

Πείραμα 3 -Kronig-Penney model.

Ιάσων Καζάζης

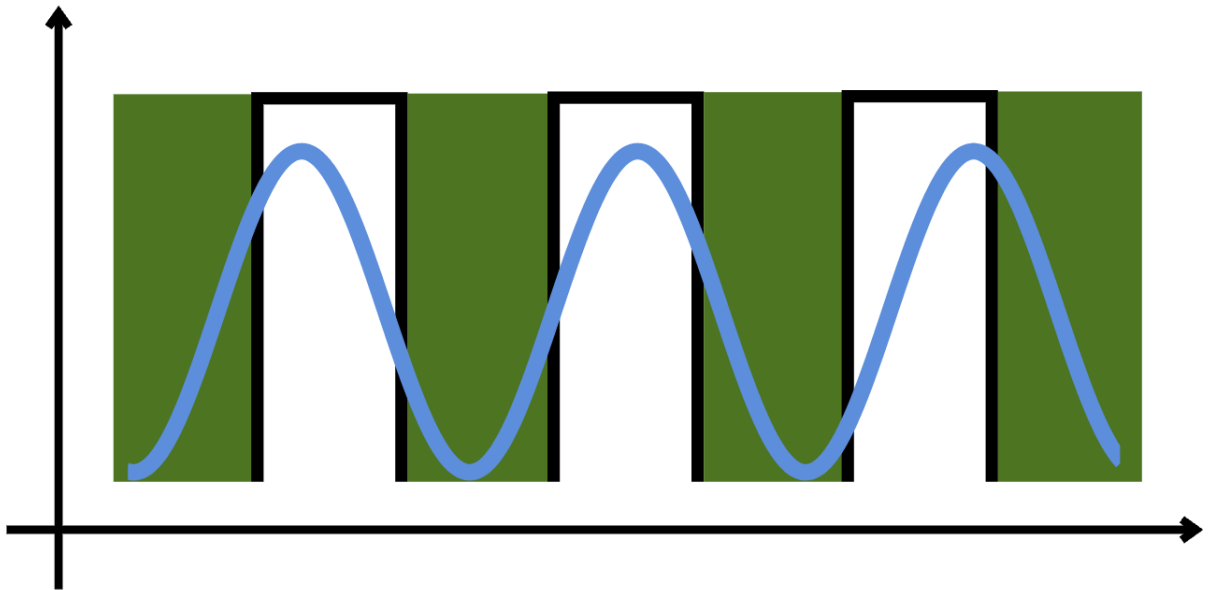
Προς την κυρία Τσέτσερη.



HELLENIC REPUBLIC
**National and Kapodistrian
University of Athens**

—EST. 1837—

Προσωπικά στοιχεία | AM: 1110201900073 , email: sph1900073@uoa.gr
Εκτέλεση άσκησης Παρασκευή 14:00-17:00, 31 Μαΐου 2024.



Εργαστηριακές Ασκήσεις Εισαγωγής στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης.

Πείραμα 3.

24 Ιουνίου 2024

Περιεχόμενα

1	Θεωρία Πειράματος.	1
2	Πειραματική Διαδικασία.	2
2.1	Εκτέλεση Βημάτων	2
2.1.1	Βήμα 1	2
2.1.2	Βήμα 2	3
2.1.3	Βήμα 3	4
2.1.4	Βήμα 4	5
2.1.5	Βήμα 5	5
2.1.6	Βήμα 6	7
2.1.7	Βήμα 7	8
2.1.8	Υπολογισμός Παραγώγου Αριθμητικά	10
2.1.9	Βήμα 8	12
2.2	Συμπεράσματα	12
3	Παράρτημα	13
4	Βιβλιογραφία.	14
4.1	Βιβλιογραφία.	14
4.2	Αναφορές.	14
4.3	Μετρήσεις-Δεδομένα.	14



Περίληψη

Με την συγκεκριμένη άσκηση αποσκοπούμε στην μελέτη της συμπεριφοράς των ηλεκτρονίων όταν βρίσκονται εντός περιοδικού δυναμικού ενός κρυσταλλικού πλέγματος μέσω της χρήσης μιας αριθμητικής προσομοίωσης. Ειδικότερα θα μελετήσουμε τον τρόπο με τον οποίο οι ενεργειακές στάθμες των δεσμών στους πυρήνες ηλεκτρονίων σταματάνε να είναι πλέον διακριτές δημιουργώντας έτσι συνεχείς ενεργειακές ζώνες και απαγορευμένα ενεργειακά χάσματα. Επίσης θα υπολογίσουμε την σχέση διασποράς, την ταχύτητα και την ενεργό μάζα των ηλεκτρονίων καθώς και πως αυτά εξαρτώνται από βασικές παραμέτρους όπως το ύψος του ηλεκτροστατικού δυναμικού που δημιουργούν οι πυρήνες V_o , του εύρους των ενεργειών που μελετάμε ($E_{1, 2}$) και το πλήθος των κυψελίδων του κρυστάλλου N .

1 Θεωρία Πειράματος.

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει όταν N άτομα πλησιάσουν αρκετά ώστε να δημιουργήσουν ένα κρυσταλλικό πλέγμα, τα ηλεκτρόνια των εξωτερικών τους στιβάδων τους υπόκεινται σε ένα νέο ηλεκτροστατικό δυναμικό δημιουργούμενο από όλους τους πυρήνες και τα γειτονικά ηλεκτρόνια συνδυαστικά, έτσι οι διακριτές ενεργειακές στάθμες υπάρχουν πλέον ελάχιστα μεταξύ τους με αποτέλεσμα να δημιουργούν ενεργειακές ζώνες καθώς και ενεργειακά χάσματα όπου τα ηλεκτρόνια απαγορεύεται να βρεθούν. Στην συνέχεια, όταν ηλεκτρικό πεδίο εφαρμοστεί στον κρύσταλλο τα ηλεκτρόνια αυτές μπορούν να συμπεριφερθούν με τρεις τρόπους ανάλογα με την δομή των ενεργειακών ζωνών.

Ο κρύσταλλος συμπεριφέρεται ως μέταλλο και είναι καλός αγωγός του ρεύματος όταν κάποιες από τις ενεργειακές ζώνες είναι μερικώς συμπληρωμένες ώστε με εφαρμογή ηλεκτρικού πεδίου τα ηλεκτρόνια προσλαμβάνουν αρκετή ενέργεια ώστε να μεταπηδήσουν σε άδειες ενεργειακές καταστάσεις ακόμα και αν αυτές βρίσκονται πιο ψηλά από την ενέργεια Fermi αλλά πολύ κοντά σε αυτήν. Αντιθέτως ο κρύσταλλος συμπεριφέρεται ως μονωτής όταν οι ενεργειακές ζώνες είναι εντελώς άδειες ή εντελώς γεμάτες.

Τέλος η συμπεριφορά είναι αυτή ενός ημιαγωγού όταν οι ενεργειακές ζώνες είναι μερικώς κατειλημμένες αλλά το ενεργειακό χάσμα μεταξύ της τελευταίας κατειλημμένης και της επόμενης άδειας είναι αρκετά μικρό ώστε ορισμένα ηλεκτρόνια να μπορούν μεταπηδήσουν σε αυτό μέσω θερμικής διέγερσης τους αφήνοντας πίσω οπές και καθιστώντας έτσι το υλικό αγώγιμο σε θερμοκρασίες κάτω

από το σημείο τήξεως.

Περιγραφή και επίλυση του προτύπου

Για απλούστευση θεωρούμε ότι το ηλεκτροστατικό δυναμικό είναι μονοδιάστατο, ενώ φέρει την περιοδικότητα του πλέγματος. Η περίοδός του είναι $l = b + c$ όπως φαίνεται στο σχήμα του (2.1.2) πιο κάτω.

Λύνουμε την χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Schrodinger για δύο περιοχές :

$$\Psi(x)'' + \kappa^2 \Psi = 0, \quad 0 < x < b \quad (1)$$

$$\Psi(x)'' + \lambda^2 \Psi = 0, \quad b < x < l \quad (2)$$

με

$$\Lambda = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3)$$

$$\kappa = \left(\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right)^{1/2} \quad (4)$$

Στις παραπάνω η m είναι η μάζα του ηλεκτρονίου, \hbar η σταθερά του Planck, E η ενέργεια των ηλεκτρονίων και V_0 το ύψος του δυναμικού. Γενικές λύσεις των παραπάνω διαφορικών εξισώσεων είναι:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad 0 < x < b \quad (5)$$

και

$$\Psi(x) = Ce^{-\lambda x} + De^{\lambda x}, \quad b < x < l \quad (6)$$

Αποδεικνύεται ότι κάθε κυματοσυνάρτηση χαρακτηρίζεται από τον εξής κυματοαριθμό:



$$k = \frac{2\pi m}{Nl}, \quad m \in \mathbb{N} \quad (7)$$

Έπειτα απαιτώντας συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της στα b και l και λύνοντας το σύστημα οδηγούμαστε στις δύο βασικές εξισώσεις :

$$\cos(kb) \cosh(\lambda c) - \frac{\kappa^2 - \lambda^2}{2\kappa\lambda} \sin(kb) \sinh(\lambda c) = \cos(kl), \quad E < V_0$$

και

$$\cos(kb) \cos(\mu c) - \frac{\kappa^2 - \mu^2}{2\kappa\mu} \sin(kb) \sin(\mu c) = \cos(kl), \quad E > V_0$$

όπου

$$\mu = \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \right)^{1/2} \quad (8)$$

Όπως γίνεται φανερό αφού τα κ, λ, μ περιέχουν την ενέργεια E οι δύο παραπάνω τελικές εξισώσεις μας δίνουν την σχέση διασποράς για τις διάφορες τιμές του k . Επίσης οι εξισώσεις αυτές θα έχουν λύση μόνο όταν το αριστερό τους μέλος παίρνει τιμές μεταξύ -1 και 1 , άρα μόνο όταν η ενέργεια των ηλεκτρονίων λαμβάνει κάποιες ανάλογες τιμές, τα διαστήματα αυτά ορίζουν τις ζώνες αγωγιμότητας του υλικού, αντίθετα τα ενδιάμεσα διαστήματα στα οποία οι (8) και (9) δεν έχουν λύση αποτελούν τα ενεργειακά χάσματα. Ενδιαφέρον αποτελεί το γεγονός ότι όλα τα παραπάνω αφορούν μια ζώνη Brillouin, την πρώτη, ενώ αποδεικνύεται ότι οι ενεργειακές ζώνες είναι άρτιες και περιοδικές συναρτήσεις του κυματοαριθμού γεγονός που σημαίνει ότι επαναλαμβάνονται αυτούσιες σε όλες τις υπόλοιπες ζώνες Brillouin.

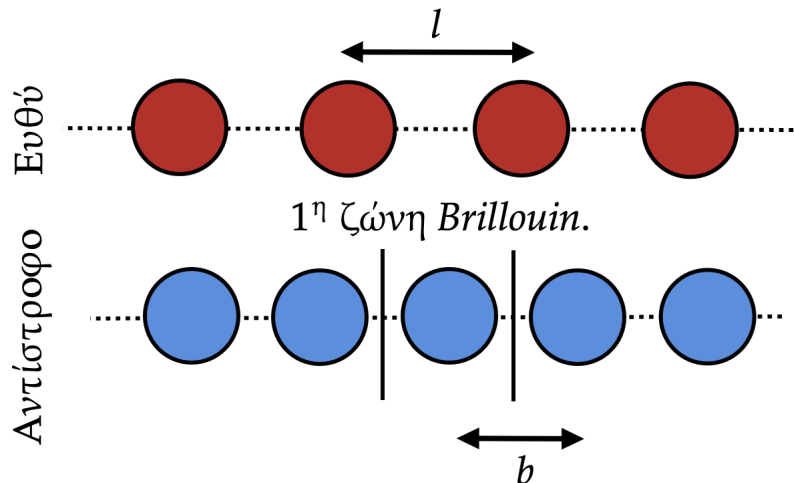
2 Πειραματική Διαδικασία.

Για αυτήν την άσκηση χρησιμοποιείται το πρόγραμμα KRONIG, μια αριθμητική προσομοίωση η οποία υπολογίζει και απεικονίζει το διάγραμμα διασποράς $E = f\left(\frac{kl}{\pi}\right)$ της πρώτης ζώνης Brillouin για δεδομένα κάθε φορά ύψος φραγμού V_0 , ενεργειακό διάστημα (E_1, E_2) στο οποίο επιλύονται οι (8) και (9) και πλήθος κυψελίδων N . Να σημειωθεί ότι για λόγους απλούστευσης χρησιμοποιείται κατάλληλο ατομικό σύστημα μονάδων για το οποίο ισχύει : $\hbar = 1$, $m_e = 1/2$ και $b = 1au$, $c = 2au$ άρα $l = 3au$ και όλες οι ενέργειες μετριοούνται σε ατομικές μονάδες ενέργειας $1\text{Ry} = 1au$.

2.1 Εκτέλεση Βημάτων

2.1.1 Βήμα 1

Η αλυσίδα θα έχει το παρακάτω ευθύ πλέγμα. Θα θεωρούμε απόσταση $l = 3au$. Τότε μπορούμε να υπολογίσουμε το αντίστροφο πλέγμα είναι στη μονοδιάστατη περίπτωση, με σταθερά $b = \frac{2\pi}{l} = \frac{2\pi}{3} au^{-1}$



**2.1.2 Βήμα 2**

Θεωρούμε το περιοδικό δυναμικό των πυρήνων και των γύρω ηλεκτρονίων στο μονοδιάστατο πλέγμα για τα ηλεκτρόνια. Εδώ Όπου $b = 1au$ και $c = 2au$

Αντίθετα το αντίστροφο πλέγμα ικανοποιεί την σχέση

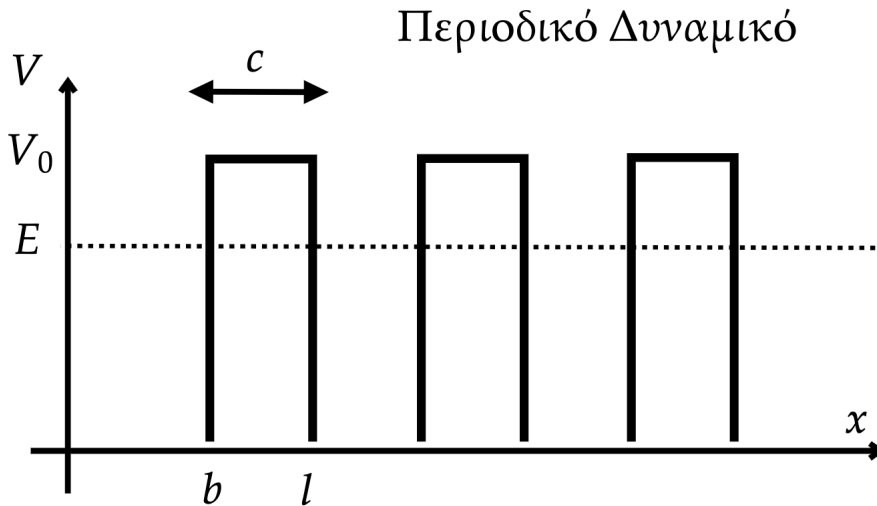
$$G \cdot R_n = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}$$

ή με άλλα λόγια τα αντίστοιχα θεμελιώδη διανύσματα είναι κάθετα μεταξύ τους. Για το αντίστροφο πλέγμα ισχύει επίσης:

$$k = \frac{2\pi}{3N}$$

όπου k ο κυματιριθμός.

Η πρώτη ζώνη Brillouin οριοθετείται από τις ακραίες τιμές του $ka = kl$ (δηλαδή τις ασυνέχειες) και βρίσκεται στο διάστημα $ka \in (0, 3.1415)$



Εδώ θα πάρουμε την εξίσωση για $E > V_0$, δηλαδή, θα έχουμε $V_0 = 0.45Ry$ και $E = 1Ry$.

$$\cos \kappa b \cos \mu c - \frac{\kappa^2 + \mu^2}{2\kappa\mu} \sin \kappa b \sin \mu c = \cos k\ell, \quad \text{για } E > V_0,$$

Με $\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\mu^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ με τα κ, μ θετικές ποσότητες βάση των περιοδικών συνθηκών Floquet-Bloch. Στη συνέχεια θέτουμε $\hbar = 1, m = 1/2, e^2 = 2$ και προκύπτει από τον υπολογισμό πως:

$$\frac{k\ell}{\pi} \approx 0.794$$

Αναλυτικά, αρχικά έχουμε

$$\cos(k\ell) = -0.7973$$

ή

$$kl = \arccos(-0.7973) = 2.4936$$

Όπως μπορούμε να διαπιστώσουμε από την παρακάτω εικόνα των δεδομένων που υπολογίστηκαν από το πρόγραμμα KRONIG, $kl(E = 1Ry) = 2.4974$ τιμή δηλαδή πολύ κοντά σε αυτή που βρήκαμε και μόνοι μας.

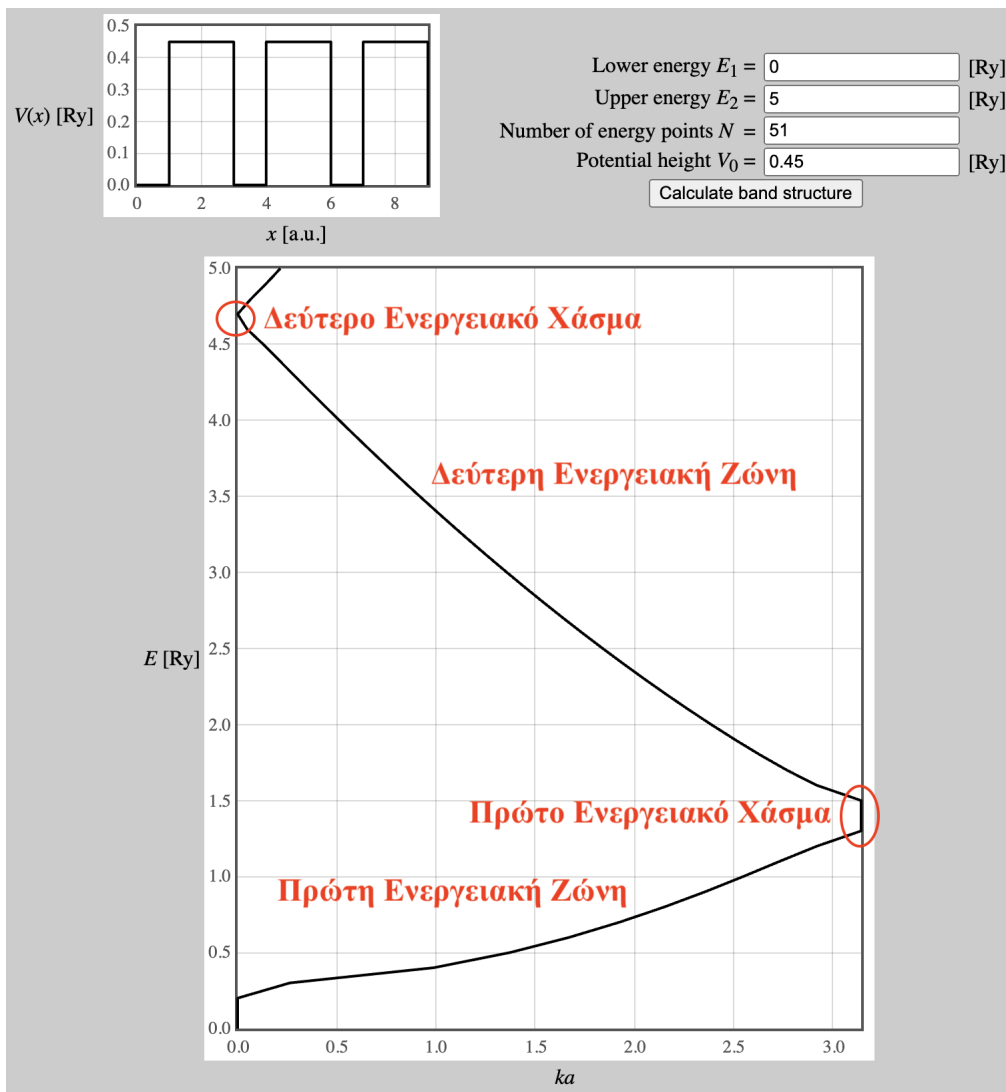


0.9519038076152304	2.4005816646358045
0.9619238476953907	2.42018406773355
0.9719438877755511	2.4396708878086493
0.9819639278557114	2.4590479854226057
0.9919839679358717	2.4783213471808354
1.002004008016032	2.49749712792094
1.0120240480961924	2.5165816986388396
1.0220440881763526	2.5355817015188666
1.032064128256513	2.5545041137749553
1.0420841683366733	2.57335632245716

Η διαφορά πιθανόν να οφείλεται σε σφάλματα στρογγυλοποίησης του προγράμματος ή των υπολογισμών μας.

2.1.3 Βήμα 3

Επιλέξαμε το ύψος δυναμικού να είναι $V_0 = 0.45Ry$ και το εύρος ενεργειών $(E_1, E_2) = (0, 5)$, ενώ προκειμένου να σαρώσουμε τις ενέργειες με βήμα $0.1Ry$ (όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα) θέσαμε $N = 51$. Επίσης εντός αυτού διακρίνονται οι δύο πρώτες ενεργειακές ζώνες και τα δύο πρώτα ενεργειακά χάσματα όπως φαίνονται στο σχήμα: Ενώ ο πίνακας με τα δεδομένα:





2.1.4 Βήμα 4

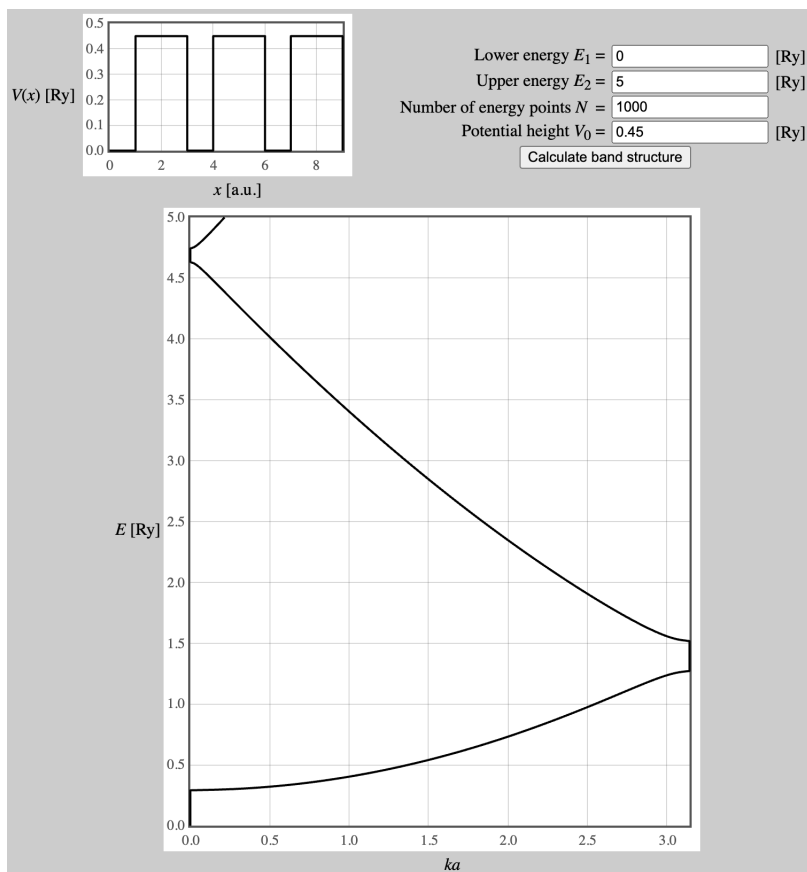
Σε αυτό το βήμα προκειμένου να πετύχουμε μεγαλύτερη ακρίβεια αυξήσαμε το $N = 1000$. Ζητούμενο εδώ είναι το εύρος και η θέση των δύο πρώτων ενεργειακών ζωνών και χασμάτων με ακρίβεια 0,001 Ry. Για να το κάνουμε αυτό χρησιμοποιούμε τον πίνακα DATA του προγράμματος KRONIG. Γνωρίζουμε ότι τα ενεργειακά χάσματα χαρακτηρίζονται από σταθερή τιμή του ka συναρτήσει της ενέργειας ενώ αντίθετα τα διαστήματα κατά τα οποία η ενέργεια μεταβάλλεται με μεταβολή του ka αποτελούν τις ενεργειακές ζώνες, σύμφωνα λοιπόν με αυτά φτιάχνουμε τον παρακάτω πίνακα:

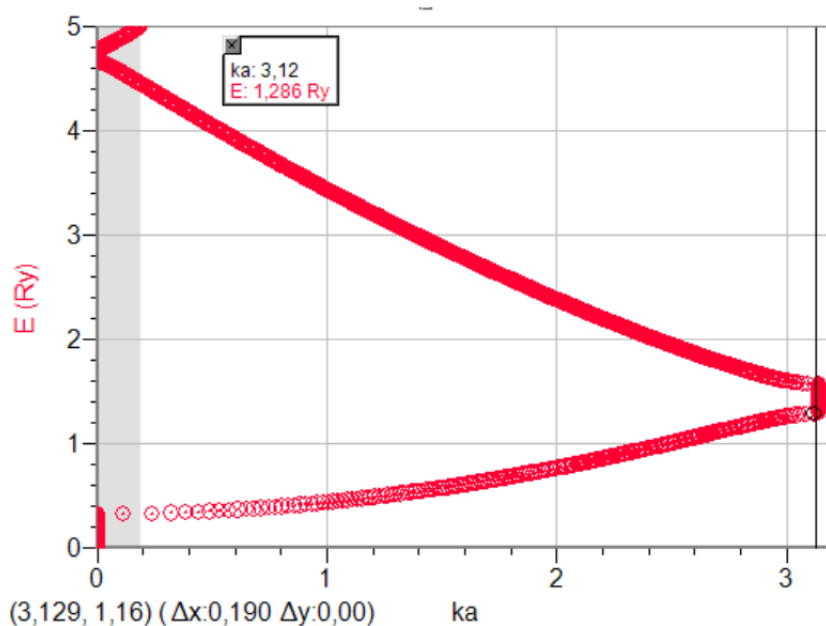
	kl	E(Ry)	Εύρος Ζώνης (Ry)
1η Ενεργειακή	0,114	0,325	0,961
	3,119	1,286	
1ο Χάσμα	3,141	1,291	0,275
	3,141	1,566	
2η Ενεργειακή	3,091	1,571	3,083
	0,015	4,654	
2ο Χάσμα	0	4,659	0,125
	0	4,784	

Πίνακας 1: Οι θέσεις και τα εύρη των ενεργειακών ζωνών και χασμάτων

2.1.5 Βήμα 5

Η γραφική παράσταση της σχέσης διασποράς για την πρώτη ζώνη σχεδιάζεται αυτόματα από το πρόγραμμα KRONIG και είναι :





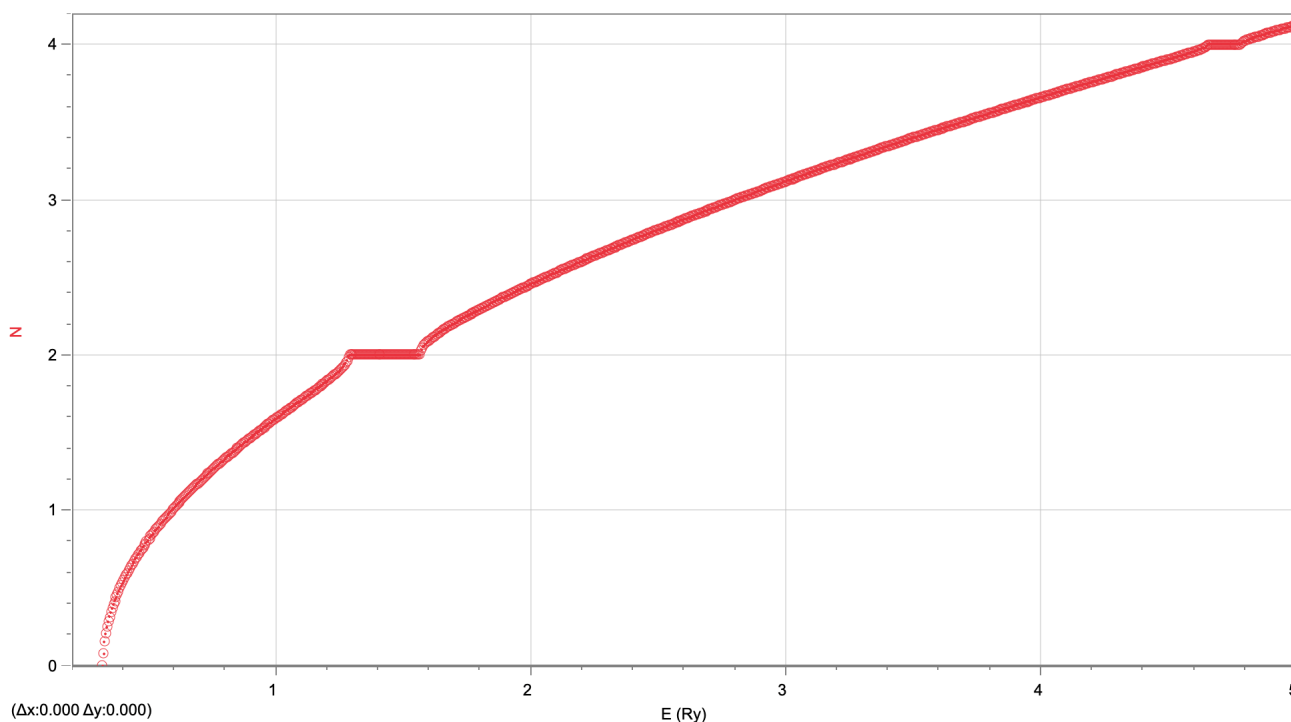
Έπειτα ξεκινώντας από την σχέση (7) αποδεικνύεται ότι ο αριθμός καταστάσεων όλων των ηλεκτρονίων του κρυστάλλου είναι :

$$N_0 = \frac{2Nlk(E)}{\pi}$$

Από αυτήν εύκολα μεταβαίνει κανείς στο πλήθος των καταστάσεων των ηλεκτρονίων ανά χυμελίδα μέχρι κάποια την ενέργεια E :

$$N_0 = \frac{2lk(E)}{\pi}$$

της οποίας η γραφική παράσταση μας δίνει μια εποπτική εικόνα του πως αυξάνεται στις ενεργειακές ζώνες (ή μένει σταθερό στα ενεργειακά χάσματα) το πλήθος των ενεργειακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων ανά χυμελίδα . Έτσι αυτό που κάνουμε για να σχεδιάσουμε την ζητούμενη γραφική παράσταση είναι να αντικαταστήσουμε τις τιμές του k από τον πίνακα DATA του προγράμματος KRONIG , στην εξίσωση (11) (να σημειωθεί σε αυτό το σημείο ότι το πρόγραμμά μας δείνει τις αδιάστατες τιμές $ka=kl$ ενώ η (11) αναφέρεται στον κυματοαριθμό k , έτσι διαιρούμε με το $l=3$ και μετά αντικαθιστούμε -φυσικά μπορούμε απλώς να αντικαταστήσουμε κατευθείαν το kl) και στην συνέχεια να υπολογίσουμε το πλήθος των καταστάσεων για κάθε έναν κυματικό αριθμό . Όπως παρατηρούμε επειδή το k εκτείνεται σε μια ζώνη Brillouin το ίδιο κάνει και το πλήθος των καταστάσεων $N(E)$ δίνοντας μας μια γραφική παράσταση ανάλογη της εικόνα του simulation , εμείς προκειμένου να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα μετακινήσαμε χειροκίνητα τις τιμές του k και κατ'επέκταση του $N(E)$ φτιάχνοντας έτσι μια μορφή επεκταμένης ζώνης (εκτείνεται δηλαδή σε παραπάνω από μια ζώνες Brillouin και ταυτίζονται σε όλες τις ενεργειακές ζώνες (στο διάστημα (0,5 Ry)) ώστε να φανεί η προσέγγιση των ενεργειακών καταστάσεων στον παρακάτω πίνακα) . Το αποτέλεσμα λοιπόν είναι :



Γραφική παράσταση του πλήθους των καταστάσεων έως κάποια ενέργεια E στο διάστημα $(0-5Ry)$

2.1.6 Βήμα 6

Η απάντηση σε αυτό το ερώτημα βασίζεται στο γεγονός ότι κάθε ενεργειακή ζώνη μπορεί να φιλοξενήσει μέχρι δύο ενεργειακές καταστάσεις. Επίσης κάθε ενεργειακή κατάσταση δύναται, λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli, να φέρει μόνο δύο ηλεκτρόνια με αντίθετο σπίν. Έτσι τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν μια-μια, από τις χαμηλότερες σε ενέργεια προς τις υψηλότερες, τις ενεργειακές καταστάσεις πάντοτε ανά δύο. Επομένως

- Στην περίπτωση που κάθε χυμελίδα έχει 1 ηλεκτρόνιο σύνθεσης τότε αυτό θα καταλάβει πρώτη την πρώτη ενεργειακή κατάσταση της πρώτης ζώνης, δηλαδή θα μπορεί να βρίσκεται σε ένα εύρος ενεργειών

$$(E_1, E_2) = (0, 0.601Ry)$$

- Ομοίως και για την περίπτωση που τα ηλεκτρόνια σύνθεσης είναι δύο, τότε απλούστατα συμπληρώνεται η πρώτη ενεργειακή κατάσταση της πρώτης ενεργειακής ζώνης με εύρος ίδιο με το προηγούμενο
- Στην περίπτωση τώρα που τα ηλεκτρόνια σύνθεσης είναι είτε 3 είτε 4 τότε συμπληρώνονται όλες οι προηγούμενες καταστάσεις με 2 ηλεκτρόνια απλά τώρα τα επόμενα δύο βρίσκονται στην δεύτερη ενεργειακή κατάσταση της πρώτης ενεργειακής ζώνης και συγκεκριμένα στο εύρος

$$(E_1, E_2) = (0.601, 1.286Ry)$$

Τέλος από τον πίνακα 1 διαπιστώνουμε ότι το εύρος των χασμάτων είναι σημαντικά μικρότερο από 2 Ry επομένως διαπιστώνουμε ότι το κρυσταλλικό υλικό έχει μεταλλικές ιδιότητες.

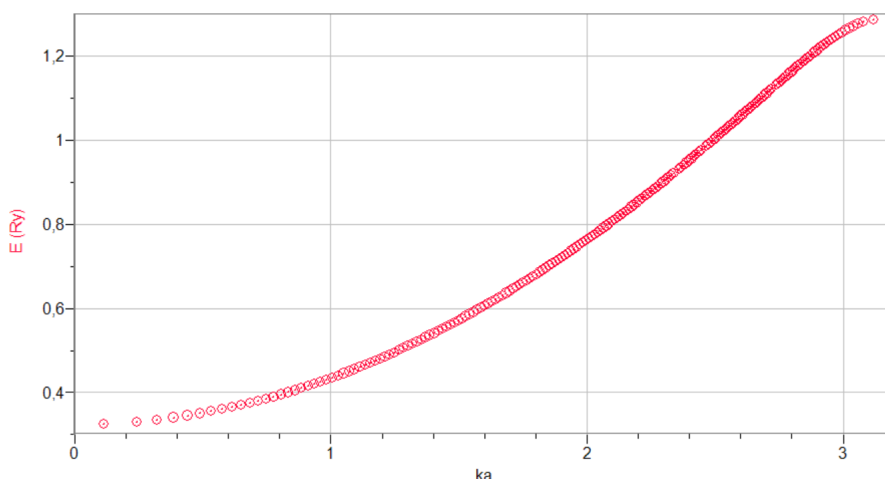


2.1.7 Βήμα 7

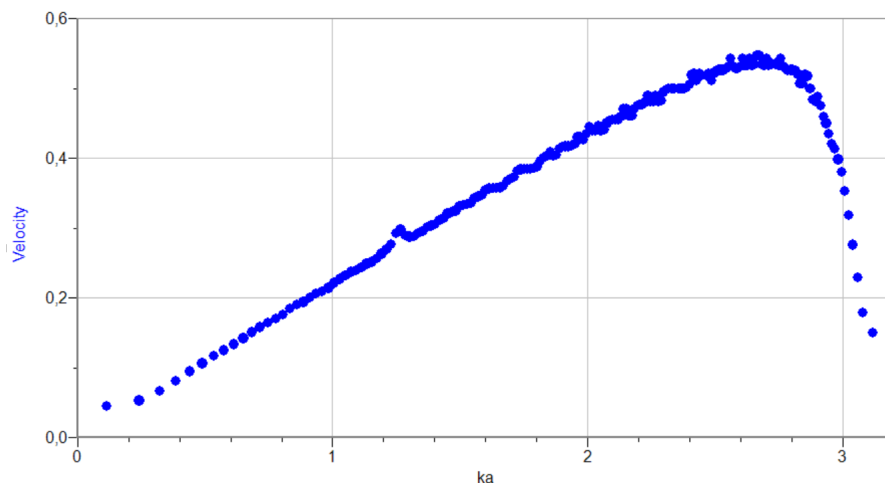
Σε αυτό το βήμα πρέπει να βρούμε την ενεργό μάζα και την ταχύτητα των ηλεκτρονίων, για να το κάνουμε αυτό θα πρέπει να εισάγουμε ορισμένες νέες έννοιες. Έπειτα από κάποια ανάλυση μπορεί να διαπιστωθεί ότι η εξωτερική δύναμη που ασκείται σε ένα ηλεκτρόνιο του κρυστάλλου είναι ανάλογη της επιτάχυνσής του λόγω τόσο των εσωτερικών όσο και των εξωτερικών δυνάμεων που του ασκούν. Ωστόσο επειδή ο προσδιορισμός των εσωτερικών δυνάμεων είναι σημαντικά δύσκολος λόγω της πολυπλοκότητας του πραγματικού δυναμικού, θεωρούμε ένα ψευδοδυναμικό (κρυσταλλικό) το οποίο η συμπεριφορά είναι ανάλογη με αυτή του πραγματικού ηλεκτρονίου στο περιοδικό δυναμικό και το οποίο επιρρέάζεται μόνο από τις εξωτερικές δυνάμεις που ασκούνται πάνω στον κρύσταλλο. Μάλιστα σε αυτό το σωματίδιο αποδίδουμε και κάποια ενεργό μάζα που αντιστοιχεί σε κάθε κατάσταση του κυματοαριθμού k :

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E_{nk}}{dk^2} \right)^{-1} \quad (12)$$

Έτσι σύμφωνα με την παραπάνω σχέση αρκεί να βρούμε την πρώτη και έπειτα την δεύτερη παράγωγο σε κάποια σημεία των ενεργειακών ζωνών του γραφήματος διασποράς και να υπολογίσουμε την ενεργό μάζα. Για να το κάνουμε αυτό περνάμε όλα τα δεδομένα από το πρόγραμμα KRONIG στο λογισμικό Logger Pro και βρίσκουμε την πρώτη και δεύτερη παράγωγο για τις καταστάσεις της πρώτης ενεργειακής ζώνης. Το γράφημα της E_{nk} είναι:

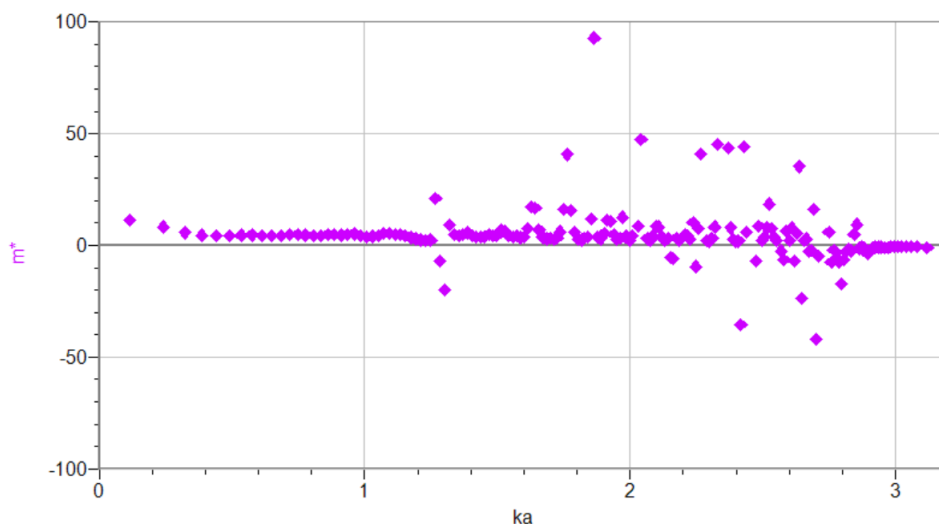


Το γράφημα της ταχύτητας $v = \frac{dE_{nk}}{dk}$ συναρτήσει του κυματοαριθμού είναι :



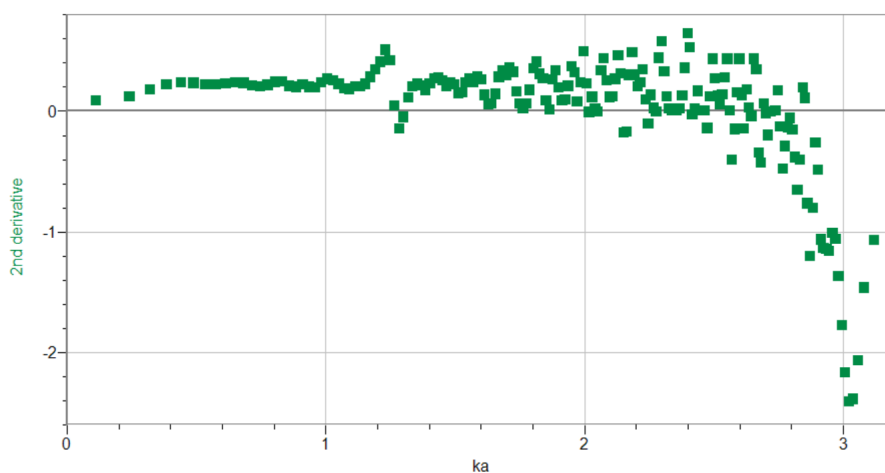


Επίσης για να κάνουμε το γράφημα της ενεργού μάζας βρίσκουμε και αντιστρέφουμε την δεύτερη παράγωγο της ενέργειας συναρτήσει του κυματοαριθμού. Η παρακάτω γραφική παράσταση απεικονίζει την συμπεριφορά της ενεργού μάζας των ψευδοσωματιδίων στις διάφορες ενεργειακές καταστάσεις της πρώτης ενεργειακής ζώνης:



Η ενεργός μάζα συναρτήσει των ενεργειακών καταστάσεων

Ωστόσο όπως γίνεται φανερό αυτό το γράφημα δύσκολα ερμηνεύεται επομένως, προς διευκόλυνση μας, θα σχολιάσουμε το γράφημα της αντίστροφης μάζας m^{*-1} συναρτήσει του κυματοαριθμού. Για να το κάνουμε αυτό απλώς αρκεί να αντιστρέψουμε την σχέση (12) και να την πλοτάρουμε:



Η αντίστροφη ενεργός μάζα συναρτήσει των ενεργειακών καταστάσεων

Σχόλια: Από το σχήμα των ενεργειακών καταστάσεων της πρώτης ενεργειακής ζώνης γίνεται φανερό ότι η ταχύτητα αυξάνεται και τελικά μεγιστοποιείται σε υψηλότερες ενεργειακές καταστάσεις ενώ σε ενέργειες κοντά σε αυτές του χάσματος μειώνεται σημαντικά και πολύ απότομα. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι με τον όρο "ταχύτητα" σε αυτή την περίπτωση δεν εννοούμε τίποτα περισσότερο από τον ρυθμό μεταβολής της ενέργειας σε κάθε ενεργειακή κατάσταση, άρα αύξηση της "ταχύτητας" σημαίνει αύξηση του ρυθμού με τον οποίο παρέχεται ενέργεια σε κάθε στάθμη, ωστόσο κοντά σε ενεργειακά χάσματα η ενέργεια τείνει να μένει σταθερή για διαφορετικές τιμές του κυματοαριθμού και άρα η ταχύτητα αύξησης της να μειωθεί μέχρι τελικά να φτάσει στο μηδέν για τους συγκεκριμένους κυματοαριθμούς! Άλλωστε είναι φανερό από το σχήμα ότι η ταχύτητα μειώνεται και τείνει στο μηδέν.



Σε ότι αφορά την ενεργό μάζα, παρατηρούμε από το σχήμα της αντίστροφης ενεργούς μάζας συναρτήσει των ενεργειακών καταστάσεων ότι το αντίστροφό της μειώνεται, άρα η ίδια αυξάνεται για τιμές κοντά στο ενεργειακό χάσμα. Αυτό καταδεικνύει όμορφα ότι ένα ψευδοσωματίδιο ικανοποιεί τους νόμους του Νεύτωνα μιας και -πολύ απλοϊκά- αύξηση της μάζας συνεπάγεται αύξηση της "αδράνειας" και άρα δυσκολότερη μεταβολή στην "ταχύτητα" και τελικά μηδενισμός αυτής. Αξίζει να σημειωθεί ότι τα παραπάνω γίνονται εύκολα αντιληπτά και από το γεγονός ότι η αντίστοιχη πτώση της "ταχύτητας" συμβαίνει το ίδιο απότομα με την "αύξηση" της μάζας. Φυσικά, στα πλαίσια της συζήτησης περί σφαλμάτων, δεν μπορούμε να αγνοήσουμε ότι τα διαγράμματα της ενεργούς μάζας και της αντιστρόφου, δεν είναι τόσο ξεκάθαρα όσο τα υπόλοιπα με τα διάφορα σημεία να μην ακολουθούν πιστά μια πορεία (ειδικότερα στο διάγραμμα ενεργού μάζας). Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι τα σημεία είναι πολλά και κάποιες φορές, οι ασυνέχειες ή μικρές μετατοπίσεις αυτών, ακόμη και στα όρια των στρογγυλοποιήσεων που κάνουμε, οδηγούν σε ασάφειες οι οποίες με την σειρά τους παράγουν μια ελαφριά δεύτερη παράγωγο.

2.1.8 Υπολογισμός Παραγώγου Αριθμητικά

Για να υπολογίσουμε την δεύτερη παράγωγο ($E(k)$) αναλυτικά χρησιμοποιώντας τις τιμές (E) στα διάφορα σημεία (k), ας ξεκινήσουμε με τις βασικές εξισώσεις.

Πρώτη Παράγωγος ($E'(k)$)

Η πρώτη παράγωγος ($E(k)$) μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας την μέθοδο της κεντρικής διαφοράς:

$$E'(k_i) \approx \frac{E(k_{i+1}) - E(k_{i-1}))}{k_{i+1} - k_{i-1}}$$

Δεύτερη Παράγωγος ($E(k)$)

Για τη δεύτερη παράγωγο, χρησιμοποιούμε την ίδια μέθοδο της κεντρικής διαφοράς πάνω στις τιμές της πρώτης παραγώγου:

$$E''(k_i) \approx \frac{E'(k_{i+1}) - E'(k_{i-1}))}{k_{i+1} - k_{i-1}}$$

Αντικαθιστώντας τις τιμές της πρώτης παραγώγου, έχουμε:

$$E''(k_i) \approx \frac{\left(\frac{E(k_{i+2}) - E(k_i)}{k_{i+2} - k_i} \right) - \left(\frac{E(k_i) - E(k_{i-2}))}{k_i - k_{i-2}} \right)}{k_{i+1} - k_{i-1}}$$

Υπολογισμός των πρώτων παραγώγων:

$$E'(k_{i+1}) \approx \frac{E(k_{i+2}) - E(k_i)}{k_{i+2} - k_i}$$

$$E'(k_{i-1}) \approx \frac{E(k_i) - E(k_{i-2}))}{k_i - k_{i-2}}$$

Υπολογισμός της διαφοράς των πρώτων παραγώγων:



$$E''(k_i) \approx \frac{\frac{E(k_{i+2})-E(k_i)}{k_{i+2}-k_i} - \frac{E(k_i)-E(k_{i-2}))}{k_i-k_{i-2}}}{k_{i+1}-k_{i-1}}$$

Συνδυασμός σε μία εξίσωση:

$$E''(k_i) \approx \frac{\left(\frac{E(k_{i+2})-E(k_i)}{k_{i+2}-k_i} \right) - \left(\frac{E(k_i)-E(k_{i-2}))}{k_i-k_{i-2}} \right)}{k_{i+1}-k_{i-1}}$$

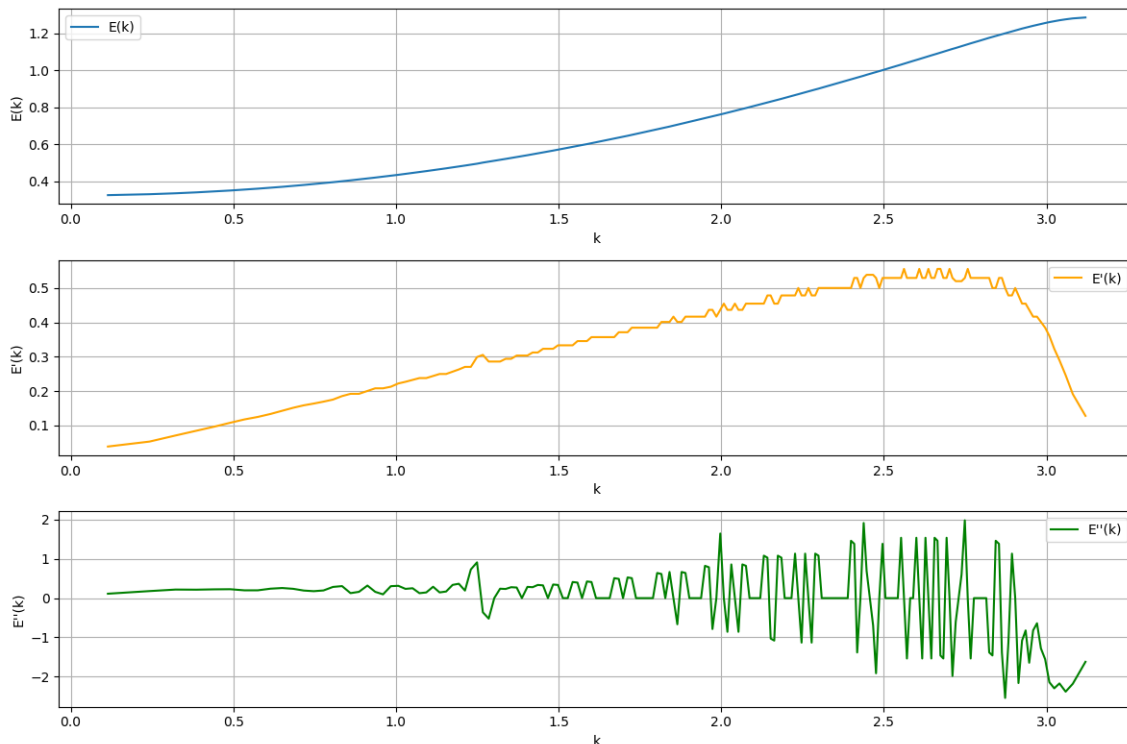
Αυτός ο τύπος δίνει τη δεύτερη παράγωγο σε ένα σημείο k_i με βάση τις τιμές της συνάρτησης (E) στα σημεία (k_{i-2}, k_i, k_{i+2}) και τις αποστάσεις μεταξύ αυτών των σημείων.

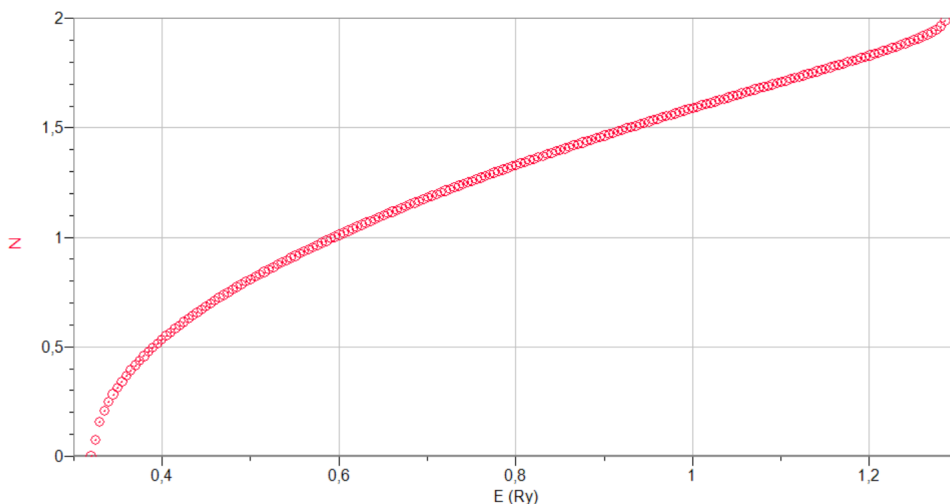
Σε περιπτώσεις όπου τα σημεία (k) είναι ομοιόμορφα κατανομημένα, δηλαδή η απόσταση (h) μεταξύ των σημείων είναι σταθερή, οι παραπάνω εξισώσεις απλοποιούνται ως εξής:

Ομοιόμορφη Κατανομή: Όταν τα σημεία είναι ισαπέχοντα με απόσταση h , ο τύπος γίνεται:

$$E''(k_i) \approx \frac{E(k_{i+1}) - 2E(k_i) + E(k_{i-1}))}{h^2}$$

Αυτός ο τύπος είναι πιο απλός και χρησιμοποιείται συχνά όταν τα δεδομένα είναι ισαπέχοντα.

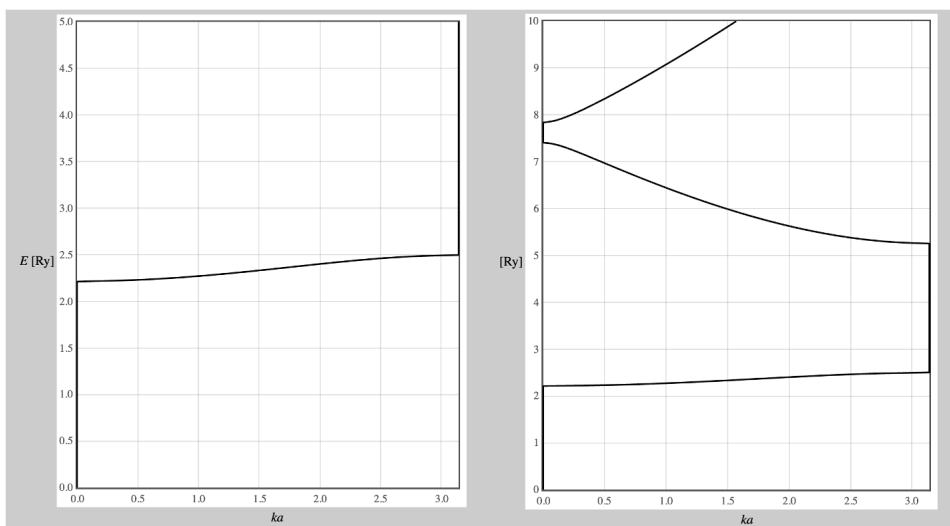




Ο αριθμός καταστάσεων $N = N(E)$ όλων των ηλεκτρονίων του Κρυστάλλου συναρτήσει της E .

2.1.9 Βήμα 8

Θέτοντας $V_0 = 45Ry$ παίρνουμε το εξής διάγραμμα. Παρατηρούμε ότι πλέον στο ενεργειακό εύρος $(E_1, E_2) = (0, 5Ry)$ υπάρχει μόνο μια ενεργειακή ζώνη και ένα μεγάλο ενεργειακό χάσμα. Η πρώτη εκτείνεται σε εύρος $(2.377, 2.617Ry)$, δηλαδή έχει πλάτος λιγότερο από $0.3 Ry$. Από την άλλη το ενεργειακό χάσμα εκτείνεται από $(2.622, 5.705Ry)$ με πλάτος $3.083Ry > 2Ry$. Άρα συμπεραίνουμε ότι το υλικό αυτό έχει ιδιότητες μονωτή. Μάλιστα το ύψος του δυναμικού έγινε τόσο μεγάλο που πλέον συμπεριφέρεται σαν απειροβάθιο πηγάδι δυναμικού και τα ηλεκτρόνια αδυνατούν να μεταβούν σε επόμενες ενεργειακές ζώνες και άρα ρεύμα να διαπεράσει το υλικό.



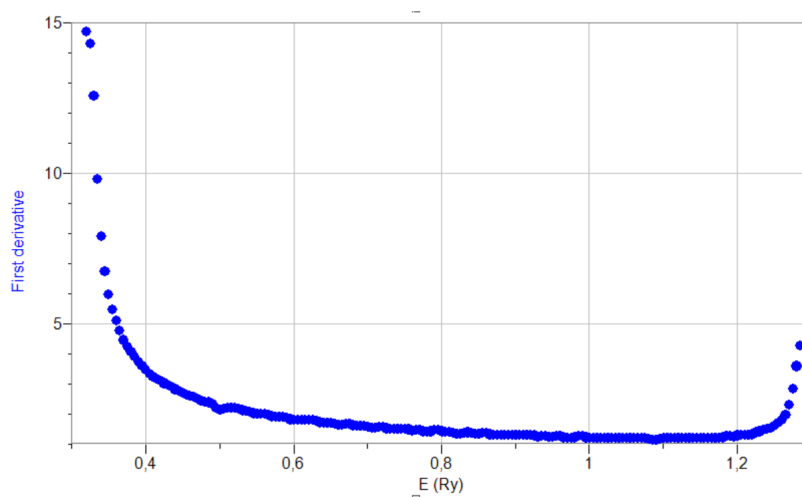
2.2 Συμπεράσματα

Συνολικά λοιπόν καταφέραμε να μελετήσουμε με αρκετή λεπτομέρεια την συμπεριφορά των ηλεκτρονίων σε περιοδικό δυναμικό. Συγκεκριμένα είδαμε πως οι ενεργειακές ζώνες και τα ενεργειακά χάσματα προκύπτουν καθώς και τον τρόπο με τον οποίο επηρεάζουν το είδος του υλικού (μονωτής, αγωγός, ημιαγωγός), επίσης υπολογίσαμε, την σχέση διασποράς, την ενεργό μάζα και την ταχύτητα ενώ είδαμε πως τα παραπάνω επηρεάζονται από παραμέτρους του κρυστάλλου όπως το ύψος του δυναμικού.

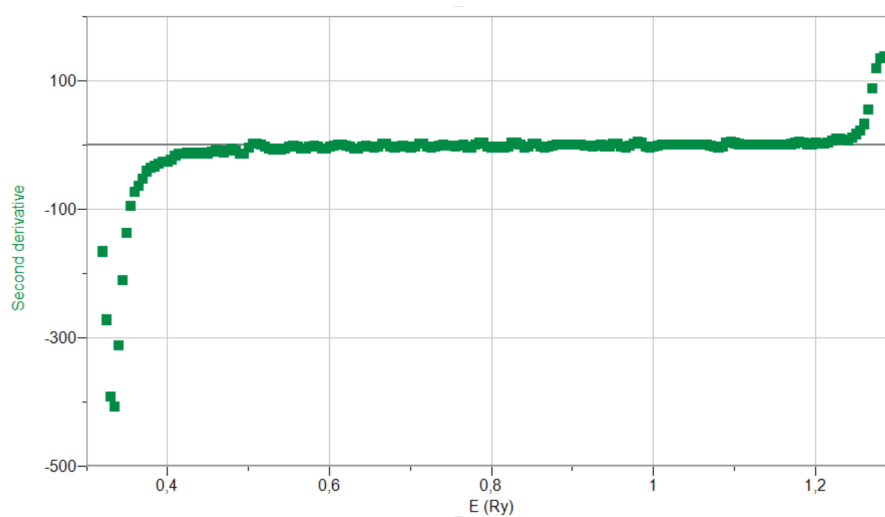


3 Παράρτημα

Παράγωγοι με Logger Pro.



Διάγραμμα: Πρώτη Παράγωγος.



Διάγραμμα: Δεύτερη Παράγωγος.



4 Βιβλιογραφία.

4.1 Βιβλιογραφία.

[Bλ1] Εργαστηριακός Οδηγός Εισαγωγής Φυσικής Στερεάς Κατάστασης.

[Bλ2] Εισαγωγή στη φυσική στερεάς κατάστασης. Kittel. Έκδοση 5, Πνευματικός.

[Bλ3] Φυσική στερεάς κατάστασης, Ashcroft, Mermin, Πνευματικός.

[Bλ4] Φυσική στερεάς κατάστασης, Ibach Harald, Lüch Hans, ΖΗΤΗ.

[Bλ5] Φυσική στερεάς κατάστασης, Ε.Ν. Οικονόμου, ΠΕΚ.

[Bλ6] Φυσική στερεάς κατάστασης, Philip Hofmann, Παπαζήση.

4.2 Αναφορές.

[1] Οδηγίες για την άσκηση 3 του εργαστηριακού φυλλαδίου.

[2] Kronig-Penney Model, άρθρο Wikipedia.

[3] Kronig-Penney Model simulation.

4.3 Μετρήσεις-Δεδομένα.

[Data-1]: Πρώτο σετ μετρήσεων από το simulation set1.txt

