**A black and white sign

Description automatically generated with medium confidence Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет**

**информационных технологий, механики и оптики**

**УЧЕБНЫЙ ЦЕНТР ОБЩЕЙ ФИЗИКИ ФТФ**

Группа **M32113** К работе допущен

Студент  **Зыонг Тхи Хуэ Линь** **и Джахан Исрат** Работа выполнена

Преподаватель **Александр Адольфович Зинчик** Отчет принят

**Рабочий протокол и отчёт по моделированию №2**

1. Цель работы

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.

где a – ширина ямы, b – ширина барьера, с – постоянная кристаллической решетки,

1. Теория

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 𝑈0. Длина цепочки равна L, а период цепочки равен 𝑐 = 𝑎 + 𝑏.

A picture containing diagram, sketch, font, design

Description automatically generated

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

A picture containing font, handwriting, line, typography

Description automatically generated

Решение для области I:

A black text on a white background

Description automatically generated with medium confidence

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

Решение для области II:

A picture containing font, handwriting, calligraphy, typography

Description automatically generated

Где коэффициенты:

Вместо 𝜓1 и 𝜓2 подставим одномерную функцию Блоха:

*A black text on a white background

Description automatically generated with low confidence*

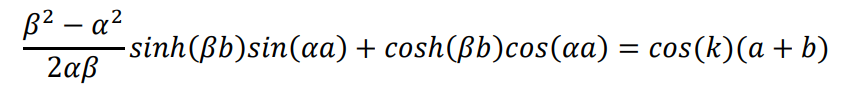
*A black text on a white background

Description automatically generated with medium confidence*

*(1)*

Последние выражения содержат четыре неизвестных *A, B,C*и*D*, которые находят из условия непрерывности волновой функции и ее первых производных, а также с учетом периодичности потенциального рельефа решетки.

*(2)*

**Подставляя (2) в (1) и решая систему уравнений нетрудно убедится, что условие существования решения системы задается уравнением::

*(3)*

Уравнение (3) связывает величины  и  , содержащие собственные значения энергии электрона Е, с волновым вектором A picture containing sketch, drawing, diagram, line

Description automatically generated . Таким образом, равенство (3) можно рассматривать как соотношение между Е и К.

Пусть  , а   , но так, чтобы произведение ширины барьера на высоту в  оставалось конечным причем  - конечно,  , (т.е. мы рассматриваем тонкие высокие барьеры). При,  ,  ,  и, наконец,

С учетом этого, вместо (3) можно записать

А также учтем, что

Обозначим

Величина *Р* представляет собой меру эффективной площади каждого барьера. Он характеризует степень прозрачности барьера для электрона или, другими словами, степень связанности электрона в потенциальной яме. С учетом этого можно записать уравнение Кронига-Пенни в следующем (окончательном) виде:

*A black text on a white background

Description automatically generated with medium confidence*

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 не может быть больше , 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.

*A picture containing line, plot, screenshot

Description automatically generated*Рассмотрим случай, когда электрон свободен (P = 0):

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

*A picture containing line, plot, diagram

Description automatically generated*

*A picture containing line, rectangle, text, plot

Description automatically generated*Рассмотрим 2 промежуточных случая (P = 3, P = 10):

*A picture containing text, line, plot, diagram

Description automatically generated*

**Выводы:**

При разрешенные зоны сужаются, превращаясь в дискретные уровни, соответствующие , где 𝑛 = {±1, ±2, …}. 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.

Код:https://colab.research.google.com/drive/1uW4Li237Zyzz6vutQBseXG7yoeHryd2V#scrollTo=u\_4BgeYgOwLE