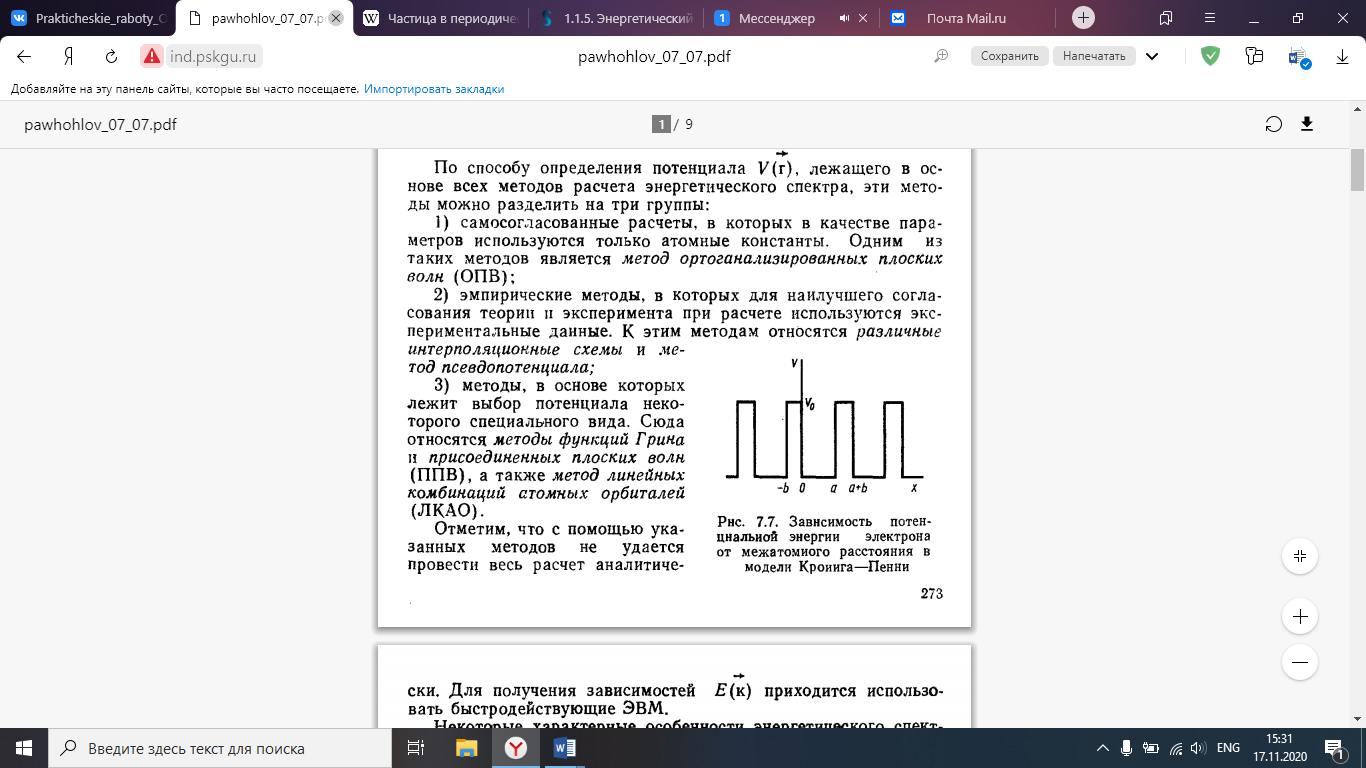
Коробов Евгений МЕН-472801 дистант от 10.11.20

1. Модельный потенциал для этой задачи. Почему приходится брать его в столь упрощенном виде?

где n – любое цлое число.



Упростим, используя теорему Блоха приблизив потенциал к прямоугольным ямам с шириной а и барьерам с шириной b. Период с будет равен a+b.

1. Основная схема решения по этапам.

Уравнение Шредингера для одномерного случая (одноэлектронное):

Используем функцию Блоха:

Найдем уравнение, которому удовлетворяет функция U(x) для области 0≤ х ≤а, а также для любой ямы:

для области а≤ х ≤ а+b, а также для любого потенциального барьера:

где и .

Используя уравнение непрерывности:

Исходя из этого получим:

Введём дополнительные упрощающие предположения. Допустим барьеры являются тонкими и высокими.

1. Два асимптотических случая решения: почти свободные электроны и почти локализованные в одной яме. Насколько они получаются правдоподобными?

Р→0 соответствует условию (приближение слабой связи), получаем aα=ka→ α=k.

Так как на коэффициент k не накладывается ограничений, то мы можем утверждать, что перед нами парабола. Это выражение совпадает с зависимостью E(k) для свободного электрона.

Р→∞ в силу того, что . Электрон находится в бесконечно глубокой яме. (приближение сильной связи). Находим, что aα=πM, где M – любое целое число.

При Р→∞ система энергетических зон вырождается в дискретные уровни.

1. Общее решение для сильной, но не бесконечной связи электрона в периодическом одномерном потенциале.

Положим Р>>1. Это соответствует приближению сильной связи. Для больших Р можно записать:

аα=πМ+∆(аα).

Исходя из этого получим:

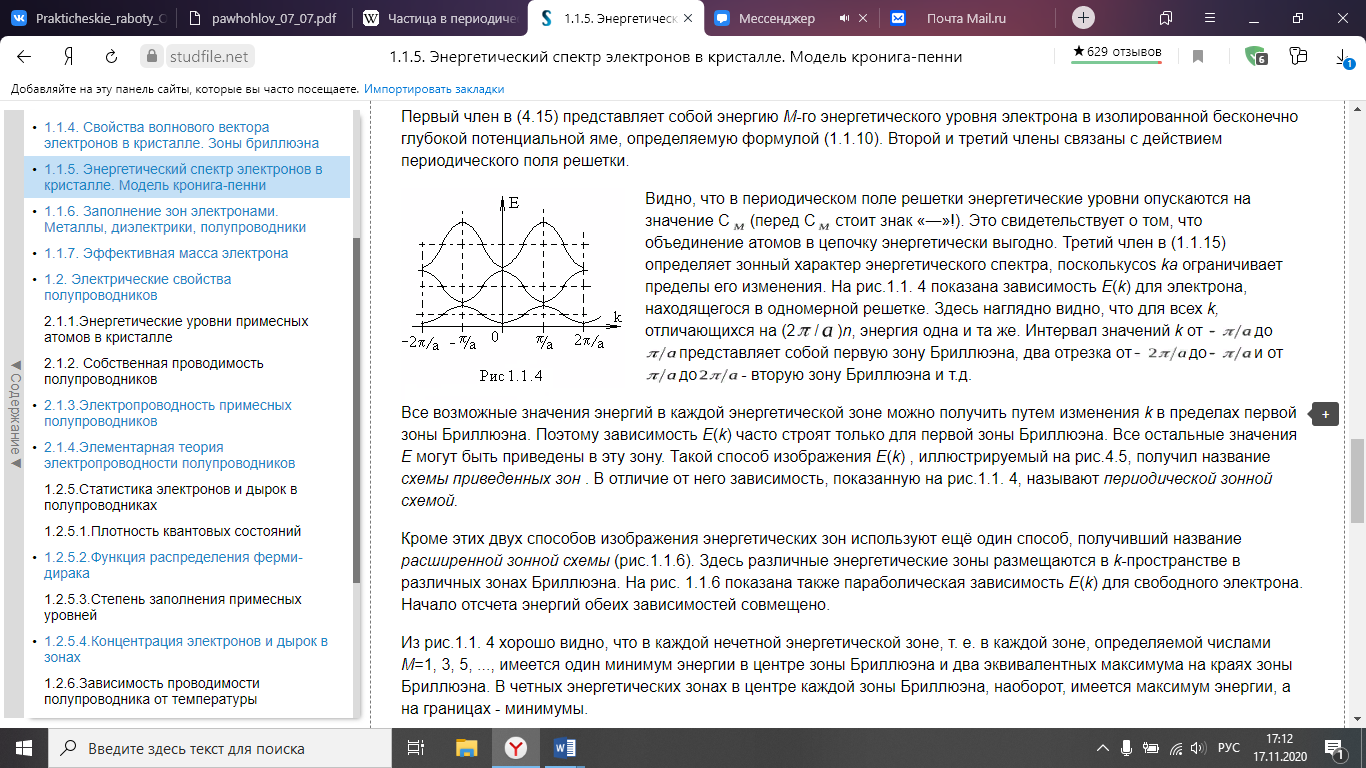
учитывая связь между α и энергией электрона Е:

где

, ,

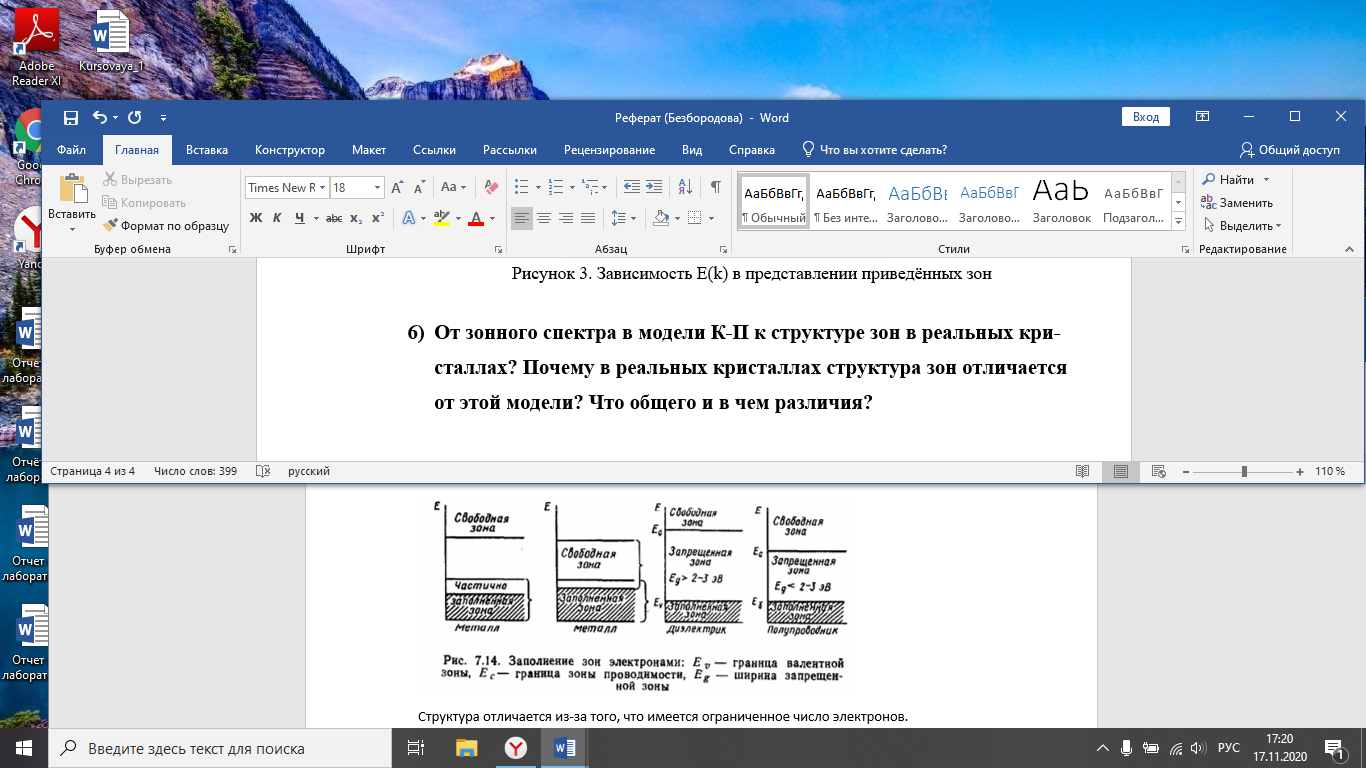
– коэффициент перед , в общем случае не равный .

1. Как из этой модели получается зонный спектр?



cos(ka) ограничивает пределы изменения энергетического спектра, поэтому определяете зонный характер.

1. От зонного спектра в модели К-П к структуре зон в реальных кристаллах? Почему в реальных кристаллах структура зон отличается от этой модели? Что общего и в чем различия?



Отличие заключается в том, что реальные кристаллы трёхмерные. Структура зон более сложная.