Влияние параметров периодического потенциала на спектр состояний и на возникновение запрещенной зоны в модели Кронига-Пенни

Нехаев Александр 654 гр.

17 июня 2019 г.

1. Периодическая задача

Рассмотрим одномерную решетку ионов, расстояние между которыми a. Потенциал при этом будет периодическим, его вид приведен на рис. 1.

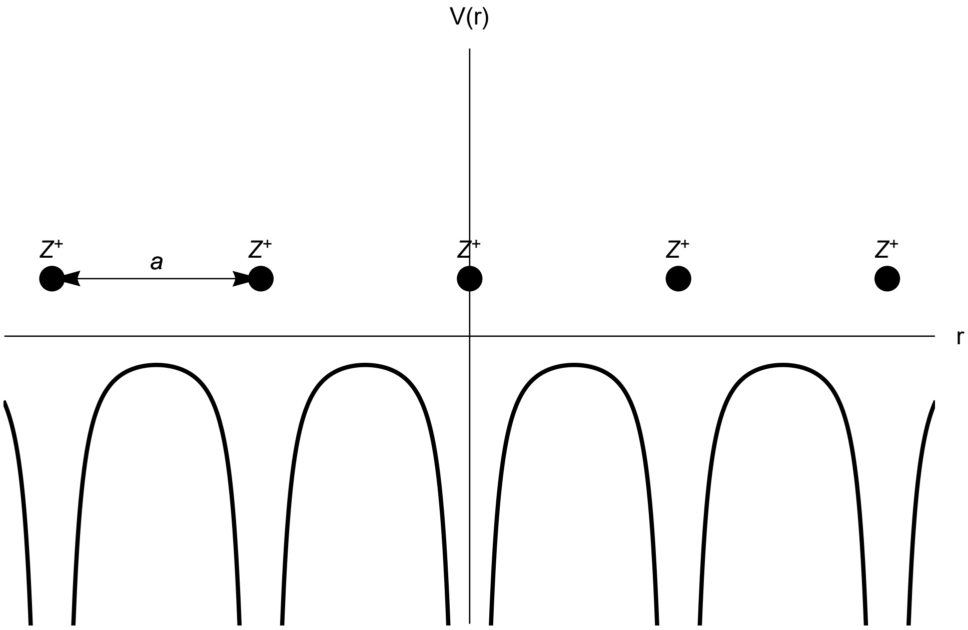

Рис. 1: Пример периодического потенциала

Рассмотрим идеализированный случай бесконечного кристалла. Уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V_a(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

с периодическим потенциалом $V_a(x) = V_a(x+a)$. Спектр определяется как множество тех энергий, при которых уравнение имеет решения, ограниченные на всей вещественной оси.

2. Теорема Блоха

Собственные состояния одноэлектронного гамильтониана

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}), \tag{2}$$

где потенциал $V(\mathbf{r})$ периодичен по всем векторам $\mathbf{R}$ решетки Бравэ, могут быть выбраны таким образом, чтобы их волновые функции имели форму плоской волны, умноженной на функцию, обладающую той же периодичностью, то и решетка Бравэ:

$$\psi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{kr}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \tag{3}$$

где $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, для всех $\mathbf{R}$, принадлежащих решетке Бравэ. Электронные волновые функции в виде $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ называют функциями Блоха.

3. Модель Кронига-Пенни

Для упрощения задачи потенциал приближают прямоугольным, используя теорему Блоха (рис. 2).

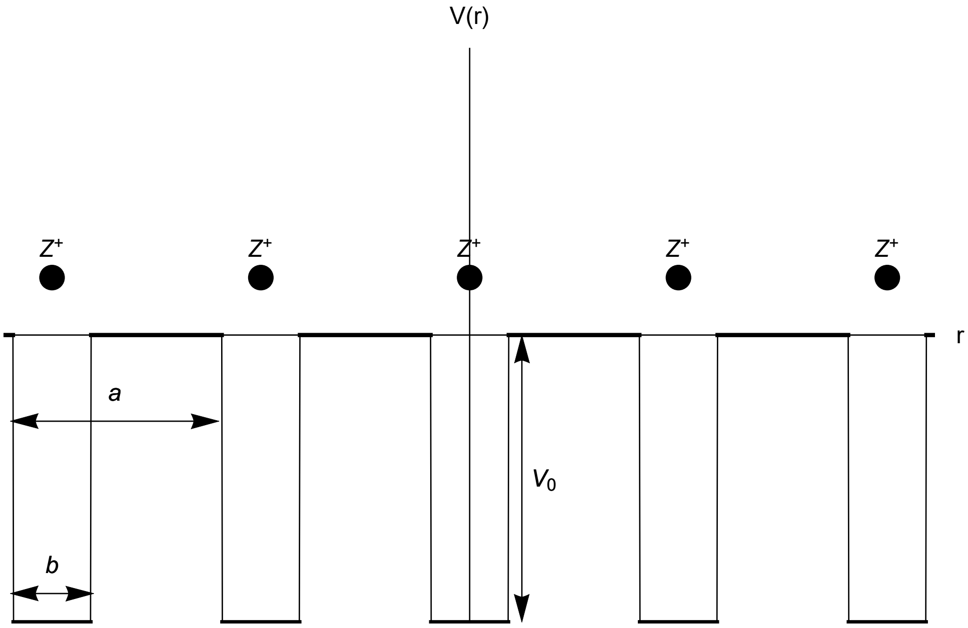

Рис. 2: Периодический потенциал с периодом a и шириной прямоугольной ямы b

Распишем уравнения для двух участков: $0 < x < a - b$ и $-b < x < 0$:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \tag{4}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi'' = (E + V_0)\psi \tag{5}$$

При их решении получаем для волновой функции "на поверхности":

$$\psi = Ae^{i\alpha x} + A'e^{-i\alpha x}, \tag{6}$$

где $\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $A = \frac{C_1}{2} - \frac{iC_2}{2}$ и $A' = \frac{C_1}{2} + \frac{iC_2}{2}$, а для волновой функции в яме:

$$\psi = Be^{i\beta x} + B'e^{-i\beta x}, \tag{7}$$

где $\beta^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$. С помощью полученных волновых функций получим соотвествующие им функции Блоха:

$$\begin{aligned} u(0 < x < a - b) = Ae^{i(\alpha - k)x} + A'e^{-i(\alpha + k)x} \\ u(-b < x < 0) = Be^{i(\beta - k)x} + B'e^{-i(\beta + k)x}. \end{aligned} \tag{8}$$

Далее проводим сшивку:

$$\begin{aligned} \psi(0^-) &= \psi(0^+) \\ \psi'(0^-) &= \psi'(0^+) \end{aligned} \tag{9}$$

и накладываем условие на периодичность функций Блоха:

$$\begin{aligned} u(-b) &= u(a-b) \\ u'(-b) &= u'(a-b). \end{aligned} \tag{10}$$

Эти условия дают матрицу:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \alpha & -\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i(\alpha-k)(\alpha-b)} & e^{-i(\alpha+k)(a-b)} & -e^{-i(\beta-k)b} & -e^{i(\beta+k)b} \\ (\alpha-k)e^{i(\alpha-k)(a-b)} & -(\alpha+k)e^{-i(\alpha+k)(a-b)} & -(\beta-k)e^{-i(\beta-k)b} & (\beta+k)e^{i(\beta+k)b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ A' \\ B \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Необходимое условие существования нетривиального решения – зануление детерминанта. После преобразований получаем:

$$\cos(ka) = \cos(\beta b)\cos[\alpha(a-b)] - \frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\sin(\beta b)\sin[\alpha(a-b)]. \tag{11}$$

4. Моделирование

Используя методы компьютерного моделирования, была созданна программа, демонстрирующую завимость разрешенных значений энергии от параметров модели. Так же видна запрещенная зона.