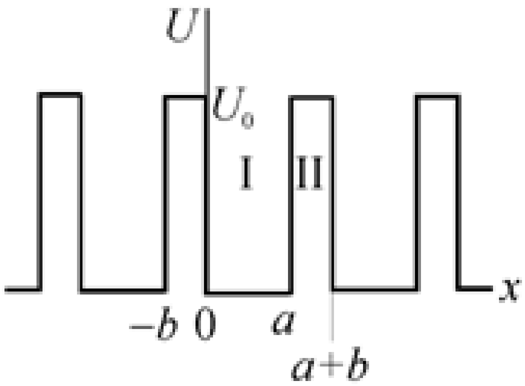
Андреев Артём, Евтушенко Иван

Группа М32001

Моделирование №2

По дисциплине: дополнительные главы физики

В модели почти свободных электронов, которую предложили Крониг и Пенни, рассматривается движение электрона в линейной цепочке прямоугольных потенциальных ям. Ширина ям равна *a*, и они отдельны друг от друга потенциальными барьерами толщиной *b* и высотой U_0. Длина цепочки равна *L,* а период цепочки равен $c = a + b$.



$$U(z) = \begin{cases} 0, \text{ если } nc < z < nc + a & \mathrm{I} \\ U_0, \text{ если } (nc + a) < z < (n+1)c & \mathrm{II} \end{cases}$$

Пусть *E* – энергия электрона. Состояние электрона описывается уравнением Шредингера:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - u)\psi = 0$$

Решение для области I:

$$\psi_1(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}$$

Первое слагаемое соответствует прямой волне, а второе – волне, отражённой от барьера.

Решение для области II:

$$\psi_2(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}$$

Где коэффициенты: $\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $\beta = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$, *A, B, C, D* – константы.

Вместо ψ_1 и ψ_2 подставим одномерную функцию Блоха: $\psi(x) = U(x)e^{ikx}$:

$$U_1(x) = Ae^{(\alpha - ik)x} + Be^{-(\alpha + ik)x}$$

$$U_2(x) = Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x}$$

Определим *A, B, C, D* используя склейку:

$$U_1(0) = U_2(0), \quad \left(\frac{\partial U_1}{\partial x}\right)_{x=0} = \left(\frac{\partial U_2}{\partial x}\right)_{x=0}, \quad U_1(a) = U_2(-b), \quad \left(\frac{\partial U_1}{\partial x}\right)_{x=a} = \left(\frac{\partial U_2}{\partial x}\right)_{x=-b}$$

Придём к уравнению:

$$\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta} sinh(\beta b) sin(\alpha a) + cosh(\beta b) cos(\alpha a) = cos(k)(a+b)$$

Рассмотрим предельный случай, устремив ширину барьера *b* к нулю и увеличим высоту барьера, устремив ее к бесконечности ($U_0 \to \infty$). При этом потребуем, чтобы произведение bU_0 оставалось постоянным.

Обозначим $bU_0 = \frac{\hbar^2}{ma}P$, тогда $P = \frac{ma}{\hbar^2 bU_0}$, где *P* – величина, характеризующая прозрачность барьера.

Получим уравнение вида:

$$\frac{P\sin(\alpha a)}{\alpha a} + cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

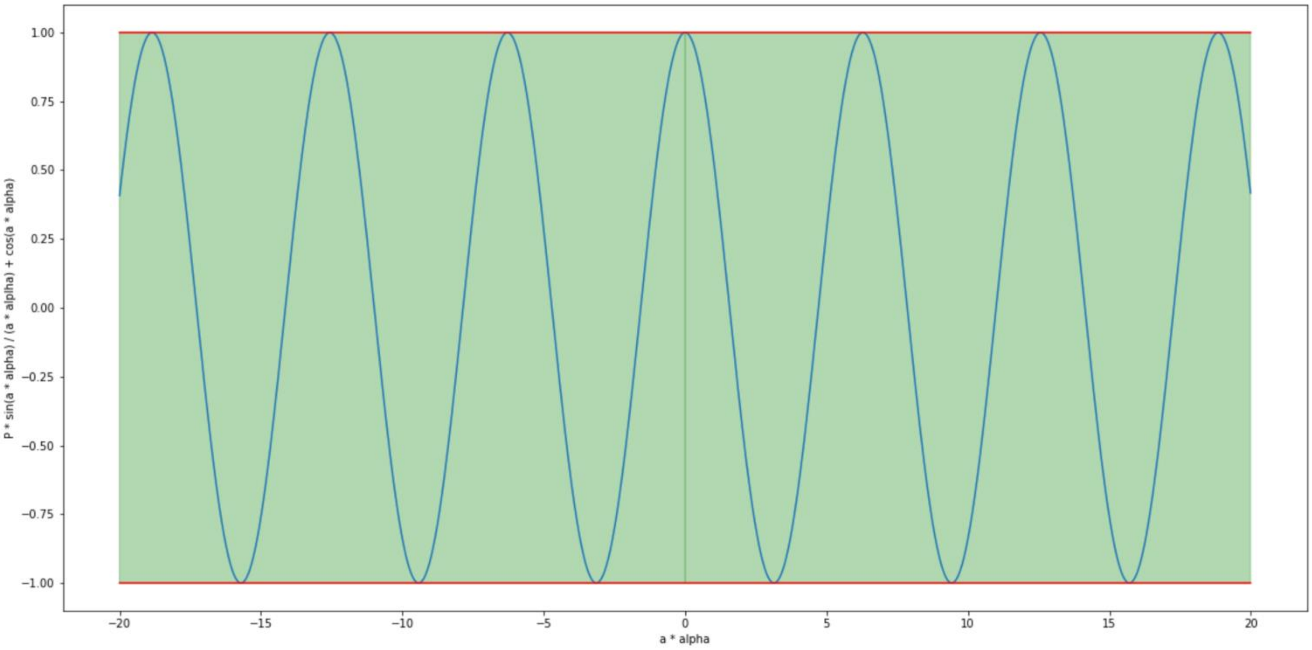
Данное уравнение называется уравнением Кронига–Пенни. Уравнение выражает зависимость энергии электрона, которая входит в коэффициент α, от волнового числа *k* для барьеров различной прозрачности *P*. Поскольку $\cos(ka)$ не может быть больше ± 1 ($-1 \le \cos(ka) \le 1$), то и левая часть уравнения лежит в этих же пределах. Эти значения определяют области разрешенных энергий электрона – энергетические зоны. Они отделены друг от друга полосами запрещенных энергий – запрещенными зонами. Ширина зон зависит от параметра прозрачности барьера *P*.

Смоделируем уравнение Кронига-Пенни:
https://colab.research.google.com/drive/1rIuLhnTJxyc5Cgdw7mKSNRCLoGbRVWtG?usp=sharing

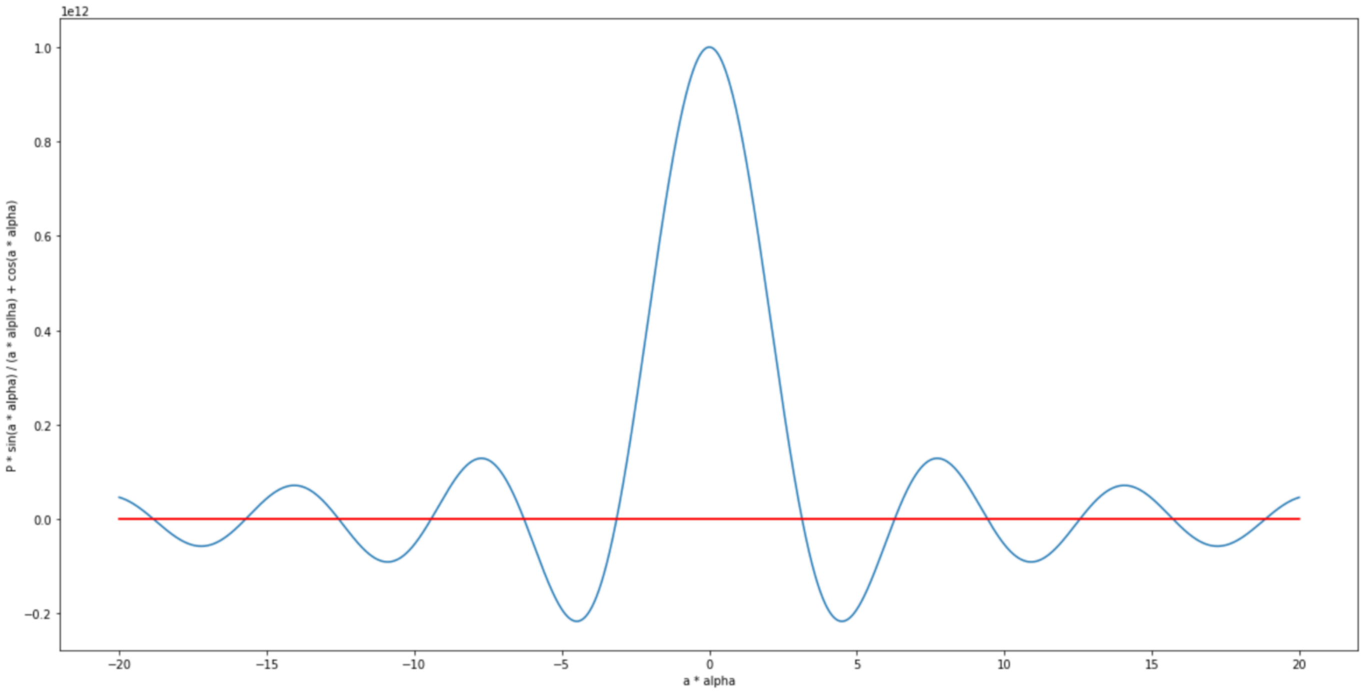
```
import numpy as np
from math import sin, cos
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

P = 3
L = 20
step = 0.01

def p_part(x):
  return P * sin(x) / x + cos(x)

def iterate():
```

```
  start = -L / 2
  cur = start

  alpha_a = []
  f = []

  while cur <= -start:
    alpha_a.append(cur)
    f.append(p_part(cur))
    cur += step
  fmin = [-1 for i in alpha_a]
  fmax = [1 for i in alpha_a]

  return alpha_a, f, fmin, fmax

x, f, minn, maxx = iterate()
fig = plt.figure()
fig.set_figheight(10)
fig.set_figwidth(20)
ax = fig.add_subplot(111)
ax.plot(x, f)
ax.plot(x, minn, color="red")
ax.plot(x, maxx, color="red")

cond = [f[i] < 1 and f[i] > -1 for i in range(len(f))]
ax.fill_between(x, minn, maxx, where=cond, color="green", alpha=0.3)

ax.set_xlabel("a * alpha")
ax.set_ylabel("P * sin(a * alpha) / (a * alplha) + cos(a * alpha)")
plt.show()
```

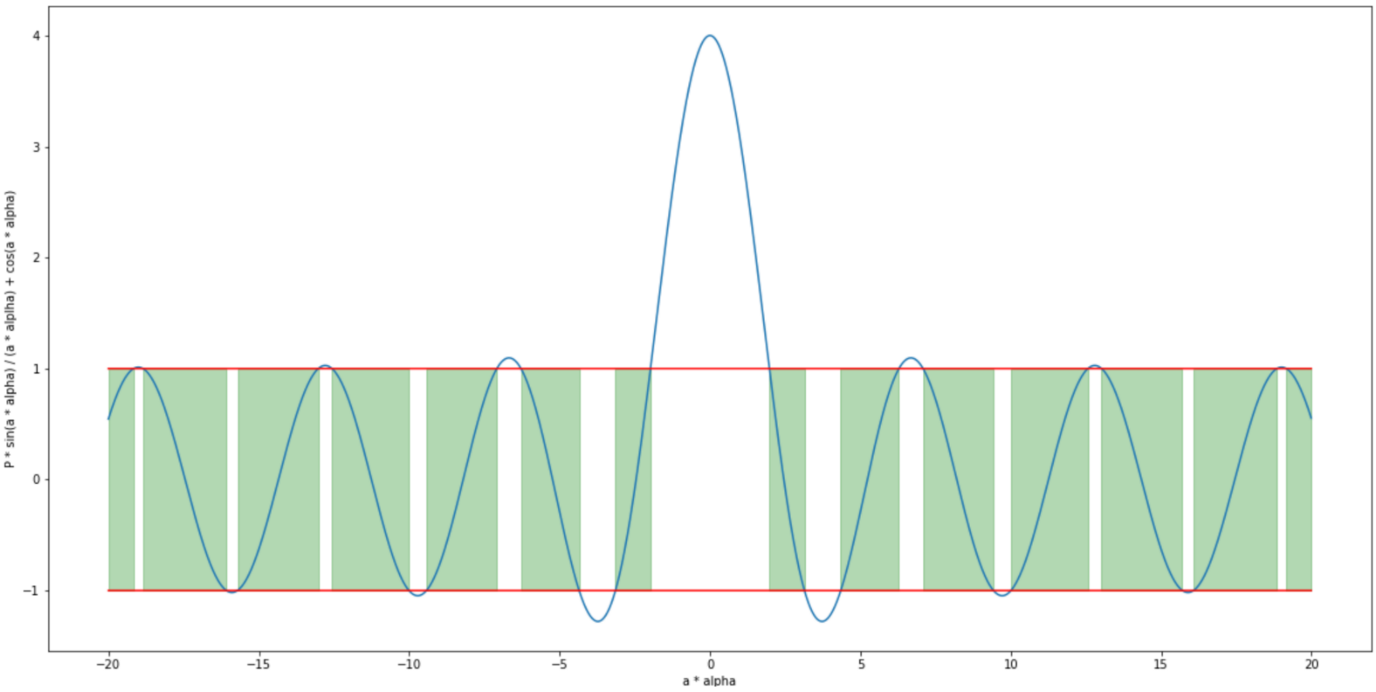
Рассмотрим случай, когда электрон свободен (P = 0):

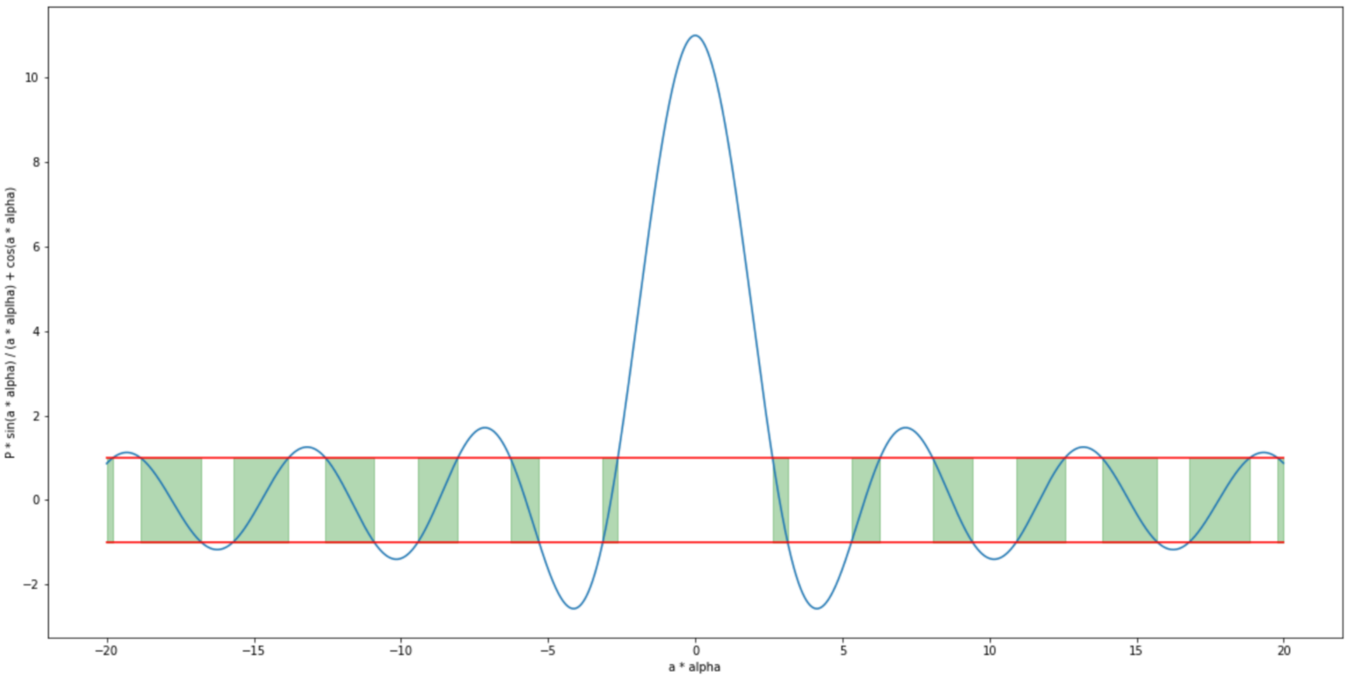


Рассмотрим случай, когда стенки непроницаемы (P → ∞):



Рассмотрим 2 промежуточных случая (P = 3, P = 10):





В получившемся уравнении Кронига-Пенни мы знаем коэффициент $\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, а значит можно получить зависимость энергии от волнового числа k. Выразить зависимость сложно, но предположив, что P $\gg 1$, можно получить зависимость:

$$E(k) = E_{0n} - C_n + (-1)^n \mathrm{A_n} \cos(ka)$$

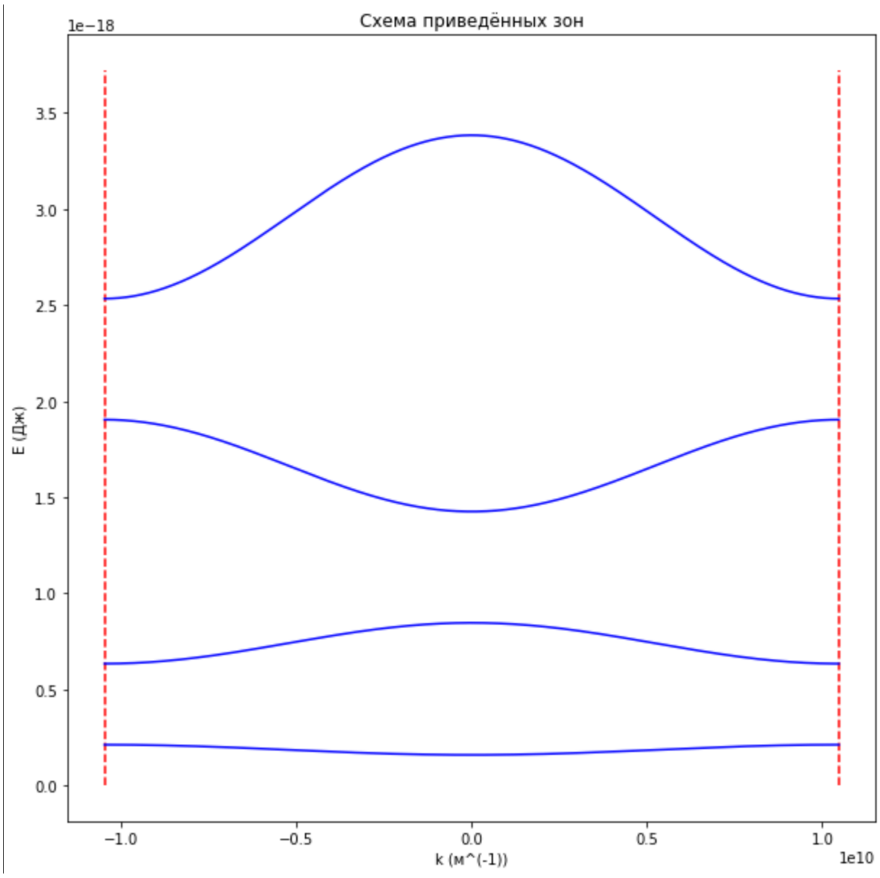
где $E_{0n} = \frac{\hbar^2 \pi n^2}{2ma^2}$ - энергия n–го энергетического уровня электрона в изолированной бесконечно глубокой яме

$$C_n = \frac{(\hbar \pi n)^2}{ma^2 P}$$

A_n - коэффициент определяет амплитуду косинусоидальной зависимости *E(k).* Предположим, что он равен C_n

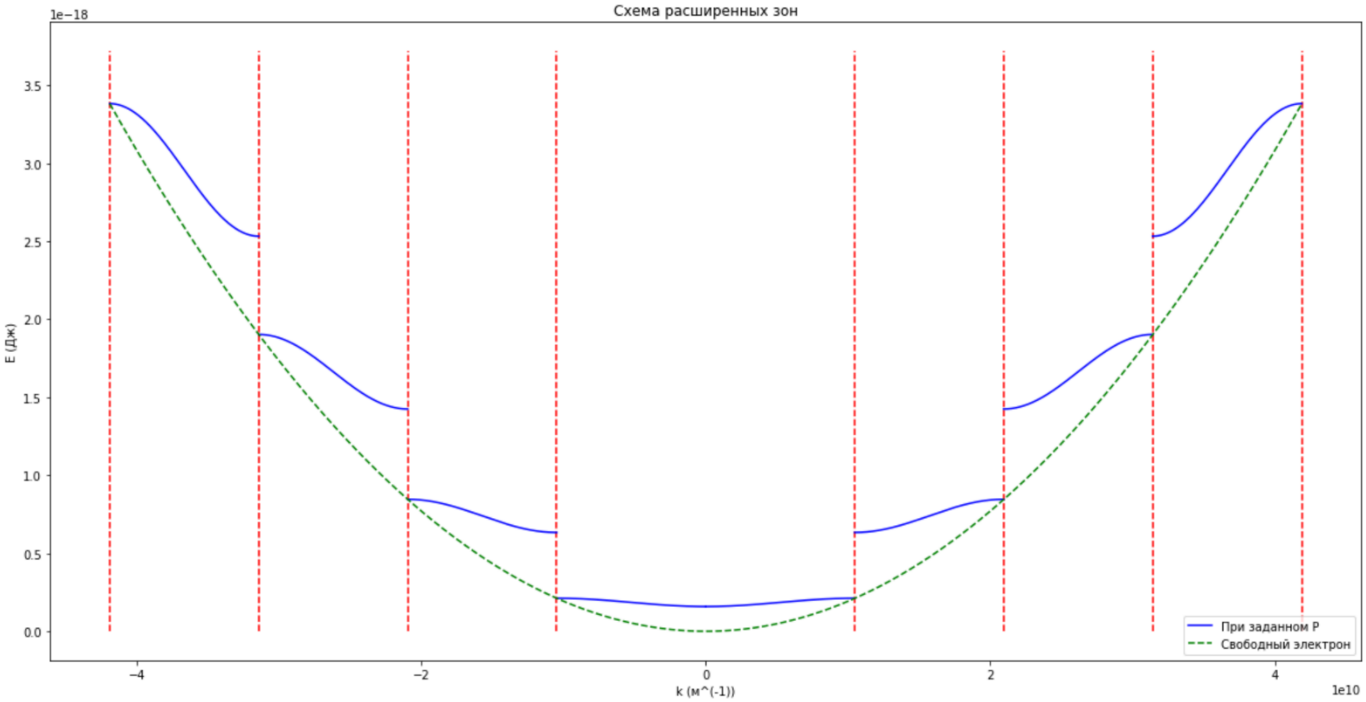
При построении M линий (n = [1, 2, … M]), получаем серию синусоид, с увеличивающейся амплитудой и сменяющейся каждй раз на противоположную фазу. Построим M таких синусоид в промежутке от $-\frac{\pi}{a}$ до $\frac{\pi}{a}$. Такую модель называют схемой приведённых зон. Она показывает полную информацию о зависимости энергии от волнового числа на первой зоне Бриллюэна.

Взято P = 50, a = 3e-10м:

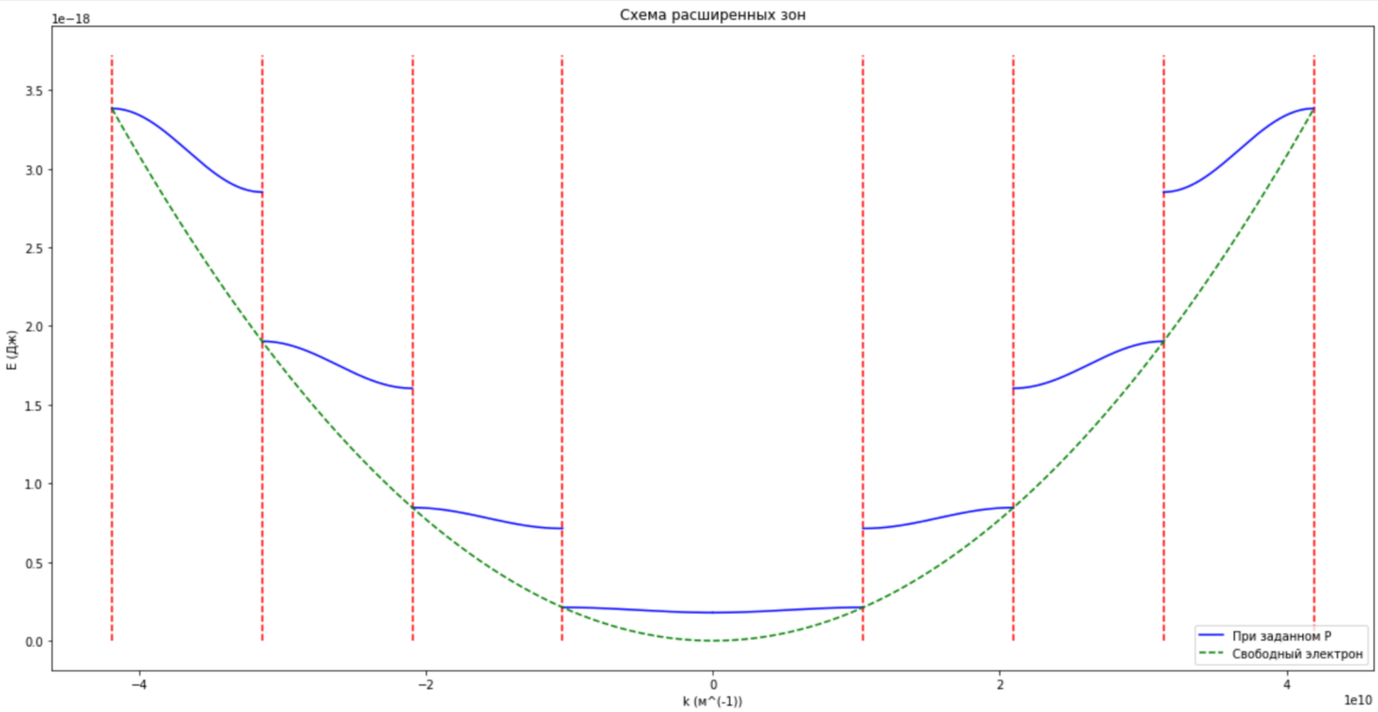


Построим M синусоид в промежутке от $-\frac{M\pi}{a}$ до $\frac{M\pi}{a}$. Такую модель называют схемой расширенных зон.

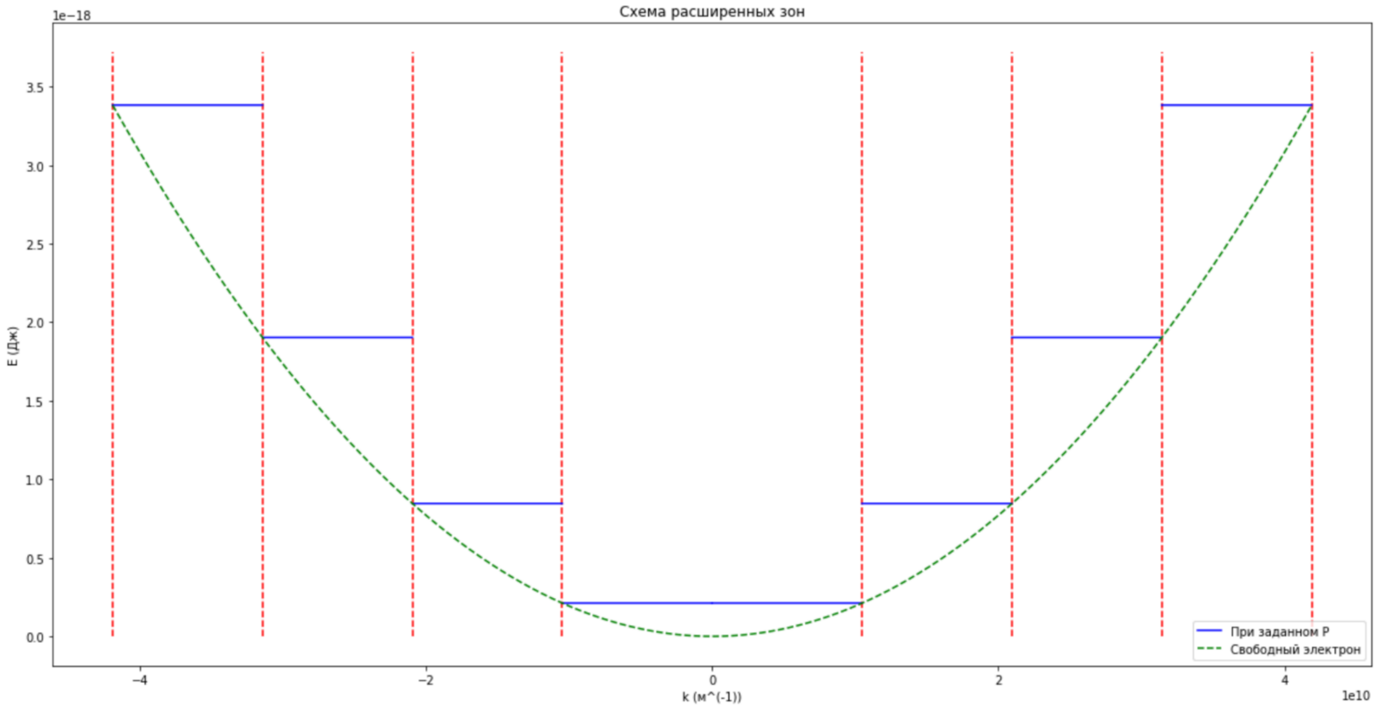
Взято P = 50, a = 3e-10м:



Взято P = 80, a = 3e-10м:



Взято P = 1e12, a = 3e-10м:



Выводы:

При $P \to \infty$ разрешенные зоны сужаются, превращаясь в дискретные уровни, соответствующие $\alpha a = \pi n$, где $n = \{\pm 1, \pm 2, \ldots\}$. Тем самым мы приходим к случаю электрона в изолированном атоме. При стремлении прозрачности барьера к нулю, наоборот, исчезают запрещенные зоны, и электрон становится свободным.

Для промежуточных значений прозрачности барьера возникает чередование запрещенных и разрешённых зон, причём отдалении αa от нуля ширина запрещённых зон уменьшается. Соответствующие запрещённые зоны становятся шире при увеличении параметра P.

При построении зависимости E(k), при относительно небольших P больших единицы мы получаем картину чередования допустимых и разрешённых значений энергии электрона, которая аппроксимируется параболой, показывающей энергию свободного электрона. При стремлении P к бесконечности допустимые значения превращаются в дискретные уровни.