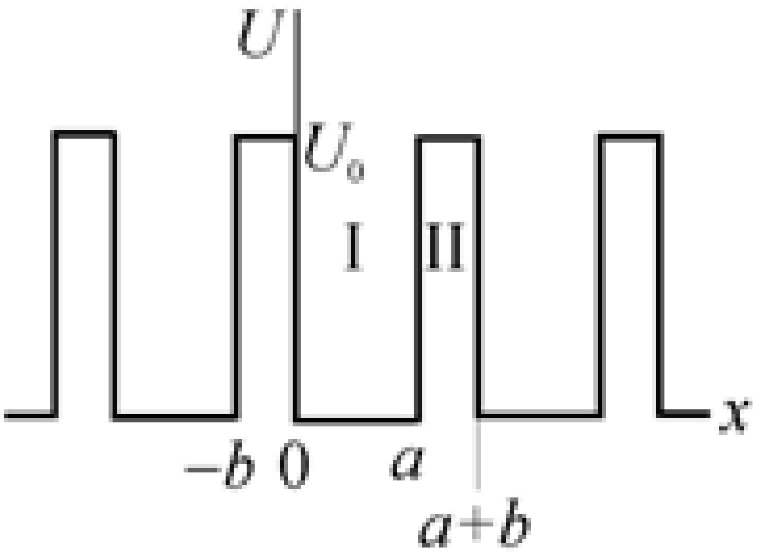
Моделирование №2

На основании модели Кронига-Пени промоделировать зонную структуру одномерного кристалла. Проанализировать изменение ширины запрещенных зон для двух крайних случаев, когда электрон совершенно свободен и когда электрон заперт внутри одной потенциальной ямы, т.е. стенки непроницаемы, а так же промежуточные случаи. $V(x)=\begin{cases} 0, & nc<x<nc+a \\ U, & (nc+a)<x<(n+1)c \end{cases}$, где a – ширина ямы, b – ширина барьера, c – постоянная кристаллической решетки, $n=0, \pm 1, \pm 2...$.

Одномерная модель Кронига-Пенни - это бесконечная цепочка потенциальных ям прямоугольной формы. Движение электронов в такой системе характеризуется качественно новым и принципиально важным свойством: спектр разрешенных значений энергий электрона состоит не из отдельных уровней, как в изолированных атомах и в модели Зоммерфельда, а из широких зон.

Обозначим ширину потенциальной ямы через *a,* а высоту и ширину барьера через U_0 и *b.* Такая цепочка потенциальных ям будет периодической с периодом c = a + b.

В модели Кронига-Пенни рассматривается одномерное движение электрона в периодическом потенциале простой формы: в одномерной потенциальной яме ширины L на одинаковом расстоянии *a* друг от друга располагаются потенциальные прямоугольные барьеры; высота каждого из них U_0, а ширина *b*.



$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } nc < x < nc + a \\ U, & \text{если } (nc + a) < x < (n+1)c \end{cases}$$

Уравнение описывающее движение электрона такой системе принимает вид

$$\nabla^2\psi(x) - \lambda^2\psi(x) = 0 \text{ при } -b \leqslant x \leqslant 0$$

$$\nabla^2\psi(x) + \varkappa^2\psi = 0 \text{ при } 0 \leqslant x \leqslant a',$$

Раскрыв его, приходим к уравнению

$$\frac{\lambda^2 - \varkappa^2}{2\varkappa\lambda} \sin \varkappa a \operatorname{sh} \lambda b + \cos \varkappa a \operatorname{ch} \lambda b = \cos\varphi,$$

В случае, когда ширина потенциального барьера b -> 0, а проницаемость барьера $V_0 b = const$, наше уравнение значительно упрощается и мы получим так называемое уравнение Кронига-Пенни

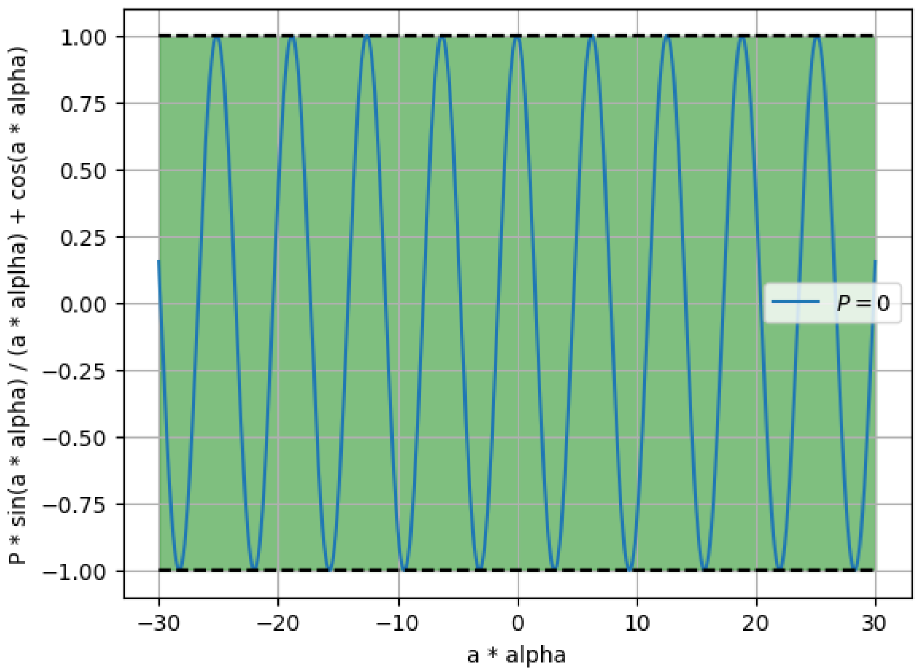
$P\frac{sin(a\alpha)}{a\alpha} + cos(a\alpha) = cos(k\alpha)$, где

$$\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_n E}$$

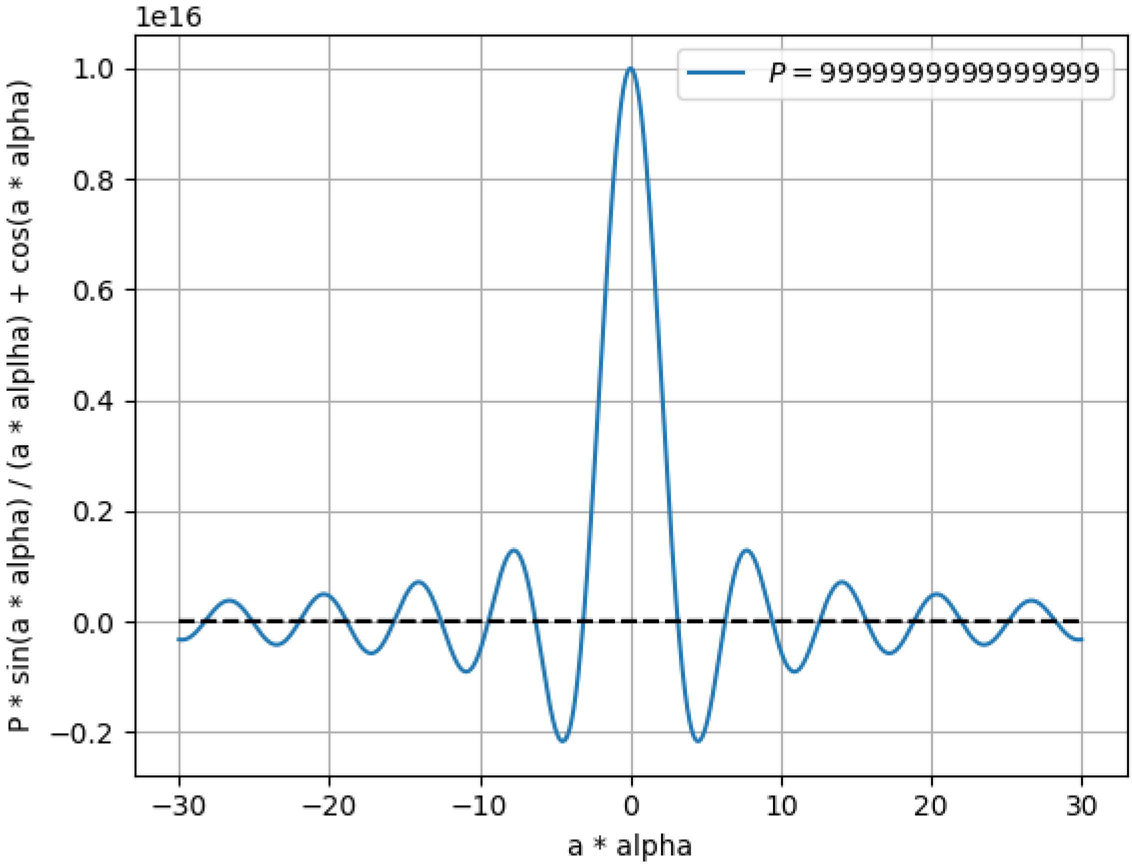
,

а параметр P прямо пропорционален площади потенциального барьера и характеризует степень его прозрачности.

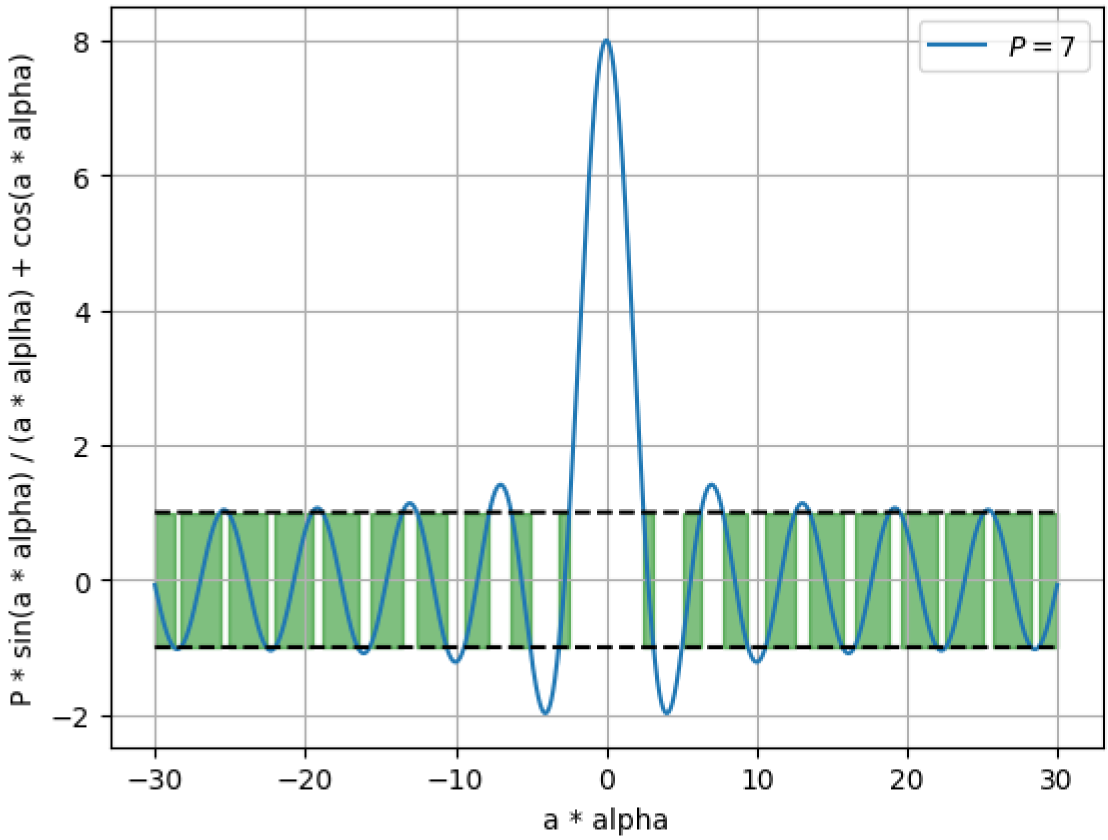
Промоделируем согласно модели Кронига-Пенни для разных P

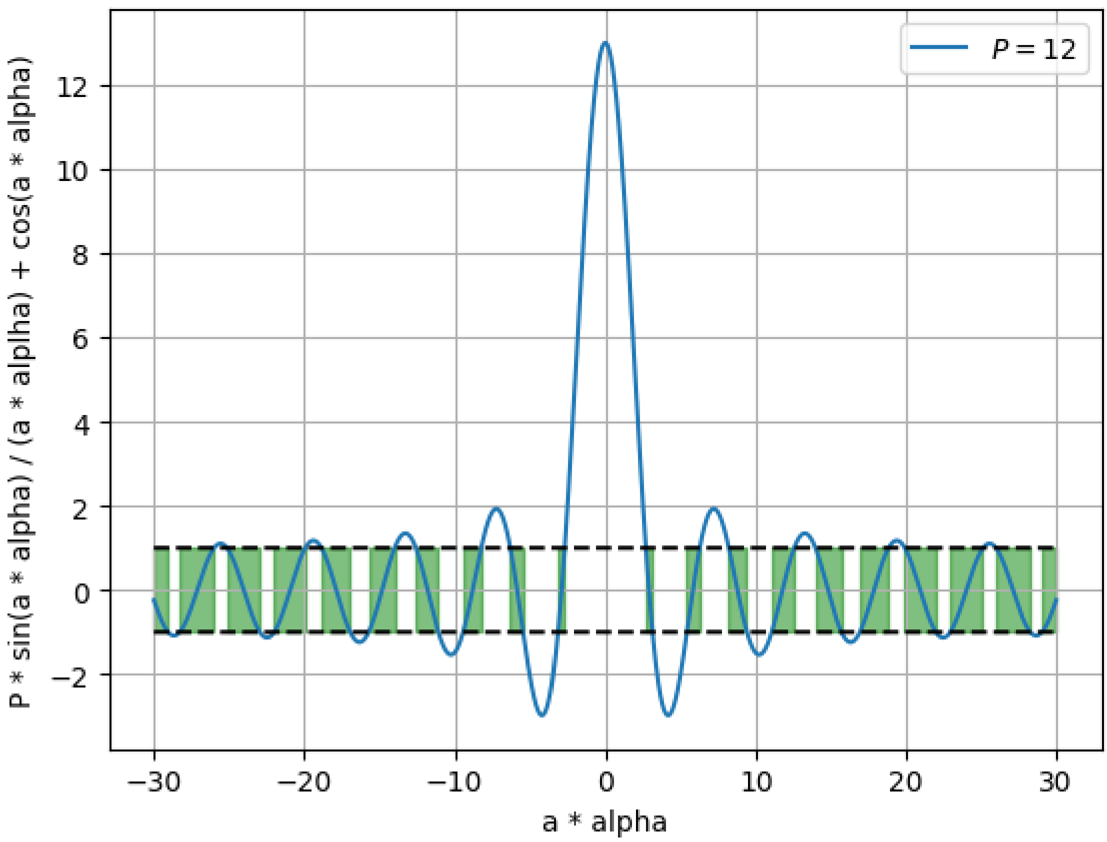


P * sin(a * alpha) / (a * alpha) + cos(a * alpha)
a * alpha
$P = 0$



1e16
P * sin(a * alpha) / (a * alpha) + cos(a * alpha)
a * alpha
$P = 9999999999999999$





При стремлении прозрачности барьера к нулю P -> 0 запрещенные зоны исчезают и наш электрон становится свободным. А если

стенки непроницаемы(P -> inf), то разрешенные зоны вырождаются в дискретные энергетические уровни, соответствующие $a\alpha = Pi * n$, где $n = \pm 1, \pm 2$... Тем самым мы приходим к случаю электрона в изолированном атоме.
Для промежуточных же значений мы наблюдаем чередование разрешенных и запрещенных зон, при этом ширина разрешенных зон увеличивается по мере удаления от нуля. При уменьшении/увеличении параметра P ширина запрещенных зон уменьшается/увеличивается соответственно.

https://scask.ru/e_book_tpi.php?id=11
http://solidstate.karelia.ru/p/tutorial/ftt/Part9/part9_3.htm
https://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_physics/3649/%D0%9A%D0%A0%D0%9E%D0%9D%D0%98%D0%93%D0%90