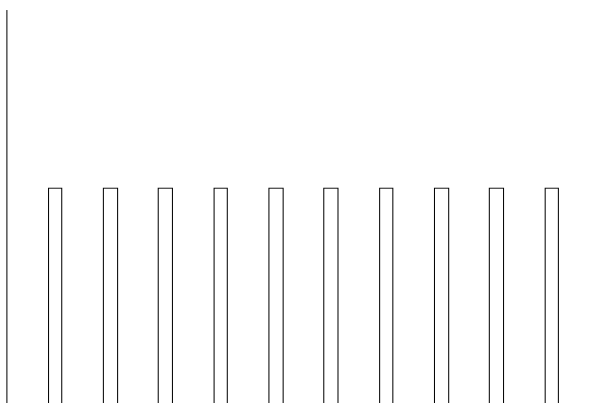


Sprawozdanie projektowe

Stany elektronowe w jednowymiarowej sieci krystalicznej

Celem projektu jest wykonanie obliczenia energetycznych stanów elektronowych w jednowymiarowej sieci krystalicznej oraz analiza wyników.

Rozpatrujemy elektron znajdujący się w jednowymiarowej sieci krystalicznej, której potencjał modelujemy za pomocą jedenastu prostokątnych, skończonych studni potencjału. Szerokość każdej z nich wynosi $1,5$ promienia Bohra a_0 . Szerokość barier pomiędzy nimi wynosi $0,5 a_0$ i ma wysokość 300 eV . Cały układ jedenastu studni potencjału na brzegach zamknięty jest nieskończonym potencjałem co przedstawione jest na wykresie 1.



Wykres 1. Schemat modelu potencjału jednowymiarowego kryształu

Hamiltonian elektronu znajdującego się w kryształ o potencjale $V(x)$ schematycznie przedstawionym na wykresie 1. ma postać :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)$$

Równanie własne powyższego operatora ma postać :

$$H\Psi(x) = \varepsilon\Psi(x)$$

W celu uproszczenia obliczeń numerycznych powyższe równanie rozwiązujemy w postaci bezwymiarowej. Jako jednostkę długości przyjmujemy promień Bohra a_0 a za jednostkę energii elektronu iloczyn $2m_e a_0^2 / \hbar^2 \cdot 1 \text{ eV}$. Tak przyjęta jednostka energii odnosi się do energii mierzonej w elektronowoltach.

Równanie przyjmuje postać :

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = [U(x) - E] \Psi(x)$$

Gdzie potencjał $U(x)$ oraz energia E są po przeskalowaniu bezwymiarowe.

Rozwiązanie numeryczne wykonać możemy przy użyciu algorytmu Numerova. Definiujemy siatkę węzłów o małym ale skończonym kroku Δx . Rozwiązanie równania otrzymujemy w formie algebraicznego, liniowego równania rekurencyjnego :

$$\Psi_{i+2} = \frac{1}{1 + \frac{\Delta x^2}{12} [E - U(x)]} \left[2\Psi_{i+1} \left(1 - \frac{5\Delta x^2}{12} (E - U(x)) \right) - \Psi_i \left(1 + \frac{\Delta x^2}{12} (E - U(x)) \right) \right]$$

Rozwiązanie numeryczne startuje od dwóch wartości początkowych Ψ_0 oraz Ψ_1 . Warunki brzegowe wymagają aby funkcja falowa miała na brzegach wartości zerowe, zatem $\Psi_0 = 0$. Pierwsza pochodna funkcji falowej w punkcie $x = 0$ może być przyjęta dowolnie. Wpływa ona na unormowanie rozwiązania zatem przyjmujemy jej wartość równą 1 co odpowiada wartości $\Psi_1 = \Delta x$. W powyższych równaniach wartość własna energii elektronu E jest niewiadoma. Szukanie wartości własnych energii spełniających nasze równanie zrealizować możemy metodą „chybił trafił” obliczając funkcję falową dla zadanej energii i sprawdzając czy funkcja się zeruje w ostatnim punkcie $x = 21,5 a_0$.

Dodatkowo szukanie odpowiednich energii można usprawnić stosując metodę bisekcji, która polega na szukaniu miejsca zerowego w danym przedziale energetycznym. Sprawdzamy wartości ostatniego punktu funkcji falowej na krańcach przedziału zadanych energii, jeżeli znaki tych wartości są przeciwne, to przewidujemy, że w przedziale tym znajduje się miejsce zerowe. Sprawdzamy czy wartość ze środka przedziału jest rozwiązaniem zadaną dokładnością, jeśli nie to dzielimy przedział na pół i dla obu podprzedziałów powtarzamy algorytm aż znajdzie rozwiązanie. Jeśli natomiast wartość znaków jest zgodna, algorytm ten nie przewiduje rozwiązania w tym przedziale energii. Korzystając z tego algorytmu należy dobrać stosowną szerokość energetyczną tak aby nie omijać możliwych rozwiązań.

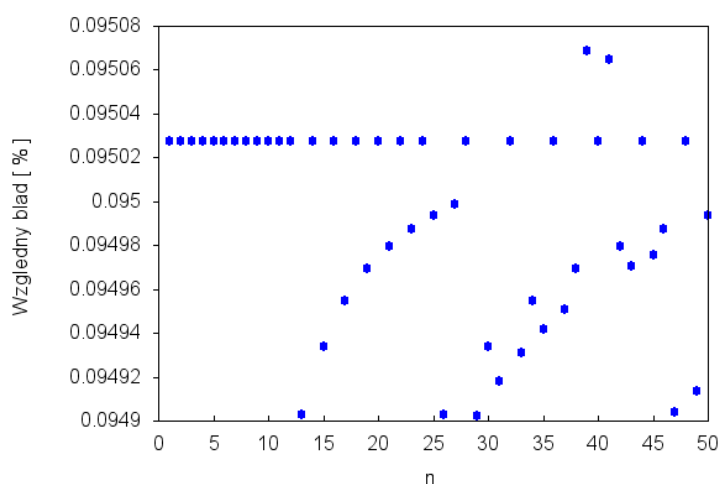
Poprawność oraz błąd obliczeń numerycznych zweryfikować możemy realizując rozwiązanie dla prostej studni potencjału dla której znamy teoretyczne wartości poziomów energetycznych :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_e L^2}$$

Gdzie L jest szerokością studni a n stanowi kolejne liczby naturalne.

Poniżej prezentuję wyniki moich obliczeń wraz z analizą. Funkcję potencjału o długości $21,5 a_0$ podzieliłem na 10000 kroków o długości $\Delta x = 21,5/10000$. Dokładność zerowania funkcji zadałem z dokładnością do $1 \cdot 10^{-5}$.

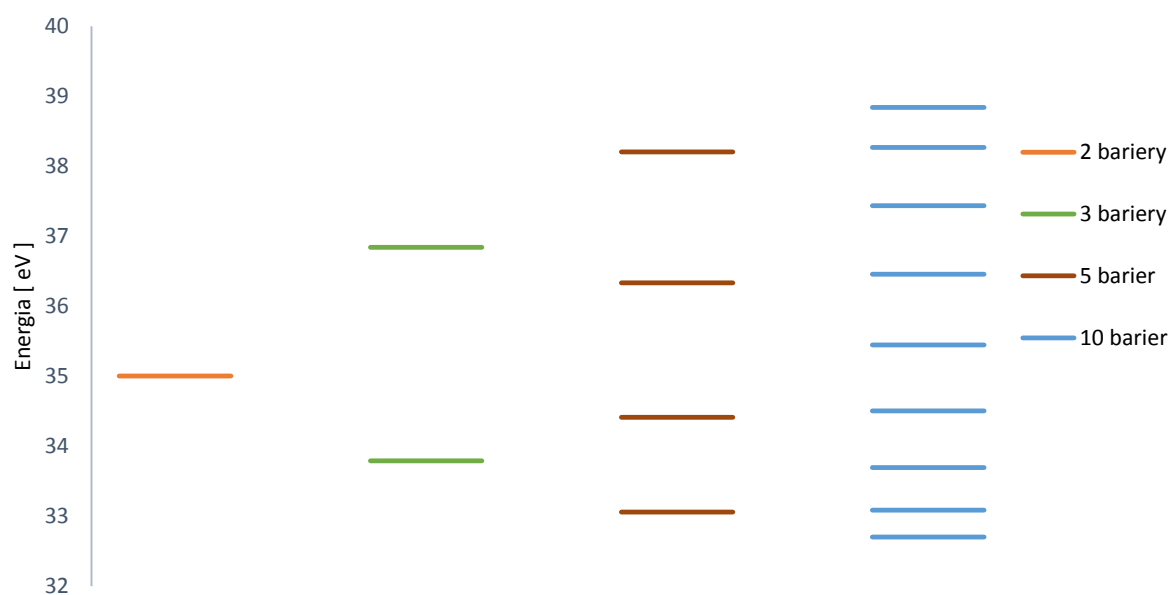
Przeprowadziłem analizę błędów i wyniki przedstawiłem na wykresie :



Wykres 2. Wykres procentowego błędów względnego dla 50 kolejnych poziomów energetycznych

Błąd nie przekracza 0.1% względem wartości teoretycznych dla 50 pierwszych poziomów energetycznych.

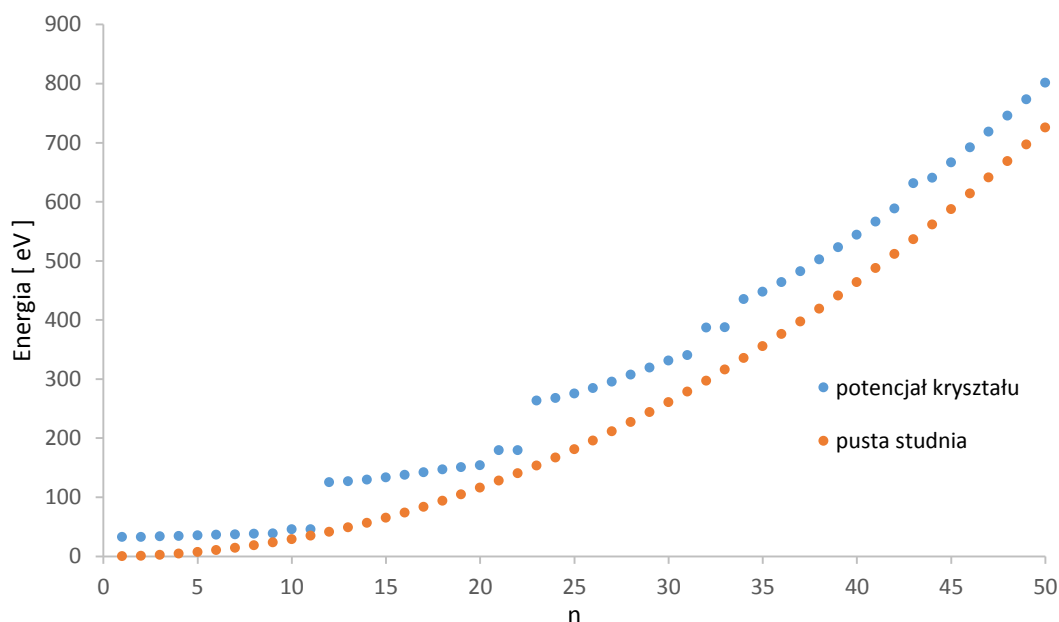
Następnie wykonałem obliczenie poziomów energetycznych w funkcji ilości barier potencjału, za każdym razem modyfikując funkcję potencjału tak aby szerokość studni oraz bariery były zachowane.



Wykres 3. Wzrost liczby poziomów w paśmie przy rosnącej liczbie barier

Wykres 3. przedstawia rozszczepienie pierwszego poziomu energetycznego w zależności od liczby barier potencjału (które obrazują atomy sieci krystalicznej). Dla 10 barier zamiast jednego poziomu energetycznego tworzy się 9 oddzielnych bardzo bliskich poziomów energetycznych. Przy rosnącej liczbie atomów poziomy energetyczne elektronu przekształcają się w pasma energetyczne.

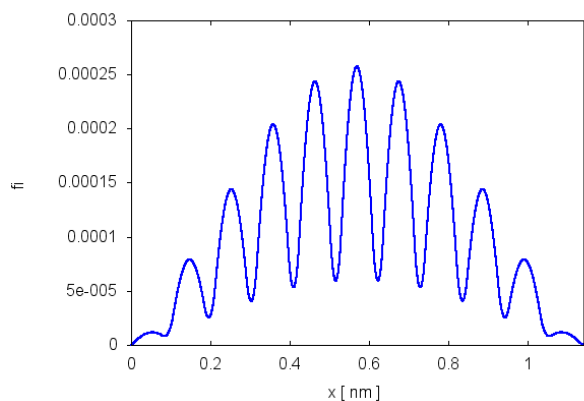
Wyzaczyłem 50 pierwszych poziomów energetycznych elektronu dla potencjału kryształu (wykres 1.) i przedstawiłem je na tle poziomów energetycznych pustej studni potencjału :



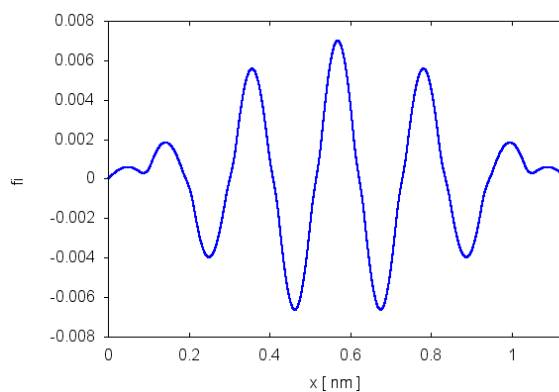
Wykres 4. Poziomy energetyczne elektronu w kryształ na tle poziomów energetycznych pustej studni

Poziomy energetyczne elektronu w kryształ schodzą się w pasma energetyczne. Na wykresie 4. widać powtarzające się pasma energetyczne oddzielone przerwami oraz dwa dodatkowe poziomy energetyczne towarzyszące każdemu pasmu. Te dodatkowe poziomy wynikają z błędów numerycznych (funkcja potencjału jest zdyskretyzowana i występują minimalne asymetrie). Trzecie pasmo przechodzi przez energię 300 eV – wysokość barier potencjału, powyżej tej energii poziomy przechodzą w rozkład kwazi-ciągły tak jak poziomy energetyczne pustej studni. Pomiędzy pasmami są przerwy energetyczne bez dozwolonych poziomów energetycznych. Przerwa energetyczna pomiędzy pasmem drugim a pasmem trzecim wynosi 109,45 eV.

Funkcje falowe minimum i maksimum pierwszego pasma energetycznego wyglądają następująco :

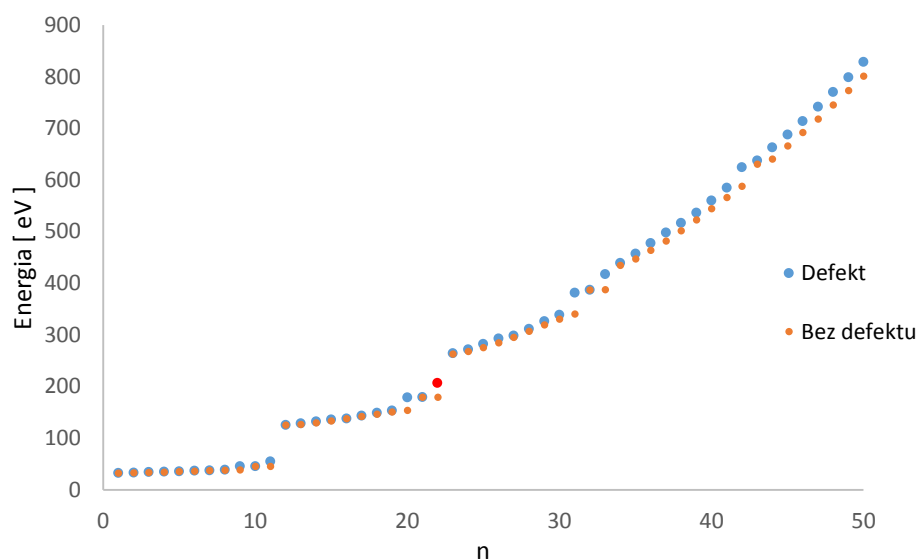


Wykres 5. Funkcja falowa 1 poziomu energetycznego



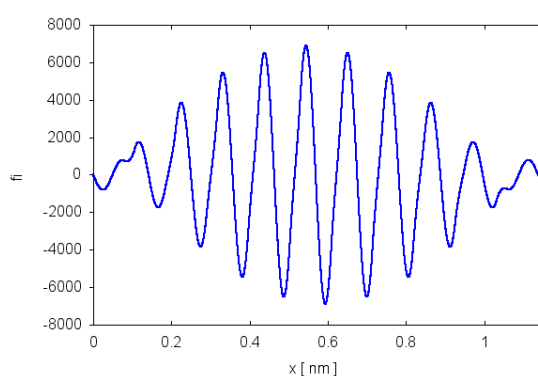
Wykres 6. Funkcja falowa 9 poziomu energetycznego

Następnie wprowadziłem defekt do kryształu w postaci zmniejszonej szerokości jednej ze studni o 25% i wyznaczyłem zmienione poziomy energetyczne :

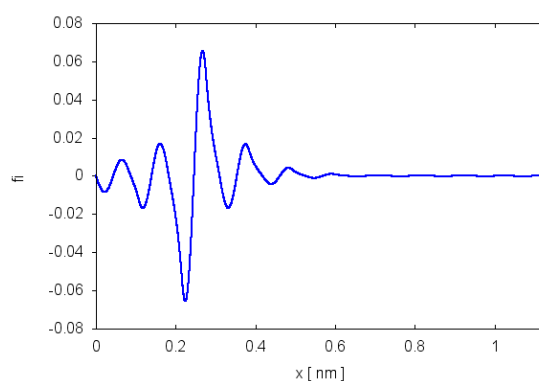


Wykres 7. Poziomy energetyczne elektronu dla kryształu z defektem oraz bez defektu

Defekt kryształu wprowadził nowy poziom energetyczny zaznaczony na czerwono na wykresie 7. w przerwie pomiędzy drugim a trzecim pasmem. Funkcja falowa tego poziomu energetycznego przed i po wprowadzeniu defektu wygląda następująco :

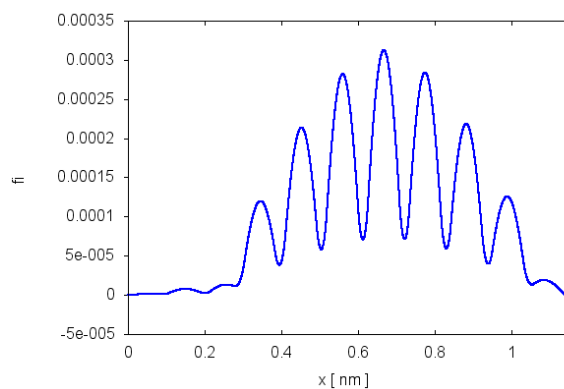


Wykres 8. Funkcja falowa 18 poziomu bez defektu

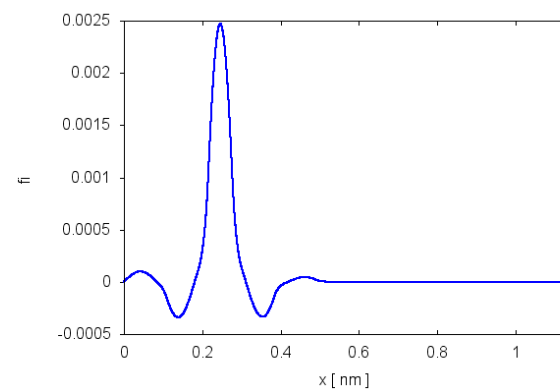


Wykres 9. Funkcja falowa 22 poziomu z defektem

Minimum oraz maksimum pierwszego pasma zdeformowane przez defekt :



Wykres 10. Funkcja falowa 1 poziomu z defektem

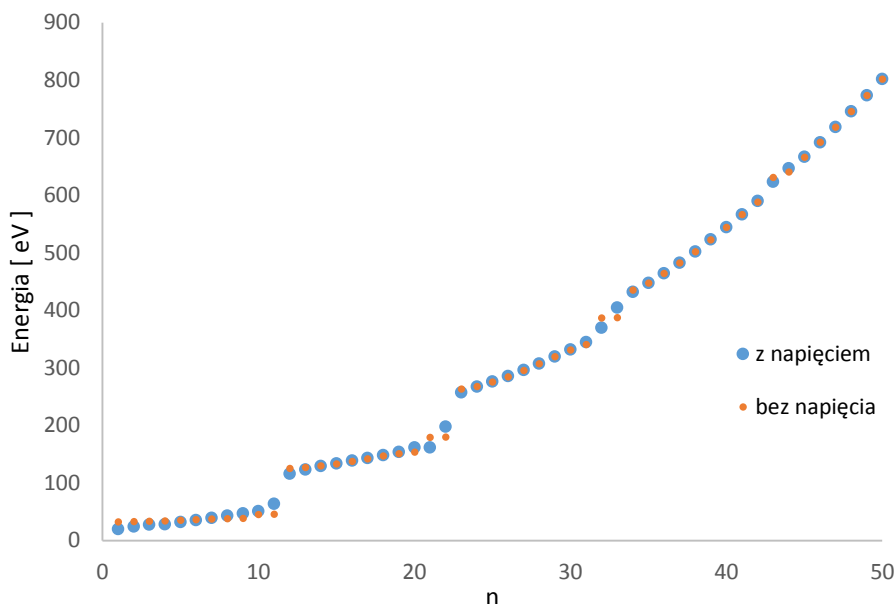


Wykres 11. Funkcja falowa 9 poziomu z defektem

Następnie umieściłem kryształ w statycznym jednorodnym polu elektrycznym – dodałem do potencjału funkcję liniową, taką że :

$$V(0) \rightarrow V(0) - 20 \text{ eV} \text{ oraz } V(21,5 a_0) \rightarrow V(21,5 a_0) + 20 \text{ eV}$$

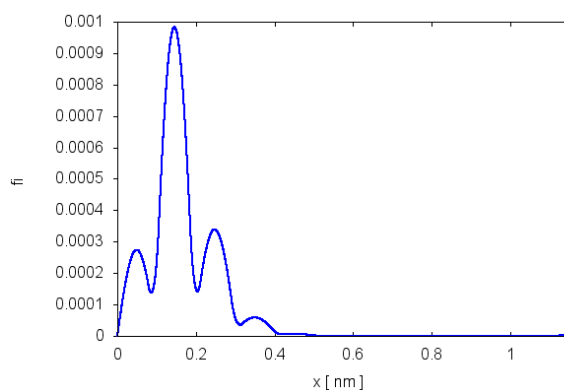
Dla tak zmodyfikowanej funkcji potencjału wyznaczyłem poziomy energetyczne elektronu :



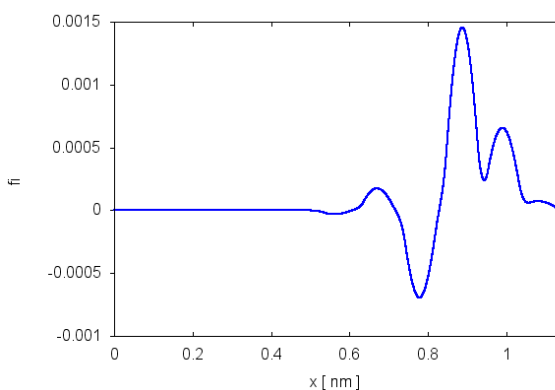
Wykres 12. Poziomy energetyczne elektronu dla kryształu z przyłożonym napięciem oraz bez

Pasma energetyczne pod wpływem przyłożonego pola elektrycznego poszerzają się, stąd wzrost szerokości pasm, co najlepiej widoczne jest przy paśmie pierwszym oraz drugim na wykresie 12. Przerwa energetyczna pomiędzy pasmem drugim a trzecim jest pomniejszona i wynosi teraz 95,72 eV.

Funkcje falowe minimum i maksimum pierwszego pasma wyglądają teraz następująco :



Wykres 13. Funkcja falowa 1 poziomu pod napięciem



Wykres 14. Funkcja falowa 9 poziomu energetycznego

Zastosowana metoda Numerova pozwoliła skutecznie rozwiązać numerycznie równanie własne operatora energii elektronu dla tego problemu. Ten prosty model kryształu jednowymiarowego jest wystarczający aby przedstawić zjawisko tworzenia się pasm energetycznych w kryształach. Pojemność pasm zależy od wielokrotności studni. Defekty kryształu wprowadzają nowe poziomy energetyczne w przerwie wzbronionej. Przyłożenie napięcia do kryształu powoduje zwężenie przerwy wzbronionej.