University of Anbar
College of Science
Department of Physics

فيزياء الحالة الصلبة

Solid State Physics

المرحلة الرابعة
الكورس الثاني
صلبة2

الدكتور قيس عبدالله عباس

Lecture3

1. Magnitude of the Energy Gap: مقدار فجوة الطاقة:

The wavefunctions at the Brillouin zone boundary $k = \pi/a$ are $\sqrt{2}\cos\pi x/a$ *and* $\sqrt{2}\sin\pi x/a$, normalized over unit length or line. Let us suppose that the potential energy of an electron in the crystal at point x is

ان الدوال الموجية عند حدود منطقة برليون $k = \pi/a$ تكون

$\sqrt{2}\cos\pi x/a$ *and* $\sqrt{2}\sin\pi x/a$) معايرة على وحدة الطول

او الخط .

الان لنفترض ان طاقة الجهد لالكترون في البلورة عند النقطة x هو

$$U(x) = U\cos 2\pi x/a$$

The first-order energy difference between the two standing wave states is

ان فرق الطاقة من الدرجة الأولى بين حالتين الموجة الواقفة هو

$$E_g = \int_0^1 dx\, U(x)\,[|\Psi(+)|^2 - |\Psi(-)|^2]$$

$$= \int dx\, U\cos(2\pi x/a)\,(cos^2\,\pi x/a - sin^2\,\pi$$

1.1 Bloch function. دالة بلوخ

Bloch considered the total potential of crystal (crystal potential) [V(r)] is the sum of two parts:

لقد اعتبر بلوخ أن إجمالي الجهد للبلورة (الجهد البلوري) [V (r)] هو مجموع جزأين:

1- The electrostatic potential $[V_i(r)]$ due to the array of atomic cores. For a perfect lattice (i.e., one with no phonons), this contribution to V(r) should have the translational periodicity of the lattice.

1-ان الجهد الالكتروستاتيكي$[V_i(r)]$ ناتج عن ترتيب من النوى الذرية, للحصول على شبيكة مثالية (واحدة بدون فونون) ، يجب أن يكون لهذا التوزيع V(r) المساهمة الدورية الانتقالية لشبيكة .

2- The potential $[V_e(r)]$ due to all other outer electrons. Bloch assumed that the charge density from this source would have the same long-term average value in every unit cell of the crystal and would thus also be periodic. Such an assumption certainly satisfies the requirements of electrical neutrality and crudely takes account of electron-electron repulsion.

2-للجهد $[V_e(r)]$ الناتج عن جميع الإلكترونات الخارجية الاخرى, افترض بلوخ ان كثافة الشحنة من هذا المصدر سيكون لها نفس متوسط القيمة على المدى الطويل في كل خلية وحدة من البلورة وبالتالي ستكون دورية أيضًا. مثل هذا الافتراض يفي بالتأكيد بمتطلبات الحياد الكهربائي ويأخذ في الحسبان تنافر الإلكترون-الكترون.

$$V(r) = V_i(r) + V_e(r)$$

From Schrodinger equation in 3-dimension for one electron

من معادلة شرودنكر في ثلاث ابعاد لالكترون واحد نجد ان

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right]\Psi = E\,\Psi$$

Where $U(r) = -eV(r)$ has the periodicity of the lattice

حيث ان $U(r) = -eV(r)$ تمتلك دورية الشبيكة

It is calculated that the wave function which satisfies this equation subject to each potential must be of the form:

تم حساب أن الدالة الموجية التي تكون مناسبة لهذه المعادلة والخاضعة لكل جهد يجب أن تكون على الشكل التالي:

$$\Psi_k(r) = U_k(r) \qquad e^{ik.r}$$

Where $U_k(r)$ is a function (independent on the time and it is depending on the value of the wave vector k) also, it has the complete periodicity of the lattice.

حيث ان هذه الدالة $U_k(r)$ هي دالة لاتعتمد على الزمن ولكن تعتمد على متجه الموجة k وتمتلك الجهد الدوري الكامل للشبيكة

$$U_k(r) = U_k(r+T)$$

Where T is translation vector.

حيث ان T هوالمتجه الانتقالي للشبيكة وله نفس دورية الشبيكة.

$$\Psi_k(r+T) = U_k(r+T)\, e^{ik.(r+T)}$$

$$= U_k(r+T)\, e^{ik.r} e^{ik.T}$$

$$\Psi_k(r+T) = \Psi_k(r)\, e^{ik.T}$$

This is the equation of Block function.

وهذه المعادلة هي دالة بلوخ (Block function)

1.2 **Bloch theorem**: نظرية بلوخ

States that the eigen function of the wave equation for a periodic potential are of the form of the product of a plane wave $e^{ik.r}$ times a function $U_k(r)$ with the periodicity of the crystal lattice.

تنص نظرية بلوخ على أن الدالة الذاتية لمعادلة الموجة للجهد دوري هي شكل ناتج لموجة مستوية $e^{ik.r}$ مضروب في الدالة $U_k(r)$ ودورية الشبيكة البلورية.

1.3 **Kronig-Penney model.** موديل كرونغ - بيني

A periodic potential for which the wave equation can be solved in terms of elementary functions is the square-well array of Figure 1. The wave equation is

ان الجهود الدورية التي يمكن من خلالها حل معادلة الموجة من حيث حدود الدوال الأولية هي مجموعة البئر المربعة كما مبين في الشكل1. فتكون معادلة الموجة هي :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \qquad \frac{d^2\Psi}{dx^2} + U(x)\Psi = \varepsilon\Psi \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots (1)$$

where $U(x)$ is the potential energy and ε is the energy eigenvalue.

حيث ان $U(x)$ هي طاقة الجهد وان ε هي القيمة الذاتية للطاقة

In the region $0 < \boldsymbol{x} < \boldsymbol{a}$ in which $\boldsymbol{U} = 0$, the eigenfunction is a linear combination,

في الحيز او النطاق $0 < \boldsymbol{x} < \boldsymbol{a}$ تكون الطاقة تساوي صفر $\boldsymbol{U} = 0$ وتكون الدالة الذاتية متراكبة خطيا فيكون حل المعادلة يساوي

$$\Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots..(2)$$

of plane waves traveling to the right and to the left, with energy

وتكون طاقة الموجات المستوية المنتقلة لليمين واليسار هي

$$\ldots\ldots\ldots\ldots (3)$$

In the region $-b < \boldsymbol{x} < 0$ within the barrier the solution is of the form

اما في حالة الحيز او النطاق $-b < \boldsymbol{x} < 0$ داخل حاجز الجهد فيكون الحل للمعادلة هو

$$\Psi = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(4)$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(5)$$

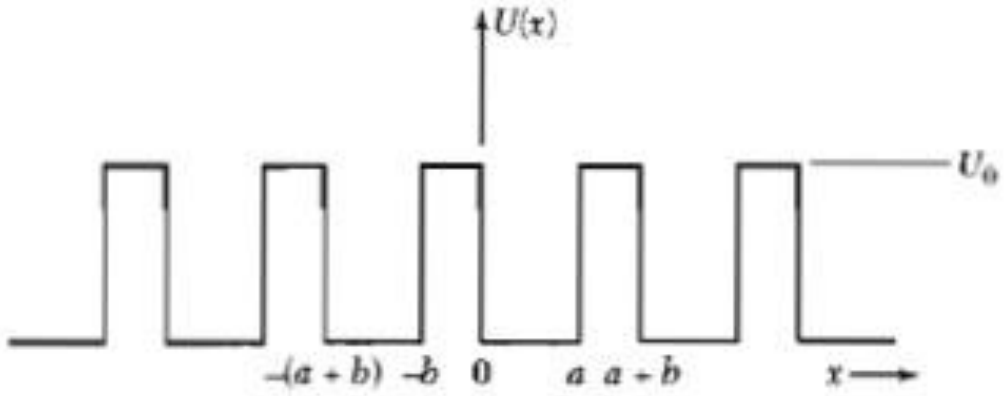

Figure (1) Square-well periodic potential as introduced by Kronig and Penney.

الشكل 1 يمثل الجهد الدوري لبئر-مربع وكما افترض من قبل كروني و بيني.

we want the complete solution to have the Bloch form

نحن نريد الحل كامل للحصول دالة بلوخ

$$\Psi_k(r) = U_k(r)exp^{(ik.r)}$$.

Thus, the solution in the region n < x < a + b must be related to the solution (4) in the region -b < r < 0 by the Bloch theorem:

وبالتلي فان الحل للحيز a < x < a + b يجب ان يكون على علاقة مع الحل في المعادلة (4) في الحيز - b < x < 0- بواسط نظرية بلوخ

$$\Psi(a < x < a + b) = \Psi(-b < x < 0)\, e^{ik(a+b)} \quad .....(6)$$

The constants A, B, C, D are chosen so that Ψ and $d\Psi/dx$ are continuous at $x = 0$ and $x = a$.

ان الثوابت A, B, C, D يتم اختيارها لذلك فان Ψ و $d\Psi/dx$ تكون مستمرة عند القيم $x = 0$ و $x = a$.

These are the usual quantum mechanical boundary conditions in problems that involve square potential wells. At x = 0,

و هذه هي شروط حدود ميكانيك الكم الاعتيادية لمسائل تتضمن بئر الجهد المربع. عندما x=0 فان

$$A + B = C + D \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots (7)$$

$$ik(A - B) = Q(C - D) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(8)$$

with Q from (4). At x = a, with the use of (6) for $\Psi(a)$ under the barrier in terms of $\Psi(-b)$,

لقيم Q من المعادلة 4 و عندما x=a وباستخدام المعادلة 6 لقيم $\Psi(a)$ وتحت الحاجز لحدود $\Psi(-b)$,

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = \left(Ce^{-Qb} + De^{Qb}\right) \qquad e^{ik(a+b)} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(9)$$

$$ik\left(Ae^{ika} - Be^{-ika}\right) = Q\left(Ce^{-Qb} - De^{Qb}\right) \qquad e^{ik(a+b)} \ldots\ldots\ldots(10)$$

The four equations (7, 8,9, and10) have a solution only if the determinant of the coefficients of A, B, C, *D* vanishes, yielding

من المعادلات 7, 8, 9, 10 ينتج لنا الحل التالي والخالي من قيم الثوابت A, B, C, *D*

$$\left[\frac{Q^2-k^2}{2Qk}\right]\sinh Qb \qquad \sin ka + \cosh Qb \cos ka = \cos k(a+b) \qquad \ldots\ldots(11)$$

when we pass to the limit $b = 0$ and $U_o = \infty$ in such a way that $Q^2ba/2 = P$, a finite quantity. In this limit $Q \gg k$ and $Qb \ll 1$. Then equation (11) reduces to:

عند الوصول للحد b=0 وكذلك $U_o = \infty$ عندما يكون $Q^2ba/2 = P$ كمية منتهية. في هذا المحدد $Q \gg k$ و $Qb \ll 1$.

لذلك فان المعادلة رقم 11 سوف تكون بالصيغة التالية

$$(P/ka)\sin ka + \cos ka = \cos ka \;\ldots\ldots\ldots\ldots(12)$$

The ranges of K for which this equation has solutions are plotted in Fig below:

ان مديات K لهذه المعادلة وامتلاكها حلول تكون مرسومة بالشكل ادناه

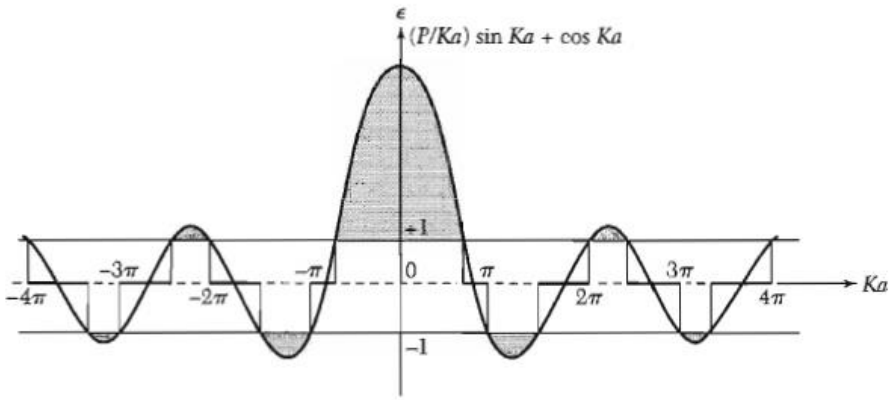

Figure 2 Plot of the function $(P/ka)\sin ka + \cos ka$, for $P = 3\pi/2$.

الشكل 2 يبين رسم الدالة $(P/ka)\sin ka + \cos ka$ عندما تكون $P = 3\pi/2$

The allowed values of the energy are given by those ranges of $ka = (2m\varepsilon/\hbar^2)^{1/2}a$ for which the function lies between ± 1.

ان القيم المسموحة للطاقة يمكن ان تعطى للمدى $ka = (2m\varepsilon/\hbar^2)^{1/2}a$ لدالة تقع مابين ± 1.

For other values of the energy there are no traveling wave or Bloch-like solutions to the wave equation, so that forbidden gaps in the energy spectrum are formed.

اما بالنسبة للقيم الاخرى للطاقة فانه لاتوجد موجات منتقلة او حلول بلوخ لمعادلة الموجة لذلك فان الفجوات المحرمة في طيف الطالقة تتشكل.

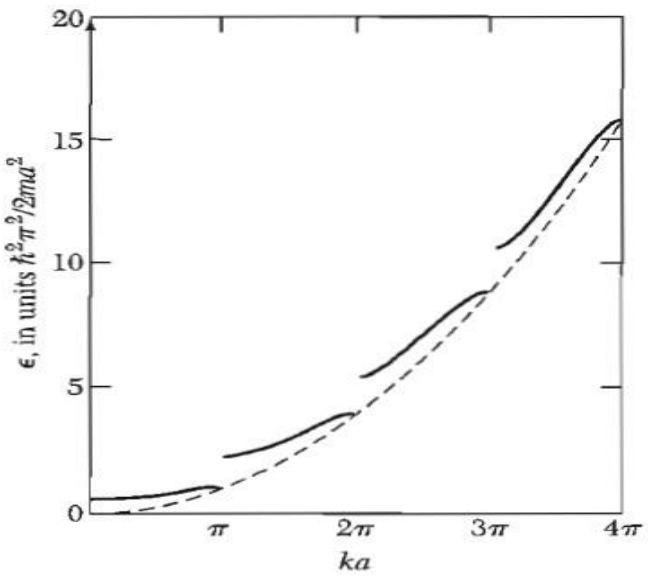

Figure 3 Plot of energy vs. wavenumber for the Kronig-Penney potential, with $P = 3\pi/2$. Notice the energy gaps at $ka = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots\ldots$

الشكل 3 يمثل رسم الطاقة كدال للعدد الموجي لجهد كرونغ – بيني عندما $P = 3\pi/2$

ملاحظة ان فجوات الطاقة موجودة على $ka = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots\ldots$

<u>References</u>

1- Charles Kittel - Introduction to Solid State Physics-Wiley (2005)

2- J. S. Blakemore - Solid State Physics-Cambridge University Press (1985)

3- M. A. OMAR Elementary-solid-state-physics