|  |  |
| --- | --- |
| Группа M3311 | К работе допущен |
| Студент Ершова Мария и Ходжаев Дорюш | Работа выполнена |
| Преподаватель Шоев В.И. | Отчет принят |

**Рабочий протокол и отчет по  
моделированию № 2**

**1. Теория**

Изображение выглядит как диаграмма, линия, зарисовка, дизайн

Автоматически созданное описание

Электрон движется в одномерном кристалле длиной L, потенциал внутри

которого приближен к форме прямоугольной ступени.

Согласно модели Кронига—Пенни, электрон, находящийся в периодической

решетке, при движении испытывает периодическое ускорение и замедление

под действием электрического поля атома.

Задача с одним электроном описывается уравнением Шредингера:

где:

- эффективная масса

Решение:

Приведенное выше уравнение проблематично решить численно => рассмотрим прямое решение уравнения:

Приведенное выше уравнение было упрощено Кронигом и Пенни:

где:

– мера силы, с которой электроны в кристалле притягиваются к ионам в узлах кристаллической решетки.

Действительные корни уравнения выше существуют только при тех значениях

, при которых левая часть уравнения принимает значения в интервале [-1;1].

На рисунке ниже можно увидеть области допустимых значений : чем меньше

, тем шире области.

Изображение выглядит как текст, График, линия, диаграмма

Автоматически созданное описание

Энергия электрона в периодическом поле не может принимать любое значение. Она ограничена рядом полос разрешенных значений, отделенных друг от друга запрещенными зонами энергетический спектр электрона в периодическом поле имеет зонную структуру. Ширина разрешенных зон определяется степенью связанности электрона внутри потенциальной ямы.

Весь график из запрещенных зон:

Изображение выглядит как текст, снимок экрана, линия, График

Автоматически созданное описание

Случай непрозрачных стенок потенциальной ямы:

Изображение выглядит как текст, График, линия, диаграмма

Автоматически созданное описание

Случай промежуточных значений :

Изображение выглядит как диаграмма, линия, График, текст

Автоматически созданное описание

Зонная структура в модели Кронига-Пенни:

Изображение выглядит как текст, График, линия, снимок экрана

Автоматически созданное описание

**2. Код  
Изображение выглядит как текст, снимок экрана, программное обеспечение, Шрифт

Автоматически созданное описание**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана, Шрифт

Автоматически созданное описание**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана

Автоматически созданное описание**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана, программное обеспечение

Автоматически созданное описание**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана, программное обеспечение

Автоматически созданное описание**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана, программное обеспечение, Шрифт

Автоматически созданное описание**

**3. Выводы**

С ростом энергии электрона разрешённые энергетические зоны расширяются, тогда как запрещённые зоны сужаются. Это объясняется тем, что электроны с высокой энергией легче преодолевают потенциальные барьеры, а влияние этих барьеров на их движение становится всё менее значимым. В предельном случае , когда барьеры становятся непрозрачными, разрешённые зоны сжимаются до дискретных уровней энергии, что соответствует состоянию электрона в изолированном атоме. Напротив, при , когда барьеры полностью исчезают, запрещённые зоны отсутствуют, и электрон ведёт себя как свободный.