})$ - спектр электрона в

кристалле, являющийся кинетической энергией (выражение для скорости следует из уравнения Гамильтона). Силу, действующую на электрон в электрическом \mathbf{E} и магнитном \mathbf{B} полях, можно записать в виде

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{B}].$$

При наличии столкновений электрон внезапно (на масштабе кинетических процессов) и случайно переходит с некоторой вероятностью $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ в другое состояние \mathbf{p}' , оставаясь в той же пространственной точке. В кинетическом уравнении столкновительные процессы учитываются «столкновительным» членом St :

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f + \frac{d\mathbf{p}}{dt} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f = St\{f\},$$

$$St\{f\} = \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} (W(\mathbf{p}', \mathbf{p})f(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t) - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t))$$

Первое слагаемое- приходный член обусловлен приходами электронов в состояние \mathbf{p} и увеличивает число электронов в этом состоянии за счет приходов из состояния \mathbf{p}' , второй- уходный связан с уходами из состояния \mathbf{p} в состояние \mathbf{p}' . Предыдущие формулы написаны для объемного кристалла. В случае систем более низкой размерности нужно заменить $d^3 p / (2\pi\hbar)^3$ на $d^d p / (2\pi\hbar)^d$, где d -размерность системы.

Вероятность рассеяния определяется типом процесса. Основные типы рассеяния электронов в твердом теле - рассеяние на примесях, на фононах и электрон-электронное. Для примесного рассеяния в борновском приближении по потенциалу атома

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} N |U(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')),$$

где $U(\mathbf{k}) = \int d^3 r e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} U(\mathbf{r})$ -фурье-образ потенциальной энергии взаимодействия электрона с отдельным примесным атомом, N - концентрация рассеивающих атомов. За рамками борновского приближения фурье-образ потенциала нужно заменить на соответствующую амплитуду рассеяния.

Для электрон-электронного рассеяния в процессе участвуют две рассеивающихся частицы. Принципа Паули разрешает переходы только в свободные состояния. С учетом этого в борновском приближении столкновительный член можно записать в виде

$$St\{f\} = -\frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{d^3 p' d^3 k d^3 k'}{(2\pi\hbar)^9} |U(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \times \\ \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{k}')) \delta(\mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{p}' - \mathbf{k}') \times \\ [f(\mathbf{p})f(\mathbf{k})(1 - f(\mathbf{p}'))(1 - f(\mathbf{k}')) - f(\mathbf{p}')f(\mathbf{k}')(1 - f(\mathbf{p}))(1 - f(\mathbf{k}))].$$

В данном случае под U понимается взаимодействие между электронами.

Для электрон-фононного рассеяния

$$\begin{aligned}
 St\{f\} = & -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{b}} \left\{ \int \frac{d^3 p' d^3 q}{(2\pi\hbar)^6} |C_{\mathbf{p},\mathbf{p}',\mathbf{q}}|^2 \left[\begin{aligned} & f(\mathbf{p}') (1 - f(\mathbf{p})) n(\mathbf{q}) - \\ & f(\mathbf{p}) (1 - f(\mathbf{p}')) (n(\mathbf{q}) + 1) \end{aligned} \right] \right\} \times \\
 & \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \hbar\omega(\mathbf{q})) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}' - \mathbf{q} - \mathbf{b}) + \\
 & \int \frac{d^3 p' d^3 q}{(2\pi\hbar)^6} |C_{\mathbf{p}',\mathbf{p},\mathbf{q}}|^2 \left[\begin{aligned} & f(\mathbf{p}') (1 - f(\mathbf{p})) (n(\mathbf{q}) + 1) - \\ & f(\mathbf{p}) (1 - f(\mathbf{p}')) n(\mathbf{q}) \end{aligned} \right] \times \\
 & \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) + \hbar\omega(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{p}')) \delta(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}' - \mathbf{b}) \}.
 \end{aligned}$$

В этом выражении $C_{\mathbf{p},\mathbf{p}',\mathbf{q}}$ -матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, $n(\mathbf{q})$ -число заполнения фононов с импульсом \mathbf{q} , \mathbf{b} -вектор обратной решетки. Первое слагаемое отвечает переходу из состояния \mathbf{p}' в \mathbf{p} с поглощением и обратный процесс с испусканием фонона, соответственно. Второе слагаемое дает процесс перехода из состояния \mathbf{p} в \mathbf{p}' с поглощением фонона и обратный процесс. В полупроводнике при переходах вблизи минимумов зон импульсы \mathbf{p} и \mathbf{p}' фиксированы и $C_{\mathbf{p},\mathbf{p}',\mathbf{q}} = C_{\mathbf{q}}$. В отсутствие переброса в сумме по векторам обратной решетки остается только член $\mathbf{b} = 0$. Процессы переброса исчезают при достаточно низкой температуре $T < \hbar\omega_{\mathbf{b}}$, так как они соответствуют конечному импульсу и, следовательно, энергии фонона.

Подстановка равновесной функции распределения обращает столкновительный член в ноль. Кинетическое уравнение является интегрально-дифференциальным и, вообще говоря, нелинейным. Его точное решение сопряжено со значительными трудностями.

При слабом отклонении от равновесия для решения кинетического уравнения пользуются его линеаризацией по неравновесной добавке к функции распределения по внешнему воздействию. Если таковым является внешнее электрическое поле, то в полевом слагаемом можно заменить функцию распределения на равновесную. Это, однако, не снимает всех трудностей.

Дополнительным существенным упрощением становится замена интегрального столкновительного члена на алгебраическое выражение, линейное по функции распределения и обращающееся в ноль для равновесной функции распределения:

$$St\{f\} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

Это приближение носит название приближение времени релаксации τ . Приближение времени релаксации оправдано для рассеяния на примесях в изотропной среде, когда вероятность рассеяния зависит только от энергии электронов и угла между импульсами налетающей и рассеянной частиц.

Градиенты температуры T и концентрации n вводятся в кинетическое уравнение с помощью слагаемого $\mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f$ в кинетическом

уравнении в отсутствии тянущего поля. Считая химический потенциал $\mu(\mathbf{r})$ и температуру $T(\mathbf{r})$ функциями координат, а функцию распределения в нулевом приближении – локально-равновесной

$f = f_0 \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu(\mathbf{r})}{T(\mathbf{r})} \right)$, где $f_0(x) = \frac{1}{e^x + 1}$ – функция Ферми, можно

преобразовать это слагаемое к виду $a\nabla T + b\nabla\mu = a\nabla T + b \frac{\partial\mu}{\partial n} \nabla n$.

Первое слагаемое соответствует обобщенной силе, связанной с градиентом температуры, второе – с градиентом концентрации носителей.

Кинетическое уравнение предполагает, что частицы можно описывать как классические. Формально это означает, что постоянная Планка стремится к нулю. На самом деле, условие применимости кинетического уравнения шире. В частности, оно применимо, когда процессы рассеяния происходят так редко, что между актами рассеяния частица успевает сформироваться как классическая. Это означает, что длина волны электрона должна быть меньше длины свободного пробега, или, что то же самое, энергия электрона гораздо больше ее неопределенности, вызванной столкновениями \hbar / τ .

В то же время, сам акт рассеяния может быть квантовым процессом. Например, это так для рассеяния в борновском приближении.

Другим ограничением применимости кинетического уравнения является требование к внешним полям, а именно, они должны быть неквантуемыми. Для магнитного поля это означает малость циклотронного кванта $\hbar\omega_c = \frac{\hbar eB}{mc}$ по сравнению с энергией электрона.

Для электрона с квадратичным спектром в электрическом поле критерий имеет вид $eE \ll \hbar^{-1} m^{1/2} \varepsilon^{3/2}$.

- 15.1. С помощью кинетического уравнения в приближении времени релаксации найти статическую проводимость металла с изотропным спектром.
- 15.2. Получить общий вид интеграла столкновений с примесями в кинетическом уравнении. Показать, что он обращается в ноль при подстановке функции распределения зависящей только от энергии электронов.
- 15.3. Получить общий вид интеграла для электрон-электронных соударений. Верно ли второе утверждение предыдущей задачи? Показать, что столкновительный интеграл обращается в ноль при подстановке равновесной функции распределения.
- 15.4. Получить общий вид интеграла столкновений электронов с фононами.
- 15.5. Показать, что в отсутствие столкновений и электрического поля равновесная функция распределения удовлетворяет кинетическому уравнению в магнитном поле.
- 15.6. Электроны с кинетической энергией $\varepsilon(\mathbf{p})$ движутся в потенциале $U(\mathbf{r})$. Показать, что кинетическому уравнению удовлетворяет функция распределения, зависящая от полной энергии электронов. Почему этот подход неприменим к задаче о токе в однородном электрическом поле?
- 15.7. Найти транспортное время свободного пробега для рассеяния электронов с квадратичным изотропным спектром на заряженных примесях.
- 15.8. То же самое для графена со спектром $\varepsilon(\mathbf{p}) = v\mathbf{p}$.

- 15.9. Найти время свободного пробега для рассеяния электронов с квадратичным изотропным спектром на примесном потенциале $u\delta(\mathbf{r})$ в борновском приближении.
- 15.10. То же что в предыдущей задаче, для псевдопотенциала и точно. Псевдопотенциал задается граничным условием на волновую функцию в нуле $\frac{\partial}{\partial r}(r\psi) = \alpha r\psi \big|_{r \rightarrow 0}$. Указание:
- Волновую функцию искать в виде $\psi = e^{ikr} + c \frac{e^{ikr}}{r}$.
- 15.11. Найти время электрон-электронной релаксации в невырожденном полупроводнике с квадратичным изотропным спектром.
- 15.12. Найти время релаксации на акустических фонах в невырожденном полупроводнике с изотропным простым спектром. Считать, что фононы находятся в равновесии.
- 15.13. Найти вероятность рассеяния двумерных электронов с квадратичным изотропным спектром на заряженных примесях. Рассмотреть борновское приближение с учетом экранировки и точную вероятность рассеяния для неэкранированного потенциала.
- 15.14. Та же одномерная задача. Считать, что квантовая проволока имеет конечную, но малую толщину.
- 15.15. Найти коэффициенты диффузии, электронной теплопроводности и термоЭДС для электронов с изотропным квадратичным спектром в отсутствие магнитного поля.
- 15.16. То же самое при наличии классического магнитного поля. Рассмотреть случаи слабого и сильного магнитного поля.
- 15.17. Найти общее решение кинетического уравнения в приближении времени релаксации в присутствии потенциала $U(z)$.
- 15.18. Найти стационарное решение кинетического уравнения в приближении времени релаксации в присутствии потенциала $U(z)$ и тянущего поля E_x .

16. Движение в магнитном поле.

- 16.1. Показать, что в отсутствие соударений электрон в магнитном поле движется в импульсном пространстве по сечению поверхности постоянной энергии плоскостью, перпендикулярной

полю. Найти циклотронную частоту ω_H для произвольного закона дисперсии.

- 16.2. Доказать соотношение между циклотронной частотой и площадью сечения S поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной магнитному полю

$$\omega_H = \frac{eB}{c\hbar^2} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon_F}$$

- 16.3. Введем величину

$$\phi = 2\pi \int^k \frac{dk}{|[\mathbf{vB}]|} / \oint \frac{dk}{|[\mathbf{vB}]|}.$$

Интегрирование идет по линии сечения поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной магнитному полю. Показать, что в приближении времени релаксации кинетическое уравнение в произвольном магнитном поле и слабом электрическом поле \mathbf{E} имеет вид

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \omega_H \frac{\partial f_1}{\partial \phi} + \frac{f_1}{\tau} = -e\mathbf{E}\mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

- 16.4. Задан тензор проводимости в магнитном поле параллельном оси z :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Найти тензор магнетосопротивления ρ_{ij} . Показать, что если

$$\frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}} \rightarrow 0, \text{ то и } \rho_{xx} \rightarrow 0.$$

- 16.5. Сопротивление образца из тонкой пленки проводника (толщиной d) измеряется четырехзондовым методом, $R_{ij,kl} = U_{kl} / I_{ij}$, i, j, k, l — номера контактов, расположенных на периферии образца). Показать, что для образца произвольной формы справедливо тождество:

$$\exp\left(-\pi \frac{d}{\rho} R_{12,34}\right) + \exp\left(-\pi \frac{d}{\rho} R_{23,41}\right) = 1,$$

где ρ — удельное сопротивление проводника (контакты пронумерованы по кругу по часовой стрелке, см. рис.8).

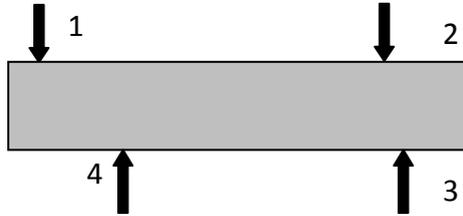


Рис.8 к задаче 16.3.

- 16.6. Найти компоненты тензора статической проводимости в проводнике с квадратичным изотропным спектром в слабом магнитном поле в приближении времени релаксации.
- 16.7. Решить точно линеаризованное кинетическое уравнение Больцмана для электронов с изотропным квадратичным спектром в произвольном (классическом) магнитном поле и переменном неоднородном электрическом поле $\mathbf{E}e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + c.c.$ в предположении времени релаксации. Найти тензор динамической электропроводности $\sigma_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.
- 16.8. Обобщить решение на случай изотропного упругого (вероятность перехода зависит только от угла рассеяния) рассеяния.
- 16.9. Произвести переход в предыдущей задаче к случаям сильного и слабого поля. Найти коэффициент Холла, магнетосопротивление в слабом магнитном поле, магнетосопротивление в сильном магнитном поле.
- 16.10. Показать, что в пределе низких температур магнетосопротивление равно нулю.
- 16.11. Найти магнетосопротивление в случае двух сортов носителей.
- 16.12. Найти тензор проводимости на конечной частоте в произвольном классическом магнитном поле в приближении времени релаксации.

- 16.13. Решить предыдущую задачу при наличии пространственной дисперсии.
- 16.14. Найти высокочастотный тензор проводимости изотропного проводника в произвольном магнитном поле при наличии примесного рассеяния, зависящего только от угла между падающей и рассеянной частицами.
- 16.15. В приближении времени релаксации найти коэффициенты диффузии, электронной теплопроводности и термоЭДС для электронов с изотропным квадратичным спектром в присутствии магнитного поля.

17. Горячие электроны.

- 17.1. Из кинематики процесса показать, что столкновение электрона с акустическим фононом в невырожденном полупроводнике является квазиупругим.
- 17.2. Вывести кинетическое уравнение в приближении времени релаксации для электронов в полупроводнике с учетом того, что упругое время релаксации значительно больше неупругого. С помощью него найти поправки к проводимости полупроводника в сильном электрическом поле. Использовать иерархию времен релаксации.
- 17.3. Вывести уравнение баланса для температуры электронов в сильном электрическом поле.
- 17.4. Пользуясь квазиупругостью взаимодействия электронов в полупроводнике с акустическими фононами вывести уравнение для функции распределения электронов по энергии.
- 17.5. Найти зависимость тока в сильном электрическом поле при наличии второго минимума (более высокого) со значительно большей эффективной массой и низкой подвижностью электронов. Показать, что вольт-амперная характеристика имеет падающий участок. Воспользоваться уравнениями баланса электронов

$$n_1 + n_2 = N_d$$

$$n_2 / n_1 = (N_{c,2} / N_{c,1}) e^{-\Delta/T_e}$$

- 17.6. На основе решения уравнения классической электродинамики показать, что в такой системе однородное распределение тока неустойчиво и может формироваться домен сильного поля. (Эффект Ганна).
- 17.7. Однородный полупроводник находится в классическом переменном однородном электрическом поле. Решить в приближении времени релаксации кинетическое уравнение во втором порядке по электрическому полю. Считать время релаксации зависящим от знака импульса. Найти стационарный электрический ток (фотогальванический эффект).

18. Полупроводник в сильном электрическом поле.

- 18.1. Энергетический спектр электрона в одномерной модели сильной связи имеет вид $\varepsilon(p) = 2t \cos(pa)$
- 18.2. С помощью уравнения Гамильтона решить задачу о классическом движении электрона в однородном стационарном электрическом поле.
- 18.3. Решить ту же задачу в общем случае уединенной зоны в трехмерной системе.
- 18.4. Найти уровни энергии линейной цепочки сильной связи в однородном электрическом поле (Штарковские уровни). Решить в скалярно-потенциальной и вектор-потенциальной калибровках.
- 18.5. Применить предыдущую задачу для нахождения состояний электронов в периодической сверхрешетке GaAs/GaAlAs, помещенной в сильное электрическое поле.
- 18.6. Решить уравнение движения электрона в графене с потенциалом Fx
- 18.7. Найти решение уравнения движения в однородном поле для электрона в модели сильной связи. (Решить уравнение движения для электрона с энергетическим спектром

- одномерной модели сильной связи $t \cos(ka/2\pi)$ в однородном электрическом поле.)
- 18.8. Найти траекторию движения электрона со спектром модели сильной связи в простом кубическом кристалле в сильном магнитном поле в координатном и импульсном пространствах в зависимости от энергии Ферми и импульса вдоль магнитного поля если магнитное поле направлено по осям $(1,0,0)$, $(1,1,0)$, $(1,1,1)$.
 - 18.9. То же в квадратной решетке. При каких условиях существуют инфинитные траектории?
 - 18.10. То же в случае графена.
 - 18.11. Найти состояния электрона в модели Дирака в сильном переменном высокочастотном электромагнитном поле.
 - 18.12. Предыдущая задача в постоянном электрическом поле. Воспользоваться векторной калибровкой $\varphi = 0$, $\mathbf{A} = \mathbf{E}t$.
 - 18.13. Найти вероятность перехода под действием слабого переменного электрического поля.
 - 18.14. То же самое в присутствии обоих полей. Разложить по слабому переменному полю, чтобы найти коэффициент электропоглощения.
 - 18.15. С помощью решения задачи 2 найти вероятность межзонного туннелирования в сильном электрическом поле.
 - 18.16. Применить решение задачи 4 для нахождения тока в туннельном диоде.

Указания к разделу «Полупроводник в сильном электрическом поле»

В рамках k-p теории возмущений волновые функции

$\psi = \sum u_{nk}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} a_n(\mathbf{k}, t)$ удовлетворяют уравнениям

$$i\dot{a}_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(t))a_n(\mathbf{k}) + \frac{e}{c}\mathbf{A}\mathbf{p}_{nm}a_m(\mathbf{k})$$

$$\mathbf{p}_{nm} = (u_{mk}^* \mathbf{p} u_{nk})$$

Здесь индекс нумерует зоны. Квазиимпульс в выбранной калибровке является сохраняющейся величиной. Последнее

слагаемое вызывает межзонные переходы. Пренебрегая ими, находим решение

$$a_n(\mathbf{k}) = e^{-i \int \varepsilon_n(\mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t)) dt}$$

По теории возмущений находим амплитуду межзонных переходов

$$T_{nm} = \frac{e}{c} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{A}(t) \mathbf{p}_{nm} e^{-i \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon_n(\mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t)) - (\varepsilon_m(\mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t)))) dt} dt$$

Вероятность межзонного перехода в стационарном поле. В этом случае $\mathbf{A}(t) = \mathbf{E}t$. Интеграл вычисляется по методу стационарной фазы. Стационарная точка соответствует минимуму интеграла в экспоненте, то есть равенству

$$\varepsilon_n(\mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t_0)) = \varepsilon_m(\mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t_0)).$$

Поскольку зоны проводимости и валентная не перекрываются, то стационарная точка соответствует комплексному времени. Неосциллирующие вклады определяются интегралом между точками остановки и t_0 . Для дираковского спектра

$$\varepsilon_{c,v}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\Delta^2 + k^2} \text{ и интеграл сводится к}$$

$$\frac{e}{c} \mathbf{p}_{cv} \mathbf{E} e^{-2 \int_0^{\frac{c}{eE} \sqrt{\Delta^2 + k_{\perp}^2}} \sqrt{\Delta^2 + k_{\perp}^2 - \left(\frac{eEt}{c}\right)^2} dt}$$

Уравнение сильной связи в однородном поле имеет вид

$$\varepsilon_n b_n = t(b_{n-1} + b_{n+1})$$

где уровни энергии

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 + eEna$$

Уравнение для b_n

формально совпадает с со связью функций Бесселя $J_n(x)$,
 где $x = \varepsilon_0 + eEa / t$

19. Оптика твердого тела.

- 19.1. Квазиодномерный ионный кристалл состоит из невзаимодействующих (редких) параллельных цепочек ионов типа A^+B^- $A^+B^- \dots A^+B^-$. с массами ионов m_A и m_B с жесткостью связей k , средняя плотность атомов n . Найти ионный вклад в высокочастотную диэлектрическую проницаемость одномерного ионного кристалла. Ионы описываются как одиночные классические осцилляторы. Случай малых ионных поправок.
- 19.2. В той же задаче найти локальные поля, действующие на отдельные ионы. Найти диэлектрическую проницаемость и сравнить с формулой Лорентц-Лоренца.
- 19.3. В той же задаче найти частоту собственных колебаний в пределе однородного электрического поля.
- 19.4. Решить ту же задачу в поле $\mathbf{E}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}-i\omega t}$ (поляритон).
- 19.5. Найти зависимость коэффициента отражения света в области поляритонного резонанса, считая опт-фононную поляризуемость малой поправкой.
- 19.6. Показать, что диэлектрическая проницаемость электронов в твердом теле может быть выражена через матричные элементы дипольного момента или импульса. (длинноволновый предел)
- 19.7. Найти с помощью формулы из предыдущей задачи высокочастотный и низкочастотный пределы диэлектрической проницаемости.
- 19.8. Выразить низкочастотную проводимость металла через матричные элементы импульса. (формула Кубо).
- 19.9. Найти диэлектрическую проницаемость электронного газа в классическом приближении. Найти высокочастотный предел и низкочастотную проводимость.

20. Оптика полупроводников.

- 20.1. Выразить диэлектрическую проницаемость полупроводника через межзонные матричные элементы скорости.
- 20.2. Найти коэффициент поглощения при прямых межзонных переходах между центральными экстремумами кубического полупроводника.
- 20.3. Решить предыдущую задачу с учетом кулоновского взаимодействия электронов и дырок в конечном состоянии.
- 20.4. Найти спектр экситонного поляритона в скалярной модели.
- 20.5. Найти коэффициент поглощения при ионизации водородо-подобного донора в кубическом полупроводнике с центральным минимумом. Рассмотреть переходы в зону проводимости и из валентной зоны на примесь.
- 20.6. Найти коэффициент поглощения на глубоких примесных центрах из задачи 14.5.
- 20.7. Почему кремний неприменим в качестве материала для полупроводникового лазера, а GaAs-применим? Найдите типичную длину волны излучения его. Почему длина волны излучения зависит от температуры?
- 20.8. Найти время безызлучательной рекомбинации электронов в прямозонном полупроводнике в пределах низких $T \ll \omega_D$ и высоких температур $T \gg \omega_D$. Смотри рис. 9. Считать температуру много меньшей ширины запрещенной зоны.

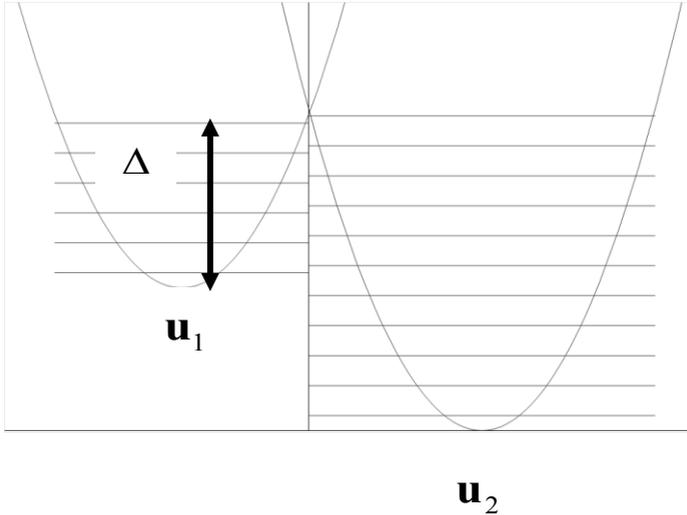


Рис.9. Конфигурационная диаграмма при безизлучательном переходе. В начальном состоянии электрона равновесное положение ионов находится в точке u_1 в конечном- в точке u_2 . Левая и правая параболы описывают электронные термы начального и конечного состояний.

21. Плазмоны.

В твердом теле возможны продольные собственные колебания электромагнитного поля, при которых поля не выходят за пределы вещества.

22.1. Показать, что в континуальном приближении диэлектрическая проницаемость системы свободных электронов имеет вид

$$1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \text{ где } \omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}, \text{ } n \text{ - концентрация электронов.}$$

- 22.2. Из решения уравнений Максвелла $\nabla \mathbf{D} = 0$ найти частоту собственных продольных электрических колебаний плазмы в длинноволновом пределе (плазмоны).
- 22.3. Показать, что при плазменных колебаниях металлической пластины с поляризацией поперек ее поверхности поле снаружи металла равняется нулю. Найти частоту колебаний.
- 22.4. Найти плазменные колебания ионного кристалла с диэлектрической проницаемостью $1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_0^2}$.
- 22.5. Найти поправки к диэлектрической проницаемости электронной плазмы по волновому вектору.
- 22.6. Найти в том же приближении частоту объемных плазмонов.
- 22.7. Найти затухание плазмона.

23. Плазмоны в неоднородных средах.

В неоднородной среде в длинноволновом пределе плазмоны удовлетворяют уравнению

$$\nabla(\varepsilon \nabla \varphi) = 0$$

Они являются нетривиальными решениями этого уравнения.

На границе разных однородных сред

$$[\varphi] = 0,$$

$$[\varepsilon \mathbf{n} \nabla \varphi] = 0.$$

Здесь \mathbf{n} - нормаль к границе.

- 23.1. В длинноволновом пределе найти частоту поверхностных плазменных колебаний металлического полупространства.
- 23.2. Диэлектрическая проницаемость полярной среды имеет вид

$$1 - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 - \omega_0^2 - i\gamma\omega)}$$

Найти плазменные поправки к частотам полярных оптических колебаний ω_0 .

- 23.3. Найти частоту плазменных колебаний тонкой металлической пластины(двумерного слоя).
- 23.4. То же самое для пленки конечной толщины.
- 23.5. Найти частоты дипольных плазменных колебаний диэлектрического шара из материала с диэлектрической проницаемостью из первой задачи. (Указание: воспользоваться формулой для поляризации шара во внешнем электрическом поле из БиТ)
- 23.6. Решить предыдущую задачу для эллипсоида.
- 23.7. Найти все собственные плазменные колебания металлического шара.
- 23.8. То же самое для металлического цилиндра.

24. Экситоны Френкеля.

Экситоны Френкеля – это возбуждение атома, способное перемещаться от одного однотипного атома к другому. Передача возбуждения происходит, как правило, за счет электрического дипольного взаимодействия между атомами, в то время как электроны остаются на месте. Гамильтониан взаимодействия, обеспечивающий переход возбуждения, имеет вид

$$H = \frac{r^2 (\mathbf{d}_i)_{nm'} (\mathbf{d}_j)_{n'n} - 3((\mathbf{d}_i)_{nm'} \mathbf{r}_{ij}) ((\mathbf{d}_j)_{n'n} \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5}$$

где \mathbf{r}_{ij} -вектор от атома i к атому j , $(\mathbf{d}_i)_{nm}$, матричный элемент дипольного момента между состояниями n и n' атома i .

- 24.1. Найти экситонные зоны в линейной цепочке из двухуровневых атомов в модели ближайших соседей.
- 24.2. Построить экситонные зоны в линейной цепочке А-В-А-В-
...
- 24.3. Построить экситонные зоны в модели ближайших соседей в структуре типа графена (рис. 10). Считать, что электрон и дырка сосредоточены на соседних неэквивалентных атомах элементарной ячейки.

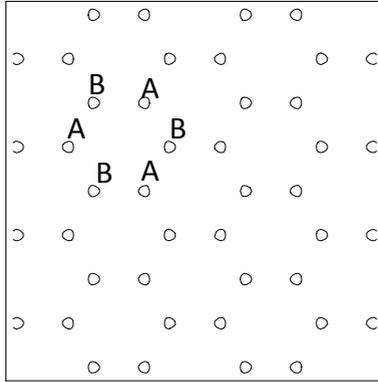


Рис.10. к задаче 24.3. Графеноподобная структура с двумя различными атомами в элементарной ячейке.

- 24.4. Уровень экситона ε_{ex} сдвигается за счет взаимодействия с деформацией ближайших атомов пропорционально ее величине в окрестности экситона на λu . Считая, что деформация описывается одной координатой u , а энергия деформации квадратична по деформации, найти в классическом приближении энергию экситона.

25. Экситоны Мотта.

В отличие от экситона Френкеля, в экситоне Мотта электрон и дырка сформировались из делокализованных состояний вблизи минимумов и максимумов соответствующих зон. Поэтому экситон Мотта построен как водородоподобное состояние. В прямозонном полупроводнике фотон может превращаться в экситон непосредственно. В непрямозонном полупроводнике для возбуждения экситона или его излучательной рекомбинации носители должны отдать большой импульс «третьему телу» - фонону, примеси и т.п.

Прямозонный полупроводник

- 25.1. Изотропная модель полупроводника. Спектр дырок в полупроводнике можно записать в виде

$$Ap^2 \pm \sqrt{B^2 p^2 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_z^2 k_y^2)}$$

Найти изотропизованные эффективные массы легкой и тяжелой дырки.

- 25.2. Найти энергетические уровни экситонов Мотта в прямозонном полупроводнике, считая спектры электронов и дырок изотропными.
- 25.3. Найти штарковское расщепление водородоподобных уровней экситона.
- 25.4. Найти зеемановское расщепление водородоподобных уровней экситона.
- 25.5. Найти спиновое расщепление основного состояния неподвижного экситона с учетом спина электронов и дырок.
- 25.6. Варизонный полупроводник имеет ширину запрещенной зоны $\Delta(x)$, зависящую от координат. Найти силу, действующую на экситон.
- 25.7. Найти коэффициент поглощения на экситонном переходе. Какие состояния являются поглощающими?
- 25.8. Найти время излучательное жизни экситона в GaAs.
- 25.9. Отрицательный ион водорода H^- имеет энергию ионизации 0,7эВ. Оценить энергию связи электрона в электронном трионе ($2e+h$) в GaAs.
- 25.10. Положительный ион водорода H_2^+ имеет разрыва связи 2,65эВ. Оценить энергию связи дырки в дырочном трионе ($e+2h$) в GaAs.
- 25.11. В изотропном приближении найти энергию основного и возбужденных состояний экситонов в GaAs. Электроны и дырки имеют изотропный спектр и массы $m_e=0.07m_0$, $m_h=0.5 m_0$, диэлектрическая проницаемость материала равна 12.

Непрямозонный полупроводник

- 25.12. В кремнии потолок валентной зоны лежит в центре зоны Бриллюэна, а дно зоны проводимости находится в направлении (100) (см. рис.6.).
- 25.13. В изотропном приближении найти энергию связи экситона из тяжелой дырки и электрона (параметры электронов и дырок найти в интернете).
- 25.14. Найти вырождение экситонного состояния. Такое состояние расщепляется за счет смешивания состояний электрона потенциалом дырки. Из соображений симметрии найти мультиплетность расщепленных состояний. Связать величину расщепления с матричными элементами потенциала между разными долинами.
- 25.15. Вариационным методом найти энергию связи непрямого экситона (тяжелая дырка-электрон) в кремнии.
- 25.16. Оценить излучательное время жизни в наинизшем состоянии непрямого экситона с учетом рассеяния на фононах.

26. Электроны в двумерной системе.

Обычным представителем двумерной системы является тонкий слой одного полупроводника в матрице из другого. За счет относительно малой массы электронов в полупроводнике волновая функция описывается в рамках модели огибающих блоховских функций. Перепад между экстремумами зон образует ступенчатый потенциальный барьер, ограничивающий движение электронов поперек слоя. В результате, движение электронов в этом направлении квантуется и образуются так называемые подзоны поперечного квантования. При достаточно малой концентрации электронов они заселяют только нижнюю подзону.

Термин «двумерная система» означает, что эффективное количество координат для свободного движения частиц в этой системе понижено до двух по сравнению с объемным материаль-

лом, где пространство трехмерно. Изменение размерности системы приводит к значительному изменению ее свойств.

Другой вариант низкоразмерной системы – инверсионный слой на поверхности полупроводника. Электрическое поле, приложенное через диэлектрик к поверхности полупроводника притягивает неосновные носители, образуя у поверхности слой пространственного заряда. Заряд в этом слое равняется заряду на полевом электроде. При большой величине поля образующаяся самосогласованная потенциальная яма квантует поперечное движение электронов. При низкой температуре электроны заселяют только одну подзону поперечного квантования.

Еще одна возможность создания двумерной системы – создание двумерного кристалла. В настоящее время наиболее известным таким материалом является графен.

Упомянем и еще один вариант двумерной системы - квантовую яму на основе дельта - слоя примесей. В процессе роста кристалла происходит легирование одного атомного монослоя примесями - поставщиками электронов или дырок. За счет большой концентрации все примесные уровни сливаются с разрешенной зоной, а носители выталкиваются, образуя двумерный слой около значительно более тонкого слоя примесей. Экранировка носителями примесного заряда происходит аналогично инверсионному слою.

Двумерные слои используются и для создания одно- и нульмерных систем. Дополнительное ограничение движения электронов происходит либо за счет потенциала, ограничивающего движение в плоскости, либо за счет вытравливания слоя материала, образующего двумерный слой. В результате образуются квантовые проволоки, в которых квазиклассическое делокализованное движение возможно по одной координате, или квантовые точки, где движение локализовано по всем координатам и спектр дискретен.

- 26.1. Найти энергетический спектр электрона в системе с прямоугольным потенциалом ямы $V(z) = -V_0\theta(z + d/2)\theta(d/2 - z)$. Найти плотность состояний и зависимость уровня Ферми от поверхностной концентрации электронов.

- 26.2. Барьер на границе GaAs/GaAlAs для электронов равен 0,32 эВ для дырок 0,12 эВ. Найти уровни квантования для электронов, легких и тяжелых дырок.
- 26.3. Решить ту же задачу для двойной квантовой ямы.

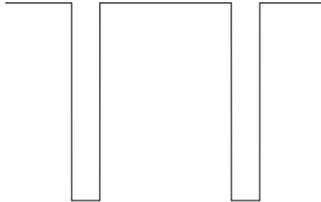


Рис.11 к задаче 26.3. Двойная квантовая яма.

- 26.4. Найти коэффициент поглощения света для межзонных переходов в двумерной системе.
- 26.5. Состояния в n-инверсионном канале на поверхности кремния образуются из-за квантования сильно вытянутых эллипсоидов. Если ориентация поверхности совпадает с (1,0,0), то наименее энергичной зоной является та, которая образуется из долин в направлении нормали. Почему?
- 26.6. В пределе сильной инверсии внешнее поле полностью экранируется электронами, сидящими в нижней подзоне поперечного квантования. Вариационным методом найти наименее энергичный уровень поперечного квантования а) в треугольной яме, б) с учетом самосогласованного потенциала.
- 26.7. Найти долинные расщепление долин в n-канале на (1,0,0) поверхности кремния.
- 26.8. Найти энергетический спектр в n-канале на вицинальной (1,0,n) ($n \gg 1$) поверхности кремния. Построить изоэнергетические поверхности.
- 26.9. Найти теплоемкость квантовой пленки с вырожденным электронным газом.
- 26.10. Найти уровни энергии в прямоугольной квантовой пленке в присутствии двумерной кулоновской примеси с потенциалом

$$U(\rho) = \frac{e^2}{\chi\rho}.$$

- 26.11. Найти уровни энергии двумерного электрона в квантующем магнитном поле, направленном вдоль нормали к поверхности.
- 26.12. Найти вырождение уровня Ландау.
- 26.13. Найти магнитный момент двумерной системы в магнитном поле, направленном по нормали.
- 26.14. Найти теплоемкость в предыдущей задаче.
- 26.15. Найти осцилляции магнитного момента в слабом магнитном поле, направленном по нормали.
- 26.16. Определить магнитную восприимчивость квантовой пленки в слабом тангенциальном поле. Перейти к пределу когда ширины стремятся к бесконечности, а затем температура стремится к нулю.
- 26.17. Двумерная система, изотропная в плоскости, имеет ориентированную поверхность, то есть физически верхняя и нижняя поверхности ее отличаются. Построить гамильтониан учитывающий спин электрона в низших порядках по импульсу электрона. Найти спектр электронов. (Спин-орбитальное взаимодействие Рашба)
- 26.18. Система из предыдущей задачи помещена в магнитное поле в плоскости образца. Найти ее спектр.

27. Квантовый эффект Холла.

- 27.1. Считая уровень Ферми заданным, найти холловскую проводимость в сильном магнитном поле в двумерной системе. (квантовый эффект Холла).
- 27.2. Рассмотреть классическое движение двумерного электрона в однородном магнитном поле и плавном потенциале. Показать, что электрон будет двигаться по линиям уровня потенциала.
- 27.3. Пусть потенциал является случайной функцией координат. Показать, что все линии уровня в предыдущей задаче замкнуты, за исключением одной.
- 27.4. Показать, что в присутствии плавного случайного потенциала $U(\mathbf{r})$ и потенциала однородного поля Fx результат задачи 1 не меняется.

- 27.5. Бабочка Хофштаттера. Пусть плавный потенциал имеет вид $V(x, y) = v \cos(2\pi x / a) + v \cos(2\pi y / a)$. Найти уравнение на собственные уровни. Показать, что состояния являются собственными для системы линейных уравнений $vC_{n-1} + vC_{n+1} + [2v \cos(4\pi^2 n c \hbar / a^2 e B + \gamma) - \varepsilon] C_n = 0$. Показать, что решение обладает периодичностью по параметру $2\pi n c \hbar / a^2 e B = p / q$, если q и p – целые числа. Решить систему с помощью компьютера. Построить состояния как функции p/q .
- 27.6. Найти зоны квантовой пленки с параболическим поперечным потенциалом $U(z) = kz^2$ в квантующем магнитном поле, направленном вдоль поверхности.
- 27.7. Найти спектр электронов в двумерной системе со спин-орбитальным взаимодействием в присутствии магнитного поля, направленного по нормали к поверхности.
- 27.8. С помощью перехода к пределу по большой толщине квантового слоя найти поверхностную энергию электронного газа в металле.
- 27.9. Два металлических полупространства расположены на расстоянии d друг от друга. Они образуют плоский резонатор для электромагнитного поля. Найти собственные электромагнитные колебания этого резонатора. Определить энергию нулевых колебаний и с помощью дифференцирования ее по расстоянию между обкладками найти силу взаимодействия. Каков знак этой силы?

29. Одномерные системы.

- 29.1. Найти зоны в квантовой проволоке с жесткими стенками.
- 29.2. Найти зоны в квантовой проволоке с асимметричным параболическим потенциалом
- 29.3. Исток и сток (двумерные «моря» электронов) находятся под разными близкими друг другу потенциалами. Они соединены квантовой проволокой, не влияющей на распределение потен-

- циалов внутри морей. Найти кондактанс системы. Показать, что он квантуется на величину кванта кондактанса e^2/h .
- 29.4. Точечный квантовый контакт соединяет два ферми-моря. Внутри ферми-морей имеется равновесие, химические потенциалы отличаются на величину заряда электрона умноженную на приложенное напряжение. Известны вероятности прохождения \bar{w}_p из состояния с импульсом \mathbf{p} слева направо и наоборот \bar{w}_p . Доказать, что полные вероятности прохождения слева направо и справа налево электронов с одинаковыми энергиями равны. Выразить кондактанс системы через вероятность прохождения.
- 29.5. Найти уровни энергии кулоновской примеси в тонкой квантовой проволоке.
- 29.6. Найти длину пробега электрона при рассеянии на кулоновской примеси в тонкой квантовой проволоке. Рассмотреть задачу в борновском приближении и точно.
- 29.7. С помощью предыдущей задачи найти проводимость одномерной проволоки при температуре, достаточно высокой, чтобы не учитывать процессы локализации. Рассмотреть невырожденный и вырожденный случаи.
- 29.8. Найти состояния электрона в планарной квантовой проволоке с потенциалом $V(y) = \frac{m\omega_0^2 y^2}{2}$ и магнитном поле B по нормали к поверхности образца. Воспользоваться калибровкой $A_x = By$. Сравнить результат с адиабатическим приближением.
- 29.9. Найти кондактанс баллистической квантовой проволоки из предыдущей задачи.
- 29.10. Резонансное туннелирование. Гетероструктура GaAs/GaAlAs/GaAs образует потенциальный барьер между двумя электронными морями. При приложении напряжения между истоком и стоком наблюдаются пики кондактанса как функции приложенного напряжения. Эти пики связываются с примесными уровнями в барьере. Объяснить явление. Найти зависимость тока от приложенного напряжения.
- 29.11. В цепочку сильной связи вставлен чужеродный атом, амплитуды перехода с которого на соседние атомы меньше основ-

ных. В первом приближении система разрывается на две несвязанные области. При подаче разности потенциалов уровни Ферми левого и правого подпространств отличаются на эту разность. Найти ток через систему при малом приложенном напряжении.

- 29.12. Найти ток резонансного туннелирования через структуру исток - туннельный диэлектрик - квантовая пленка - туннельный диэлектрик - сток в режиме малого приложенного напряжения.

30. Квантовые точки.

- 30.1. Если квантовая пленка ограничена в планарном направлении, так что в этом направлении электроны квантуются, она называется планарной квантовой точкой. Считая, что квантовая точка представляет собой плоский диск, найти уровни энергии электрона.
- 30.2. Найти уровни энергии в планарной квантовой точке с параболическим потенциалом $(k_1x^2 + k_2y^2)/2$.
- 30.3. Найти состояния в квантовой точке с потенциалом $k(x^2 + y^2)/2$ в магнитном поле B_z . Определить магнитный момент при заданном числе электронов. Переходом к пределу $k \rightarrow 0$ найти восприимчивость бесконечной системы.
- 30.4. Квантовый насос. Квантовая точка слабо связана с истоком и стоком. Параметры (не менее 2) этой системы испытывают медленное периодическое изменение. Показать, что в результате этих изменений за период через точку протекает заряд, кратный заряду электрона.

31. Другие низкоразмерные системы.

- 31.1. Квантовое кольцо радиуса R помещено в магнитное поле, направленное под углом к плоскости кольца. Найти период осцилляций Ааронова-Бома.

- 31.2. Оценить ток через иглу туннельного микроскопа.
- 31.3. Оценить силу, приложенную к игле атомного силового микроскопа и амплитуду ее смещения под действием этой силы.
- 31.4. По экспериментальной зависимости квантового эффекта Холла определить массу электрона и g-фактор.
- 31.5. Оценить величину тока в туннельном диоде из Si. Ширина p-n перехода равна 10^{-6} см.
- 31.6. Найти классическое магнетосопротивление материала с зонной структурой графена в зависимости от энергии Ферми.
- 31.7. Построить зону Бриллюэна и поверхность Ферми двумерного двухвалентного металла, кристаллизующегося в простую квадратную решетку и аналогичные задачи.
- 31.8. Найти транспортное время свободного пробега двумерного электрона на нейтральных примесях с двумерной концентрацией n и потенциалом $V(\mathbf{r}) = u\delta(\mathbf{r})$.
- 31.9. Найти транспортное время свободного пробега двумерного электрона на антиточках с двумерной концентрацией n и потенциалом $V(\mathbf{r}) = u\theta(\rho_0 - \rho)$.

32. Кулоновская блокада.

- 32.1. Найти емкость квантовой точки в структуре исток-туннельный диэлектрик - планарная квантовая точка - туннельный диэлектрик-сток в предположении, что толщина диэлектрика мала по сравнению с диаметром диска и энергию ее заряжения одиночным электроном. В каком случае энергия зарядки превышает расстояния между одноэлектронными уровнями?
- 32.2. В последнем предположении найти зависимость тока через квантовую точку в линейном режиме от уровня Ферми в истоке и стоке при конечной температуре. Показать, что ток испытывает периодические осцилляции.

33. Экситоны в двумерной и нульмерной системах.

- 33.1. Найти состояния пары электрон-дырка в изотропном приближении в тонкой квантовой пленке.
- 33.2. Найти вероятность поглощения света на межзонных экситонных переходах в квантовой пленке прямозонного полупроводника.
- 33.3. Некоторые стеклянные светофильтры делают добавляя в исходный материал полупроводниковые добавки, например, CdS. В процессе отжига эти вещества образуют квантовые точки –нанокластеры внутри стекла. Размер нанокластеров зависит от условий отжига. Эти кластеры поглощают свет в области межзонных переходов в экситонные состояния. Найти уровни экситонов в сферическом нанокристалле CdS, считая размер экситона значительно меньшим радиуса нанокристалла, а границу кристалла – непроницаемой для электронов и дырок.
- 33.4. Решить ту же задачу в противоположном пределе.
- 33.5. Найти размер нанокристаллов CdS в стекле от фиолетового до красного цветов.
- 33.6. Исходя из аналогии с водородом, оценить температуру конденсации экситонов в электрон-дырочные капли в кремнии при возбуждении светом с мощностью $0,1 \text{ Вт/см}^2$, коэффициент поглощения 10^3 см^{-1} . Время жизни экситонов 1нс. Считать массу дырок значительно большей массы электронов.
- 33.7. Оценить температуру бозе-конденсации экситонов в предыдущей задаче.
- 33.8. Найти энергию связи экситона в двойной квантовой яме с точностью до следующих слагаемых по толщине. Расстояние между ямами много больше их толщины. Расстояние между ямами D , толщина каждой из ям d , равновесная концентрация носителей мала, электрическое поле F .

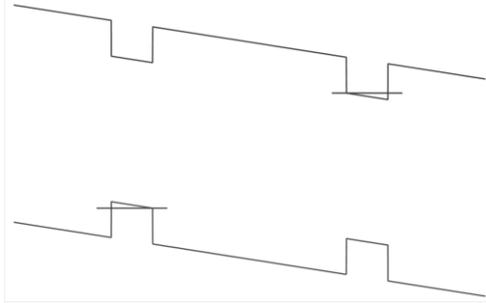


Рис.12. к задаче 33.8. Двойная квантовая яма во внешнем электрическом поле. Электроны и дырки сосредоточены, преимущественно, в разных ямах. Электрическое поле позволяет управлять энергией экситонов.

- 33.9. Показать, что экситоны в двойной квантовой яме из предыдущей задачи отталкиваются между собой и не могут образовать обычный конденсат. Найти температуру Бозе-конденсации.

34. Неупорядоченные системы.

Модель сильной связи со случайными уровнями атомов.

С помощью системы $\varepsilon_n b_n = t(b_{n-1} + b_{n+1})$ где уровни энергии

ε_n – случайные величины, равномерно распределенные в интервале $\pm W$

Найти численно:

- 34.1. Плотность состояний в большой решетке. Исследовать ее поведение в зависимости от энергии, w и t .
- 34.2. Поведение коэффициентов b_n при больших n . Воспользоваться рекурренцией для величины $z_n = b_n / b_{n-1}$ и тем, что

$b_n = z_n z_{n-1} \dots b_0$. Показать, что b_n растет экспоненциально с n . Показать, что амплитуда прохождения пропорциональна b_0 / b_n . Найти кондактанс структуры и показать, что он экспоненциально падает с длиной цепочки.

35. Проблемы.

- 35.1. Вдоль одной из ям в двойной квантовой яме пущен ток. Найти ЭДС во второй квантовой яме, определяемый туннелированием электронов между ними.

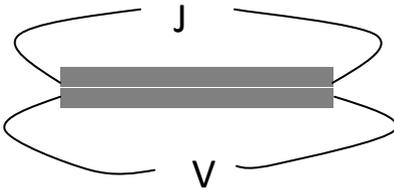


Рис.13 к задаче 35.1.

- 35.2. Аналогичная задача для параллельных квантовых проволок.
- 35.3. Вычислить добавку к энергии кристалла за счет нулевых колебаний фононов в одномерной решетке за счет конечности системы. Найти температурную зависимость поверхностной энергии. Воспользоваться спектром колебаний конечной цепочки, найденным в разделе «фононы».
- 35.4. Два металлических полупространства расположены на расстоянии d друг от друга. Электроны могут туннелировать из металла в металл. Определить составляющую силы, связанную с перекрытием волновых функций электронов. Указание: Вычислить энергию двойной квантовой ямы с заданной объемной плотностью электронов, устремить толщину квантовых слоев к бесконечности и продифференцировать энергию по расстоянию между ямами.
- 35.5. Найти силу Казимира между двумя квантовыми пленками. Показать знакопеременность этой силы.
- 35.6. Найти силу Казимира между двумя параллельными.

графеновыми плоскостями. Рассмотреть взаимодействие за счет плазмонной моды и туннелирования электронов.

- 35.7. Найти силу трения между двумя параллельными графеновыми плоскостями. Рассмотреть взаимодействие за счет плазмонной моды и туннелирования электронов.
- 35.8. Найти зависимость порога фотоэмиссии из графена от вертикального электрического поля.
- 35.9. Найти зависимость холодной эмиссии из графена от нормального к его поверхности электрического поля.

Ответы и решения

4.1. Уравнение движения:

$$m\ddot{u}_n = \alpha(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее теореме Блоха, имеет вид:

$$u_n = U_k e^{ikn - i\omega t},$$

где

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)$$

и U_k — частота и амплитуда колебания с волновым вектором k , a — постоянная решетки.

4.3 Пишем уравнения движения

$$m\ddot{u}_n = \alpha(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n), \quad n \neq 0$$

$$M\ddot{u}_0 = \alpha(u_1 + u_{-1} - 2u_0), \quad n = 0$$

Ищем решение системы в виде

$$u_n = u_0 (-1)^n e^{-\kappa a |n| - i\omega t}.$$

Тогда

$$m\omega^2 u_n = \alpha u_n (e^{-\kappa a} + e^{\kappa a} + 2),$$

$$M\omega^2 u_0 = \alpha u_0 (e^{-\kappa a} + e^{-\kappa a} + 2)$$

Здесь κ — декремент затухания локализованного состояния, остальные обозначения определены в решении задачи 4.1. Единственное действительное решение этой системы

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\alpha\gamma}{M(2\gamma-1)}}, \quad \kappa a = \ln\left(2\frac{m}{M}-1\right)$$

($\gamma = m/M$) имеет место, если $M < m$. Именно это условие обеспечивает выполнение неравенства

$$\omega > 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

Это означает, что уровень локализованного состояния должен быть вне разрешенной зоны.

4.4. Ищем решение системы

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_n &= \alpha(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n), & n \neq 0 \\ M\ddot{u}_0 &= \alpha(u_1 + u_{-1} - 2u_0), & n = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

в виде

$$u_n = \begin{cases} (e^{ikan} + R \cdot e^{-ikan})e^{-iot}, & n < 0 \\ T e^{ikan-iot}, & n \geq 0 \end{cases} \quad (2)$$

с $\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)$.

Ясно, что (2) обеспечивает решение первого уравнения системы (1), $n = 0, \pm 1$

для

Нетрудно убедиться, что условие

$$u_0 = T = 1 + R$$

обеспечивает выполнение этого уравнения и для $n = \pm 1$

. Из оставшегося уравнения найдем

$$T = \frac{2i\alpha \sin ka}{M\omega^2 + 2\alpha(e^{ika} - 1)}$$

4.5.

Ответ.

Локализованное состояние существует, если жесткость пружинки-примеси α_0 превышает жесткость остальных пружинок α . При этом

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\alpha_0}{m}}, \quad \kappa a = \ln\left(\frac{2\alpha_0}{\alpha} - 1\right)$$

4.10. Средняя энергия осциллятора равна $\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{d(\ln Z)}{dT}$, где

$$Z = \int e^{-\left[\frac{p^2}{2m} + U(x)\right] \frac{1}{k_B T}} dp dx \quad \text{— статсумма. Откуда}$$

$$C = \frac{d\langle E \rangle}{dT} = k_B \left[1 + \left(\frac{3f}{2c^2} + \frac{15g^2}{8c^3} \right) k_B T \right]$$

4.11. Ответ.

$$H = \int dx \rho (\dot{u}^2 + c^2 (\partial_x u)^2) / 2$$

Здесь $\rho = M/a$ - линейная плотность материала, $c = a\sqrt{k/M}$ - скорость звука.

4.13. Решение. Форма струны $\mathbf{r} = (x, \mathbf{u}(x))$, $\mathbf{u} = (u_y, u_z)$

Длина струны

$$\int \sqrt{1 + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)^2} dx$$

Удлинение

$$\int \sqrt{1 + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)^2} dx - \int dx \approx \int \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)^2 dx$$

Потенциальная энергия

$$U = F \int \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)^2 dx$$

Кинетическая энергия

$$T = \int \rho \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)^2 dx$$

Уравнение Лагранжа дает

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} + \frac{F}{\rho} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} = 0$$

Спектр колебаний

$$\omega = \sqrt{\frac{F}{\rho}} k$$

4.14. Потенциальная энергия свободной струны

$$U = \int \kappa \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} \right)^2 dx$$

Кинетическая энергия

$$T = \int \rho \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)^2 dx$$

Уравнение Лагранжа дает

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} + \frac{\kappa}{\rho} \frac{\partial^4 \mathbf{u}}{\partial x^4} = 0$$

Спектр колебаний

$$\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{\rho}} k^2$$

4.15. Решение

$$E = \sum_k \hbar \omega (n_k + 1/2) = \int \hbar \omega \left(\frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{T}} - 1} + 1/2 \right) \frac{dk}{2\pi}$$

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\hbar^2}{T^2} \int \omega^2 \frac{1}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1\right)^2} \frac{dk}{2\pi} =$$

$$\frac{T}{h} \sqrt{\frac{\rho}{F}} \int_0^\infty \frac{x^2}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{\pi^2 - 6\zeta(3)}{3} \frac{T}{h} \sqrt{\frac{\rho}{F}}$$

4.15. Решение.

Энергия k -ой моды колебаний есть (смотри теорему вириала)

$$\rho \dot{u}^2 = \rho \omega_k^2 u_k^2 = (n_k + 1/2) \hbar \omega_k.$$

Отсюда

$$\langle u^2 \rangle = \sum_k u_k^2 = L^d \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{n_k + 1/2}{\rho \omega_k}$$

4.28. Объяснение. Вигнеровская решетка- это классическая решетка, построенная из одинаковых зарядов. Предполагается, что противоположный заряд равномерно размазан в пространстве. Первоначально эта модель была предложена для оценки энергии связи металла. В такой постановке электроны являются делокализованными и почти равномерно размазанными по пространству, а ионы стоят в узлах решетки. К сожалению, плотность электронов перераспределяется, экранируя ионы, что делает эту модель не совсем точной. Однако в двумерных системах ВР возможна, если разнести пространственно носители заряда в квантовом канале и противоположные заряды на «полевой» электрод. Имеется конкуренция тепловых или квантовых флуктуаций зарядов, для конкретности, электронов и их упорядоченья за счет отталкивания.

4.31. Волна, падающая на решетку имеет импульс \mathbf{k} , рассеянная – $\mathbf{k}+\mathbf{K}$. Начальный фотон рентгеновского излучения имеет волновую функцию в точке ядра $n e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n+\mathbf{u}_n)}$, конечный фотон - $e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})(\mathbf{R}_n+\mathbf{u}_n)}$ (\mathbf{R}_n координата n -ого атома в покое, \mathbf{u}_n -его смещение). Волновая функция системы ядер +фотон в начальный момент $e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n+\mathbf{u}_n)} |i\rangle$, в конечный момент $e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})(\mathbf{R}_n+\mathbf{u}_n)} |f\rangle$ (i и f – начальное и конечное состояния кристалла).

Амплитуда рассеяния рентгена системой атомов равна

$$F(\mathbf{K}) \langle i | \sum_n e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_n + \mathbf{u}_n)} | f \rangle,$$

где $F(\mathbf{K})$ -амплитуда рассеяния на одиночном атоме. Вероятность рассеяния пропорциональна

$$|F(\mathbf{K})|^2 \left| \langle i | \sum_n e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_n + \mathbf{u}_n)} | f \rangle \right|^2 = |F(\mathbf{K})|^2 N \left| \langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{u}_0} | f \rangle \right|^2 \sum_n e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_n}.$$

Эту величину следует усреднить по положениям атомов с учетом их тепловых колебаний. При упругом рассеянии начальное и конечное состояния совпадают. В частном случае высоких температур

$T = 1/\beta$ атомы можно считать классическими и

$$\begin{aligned} \left| \langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{u}_0} | i \rangle \right|^2 &= \frac{\left| \int e^{i\mathbf{K} \frac{1}{V} \sum_k \mathbf{u}_k} e^{-\beta \frac{1}{V} \sum_k \rho \omega_k^2 \mathbf{u}_k^2} \prod d\mathbf{u}_k \right|^2}{\left| \int e^{-\beta \frac{1}{V} \sum_k \rho \omega_k^2 \mathbf{u}_k^2} \prod d\mathbf{u}_k \right|^2} \\ &= e^{-\frac{\beta K^2}{4} \frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{\rho \omega_k^2}} \end{aligned}$$

4.32. Указание. Разбить задачу на отдельные осцилляторы, соответствующие нормальным колебаниям и усреднить по состояниям осцилляторов величины типа $\left\langle \left| \langle \dots n'_k \dots | e^{i\mathbf{q}\mathbf{u}(\mathbf{x})} | \dots n_k \dots \rangle \right|^2 \right\rangle$, а затем провести статистическое усреднение.

Ответ

$$e^{-\frac{\beta K^2}{4} \int \frac{n_k + 1/2}{\rho \omega_k} \frac{d^3 k}{(2\pi\hbar)^3}}$$

6.7. Указание: Построение Харрисона: Чтобы получить поверхность Ферми в пределе пустой решетки, нужно построить ее для заданной концентрации электронов, определяемой валентностью. Затем эта поверхность транслируется на все вектора обратной решетки. По-

лученная картина приводится к первой зоне Бриллюэна. С учетом задачи 1 из предыдущего параграфа поверхности Ферми слегка искажаются вблизи границ ячеек, так, чтобы поверхность Ферми была ортогональна границе (почему?).

6.8. Пользуясь спектром в модели Кроннига-Пенни

$$\cos pa = \cos ka + \frac{m\beta}{\hbar^2 k} \sin ka$$

в модели почти свободных электронов имеем

$$\beta \rightarrow 0, \quad p = k, \quad E(p) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}$$

Это не так вблизи щели. Рассмотрим этот случай отдельно. Пусть $p = \pi/a - q$, $q \ll \pi/a$. Тогда

$$\begin{aligned} \cos pa &= -\cos qa \approx -1 + q^2 a^2 / 2, & ka &= \pi + \delta, \\ \sin ka &= -\sin \delta \approx -\delta, & \cos ka &\approx -1 + \delta^2 / 2 \end{aligned}$$

Дисперсионное уравнение Кроннига-Пенни принимает вид

$$\frac{q^2 a^2}{2} = \frac{\delta^2}{2} - \frac{m\beta a}{\pi \hbar^2} \delta = \frac{\delta}{2} \left(\delta - \frac{2m\beta a}{\pi \hbar^2} \right).$$

Это уравнение связывает энергию

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m \approx E_1 + \frac{\pi \hbar^2}{ma^2} \delta, \quad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

с волновым вектором q . Решая предыдущее уравнение относительно

$$\delta \quad E = E_1 - \frac{\pi^2 \hbar^4}{2m^2 \beta a} q^2$$

но , найдем

$$E = E_1 + \frac{\pi^2 \hbar^4}{2m^2 \beta a} q^2 + \Delta$$

и

Для нижней и верхней зон соответственно. Здесь $\Delta = 2\beta/a$ — ширина щели.

В приближении сильной связи полагаем $\beta \rightarrow \infty$, т. е. $\sin ka \rightarrow 0$ при $k \neq 0$. Пусть $ka = \pi n + \delta$. При $n = 1$ $\sin ka = -\delta$, $\cos ka = -1$, откуда $\delta = -\frac{\pi \hbar^2}{m\beta a}(1 + \cos pa)$. Тогда

$$E(p) = E_1 + \frac{\pi \hbar^2}{ma^2} \delta = E_1 - \frac{\pi \hbar^2}{m\beta a} - \frac{\pi \hbar^2}{m\beta a} \cos pa$$

Аналогично для $n = 2$ найдем

$$E(p) = E_2 + \frac{2\pi \hbar^2}{ma^2} \delta = E_2 - \frac{4\pi^2 \hbar^4}{m^2 \beta a^3} + \frac{4\pi^2 \hbar^4}{m^2 \beta a^3} \cos pa$$

6.8. Ответ: Спектр в модели Кроннига-Пенни определяется уравнением

$$\cos pa = \cos ka + \frac{m\beta}{\hbar^2 k} \sin ka$$

где $E_k = (\hbar k)^2 / 2m$ — энергия электрона, $\hbar p$ — его квазиимпульс.

7.4. Запишем гамильтониан сильной связи

$$H = \sum_n E_0 a_n^+ a_n + t \sum_n (a_n^+ a_{n+1} + \text{h.c.})$$

Здесь a_n^+ — оператор рождения электрона на n -м узле решетки, E_0 — энергия электрона на атоме в отсутствие других электронов, t — матричный элемент перехода между соседними атомами. Будем решать уравнение Шредингера $H\psi = E\psi$, полагая $\psi = \sum_i c_i a_i^+ |0\rangle$.

Тогда уравнение Шредингера принимает вид

$$E_0 \sum_n c_n a_n^+ + t \sum_n (c_{n+1} a_n^+ + c_n a_{n+1}^+) = E \sum_n c_n a_n^+$$

Состояния электрона, локализованные на разных атомах ортогональны. Это позволяет приравнять коэффициенты при каждом слагаемом a_n^+ . Это значит, что уравнение Шредингера приводит к системе уравнений на c_n

$$(E - E_0)c_n - t(c_{n+1} + c_{n-1}) = 0$$

Его решение, удовлетворяющее теореме Блоха, есть

$$c_n = c_0 e^{ipn}$$

При этом

$$E = E_0 + 2t \cos p$$

Это — знакомое дисперсионное уравнение для электрона в решетке в приближении сильной связи. Заметим, что уравнение Шредингера легко решается диагонализацией Гамильтониана путем Фурье преобразования

$$a_n = \sum_p e^{ipn} a_p$$

Действительно, прыжковую часть гамильтониана можно преобразовать как

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{t}{N} \sum_{p,p',n} \left[a_p^+ a_p e^{-ipn+ip'(n+1)} + a_p a_p^+ e^{ipn-ip'(n+1)} \right] = \\ &= t \sum_p a_p^+ a_p (e^{ip} + e^{-ip}) = 2t \sum_p \cos p a_p^+ a_p \end{aligned}$$

7.5. Запишем гамильтониан сильной связи в виде

$$H = \sum_n E_0 a_n^+ a_n + \varepsilon a_0^+ a_0 + t \sum_n (a_n^+ a_{n+1} + \text{h.c.})$$

Здесь $E_0 + \varepsilon$ — энергия примесного атома, локализованного в узле $n = 0$. Решение уравнения Шредингера ищем в виде

$$\psi = \sum_i c_i a_i^+ |0\rangle$$

Коэффициенты c_n удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{aligned} (E - E_0)c_n - t(c_{n+1} + c_{n-1}) &= 0, & n \neq 0 \\ (E - E_0 - \varepsilon)c_0 - t(c_1 + c_{-1}) &= 0, & n = 0 \end{aligned}$$

Пусть

$$c_n = \begin{cases} Ae^{\kappa(n+1)}, & n < 0 \\ c_0, & n = 0 \\ Be^{-\kappa(n-1)}, & n > 0 \end{cases}$$

Уравнение Шредингера удовлетворяется вдали от примеси ($|n| > 1$), если

$$E = E_0 + 2t \operatorname{ch} \kappa$$

Это уравнение позволяет записать уравнение сильной связи для атомов $n = 0, \pm 1$ в виде

$$\begin{aligned} tAe^\kappa - tc_0 &= 0, & n &= -1 \\ (E - E_0 - \varepsilon)c_0 - t(A + B) &= 0, & n &= 0 \\ tBe^\kappa - tc_0 &= 0, & n &= 1 \end{aligned}$$

Условие совместности этой системы

$$\varepsilon = 2t \operatorname{ch} \kappa$$

Позволяет связать коэффициент затухания волновой функции κ с положением уровня примеси ε относительно уровня атомов решетки E_0 . Уравнение имеет действительные решения, если

$$\varepsilon > 2t,$$

т. е. если уровень примеси находится вне зоны разрешенных состояний.

Для решения задачи о рассеянии плоской волны на примеси в одномерной цепочке ищем коэффициенты c_n в виде

$$c_n = \begin{cases} e^{ip(n+1)} + R e^{-ip(n+1)}, & n \leq 0 \\ T e^{ip(n-1)}, & n \geq 0 \end{cases}$$

Коэффициенты отражения R и прохождения T определяются уравнениями сильной связи для атома $n = 0$.

Ответ:

$$R = -\frac{\varepsilon e^{2ip}}{2it \sin p + \varepsilon}, \quad T = \frac{2ite^{2ip} \sin p}{2it \sin p + \varepsilon}$$

7.11. Ответ:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2} + 4 \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_x a \sqrt{3}}{2}}$$

7.14. Пусть z_n и Z_n - импедансы горизонтального и вертикального участков с номером n , $-c_n$ потенциал на n -ом узле сверху. Втекаю-

щий в n узел ток есть $(c_n - c_{n-1})/z_n + (c_n - c_{n+1})/z_{n+1} + c_n/Z_n = 0$.

Пусть все $z_n = i\omega L = i/t$, $Z_n = 1/i\omega C$, $2/z + 1/Z = -i\varepsilon$. Тогда система уравнений может быть переписана как

$\varepsilon c_n - t(c_{n-1} + c_{n+1}) = 0$, то есть в виде уравнений цепочки сильной

связи с решением $c_n = e^{ikn}$, $\varepsilon(k) = 2t \cos k$. Бегущая волна существует в разрешенной зоне. В запрещенной зоне убывающее решение задачи есть $c_n = e^{-kn}$, $\varepsilon(k) = 2t \operatorname{ch} k$. Отсюда можно получить частоту волны, распространяющейся по линии $\omega = \pm \frac{2}{\sqrt{LC}} |\sin(k/2)|$.

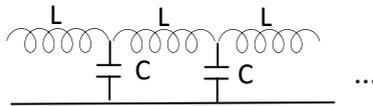


Рис.7 к задаче 7.14

9.2. Указание: дырочная зона построена из атомных p -подобных состояний. Матричные элементы вектора пропорциональны матричным элементам орбитального момента $l = 1$. Из-за инверсионной симметрии гамильтониан квадратичен по квазиимпульсу (почему?).

9.5. Указания:

Линейный по k гамильтониан строится при помощи скалярных комбинаций. В изотропной системе это $H = \alpha \mathbf{k} \mathbf{J}$, где \mathbf{J} - оператор соответствующего момента.

При наличии анизотропии $H = \alpha_{ij} k_i J_j$ тензор α_{ij} имеет симметрию кристалла. Аналогично для квадратичного гамильтониана.

12.1 Спектр электронов определяется выражениями

$$E = E_1 - \frac{\pi^2 \hbar^4}{2m^2 \beta a} q^2 \quad \text{и}$$

$$E = E_1 + \frac{\pi^2 \hbar^4}{2m^2 \beta a} q^2 + \Delta$$

Для нижней и верхней зон соответственно. Зависимость спектра от деформации определяется слагаемым

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2},$$

определяющим положение уровня, локализованного между дельта-барьерами. Ясно, что

$$\delta E_1 = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^3} \delta a = D \frac{\delta a}{a}.$$

Таким образом, константа D деформационного потенциала для обеих зон вблизи экстремума отрицательна.

Это нетрудно понять из следующих простых рассуждений. Увеличение расстояния между дельта-функциями, т.е. увеличение размера атома, означает уменьшение энергии электрона, локализованного на этом атоме. При неизменной прозрачности барьера ($\propto \beta$) это означает уменьшение энергии электронного газа.

12.5. Рассмотрим цепочку сильной связи

$$\hat{H} = t \sum_n (c_n^+ c_n + \text{h.c.})$$

В которой интеграл перекрытия t зависит от расстояния между атомами. Пусть

$$t \rightarrow t + D(q_{n+1} - q_n)$$

В представлении вторичного квантования

$$q_n = \sum_p \frac{1}{\sqrt{2m\omega_p N}} (a_p e^{ipn} + a_p^+ e^{-ipn})$$

Так, что

$$q_n - q_{n+1} = \sum_p \frac{1}{\sqrt{2m\omega_p N}} \left[a_p e^{ipn} (e^{ip} - 1) + a_p^+ (e^{-ip} - 1) \right] \approx$$

$$\approx \sum_p \frac{ip}{\sqrt{2m\omega_p N}} \left[a_p e^{ipn} - a_p^+ e^{-ip} \right]$$

Мы предполагаем испускание/поглощение длинноволновых фононов, для которых $p \ll 1$ (при этом величина pn может быть любой). Подставляя это в исходный гамильтониан сильной связи, найдем

$$\hat{H} = 2t \sum_k \cos k c_p^+ c_p + D \sum_{k,p} \frac{ip}{\sqrt{2m\omega_p N}} c_{k+p}^+ c_k (a_p - a_{-p}^+)$$

В этом выражении второй член отвечает за электрон-фононное взаимодействие, а параметр D играет роль деформационного потенциала. При этом $D > 0$. Действительно, уменьшение расстояния между атомами приводит к увеличению перекрытия волновых функций соседних атомов, а следовательно, и к уширению зон. Это означает уменьшение энергии электронов, локализованных вблизи дна зоны проводимости.

12.10. Указание к решению: Найти потенциал, создаваемый деформацией. В отсутствие свободных носителей потенциал подчиняется уравнению Пуассона

$$\chi \Delta \varphi = -4\pi \nabla \mathbf{P}$$

Здесь χ - диэлектрическая проницаемость среды. В присутствии свободных носителей,

$$\chi (\Delta \varphi + \kappa^2 \varphi) = -4\pi \nabla \mathbf{P},$$

где

$$\kappa^2 = 4\pi e^2 \frac{\partial n}{\partial \mu}$$

квадрат обратного радиуса Дебая, n -концентрация заряженных носителей, μ -химический потенциал.

13.1. Указание: соответствующая система уравнений на потенциал:

$$\varepsilon \Delta \varphi = 4\pi e (\delta(r) - (n - n_0))$$

$$n \approx n_0 + \frac{\partial n_0}{\partial \mu} e\varphi$$

13.2. Указание: решение определяется уравнениями и граничными условиями на потенциал в р-п переходе. В окрестности р-п – перехода потенциал настолько велик, что он полностью отталкивает и электроны и дырки. Слева есть только заряженные акцепторы с концентрацией, совпадающей с концентрацией p дырок при $x \rightarrow -\infty$, справа- только доноры с концентрацией, совпадающей с концентрацией электронов при $x \rightarrow \infty$. Внутри р-п перехода концентрация электронов пренебрежима. Потенциал описывается системой уравнений.

$$\varepsilon \Delta \varphi = 4\pi \rho$$

$$\rho = eN_a \quad \text{при } x < 0$$

$$\rho = -eN_d \quad \text{при } x > 0$$

$$\left. \begin{array}{l} [\varphi] = 0 \\ [\frac{\partial \varphi}{\partial x}] = 0 \end{array} \right\} \text{при } x = 0$$

$$\left. \begin{array}{l} \varphi = 0 \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0 \end{array} \right\} \text{на границах слоя истощения } x = -d_1, x = d_2.$$

13.5. Указание: воспользоваться теорией возмущений:

$$\psi_p(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{p}'} \langle \mathbf{p} | e\varphi | \mathbf{p}' \rangle \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')} e^{i\mathbf{p}'\mathbf{r}} + \dots,$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} |\psi_p(\mathbf{r})|^2 f_0(\mathbf{p}),$$

где $f_0(\mathbf{p})$ - функция Ферми. Рассмотрим случай нулевой температуры. Ответ

$$\Pi(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \Pi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \dots,$$

$$\Pi(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{f_0(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - f_0(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q})}.$$

14.5. Решение.

Система уравнений на коэффициенты имеет вид:

$$H_{nn'} c_{n'} = \varepsilon c_n,$$

$$\text{где } H_{nn'}^0 = \varepsilon_0 \delta_{nn'} + t_{n-n'}, \quad H_{nn'} = (\varepsilon_0 + \beta \delta_{n0}) \delta_{nn'} + t_{n-n'}.$$

Введем обратную матрицу (дискретную функцию Грина) $G_{nn'}$ для матрицы $H_{nn'}^0 - \varepsilon \delta_{nn'}$:

$$(H_{nn'}^0 - \varepsilon \delta_{nn'}) G_{nn'} = \delta_{nn'}.$$

Исходное уравнение может быть записано в виде

$$c_0 + \beta G_{00} c_0 = 0, \quad c_n = -\beta G_{n0} c_0.$$

Из первого уравнения получаем

$$1 + \beta G_{00} = 0.$$

G_{00} можно найти с помощью Фурье-преобразования. Фурье-образ от $H_{nn'}^0$ равен

$$\sum_{nn'} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a}_n - \mathbf{k}'\mathbf{a}_{n'})} H_{nn'} = (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + \sum_n t_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n}.$$

С помощью обратного преобразования Фурье находим

$$G_{00} = \int \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \frac{d^d k}{(2\pi)^d}$$

Для одномерной простой решетки получаем

$$\beta \int \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_0 - 2t \cos ka} \frac{dk}{2\pi} = 1.$$

Для простой квадратной решетки

$$\beta \int \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_0 - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} = 1.$$

Для простой кубической решетки

$$\beta \int \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_0 - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = 1.$$

15.1.

Решение.

$$eE \frac{\partial f_0(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f_1}{\tau}$$

$$\mathbf{j} = 2 \int \mathbf{v} f_1 \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

16.1. Ответ:

$$T_H = \frac{2\pi}{\omega_H} = \frac{ch}{e} \oint \frac{dk}{|[\mathbf{Bv}(\mathbf{k})]|}$$

16.7. Рассмотрим электромагнитное поле вида $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{kr} - i\omega t)} + c.c.$

В линейном по полю приближении кинетическое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1 + \frac{e}{c} [\mathbf{vH}] \frac{\partial f_1(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_1 + \frac{f_1}{\tau} = e\mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_0.$$

Будем искать отклик на поле $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{kr} - i\omega t)}$ в виде $f_1 \sim e^{i(\mathbf{kr} - i\omega t)}$.

Тогда

$$(-i\omega + i\mathbf{kv} + \frac{e}{c} [\mathbf{vH}] \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + 1/\tau) f_1 = e\mathbf{E}\mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} f_0(\varepsilon).$$

С помощью подстановки $f_1(\mathbf{p}) = \mathbf{A}(\varepsilon)\mathbf{v} \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}$ уравнение становится алгебраическим:

$$(-i\omega + i\mathbf{kv} + 1/\tau)(\mathbf{A}(\varepsilon)\mathbf{v}) + \frac{e}{mc} [\mathbf{vH}]\mathbf{A}(\varepsilon) = e\mathbf{E}\mathbf{v}.$$

Представим $\mathbf{A}(\varepsilon)$ в виде $\mathbf{A} = A_H \mathbf{H} / H + [\mathbf{A}_\perp \mathbf{H}] / H$. Тогда

$$(-i\omega + i\mathbf{k}\mathbf{v} + 1/\tau)(\mathbf{A}(\varepsilon)\mathbf{v}) + \frac{e}{mc}[\mathbf{v}\mathbf{H}]\mathbf{A}(\varepsilon) = e\mathbf{E}\mathbf{v}.$$

Плотность тока равна

$$j_i = 2e \int v_i f_1 \frac{d^d p}{(2\pi)^d} = 2e^2 \int v_i (\mathbf{v}\mathbf{A}) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} f_0(\varepsilon) \frac{d^d p}{(2\pi)^d}$$

17.1. Законы сохранения энергии и импульса дают

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{k})^2}{2m} + sk$$

s - скорость фонона. Типичный импульс испускаемого фонона $k \sim p$. Скорость фонона значительно меньше скорости электрона p/m . Поэтому передаваемая фонону энергия $sk \ll p^2/2m$ и процесс квазиупругий.

17.3.

Ответ:
$$\frac{3}{2} \frac{T_e - T}{\tau_\varepsilon} n_e = \sigma E^2$$

17.4.

Изменения энергии электронов при столкновении с примесями не происходит. При испускании и поглощении фононов электрон изменяет свою энергию маленькими порциями и случайно. Поэтому процесс можно описывать как диффузию в пространстве энергий. Число электронов с данной энергией равно $\nu(\varepsilon)f(\varepsilon)$, где $f(\varepsilon)$ - функция распределения, усредненная по изоэнергетическому слою.

Направленный поток по энергии равен $j_\varepsilon = \frac{\varepsilon}{\tau_\varepsilon} (\nu(\varepsilon)f(\varepsilon))$, где τ_ε -

время энергетической релаксации. Этот поток следует пополнить диффузионным потоком, пропорциональным производной по энергии от числа электронов с заданной энергией $\nu(\varepsilon)f(\varepsilon)$, из таких соображений, чтобы в условиях равновесия полный поток равнялся нулю. Для невырожденного полупроводника

$$\bar{j}_\varepsilon = j_\varepsilon + j_D = -\frac{\varepsilon}{\tau_\varepsilon} \left(\nu(\varepsilon) \left(f(\varepsilon) + T \frac{\partial}{\partial \varepsilon} f(\varepsilon) \right) \right). \quad \text{Здесь } \tau_\varepsilon \text{ - время}$$

энергетической релаксации. Уравнение для \bar{j}_ε есть

$$\frac{\partial}{\partial t} (\nu(\varepsilon) f(\varepsilon)) + \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \bar{j}_\varepsilon = g(\varepsilon).$$

Под величиной $g(\varepsilon)$ понимается количество электронов, поставляемых другими процессами в данную энергию за единицу времени. Разогрев электронов внешним стационарным электрическим полем увеличивает энергию электронов с начальной

энергией ε на $j_E = \mathbf{j}(\varepsilon) \mathbf{E} = \frac{e^2 \tau_p}{m} E^2 (\nu(\varepsilon) f(\varepsilon))$. Это определяет

дополнительный поток в энергетическом пространстве вверх по энергии. В стационарных условиях при отсутствии другой генерации $j_E + \bar{j}_\varepsilon = 0$. Отсюда получаем уравнение

$$\left(1 - \frac{\eta}{\varepsilon}\right) f(\varepsilon) + T \frac{\partial}{\partial \varepsilon} f(\varepsilon) = 0,$$

$$\eta = \frac{e^2 \tau_p \tau_\varepsilon}{m} E^2$$

Решение последнего уравнения имеет вид

$$f(\varepsilon) = f_0 \exp \left(+ \frac{1}{T} \int_\varepsilon^\infty (1 - \eta / \varepsilon) d\varepsilon \right)$$

17.6. Указание: Использовать систему уравнений, включая уравнение непрерывности и Пуассона, показать, что малая волна становится нарастающей.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0$$

$$\varepsilon \nabla \mathbf{E} = 4\pi \rho$$

$$\mathbf{E} = (E, 0, 0)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 e^{ikx - i\omega t}$$

$$j(E) = j(E_0) + \alpha E_1 e^{ikx - i\omega t}$$

$$\alpha = \frac{\partial j(E_0)}{\partial E_0}$$

$$\left(\frac{\omega}{4\pi} k \varepsilon - ik\alpha \right) E_1 = 0$$

$$\omega = \frac{i4\pi\alpha}{\varepsilon}$$

Т.е. решение убывает при $\alpha > 0$ и нарастает при $\alpha < 0$.

18.4.

Указание к задаче: Стационарная калибровка

$$\text{Уравнение Шредингера } iF \frac{\partial}{\partial p} a_n(p) + (\varepsilon_n(p) - E) a_n(p) = 0.$$

$$\text{Условие периодичности } a_n\left(p + \frac{2\pi}{a}\right) = a_n(p),$$

$$\text{Решение } a_n(p) = e^{i\frac{E}{F}p - i\frac{1}{F} \int \varepsilon_n(p) dp}$$

Условие квантования

$$E = neFa + \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \varepsilon_n(p) dp$$

19.6. Вероятность перехода в единицу времени одного электрона между состояниями i и f под действием периодического электри-

ческого поля $\mathbf{E}e^{i\omega t} + \mathbf{E}^*e^{-i\omega t}$, дающего гамильтониан возмущения $e\mathbf{E}\mathbf{x}e^{i\omega t} + c.c.$, есть

$$dw_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |e\mathbf{E}\mathbf{x}_{if}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega).$$

Чтобы найти поглощаемую мощность, нужно умножить эту величину на число электронов в начальном состоянии $f(\varepsilon_i)$, на число пустых мест в конечном состоянии $1 - f(\varepsilon_f)$, на энергию, поглощаемую в переходе $\hbar\omega$ и просуммировать по всем состояниям. С другой стороны, поглощаемая мощность W выражается через проводимость на частоте ω $\sigma_{nm}(\omega)$: $W = 2\sigma_{nm}(\omega)E_nE_m^*$. Отсюда получаем для проводимости

$$\sigma_{nm}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{\omega^2} \sum_{nm} v_{n,if} v_{m,fi} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega) (f(\varepsilon_i) - f(\varepsilon_f)).$$

Здесь $v_{n,if}$ -матричный элемент скорости между состояниями i и f .

20.6. Указание. В узельном представлении для нахождения взаимодействия с электромагнитным полем необходимо дополнить гамильтониан слагаемыми, учитывающими это поле. Диагональный матричный элемент дипольного момента на состоянии одного атома обращается в ноль, поэтому нужно учесть ближайшие соседи. Гамильтониан взаимодействия приобретает вид

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{i\omega} \mathbf{A}\mathbf{p}_{VV'} + c.c. =$$

$$\frac{e}{i\omega} \eta (A_x \delta_{n_x+1, n_x} \delta_{n_y, n_y} \delta_{n_z, n_z} +$$

$$A_y \delta_{n_x, n_x} \delta_{n_y+1, n_y} \delta_{n_z, n_z} + A_z \delta_{n_x, n_x} \delta_{n_y, n_y} \delta_{n_z+1, n_z}) + c.c.$$

Здесь η -некоторый коэффициент. Чтобы найти коэффициент поглощения при переходах примесь-зона, необходимо обложить этот гамильтониан волновыми функциями связанного состояния из задачи 14.5. и свободного движения, учитывающей наличие примеси. Далее квадрат матричного элемента по золотому правилу дает вероятность оптического перехода.

20.8. Указание. Безызлучательная рекомбинация происходит за счет перехода между состояниями с излучением не фотонов, а фононов. Поскольку излучаемая энергия значительно превосходит дебаевскую частоту фононов, происходит излучение большого числа фононов. Амплитуда этого процесса является произведением волновых функций начального и конечного состояний системы электрон+фононы. Электронный переход происходит между пересекающимися термами (уровнями электрона при неподвижных, но сдвинутых ионах). Амплитуда такого процесса пропорциональна матричному элементу от потенциала взаимодействия электронов с фононами, умноженной на перекрытие колебательных волновых функций $\varphi_n(\mathbf{u}-\mathbf{u}_1)$ и $\varphi_m(\mathbf{u}-\mathbf{u}_2)$. Величины \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 дают сдвиг центра масс фононного осциллятора в начальном и конечном состояниях. Первая величина в вероятности перехода дает обратное время релаксации при взаимодействии электронов с фононами, а вторая- величину $\left| \int \varphi_n(\mathbf{u}-\mathbf{u}_1)\varphi_m(\mathbf{u}-\mathbf{u}_2)d\mathbf{u} \right|^2$. При высокой температуре барьер преодолевается за счет теплового возбуждения колебаний, при низкой температуре- туннельным образом с нижнего колебательного состояния. Поэтому при высокой температуре вероятность перехода пропорциональна $e^{-\frac{\Delta}{T}}$, а при низкой температуре- $|\varphi_0(-\mathbf{u}_1)\varphi_m(-\mathbf{u}_2)|^2$ при $\varepsilon_m^{(2)} \approx \varepsilon_0^{(1)}$. Далее следует найти эту величину $|\varphi_0(-\mathbf{u}_1)\varphi_m(-\mathbf{u}_2)|^2$ при $\varepsilon_m^{(2)} \approx \varepsilon_0^{(1)}$.

22.2. Поскольку $\mathbf{D} = 0$, а $\mathbf{E} \neq 0$, то диэлектрическая проницаемость

$$\chi = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = 0. \text{ Отсюда } \omega = \omega_p.$$

22.3. Скачек нормальной компоненты \mathbf{D} равен нулю. Поскольку снаружи поле совпадает с поляризацией и равно нулю, а то внутри при конечном \mathbf{E} диэлектрическая проницаемость должна обращаться в ноль, то есть $\omega = \omega_p$.

23.1. Потенциал удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\varphi = 0$ и граничным условиям $[\varphi] = 0$, $\left[\varepsilon \frac{\partial\varphi}{\partial z} \right] = 0$.

Снаружи $\varepsilon_1 = 1$, внутри $\varepsilon_2 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$

Ищем решение в виде, удовлетворяющем первому условию

$$\varphi = \varphi_0 e^{ikp} e^{-k|z|}.$$

Подстановка во второе граничное условие дает

$$-k(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\varphi_0 = 0.$$

С учетом того, что $\varphi_0 \neq 0$, отсюда получаем $(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) = 0$, или $\omega = \omega_p / \sqrt{2}$.

23.3. Снаружи пластины потенциал удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\varphi = 0$. На границе выполнены граничные условия

$$[\varphi] = 0, \quad \left[\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right] = 4\pi\rho d.$$

Здесь d - толщина пластины, ρ - объемная плотность заряда. Диэлектрическая проницаемость пластины равна $1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$. Ищем решение

уравнения Лапласа для волны бегущей вдоль поверхности и затухающей от пластины в виде $\varphi = \varphi_0 e^{ikp} e^{-k|z|}$. Такой вид удовлетворяет уравнению Лапласа и первому граничному условию. Подставляя соотношение для объемной плотности заряда $\rho = \nabla\mathbf{P}$ во второе граничное условие, находим частоту плазмонов

$$\omega = \omega_p \sqrt{kd/2}.$$

24.4. Решение. Энергия экситона без учета деформации ε_0 . С учетом деформации энергия системы становится $\varepsilon_{ex} = \varepsilon_0 + \lambda u + ku^2/2$. Минимизируя по деформации, находим $\varepsilon_{ex} = \varepsilon_0 - \lambda^2/2k$. Второе слагаемое представляет собой так называемый поляронный сдвиг энергии экситона.

25.5. Решение. При нулевом импульсе гамильтониан взаимодействия спинов электрона и дырки есть $H = \alpha(\mathbf{S}\mathbf{J})$. Момент электрона $S=1/2$. С учетом спин-орбитального расщепления $J=3/2$. Полный спиновый момент экситона K может быть равен 1 или 2. Сдвиги

$$\delta\varepsilon_K = \alpha(K(K+1) - J(J+1) - S(S+1)) / 2,$$

уровней энергии равны $\delta\varepsilon_{K=2} = \frac{3}{4}\alpha$, вырождение 5

$$\delta\varepsilon_{K=1} = -\frac{5}{4}\alpha \text{ вырождение 3.}$$

26.6. Решение. Электроны находятся на одном поперечном уровне и при этом полностью экранируют внешнее поле. Распределение плотности повторяет квадрат волновой функции поперечного движения. Волновая функция обращается в ноль на поверхности и на бесконечности. Удобная пробная функция есть $z e^{-bz}$. Волновая функция должна минимизировать энергию электронного газа при заданной поверхностной плотности электронов:

$$H = T + U,$$

$$T = \frac{1}{2m} N_s \int \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 dz,$$

$$U = -4\pi \frac{e^2 N_s^2}{2\chi} \int_0^\infty \int_z^\infty (z' - z) \psi^2(z) \psi^2(z') dz' dz$$

Нормировка дает $\psi = 2b^{3/2} z e^{-bz}$. Подставляя в H и минимизируя по b , получим

$$b = \frac{(15/2)^{1/3} e^{2/3} m^{1/3} N_s^{2/3} \pi^{1/3}}{2\hbar^{2/3}}$$

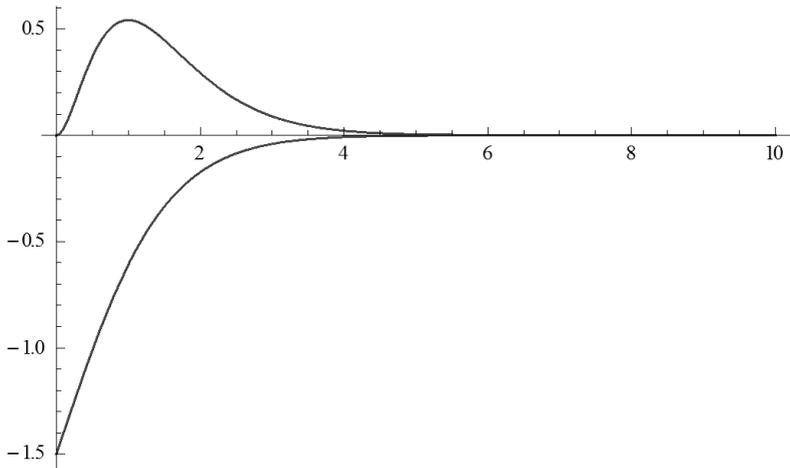


Рис.14 к задаче 26.6. Нижняя кривая-ход потенциала, верхняя кривая-волновая функция.

26.7. Указание: В объемном кремнии эллипсоиды зоны проводимости направлены вдоль осей $(1,0,0)$. При квантовании поперечного движения зоны, образовавшиеся из долин $(1,0,0)$ и $(-1,0,0)$ гибридизуются. Без гибридизации они имеют спектры

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_0 + \frac{p^2}{2m_{\perp}}$$

Потенциал канала смешивает состояния с одинаковым импульсом вдоль поверхности. Соответствующий гамильтониан имеет матричный вид

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 + \frac{p^2}{2m_{\perp}} & V \\ V & \varepsilon_0 + \frac{p^2}{2m_{\perp}} \end{pmatrix}$$

26.8. На слабо отклоненной поверхности центры долин «разъезжаются» на расстояние между их минимумами $2P$, спроектированное на плоскость. Гамильтониан приобретает вид

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 + \frac{(p_x - p_0)^2}{2m_{\perp}} + \frac{p_y^2}{2m_{\perp}} & V \\ V & \varepsilon_0 + \frac{(p_x + p_0)^2}{2m_{\perp}} + \frac{p_y^2}{2m_{\perp}} \end{pmatrix},$$

$$p_0 = P/n$$

26.18. Гамильтониан с учетом спина является оператором в спиновом пространстве. Он должен быть скаляром относительно операций поворота и не менять знак при отражении времени. Этим условиям отвечает конструкция типа $H = \alpha \mathbf{n}[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}]$, где \mathbf{n} -вектор нормали к поверхности (верх и низ поверхности неэквивалентны!), $\boldsymbol{\sigma}$ -матрица спина, \mathbf{p} -квазиимпульс, α -некоторая константа. Такой гамильтониан называется гамильтонианом Рашба. В слагаемые второго порядка по импульсу спин не входит, поэтому они сохраняют вид $p^2/2m$. Выбирая направление $[\mathbf{n} \mathbf{p}]$ за ось z , находим собственные значения энергии $\varepsilon(p) = p^2/2m \pm \alpha p$. Подчеркнем, что энергия не зависит от направления импульса, а только от его величины. В рассматриваемой модели сохраняется проекция спина на направление $[\mathbf{n} \mathbf{p}]$ (спиральность или хиральность). На рис.16

приведена зависимость энергии спиновых подзон от двумерного импульса.

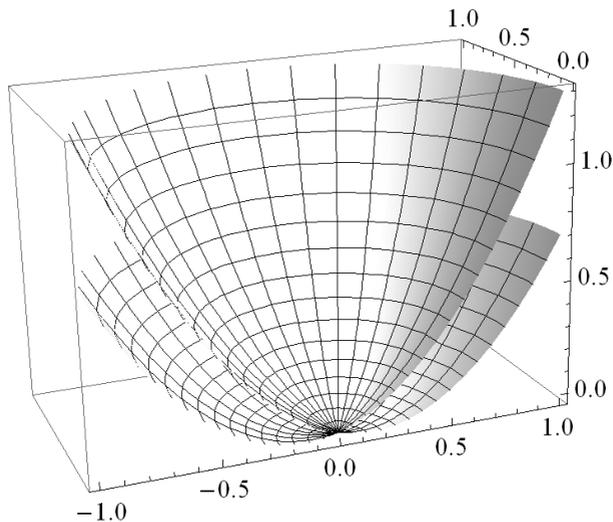


Рис.15 к задаче 26.18. Зависимость спектра в модели Рашба от двумерного квазиимпульса.

29.8. Ответ. Уровни энергии $(n + \frac{1}{2})\sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2} + \frac{m\omega_0^2 c^2 p_x^2}{2e^2 B^2}$, волно-

вые функции $e^{ip_x x} \varphi_n(y - \frac{cp_x}{eB})$, где $\varphi_n(y)$ -собственные функции

осциллятора с комбинированной частотой $\sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2}$.

29.11. Решение.

Система уравнений для амплитуд на атомах

$$\varepsilon a_{-1} + t a_{-2} + t_1 a_0 = 0,$$

$$\varepsilon a_0 + t_1 a_{-1} + t_1 a_1 = 0,$$

$$\varepsilon a_1 + t a_2 + t_1 a_0 = 0.$$

Решения ищем в виде

$$a_n = e^{ikan} + re^{-ikan} \quad n \leq -1,$$

$$a_n = \tau e^{ikan} \quad n \geq 1,$$

$$a_0.$$

Вероятность прохождения есть

$$|\tau|^2 = \frac{\alpha^2 |\sin(ka)|}{\sqrt{\alpha^4 + (1 - 2\alpha^2)\cos^2(ka)}} = \frac{\alpha^2 \sqrt{4t^2 - \varepsilon^2}}{\sqrt{4t^2\alpha^4 + (1 - 2\alpha^2)\varepsilon^2}}$$

Кондактанс равен

$$\Sigma = \frac{e^2}{h} |\tau|^2|_{\varepsilon=\mu}$$

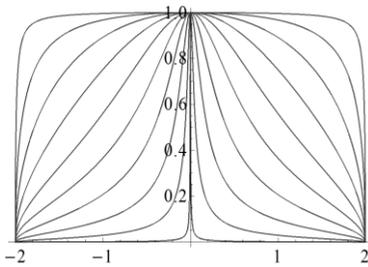


Рис.16 к задаче 29.11. Зависимость кондактанса (в единицах e^2/h) от энергии Ферми (в единицах t) при разных $\alpha = t_1/t$. Пики сужаются с уменьшением α . Узкие максимумы соответствуют резонансному прохождению через квазилокальное состояние $\varepsilon = 0$.

33.8. Ответ.

$$\Delta + E_{e1} + E_{v1} - eFD - \frac{e^2}{\kappa D} + \sqrt{\frac{e^2}{\kappa D^2} \frac{m_e + m_h}{m_e m_h}},$$

$$E_{e1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e D^2}, E_{h1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_h D^2}$$

34.2. Нарастание связано с тем, что мы фиксируем начальные условия для этих величин. Если рассматривать задачу прохождения через решетку (частица падает на решетку слева и проходит направо), то нужно подбирать начальные условия так, чтобы решение убывало направо. Полученное решение же соответствует прохождению справа налево. Амплитуда прохождения пропорциональна b_0 / b_n . Квадрату этой величины пропорционален кондактанс структуры.

Ниже приведена простая программа на Mathematica и полученная зависимость натурального логарифма b_n / b_0 . Логарифм сопротивления контакта в два раза больше. Из решения видно, что сопротивление одномерной системы при низкой температуре экспоненциально зависит от ее длины, а не линейно, как в случае закона Ома (теорема Андерсена-Мотта).

```
nn=1000;z=1;w=Table[x=Random[];z=x-1/z,{n,nn}];
w1=Table[Log[Abs[Product[w[[n]],{n,1,k}]]^2],{k,1,nn}];
ListPlot[w1]
```

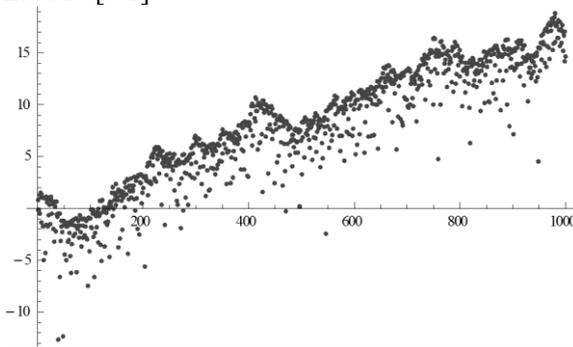
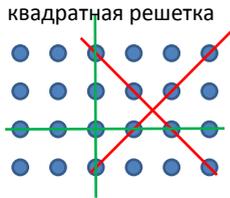


Рис.17. к задаче 34.2.

Приложение

Элементы симметрии кристалла

Точечная симметрия



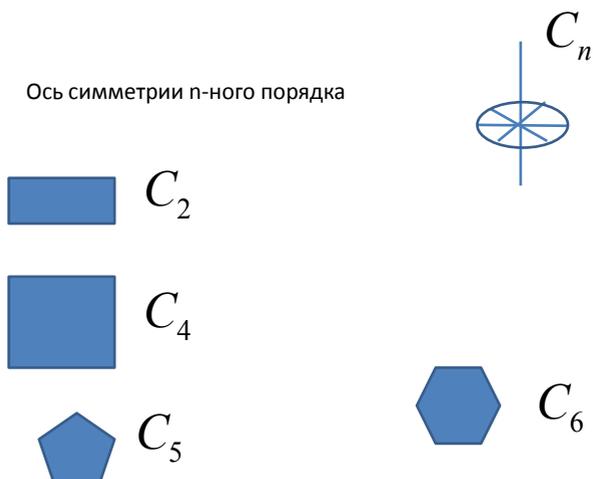
Ось симметрии 4 порядка

4 плоскости симметрии:
горизонтальная, вертикальная и
две под 45 градусов

$$U(\text{Tr})=U(r)$$

T-матрица поворота на 90 градусов

Элементы точечной симметрии



Разоблачение фокусов. Как создавались рисунки?

Для того, чтобы нарисовать технические рисунки, полезно создать их физическую модель. Так, пружинка может быть изображена при помощи холловского дрейфа электрона в скрещенных полях. Для изображения двойной квантовой ямы можно ее определить логическими условиями. Как только модель построена, изображение программа типа Mathematica строит мгновенно и аккуратно.

Программы для рисования

Двойной квантовой ямы

```
F[z_] = If[z > -1 && z < -.7 || z >=.7 && z < 1, 0.67, 1];
q1 = Plot[{F[z] - 0.2z, -F[z] - 0.2z}, {z, -1.7, 1.7}, Axes -> False];
q2 = Plot[0.53, {z, 0.6, 1.1}];
q3 = Plot[-0.53, {z, -1.1, -0.6}];
Show[q1, q2, q3]
```

Пружинка

```
ParametricPlot[{Sin[t] + 0.3t, Cos[t]}, {t, -Pi/2, 17 Pi/2}, Axes
→ False, PlotStyle → {Black, Thick}]
```

Кольцевая пружинка

Ее можно изобразить наложением медленного вращения по большому кругу на быстрое вращение по маленькому. Физическая модель процесса – электрон в сильном магнитном поле и плавном аксиально-симметричном поле. В такой системе на размере циклотронной орбиты электрическое поле может считаться однородным. Электронная орбита дрейфует по азимуту со скоростью

$$c \frac{|\mathbf{E} \times \mathbf{B}|}{B^2}.$$

```
ParametricPlot[{Sin[t] + 10Sin[t/31], Cos[t]
+ 10Cos[t/31]}, {t, 0, 62Pi}, Axes → False, PlotStyle
→ {Black, Thick}]
```

Как построить и посмотреть разные типы кристаллических решеток.

В программах Mathematica версий 6+ имеется возможности построения кристаллических решеток

Эта команда дает типы двумерных решеток

```
LatticeData[2]
```

Результат

```
{"HexagonalLattice", "SquareLattice"}
```

Для трехмерных решеток

```
LatticeData[3]
```

```
{"BaseCenteredMonoclinic", "BaseCenteredOrthorhombic",
```

```
о с, о о о с, о ,
```

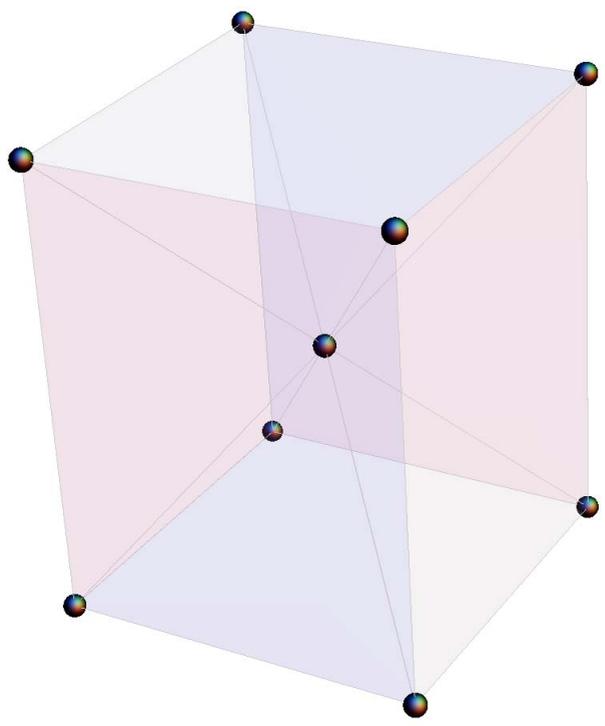
```
с с, с о о с, о ос с ,
```

```
с , о , о о с, о о с,
```

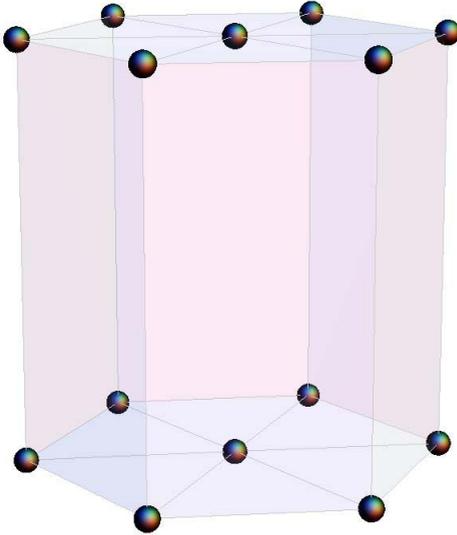
```
"SimpleTetragonal", "SimpleTriclinic", "SimpleTrigonal", "TetrahedralPacking"}]
```

Так можно визуализировать решетки:

```
LatticeData["CenteredTetragonal", "Image"]
```



LatticeData["SimpleHexagonal", "Image"]



Но в программе, в отличие от книги, картинку можно покрутить и увидеть с разных сторон.

Как задать тип решетки

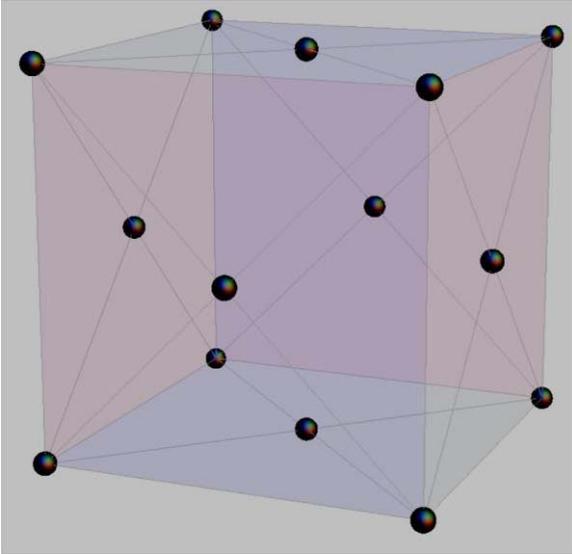
Bravais=Браве

Cubic=кубическая

FaceCentered=гранецентрическая

BodyCentered=объемноцентрическая

```
LatticeData[{"Bravais", {"Cubic", "FaceCentered"}}, "Image"]
```



Первый аргумент функции `LatticeData` — {тип решетки, {кристаллическая система, как центрирована}}, в математике:

`{"Bravais", {"system", "centering"}}`

Второй аргумент — в каком виде выводить. Так можно получить базисные вектора решетки:

`LatticeData[{"Bravais", {"Cubic", "FaceCentered"}], "Basis"]`

Ответ:

`{{-1, -1, 0}, {1, -1, 0}, {0, 1, -1}}` (вектора из угла в центры граней)

Литература

1. А.А. Абрикосов Введение в теорию нормальных металлов, Москва. Наука, 1972.
2. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. Москва, Наука, 1978
3. Аскеров Б.М. - Электронные явления переноса в полупроводниках. 1985
4. Белиничер В.И. Физическая кинетика: лекции для магистрантов. Новосибирский Государственный Университет, 1995.
5. Блейкмор Дж. Физика твердого тела. 1988
6. В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников– Физика полупроводников. Москва. Наука, 1977
7. А.С. Давыдов. Теория твердого тела.Москва, Наука, 1976.
8. Дж. Займан Принципы теории твердого тела Москва, Мир, 1966
9. Дж. Займан. Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах, Москва, ИЛ, 1962
10. Зеегер К. - Физика полупроводников. Москва, Мир, 1977
11. Л.Д.Ландау ,Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, т. 1 Механика. Москва, Наука, 1973
12. Л.Д.Ландау ,Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, т. 3 Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Москва, Наука, 1974
13. Л.Д.Ландау ,Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, т. 5 Статистическая физика ч. 1. Москва, Наука, 1976
14. Л.Д.Ландау ,Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, т. 7 Теория упругости. Москва, Наука, 1987
15. Л.Д.Ландау ,Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, т. 8, Электродинамика сплошных сред. Москва, Наука, 1982
16. Л.Д.Ландау ,Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, т. 10. Физическая кинетика. Москва, Наука, 1979
17. Г.Л. Коткин В.Г. Сербо, Сборник задач по классической механике, Москва, Наука, 1977.
18. В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган, Задачи по квантовой механике. Москва, Наука, 1981

19. И.И. Гольдман, В.Д. Кривченков, Сборник задач по квантовой механике, Москва, Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1957
20. З. Флюгге, Задачи по квантовой механике, тт. 1-2, Москва, Мир, 1974
21. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, (Лившиц и др.) Электронная теория металлов, Москва, Наука, 1971
22. Ю.Б. Румер, М.Ш. Рывкин, Термодинамика, статистическая физика и кинетика, Москва, Наука, 1977.
23. Ч. Киттель, Введение в физику твердого тела, Москва, Наука, 1978.
24. Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел, Москва, Наука, 1967.
25. У. Харрисон. Теория твердого тела, Москва, Мир, 1972
26. А. Анималу, Квантовая теория кристаллических твердых тел, Москва, Мир, 1981
27. Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн, Электронные свойства двумерных систем, Москва, Мир, 1985.
28. www.wikipedia.org

Оглавление

1. Симметрия кристалла.....	5
2. Тензоры в кристалле.....	5
3. Энергия связи твердых тел, упругость, силовая матрица.....	6
4. Фононы.....	8
5. Статистика электронов.....	14
6. Зонная структура твердого тела. Теорема Блоха.....	16
7. Метод сильной связи.....	16
7. Приближение эффективной массы.....	19
8. Слабая связь. k-p теория возмущений.....	20
9. Поверхностные состояния в кристалле.....	22
10. Особенности Ван-Хова.....	23

11. Взаимодействие электронов с фононами	24
12. Экранировка и статические потенциалы в полупроводнике	25
13. Примесные состояния	27
14. Кинетика электронов.....	29
15. Движение в магнитном поле	34
16. Горячие электроны	37
17. Полупроводник в сильном электрическом поле.....	38
18. Оптика твердого тела	41
19. Оптика полупроводников	42
20. Плазмоны.....	43
21. Плазмоны в неоднородных средах	44
22. Экситоны	45
Экситоны Френкеля	45
Экситоны Мотта	46
Прямозонный полупроводник.....	47
Непрямозонный полупроводник	48
23. Электроны в двумерной системе	48
24. Квантовый эффект Холла	51
25. Поверхностная энергия. Силы Казимира ... Ошибка! Закладка не определена.	
26. Одномерные системы.....	52
27. Квантовые точки.....	54
28. Другие низкоразмерные системы	54
29. Кулоновская блокада.....	55
30. Экситоны в двумерной и нульмерной системах.....	56
31. Неупорядоченные системы.....	57
32. Проблемы	58

Ответы и решения.....	59
Приложение	87
Элементы симметрии кристалла Разоблачение фокусов. Как создавались рисунки?.....	87
Как построить и посмотреть разные типы кристаллических решеток.....	89
Оглавление	94