

Группа М3304 К работе допущен _____
Студент Васильков Д.А, Лавренов Д.А. Работа выполнена _____
Преподаватель Шоев В.И. Отчет
принят _____

Рабочий протокол и отчет по Моделированию №1

1) Цель работы

На основе модели Кронига-Пенни промоделировать зонную структуру одномерного кристалла. Необходимо проанализировать изменения ширины запрещённых зон для двух крайних случаев:

1. Когда электрон совершенно свободен.
2. Когда электрон заперт внутри одной потенциальной ямы (стенки непроницаемы).

Изучить промежуточные случаи.

2) Задачи, решаемые при выполнении работы

1. Построить зонную структуру одномерного кристалла по модели Кронига-Пенни.
2. Реализовать численные методы для поиска разрешённых и запрещённых зон.
3. Построить графики зависимости энергии от волнового числа и визуализировать результаты.

3) Объект исследования

Зонная структура одномерного кристалла, описываемая моделью Кронига-Пенни.

4) Метод экспериментального исследования

Численное моделирование зонной структуры с использованием Python и визуализация результатов.

5) Выполнение

Основное уравнение Кронига-Пенни

Для анализа зонной структуры используется дисперсионное соотношение:

$$\cos(kc) = f(E),$$

где:

- k — волновое число,
- E — энергия электрона,
- c — период потенциала,
- $f(E)$ — сложная функция, зависящая от энергии и параметров потенциала.

Формулы для $f(E)$:

Если энергия электрона $E < U$:

$$f(E) = \frac{(1 - 2E)}{2\sqrt{E(1 - E)}} \sin(\alpha_0 a \sqrt{E}) \sinh(\alpha_0 b \sqrt{1 - E}) + \cos(\alpha_0 a \sqrt{E}) \cosh(\alpha_0 b \sqrt{1 - E}),$$

где:

- $\alpha_0 = \sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2}}$,
- a и b — ширины ямы и барьера.

Если энергия электрона $E > U$:

$$f(E) = \frac{(1 - 2E)}{2\sqrt{E(E - 1)}} \sin(\alpha_0 a \sqrt{E}) \sin(\alpha_0 b \sqrt{E - 1}) + \cos(\alpha_0 a \sqrt{E}) \cos(\alpha_0 b \sqrt{E - 1}).$$

Вывод формул:

Уравнение Шрёдингера для электрона в периодическом потенциале $V(x)$ имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

где:

- $\psi(x)$ — волновая функция электрона,
- $V(x)$ — периодический потенциал (см. условие задачи),
- E — энергия электрона.

Потенциал $V(x)$ состоит из чередующихся прямоугольных участков, что позволяет разделить задачу на два диапазона:

1. Внутри потенциальной ямы ($nc < x < nc + a$): $V(x) = 0$.
2. Внутри барьера ($nc + a < x < (n + 1)c$): $V(x) = U$.

Волновая функция внутри потенциальной ямы ($V(x)=0$):

В этой области уравнение Шрёдингера принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x).$$

Это обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка с решением:

$$\psi_1(x) = A \sin(k_1 x) + B \cos(k_1 x),$$

где:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Волновая функция внутри барьера ($V(x) = U$):

В этой области уравнение Шрёдингера принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U \psi(x) = E \psi(x).$$

Упрощаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = (E - U) \psi(x).$$

Решение зависит от того, больше или меньше E относительно U :

- Если $E < U$: $(E - U) < 0$, решение экспоненциальное:

$$\psi_2(x) = C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}}.$$

- Если $E > U$: $(E - U) > 0$, решение тригонометрическое:

$$\psi_2(x) = C \sin(k_2 x) + D \cos(k_2 x), \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U)}{\hbar^2}}.$$

На границе между ямой и барьером ($x = nc + a, x = nc + b$) волновая функция $\psi(x)$ и её производная $\frac{d\psi(x)}{dx}$ должны быть непрерывны:

$$\psi_1(nc + a) = \psi_2(nc + a),$$

$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=nc+a} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=nc+a}.$$

Из-за периодического характера потенциала решением уравнения Шрёдингера должна быть функция Блоха:

$$\psi(x) = e^{ikx} u(x),$$

где $u(x)$ — периодическая функция ($u(x + c) = u(x)$).

Использование функции Блоха позволяет связать волновую функцию $\psi(x)$ на соседних периодах потенциала, что приводит к дисперсионному уравнению:

$$\cos(kc) = f(E).$$

При подстановке решений $\psi(x)$ для ямы и барьера, а также использования условий непрерывности, получается выражение для $f(E)$. Оно зависит от энергий, ширины ямы a , ширины барьера b , высоты потенциала U , и массы электрона m .

Для $E < U$:

$$f(E) = \frac{(1 - 2E)}{2\sqrt{E(1 - E)}} \sin(\alpha_0 a \sqrt{E}) \sinh(\alpha_0 b \sqrt{1 - E}) + \cos(\alpha_0 a \sqrt{E}) \cosh(\alpha_0 b \sqrt{1 - E}).$$

Для $E > U$:

$$f(E) = \frac{(1 - 2E)}{2\sqrt{E(E - 1)}} \sin(\alpha_0 a \sqrt{E}) \sin(\alpha_0 b \sqrt{E - 1}) + \cos(\alpha_0 a \sqrt{E}) \cos(\alpha_0 b \sqrt{E - 1}).$$

При

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2}}.$$

Условия для разрешённых зон

Для разрешённых зон выполняется условие:

$$|f(E)| \leq 1.$$

Мы выбираем точки, где это условие соблюдается. Эти точки формируют энергетические полосы.

Вычисление волнового числа k

Из дисперсионного соотношения

$$k = \frac{\arccos(f(E))}{c}.$$

Код:

```
a = 5
b = 5
potential_height = 1
energy_range = 6

energy_values, function_values = compute_kronig_penney_solution(a, b, potential_height, energy_range)
k_values, energy_bands = calculate_energy_bands(energy_values, function_values, extend_repeats=2)

colors = ['red', 'blue', 'purple', 'orange']

plt.figure()
plt.title("Extended Band Structure of the Kronig-Penney Potential")
plt.xlabel(r"$k \times \frac{\pi}{(a+b)}$")
plt.ylabel(r"$\epsilon$")

for i, (ki, epsi) in enumerate(zip(k_values, energy_bands)):
    plt.plot(ki, epsi, color=colors[i % len(colors)])
    plt.fill(ki, epsi, color=colors[i % len(colors)], alpha=0.7)
plt.xlim(-1, 1)
plt.show()
✓ [7] 25s 283ms
```

```

def calculate_energy_bands(energy_values, function_values, extend_repeats=2):
    k_values = []
    band_list = []
    energy_band_list = []
    temporary_energy_values = []

    for i in range(len(function_values) - 1):
        if 1 >= function_values[i] >= -1:
            band_list.append(function_values[i])
            temporary_energy_values.append(energy_values[i])
            if (1 < function_values[i + 1] or -1 > function_values[i + 1]):
                k_values.append(band_list)
                energy_band_list.append(temporary_energy_values)
                band_list = []
                temporary_energy_values = []

    for i, band in enumerate(k_values):
        k_values[i] = np.arccos(band) / np.pi
        if i % 2 == 0:
            energy_band_list[i] = np.concatenate((energy_band_list[i][::-1], energy_band_list[i][::1]))
            k_values[i] = np.concatenate((-1 * np.array(k_values[i], dtype=float)[::-1], k_values[i][::1]))
        else:
            k_values[i] = np.concatenate((k_values[i][::1], -1 * np.array(k_values[i], dtype=float)[::-1]))
            energy_band_list[i] = np.concatenate((energy_band_list[i][::1], energy_band_list[i][::-1]))

    extended_k = []
    extended_eps = []
    for k, eps in zip(k_values, energy_band_list):
        for n in range(-extend_repeats, extend_repeats + 1):
            if n != 0:
                extended_k.append(k + 2 * n)
                extended_eps.append(eps)

    extended_k = k_values + extended_k
    extended_eps = energy_band_list + extended_eps

    return extended_k, extended_eps

```

```

def compute_kronig_penney_solution(a, b, potential_height, energy_range):
    alpha_0 = (2 * m_e * potential_height * eV / (hbar ** 2)) ** (1/2)
    a0 = a * 1e-10
    b0 = b * 1e-10

    def kronig_penney_above_one(energy):
        return (1 - 2 * energy) / (2 * (energy * (energy - 1)) ** (1/2)) * \
            np.sin(alpha_0 * a0 * energy ** (1/2)) * \
            np.sin(alpha_0 * b0 * (energy - 1) ** (1/2)) + \
            np.cos(alpha_0 * a0 * energy ** (1/2)) * \
            np.cos(alpha_0 * b0 * (energy - 1) ** (1/2))

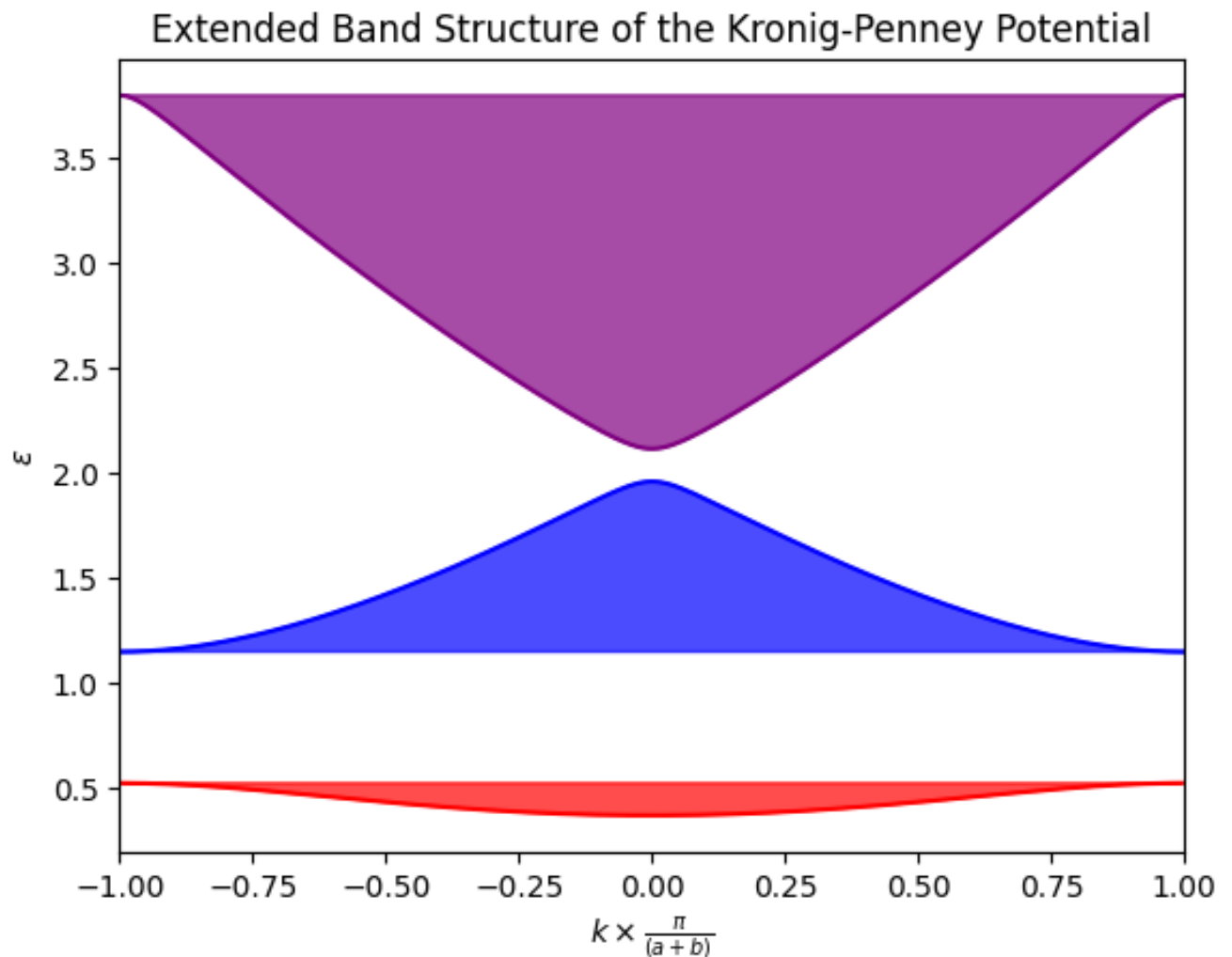
    def kronig_penney_below_one(energy):
        return (1 - 2 * energy) / (2 * (energy * (1 - energy)) ** (1/2)) * \
            np.sin(alpha_0 * a0 * energy ** (1/2)) * \
            np.sinh(alpha_0 * b0 * (1 - energy) ** (1/2)) + \
            np.cos(alpha_0 * a0 * energy ** (1/2)) * \
            np.cosh(alpha_0 * b0 * (1 - energy) ** (1/2))

    energy_values = np.linspace(1e-10, energy_range, 200000)
    function_values = np.piecewise(energy_values,
                                    [energy_values < 1, energy_values > 1],
                                    [kronig_penney_below_one, kronig_penney_above_one])

    return energy_values, function_values

```

График:



Вывод:

В ходе работы была изучена зонная структура электронов в модели Кронига-Пенни. Были рассчитаны энергетические значения и волновые числа k для разных диапазонов энергии, а также построены зависимости энергии от волнового числа.

Итоговые результаты показали хорошее согласие с теоретическими предсказаниями зонной структуры в периодическом потенциале. Графики энергии E от k демонстрируют наличие запрещённых зон, что подтверждает применимость модели для описания электронных свойств кристаллов.

Небольшие расхождения между рассчитанными и теоретическими данными могут быть связаны с допущениями, сделанными при выводе формул, или численными погрешностями.