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

Нехаев Александр 654 гр.

16 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.

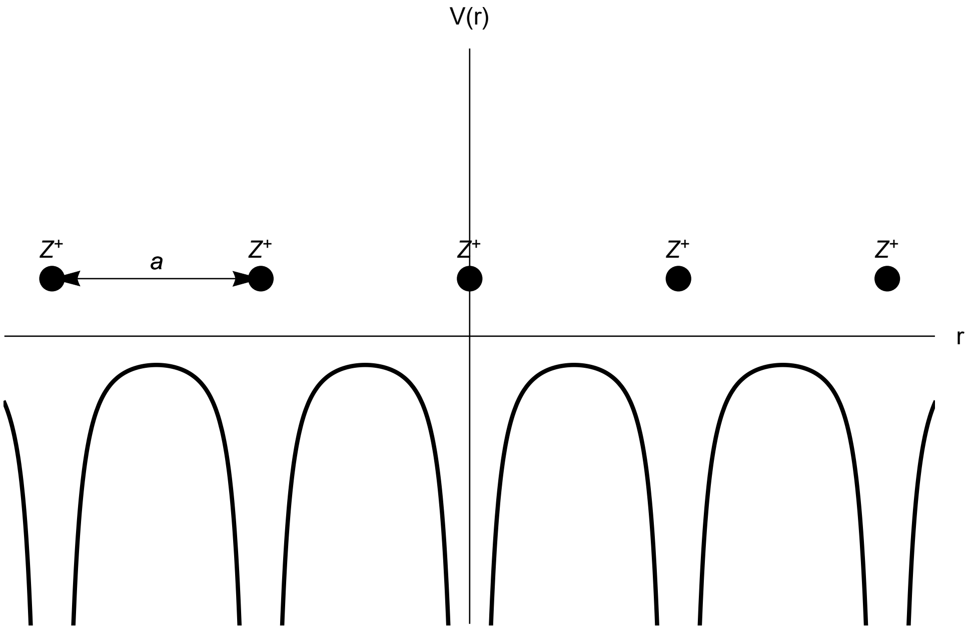

Рис. 1: Пример периодического потенциала

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).

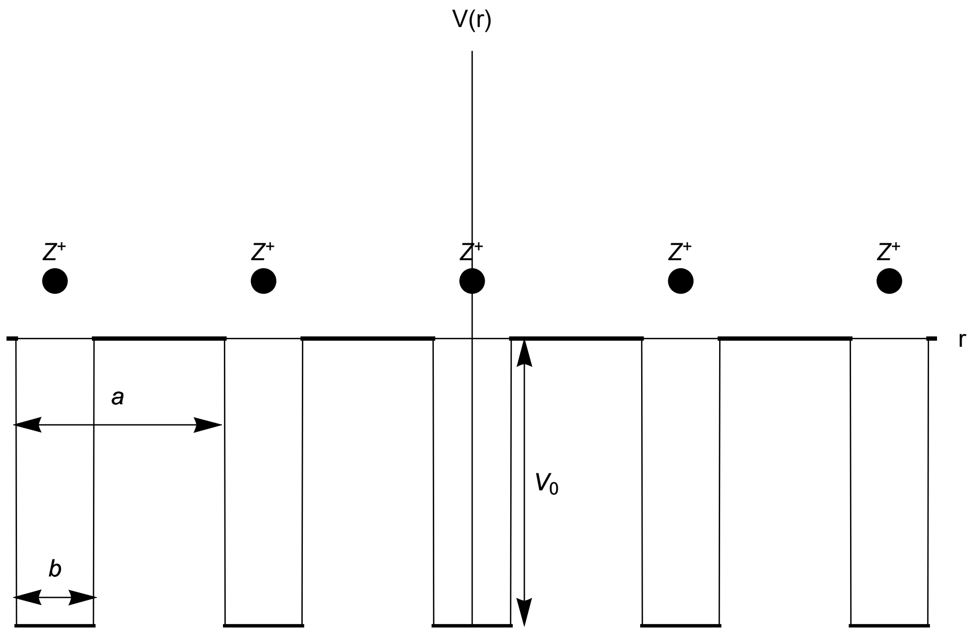

Рис. 2: Периодический потенциал с периодом a и шириной прямоугольной ямы b