**Университет ИТМО**

**Физико-технический мегафакультет**

**Физический факультет**



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 №2**

# 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.

# 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.

1. **Объект исследоваия**

Зонная структура одномерного кристалла, описываемая моделью Кронига-Пенни.

1. **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:

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана, Шрифт, белый

Автоматически созданное описание**

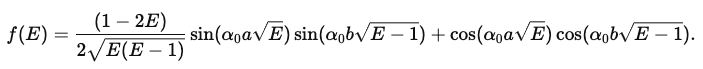
**Формулы для **

Если энергия электрона E < U:

**Изображение выглядит как текст, чек, Шрифт, снимок экрана

Автоматически созданное описание**

Если энергия электрона E > U:

****

**Вывод формул:**

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

**Изображение выглядит как текст, чек, Шрифт, снимок экрана

Автоматически созданное описание**

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

* + 1. Внутри потенциальной ямы 
    2. Внутри барьера 

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

В этой области уравнение Шрёдингера принимает вид:

**Изображение выглядит как Шрифт, рукописный текст, белый, каллиграфия

Автоматически созданное описание**

Это обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка с решением:

**Изображение выглядит как текст, Шрифт, белый, снимок экрана

Автоматически созданное описание**

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

В этой области уравнение Шрёдингера принимает вид:

Изображение выглядит как текст, чек, Шрифт, белый

Автоматически созданное описание

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

Изображение выглядит как текст, чек, Шрифт, снимок экрана

Автоматически созданное описание

На границе между ямой и барьером  волновая функция  и её производная  должны быть непрерывны:

Изображение выглядит как Шрифт, текст, белый, рукописный текст

Автоматически созданное описание

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

Изображение выглядит как текст, Шрифт, рукописный текст, белый

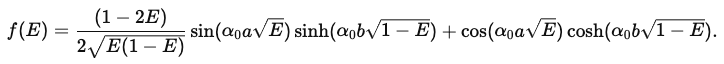
Автоматически созданное описание

Использование функции Блоха позволяет связать волновую функцию  на соседних периодах потенциала, что приводит к дисперсионному уравнению:

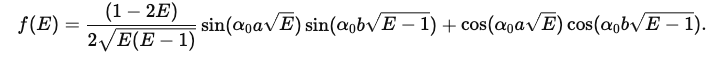


При подстановке решений  для ямы и барьера, а также использования условий непрерывности, получается выражение для f(E). Оно зависит от энергий, ширины ямы a, ширины барьера b, высоты потенциала U, и массы электрона m.

Для E < U:



Для E > U:



При

Изображение выглядит как текст, Шрифт, белый, Графика

Автоматически созданное описание

**Условия для разрешённых зон**

Для разрешённых зон выполняется условие:

****

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

**Вычисление волнового числа k**

Из дисперсионного соотношения

**Изображение выглядит как Шрифт, текст, белый, линия

Автоматически созданное описание**

**Код:**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана

Автоматически созданное описание**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана

Автоматически созданное описание**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана, Шрифт

Автоматически созданное описание**

**График:**

**Изображение выглядит как текст, снимок экрана, График, линия

Автоматически созданное описание**

**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.