

# Übungen zur Computerphysik: Hausaufgabe 3

Abgabe: 09.06.2020

Lars Döpfer , Dirk Knott

## Inhaltsverzeichnis

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>i</b>
<b>1 H.7:Eigenwerte linearer Differentialoperatoren</b>	<b>1</b>
1.1 Problembeschreibung . . . . .	1
1.1.1 Bedeutung der Eigenfunktionen . . . . .	1
1.1.2 Implementation des Codes . . . . .	2
<b>2 H.8: Kronig-Penney Modell</b>	<b>4</b>
2.1 Problembeschreibung . . . . .	4
2.1.1 Bestimmen der Energieeigenwerte . . . . .	5
2.1.2 Abhängigkeit der Bandstruktur . . . . .	7
2.1.3 Einfluss eines äußeren konstanten elektrischen Feldes . . . . .	8

## Abbildungsverzeichnis

1	Energieeigenwerte für $L=8$ . . . . .	5
2	Wellenstruktur oberhalb der ersten Bandlücke . . . . .	6
3	Wellenstruktur unterhalb der ersten Bandlücke . . . . .	6
4	Wellenstruktur oberhalb der ersten Bandlücke . . . . .	6
5	Wellenstruktur unterhalb der zweiten Bandlücke . . . . .	7
6	Energieeigenwerte $L = 16$ . . . . .	7
7	Energieeigenwerte $L = 32$ . . . . .	8
8	Energieeigenwerte $L = 48$ . . . . .	8
9	Auswirkung des Elektrischen Feldes . . . . .	9

# 1 H.7:Eigenwerte linearer Differentialoperatoren

## 1.1 Problembeschreibung

Wir betrachten das bekannte Randwertproblem

$$u''(x) + g(x)u(x) = 0 \quad (1)$$

$$u(t_0) = u_0$$

$$u(t_1) = u_1 \quad (2)$$

Die Gleichungen (1,2) werden aufgefasst als Anwendung eines linearen Operators  $D$  auf die Funktion  $u : Du = u'' + gu$  (+Randbedingungen)

Wir möchten besonders die Eigenwerte(Spektrum) und Eigenfunktionen des linearen Differentialoperators, sowie die Paare aus Funktionen  $(\lambda, u_\lambda(x))$  betrachten. Diese erfüllen die Eigenwertgleichung

$$Du_\lambda - \lambda u_\lambda = 0 \quad (3)$$

und die homogene Randbedingungen der Glg.(2) mit  $u_0 = 0 = u_1$

### 1.1.1 Bedeutung der Eigenfunktionen

Die Bedeutung der Eigenfunktionen zu  $D$  mit homogenen Randbedingungen  $u_0 = 0 = u_1$  für die Lösung des Inhomogenen Systems

$$Du(x) = \lambda u(x) + f(x), \quad u(x_0) = a, \quad u(x_1) = b \quad (4)$$

lassen sich wie folgt beschreiben: Die Lösung einer inhomogenen Differentialgleichung setzt sich immer aus der Lösung des homogenen Problems  $u_{homogen}$  und einer partikulären Lösung  $u_{partikulr}$  zusammen. Wenn dann für die homogene Funktion gilt:

$$Du_{homogen} - \lambda u_{homogen} = 0$$

$$u_{homogen}(x_0) = 0$$

$$u_{homogen}(x_1) = 0$$

so muss die partikuläre Lösung nur noch die folgende Differentialgleichung erfüllen:

$$Du_{partikulr} - \lambda u_{partikulr} = f(x) \quad (5)$$

$$u_{partikulr}(x_0) = a \quad (6)$$

$$u_{partikulr}(x_1) = b \quad (7)$$

Damit stellen alle Funktionen  $u_{homogen}$  eine Basis des Lösungsraums dar, zu der wir jeweils nur eine partikuläre Lösung, die die Randwerte erfüllt, dazu addieren müssen

### 1.1.2 Implementation des Codes

Wir möchten unseren Code so erstellen, dass die 10 kleinsten Werte im Spektrum von  $D$  für den Fall  $g(x) \equiv 0$  und  $t_0 = 0, t_1 = 60, u_0 = 1, u_1 = 0$  per Numerov Verfahren bestimmt werden. Wir benutzen das Maximum der Amplitude der Lösung zur Identifikation der Eigenwerte. Um zu erklären, warum wir das Maximum der Amplitude als Identifikation eines Eigenwerts benutzen können, lösen wir zunächst die homogene Eigenwertgleichung analytisch. Wir erhalten die Gleichung:

$$\frac{d^2 u}{dx^2}(x) - \lambda u(x) = 0, \quad u(0) = u(60) = 0 \quad (8)$$

Für diese Gleichung führen wir eine Fallunterscheidung durch.

1. Fall:  $\lambda = 0$ : Die Differentialgleichung lautet dann:

$$\frac{d^2 u}{dx^2}(x) = 0$$

Wir setzen hier als Lösung an:

$$u(x) = Ax + b$$

Und mit den homogenen Randwerten erhalten wir nur die triviale Lösung der Nullfunktion. Somit ist  $\lambda = 0$  kein Eigenwert des Problems.

2. Fall:  $\lambda > 0$ : Dies führt zur Differentialgleichung und dem Ansatz:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u}{dx^2}(x) &= \lambda u(x) \\ u(x) &= Ae^{\sqrt{\lambda}x} + Be^{-\sqrt{\lambda}x} \end{aligned}$$

Mit den homogenen Randwerten führt das auf folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} u(0) &= A + B = 0 \Rightarrow B = -A \\ u(60) &= A(e^{\sqrt{\lambda}60} - e^{-\sqrt{\lambda}60}) = 0 \Rightarrow 2A \sinh(\sqrt{\lambda}60) = 0 \end{aligned}$$

Dies führt auch wieder nur auf die triviale Lösung der Nullfunktion. Damit sind  $\lambda > 0$  keine Eigenwerte des Problems.

3. Fall:  $\lambda < 0$ : Dies führt zu folgender Differentialgleichung und Ansatz:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u}{dx^2}(x) &= -(-\lambda)u(x) \\ u(x) &= A \cos(\sqrt{-\lambda}x) + B \sin(\sqrt{-\lambda}x) \end{aligned}$$

Da gilt  $\lambda < 0$  ist die Wurzel reell und wir können sie einfach berechnen. Mit den Randwerten liefert dies:

$$\begin{aligned} u(0) &= A = 0 \\ u(60) &= B \sin(\sqrt{-\lambda}60) = 0 \end{aligned}$$

Diese Gleichung führt nur zu nicht-trivialen Lösungen, wenn gilt

$$\begin{aligned}\sqrt{-\lambda}60 &= n\pi, \quad n \in \mathbb{N} \\ \Rightarrow \lambda_n &= -\left(\frac{n\pi}{60}\right)^2\end{aligned}$$

Damit haben wir eine Beschreibung der Eigenwerte und Eigenfunktionen des Systems gefunden. Es gilt:

$$u_n(x) = B \times \sin\left(\frac{n\pi}{60}x\right); \quad (9)$$

Damit sind die alle Eigenfunktionen des homogenen Problems bis auf einen konstanten Vorfaktor  $B$  bestimmt. Wenn wir nun numerisch die Eigenwerte des inhomogenen Problems berechnen, fällt auf, dass die Maximalamplitude für Werte sehr nahe der Eigenwerte des homogenen Problems sehr groß wird verglichen zu den sonstigen Amplituden für nicht-Eigenwerte des homogenen Problems. Das liegt daran, dass die Lösung des inhomogenen Problems eine Überlagerung von  $\cos(\sqrt{-\lambda}x)$  und  $\sin(\sqrt{-\lambda}x)$  ist. Damit die Randbedingung  $u(60) = 0$  erfüllt ist, müssen sich Sinus und Cosinus gegenseitig auslöschen. Das kann aber nur passieren, wenn  $\sin(\sqrt{-\lambda}60) \neq 0$ . Dies ist nur für Werte von  $\lambda$  erfüllt, die nicht Eigenwert des homogenen Problems sind, da bei diesen  $\sin(\sqrt{-\lambda}60) = 0$  gilt und sich die Amplituden nicht gegenseitig aufheben können. Wenn der Wert, den wir für  $\lambda$  einsetzen, aber nahe dem Eigenwert des homogenen Problems ist, wird die Maximalamplitude des Problems sehr groß, da der Sinus nahe bei 0 und der Cosinus nahe bei  $\pm 1$  ist. Somit muss die Amplitude des Sinus sehr groß sein, um den Cosinus auszugleichen. Wir suchen in unserem Programm also nach sehr großen Amplituden und identifizieren so die Eigenwerte des homogenen Problems durch die Lösung des inhomogenen Problems. Zudem führen wir nach einem gefundenen Eigenwert einen Sprung in unserem Laufindex durch, sodass nicht der direkte Nachfolger, dessen Maximalamplitude auch über dem Grenzwert liegen könnte, wenn der reale Eigenwert zwischen den beiden Werten liegt, als nächster Eigenwert identifiziert wird. Ansonsten orientiert sich unsere Implementierung an der in der Vorlesung vorgestellten Version, wir fassen allerdings die gesamte Logik des Numerov-Verfahrens in einer eigenen Funktion `numerov_complete` zusammen, um so einen möglichst generischen Ansatz und Wiederverwendbarkeit zu ermöglichen. Wir vergleichen die numerischen und analytischen Eigenwerte in Tabelle 1. Wir erkennen, dass die numerische Bestimmung der Eigenwerte sehr präzise die analytischen Eigenwerte widerspiegelt. Das zeigt die Korrektheit unseres Verfahrens.

$ \lambda_n $ analytisch	$ \lambda_n $ numerisch
0,00274	0,00274
0,01096	0,01096
0,02467	0,02467
0,04386	0,04386
0,06853	0,06853
0,09869	0,09868
0,13433	0,13432
0,17545	0,17544
0,22206	0,22204
0,27415	0,27413

Tabelle 1: Vergleich der analytischen und numerischen Eigenwerte

## 2 H.8: Kronig-Penney Modell

### 2.1 Problembeschreibung

Quantenmechanische Zustände von Valenzelektronen eines kristallinen Festkörpers werden durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x) \quad (10)$$

$\psi$  beschreibt hier die Wellenfunktion,  $m_e$  die Elektronenmasse,  $\hbar$  das Planksche Wirkungsquantum und  $V$  das durch Ionen im Kristallgitter erzeugte Potential.

Für stationäre Zustände mit Energie  $E$  gilt die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion,

$$\psi(t, x) = e^{-iEt/\hbar} \phi(x) \quad (11)$$

sowie die Propagation des Elektrons durch den Kristall definiert über die Dichtefunktion der Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\phi(x)|^2$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2} \Delta \psi(x) + V(x) \psi(x) = \lambda \psi(x) \quad (12)$$

1-dimensionales Modell für das Potential eines Kristallgitters der Länge  $L$  (ganzzahlig) ist gegeben durch das periodische Potential

$$V_{\text{per}}(x) = 60(\cos(\pi x))^{16} \quad (13)$$

Durch unendlich hohe Potentialwände bei  $x = 0$  und  $x = L$  werden die Randbedingungen erzwungen für die Wellenfunktion  $\psi(0) = 0 = \psi(L)$ :

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0, \\ V_{\text{per}}(x) & 0 < x < L, \\ \infty & x \geq L. \end{cases}$$

### 2.1.1 Bestimmen der Energieeigenwerte

Wir möchten nun die Energieeigenwerte  $\lambda$  für  $L = 8$  im Bereich  $0 \lesssim \lambda \lesssim \max\{V_{\text{per}}(x)\}$  mit Hilfe des Numerov-Verfahrens bestimmen.

Dabei verifizieren wir die Bandstruktur des Spektrums, was bedeutet, dass die Eigenwerte nicht kontinuierlich wachsen sondern in gruppierten Stufen zwischen den Gruppen.

Dies beschreibt eine Bandlücke was für verbotene Energiebereiche eines  $e^-$  dar.

Danach plotten wir noch die auf 1 normierte Wellenfunktion für den Zustand ober- und unterhalb der Bandlücken.

$$\|\psi\|^2 = \int_0^L |\psi(x)|^2 dx \quad (14)$$

Wir identifizieren die Eigenwerte des Problems durch eine Nullstelle am rechten Rand der Funktion  $\psi(x)$ , da dort die Randbedingungen erfüllt sein müssen. Dazu iterieren wir über alle möglichen Eigenwerte von  $\lambda \in [0, 60]$ , nutzen das Numerov-Verfahren von  $x = 0$  ausgehend und betrachten den Wert der Funktion bei  $x = L$  und in dieser Aufgabe dann  $L = 8$ . Wann immer die Funktion  $\psi(x)$  dort eine direkte Nullstelle oder einen Vorzeichenwechsel vorweist, haben wir einen Eigenwert identifiziert. Diese Eigenwerte speichern wir in einer eigenen Liste und geben diese am Ende der Analyse aus.

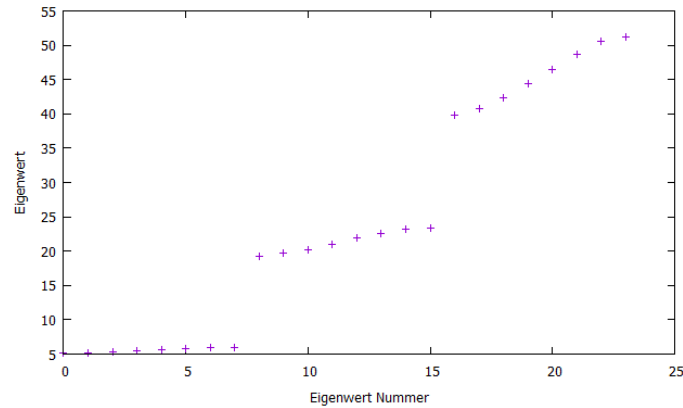


Abbildung 1: Energieeigenwerte für  $L=8$

Wir haben hier unsere berechneten Energieeigenwerte für ein  $L = 8$  graphisch dargestellt und man kann klar erkennen wie sich die Bandstruktur darstellt.

Nun stellen wir die auf 1 normierte Wellenfunktion für den Zustand ober und unterhalb der Bandlücken dar.

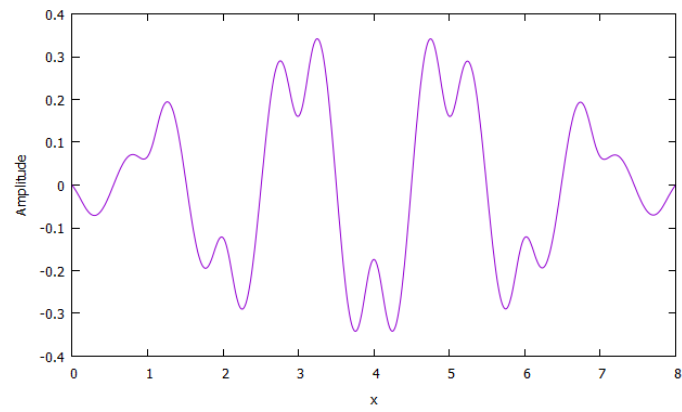


Abbildung 2: Wellenstruktur oberhalb der ersten Bandlücke

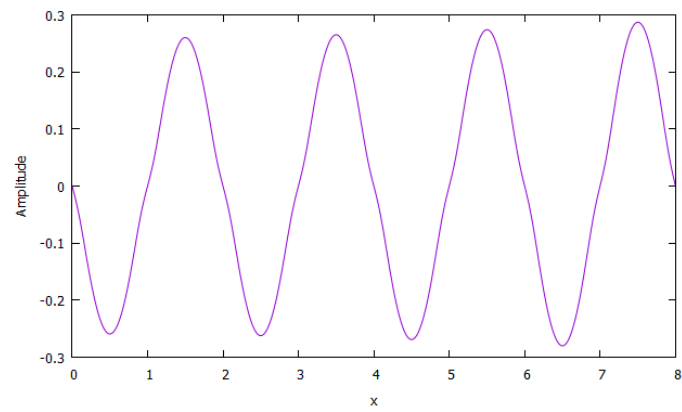


Abbildung 3: Wellenstruktur unterhalb der ersten Bandlücke

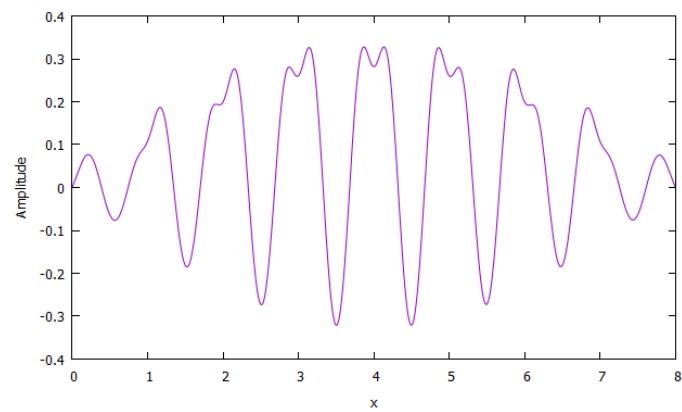


Abbildung 4: Wellenstruktur oberhalb der ersten Bandlücke

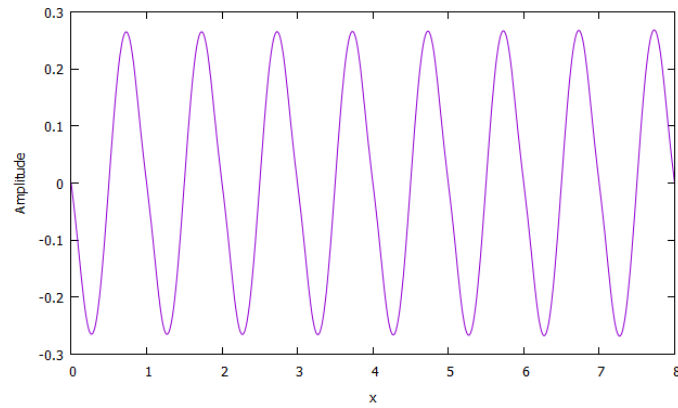


Abbildung 5: Wellenstruktur unterhalb der zweiten Bandlücke

### 2.1.2 Abhängigkeit der Bandstruktur

Die kleine Länge  $L$  des Kristalls ergibt eine systematische Unsicherheit (*finite size effect*) gegenüber einer realistischen Kristallgröße.

Wir prüfen die Abhängigkeit der Bandstruktur aus Aufgabenteil 1 von der Länge  $L$  für  $L = 16, 32, 48$ . Dafür gehen wir wie in Aufgabe 8.1 vor, um die Eigenwerte zu identifizieren.

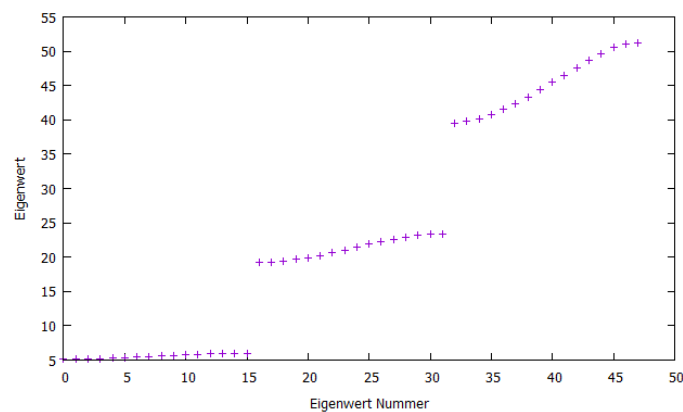


Abbildung 6: Energieeigenwerte  $L = 16$



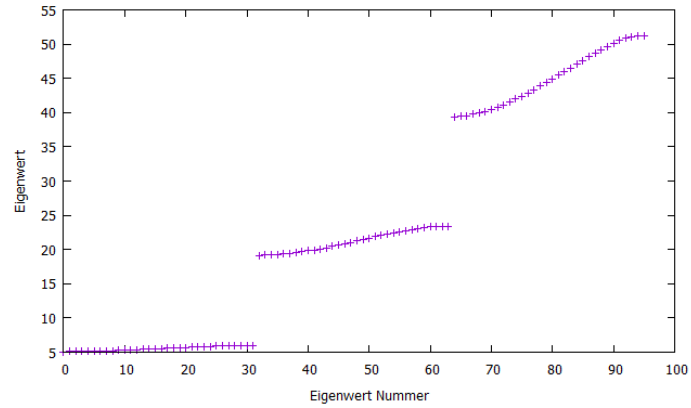


Abbildung 7: Energieeigenwerte  $L = 32$

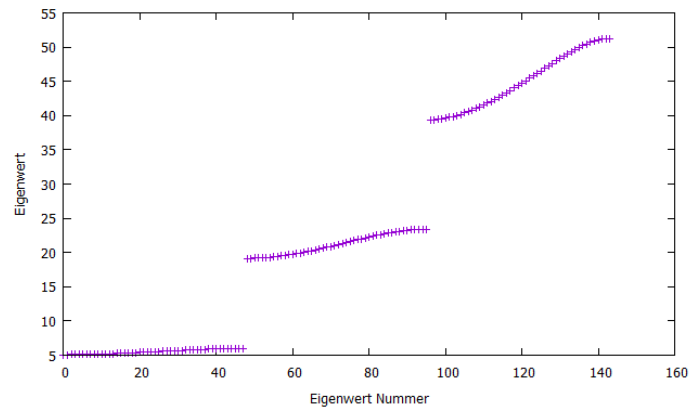


Abbildung 8: Energieeigenwerte  $L = 48$

Wie man anhand unserer geplotteten Daten erkennen kann ergibt sich für eine Erhöhung des Wertes  $L$  keine Veränderung bei Ort und Art der Bandlücken, es wirkt sich lediglich auf die Anzahl der Eigenwerte aus.

### 2.1.3 Einfluss eines äußeren konstanten elektrischen Feldes

Wir untersuchen den Einfluss eines äußeren konstanten elektrischen Feldes  $-\epsilon (\epsilon > 0)$  auf die Struktur des Spektrums.

Dabei stellen wir die ersten beiden Bandlücken als Funktion der Feldstärke  $\epsilon$  dar.

Hier ist die Negative Ladung des Elektrons:  $q_e = -1$  und ein zusätzliches Potential  $V_e(x) = x\epsilon$

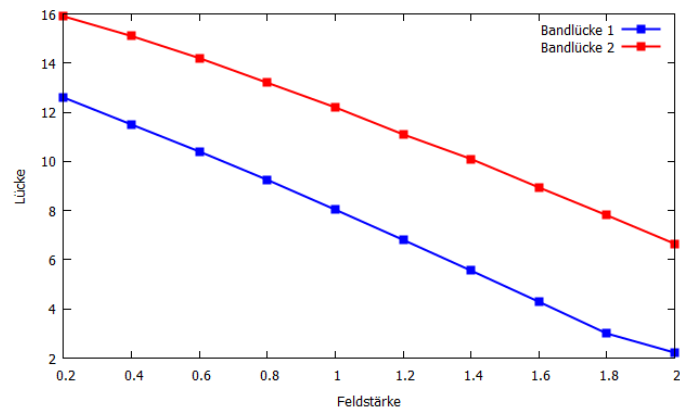


Abbildung 9: Auswirkung des Elektrischen Feldes

Hier haben wir die Elektrische Feldstärke für die jeweiligen Bandlücken geplottet. Anhand unseres Plots erkennen wir das Absinken der jeweiligen Energieniveaus der einzelnen Bandlücken für ein steigendes externes elektrisches Feld.