Университет ИТМО
Факультет информационных технологий
и программирования

Отчет по моделированию №2

Моделирование зонной структуры одномерного кристалла
в модели Кронига–Пенни

Студент: Хрусталев Н. Д.
Группа: M3300
Преподаватель: Хвастунов Н. Н.

1. Цель работы

На основании модели Кронига–Пенни промоделировать зонную структуру одномерного кристалла, а именно:

- построить периодический потенциальный рельеф кристалла;
- численно реализовать графический метод решения уравнения Кронига–Пенни;
- получить энергетические зоны и запрещённые щели;
- проанализировать, как меняется ширина запрещённых зон при переходе от свободного электрона к случаю почти непроницаемых барьеров, а также для промежуточных значений параметра потенциала.

2. Теоретические сведения

2.1. Потенциал периодической решётки

Рассматривается одномерный кристалл с периодическим потенциалом (модель Кронига–Пенни). Потенциал задаётся в виде прямоугольных ям и барьеров:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & nc < x < nc + a, \\ U, & nc + a < x < (n+1)c, \end{cases} \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

где a — ширина потенциальной ямы, b — ширина барьера, $c = a + b$ — период кристаллической решётки, U — высота барьера.

Движение электрона в таком поле описывается стационарным уравнением Шрёдингера

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

а периодичность потенциала позволяет использовать теорему Блоха: собственные функции имеют вид $\psi_k(x) = e^{ikx}u_k(x)$, где $u_k(x)$ — периодическая функция с периодом c.

2.2. Уравнение Кронига–Пенни

Аналитическое решение задачи приводит к дисперсионному соотношению, связывающему квазиимпульс k и энергию E. В *дельта-приближении* (когда барьеры узкие и высокие, но имеют конечную площадь) уравнение принимает вид

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

где

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad x = \alpha a,$$

а безразмерный параметр P характеризует "силу" барьеров (пропорционален произведению высоты на ширину барьера). При численном моделировании используются безразмерные единицы, в которых $\hbar^2/2m = 1$, $a = 1$, тогда $E = \alpha^2 = x^2$.

Правая часть уравнения обозначим как

$$f(x; P) = \cos x + P\frac{\sin x}{x}.$$

Слева стоит $\cos(ka)$, по модулю не превосходящий единицы. Следовательно, для заданного P энергия E (или x) допускается только тогда, когда

$$|f(x; P)| \leq 1.$$

Области по x, где выполняется это неравенство, соответствуют разрешённым энергетическим зонам; промежутки, где $|f(x; P)| > 1$, образуют запрещённые зоны (энергетические щели).

2.3. Крайние случаи

- **Свободный электрон** ($P = 0$). Тогда $f(x; 0) = \cos x$, и условие $|f| \leq 1$ выполняется для любых x: спектр непрерывен, запрещённых зон нет, дисперсия $E = k^2$ (парабола).
- **Непроницаемые стенки** ($P \to \infty$). При очень больших P разрешённые области по x сжимаются к отдельным точкам, и энергетические зоны превращаются в дискретный спектр, близкий к уровням одиночной ямы. Запрещённые щели между зонами становятся очень широкими.
- **Промежуточные значения** ($0 < P < \infty$). При конечных P имеются полосы разрешённых энергий и запрещённые щели между ними. При увеличении P ширина зон уменьшается, а ширина щелей растёт.

3. Численная реализация

3.1. Построение потенциала

Потенциал реализован в виде периодической функции:

- на участке $nc < x < nc + a$ потенциал равен нулю (потенциальная яма);
- на участке $nc + a < x < (n + 1)c$ потенциал равен U (барьер).

График потенциального рельефа строится по набору точек x в нескольких периодах.

3.2. Графический анализ уравнения Кронига–Пенни

Для заданного параметра P вычисляется массив значений $f(x; P)$ на сетке по x (фактически по энергии). На графике совместно изображаются функции $y = f(x; P)$, $y = 1$ и $y = -1$. Участки, где $|f(x; P)| \leq 1$, закрашиваются, визуализируя разрешённые зоны.

3.3. Нахождение энергетических зон и щелей

Численный алгоритм:

1. Задаётся равномерная сетка значений $x \in (0, x_{\max})$.
2. Вычисляется $f(x_i; P)$ для всех точек сетки.
3. Строится логический массив $\texttt{allowed}_i = (|f(x_i; P)| \le 1)$.
4. По переходам `False` $\to$ `True` и `True` $\to$ `False` определяются границы интервалов разрешённых энергий по x.
5. Каждому интервалу $[x_{\min}, x_{\max}]$ соответствует энергетическая зона
$$E \in [E_{\min}, E_{\max}] = \left[\left(\tfrac{x_{\min}}{a}\right)^2,\ \left(\tfrac{x_{\max}}{a}\right)^2\right].$$
6. Разность между верхней границей одной зоны и нижней границей следующей зоны даёт ширину запрещённой щели.

3.4. Построение зависимостей $E(k)$

Для построения зонной структуры в пространстве (k, E):

1. Для каждой точки x с разрешённой энергией вычисляется $f(x; P)$ и значение $ka = \arccos(f)$, $k = \frac{1}{a}\arccos(f)$.
2. Энергия $E = (x/a)^2$.
3. Точки (k, E) и $(-k, E)$ наносятся на диаграмму для первой зоны Бриллюэна $|k| \le \pi/a$.

4. Результаты моделирования

4.1. Потенциальный рельеф

На рисунке 1 показан периодический потенциальный рельеф, соответствующий последовательности ям и барьеров. При выбранных параметрах $a = 1$, $b = 0{,}8$, $U = 1$ структура потенциала повторяется с периодом $c = 1{,}8$.

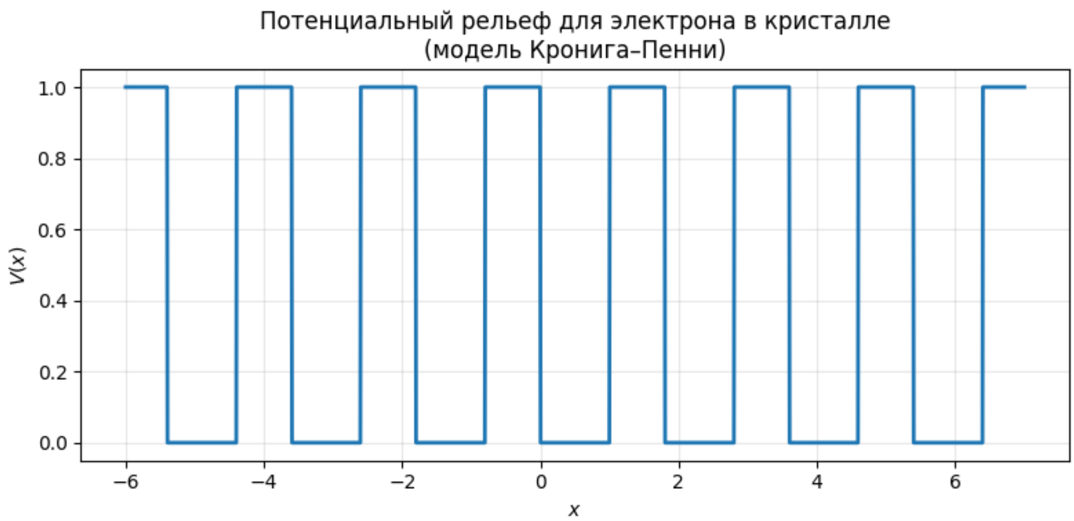

Рис. 1: Потенциальный рельеф в модели Кронига–Пенни.

4.2. Графический анализ уравнения Кронига–Пенни

На рисунках 2–5 представлены графики функции $f(x; P)$ и линий $y = \pm 1$ для нескольких значений параметра P:

- $P = 0$ — свободный электрон;
- $P = 5$ и $P = 15$ — промежуточные случаи;
- $P = 100$ — почти непроницаемые барьеры.

Области, где $|f(x; P)| \leq 1$, закрашены и соответствуют разрешённым энергетическим зонам.

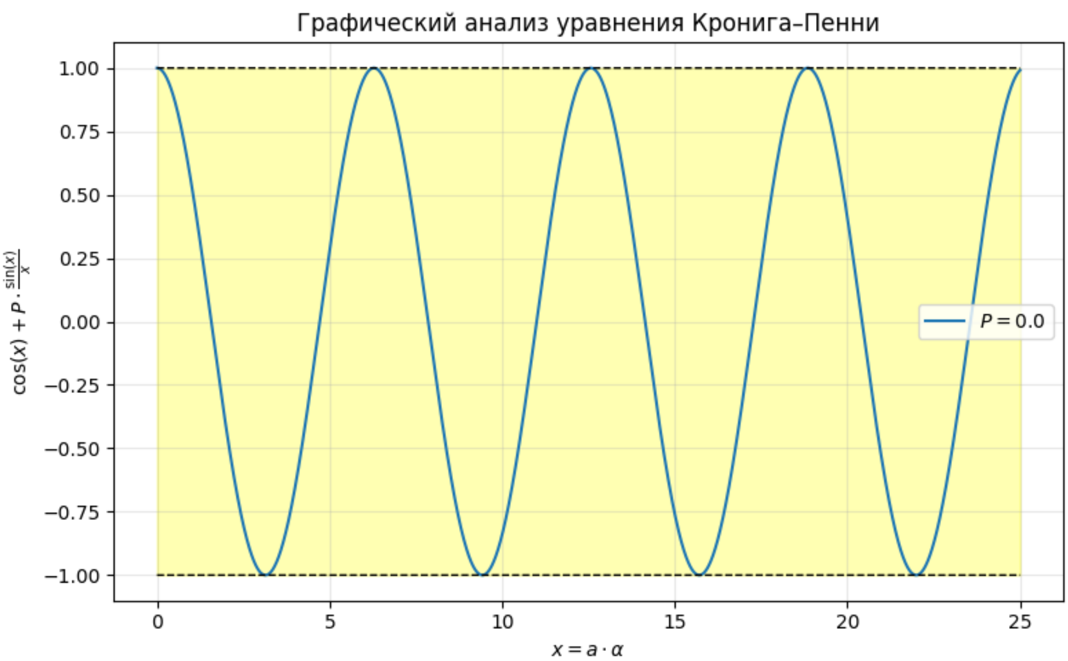

Рис. 2: Графический анализ уравнения Кронига–Пенни, $P = 0$ (свободный электрон).

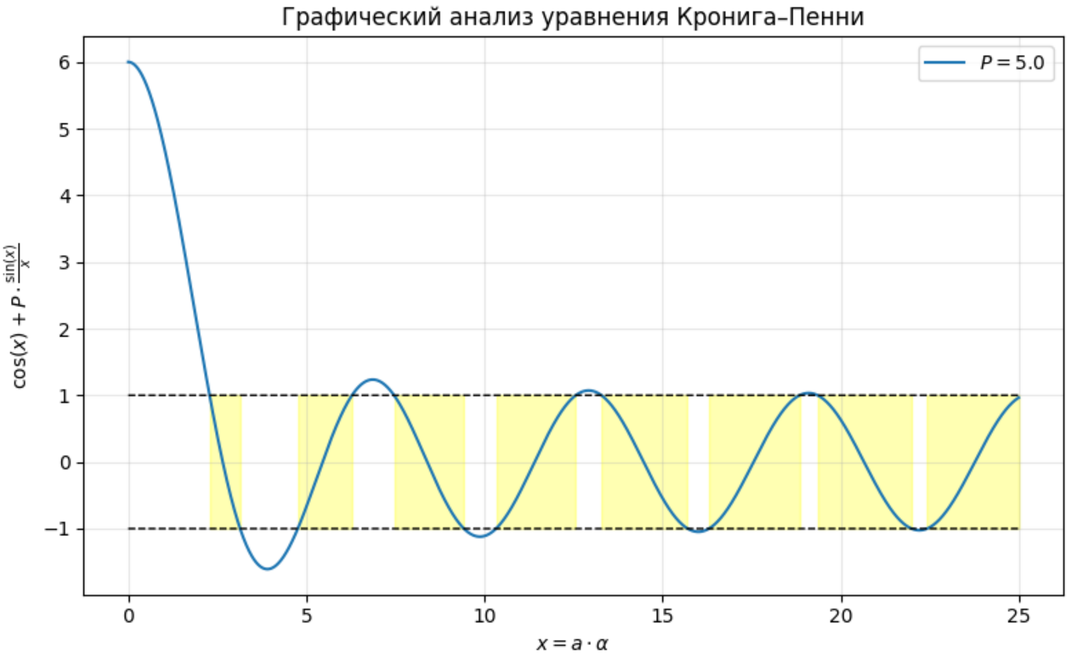

Рис. 3: Графический анализ уравнения Кронига–Пенни, $P = 5$.

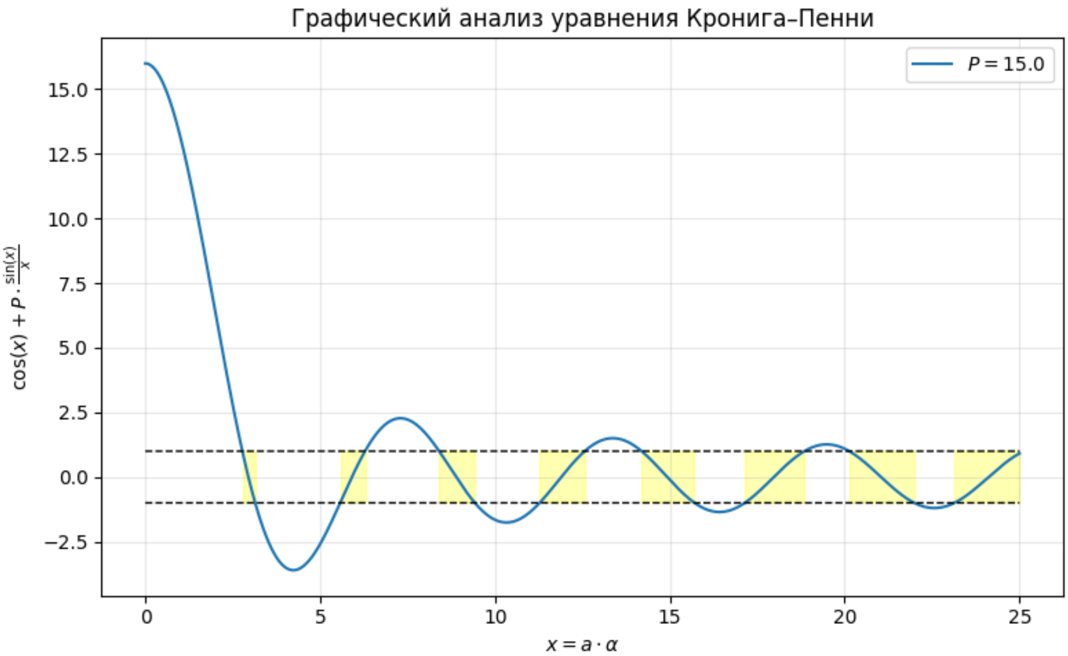

Рис. 4: Графический анализ уравнения Кронига–Пенни, $P = 15$.

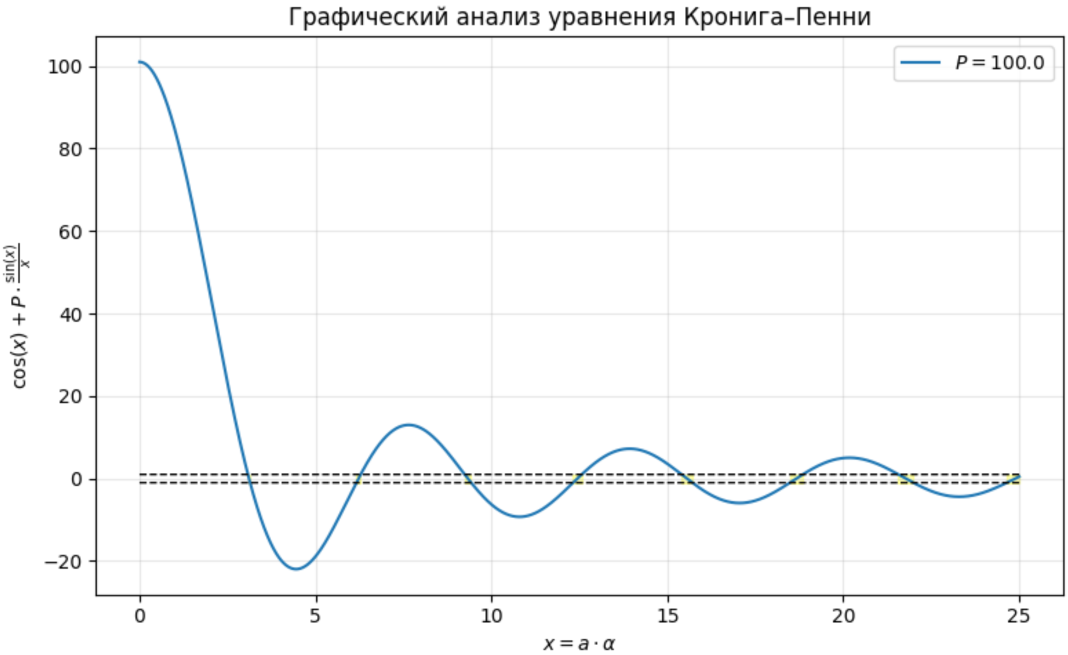

Рис. 5: Графический анализ уравнения Кронига–Пенни, $P = 100$ (почти непроницаемые барьеры).

4.3. Энергетические зоны и запрещённые щели

Для каждого значения P численно найдены первые несколько разрешённых зон. В безразмерных единицах (при $a = 1$) получены следующие результаты для первой зоны и первой запрещённой щели:

Таблица 1: Первая энергетическая зона и ширина первой щели при разных значениях параметра P.

P	$E_{1,\min}$	$E_{1,\max}$	$\Delta E_{\text{щели}}$
0	≈ 0	очень велика	нет щели
5	5.23	9.87	12.82
15	7.73	9.87	21.22
100	9.51	9.87	28.12

Из таблицы видно, что при увеличении P:

- **ширина первой зоны** уменьшается (например, для $P = 5$ зона примерно $[5{,}23; 9{,}87]$, а для $P = 100$ уже $[9{,}51; 9{,}87]$);
- **ширина первой запрещённой щели** $\Delta E_{\text{щели}}$ заметно растёт (с $\approx 12{,}8$ до $\approx 28{,}1$).

Таким образом, при усилении периодического потенциала электронные зоны “сжимаются”, а запрещённые интервалы энергии расширяются.

4.4. Зонная структура $E(k)$

На рисунке 6 показана зонная структура $E(k)$ в первой зоне Бриллюэна $|k| \leq \pi/a$ для разных значений P.

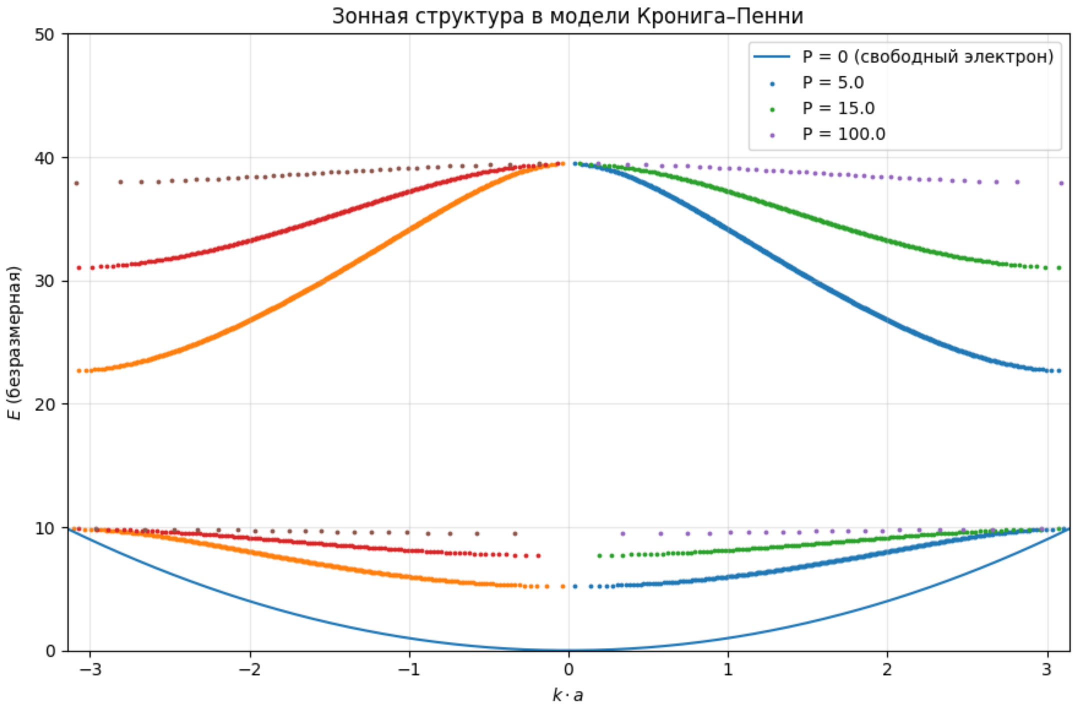

Рис. 6: Зонная структура $E(k)$ для разных значений параметра P.

- При $P = 0$ видна параболическая дисперсия свободного электрона $E = k^2$, спектр непрерывен.
- При конечных P появляются отдельные полосы, разделённые запрещёнными щелями; кривая $E(k)$ становится "зазубренной".
- При больших P (почти непроницаемые барьеры) зоны сильно сжаты по энергии, а щели между ними становятся широкими; это соответствует электронам, локализованным в отдельных ямах, с малыми перекрытиями волновых функций соседних ячеек.

5. Обсуждение результатов

Полученные результаты хорошо согласуются с физическими ожиданиями:

1. В отсутствие периодического потенциала ($P = 0$) электрон ведёт себя как свободная частица, спектр является непрерывным, запрещённых щелей нет.
2. При малых, но отличных от нуля значениях P периодический потенциал приводит к расщеплению непрерывного спектра на полосы и появлению узких запрещённых зон около "точек Бриллюэна" (значения k, кратные π/a).
3. При увеличении высоты/ширины барьеров (рост P) волновые функции в соседних ячейках всё меньше перекрываются. Энергетические уровни, соответствующие отдельной яме, лишь слабо "размазываются" в зоны, а щели между ними становятся очень широкими.
4. В предельном случае почти непроницаемых барьеров система близка к набору независимых потенциальных ям, и спектр приближается к набору дискретных уровней одиночной ямы.

6. Выводы

1. Реализована численная модель одномерного кристалла в рамках модели Кронига–Пенни, построен периодический потенциал и выполнен графический анализ уравнения Кронига–Пенни.

2. С помощью численного алгоритма выделены энергетические зоны и запрещённые щели; построены зависимости $E(k)$ в первой зоне Бриллюэна.

3. Показано, что при переходе от свободного электрона к случаю почти непроницаемых барьеров:

   - ширина разрешённых зон уменьшается;
   - ширина запрещённых зон монотонно возрастает.

4. Полученные результаты демонстрируют физическую природу зонной структуры твёрдого тела: даже относительно слабый периодический потенциал приводит к возникновению запрещённых энергетических интервалов для электронов в кристалле.