**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования**

**«Национальный исследовательский университет ИТМО»**

Факультет информационных технологий и программирования

Моделирование 2

*Моделирование зонной структуры одномерного кристалла на основании модели Кронига-Пени.*

**Выполнили студенты группы № М3311**

Сорокина Н.

Пестриков М.

Санкт-Петербург

2024

1) Цели работы:

Выполнить моделирование зонной структуры электрона в периодическом потенциале на основе модели Кронига-Пени.

2) Задачи:

Написать программу для расчёта зонной структуры электрона при различных параметрах периодического потенциала (ширина ямы, высота барьера, период решётки).

Проанализировать зависимости ширины запрещённых зон и энергетического спектра от высоты и ширины потенциальных барьеров.

Исследовать предельные случаи: свободное движение электрона и его локализацию в изолированной потенциальной яме.

3) Теория:

Задача посвящена анализу зонной структуры одномерного кристалла на основе модели Кронига-Пенни, которая описывает движение электронов в периодическом потенциальном поле.

Зонная структура одномерного кристалла – концепция, которая описывает распределение энергетических уровней электронов в этом кристалле.

Одномерный кристалл – это идеализированная периодическая структура, в которой атомы или молекулы расположены в одной линии, образуя цепочку. Потенциал в ней повторяется с периодом, равным постоянной решетки , где - ширина потенциальной ямы (области низкого потенциала), - ширина потенциального барьера (области высокого потенциала).

Потенциал задается кусочно-постоянной функцией:

Где - целое число, определяющее положение повторяющихся элементов решетки.

: это область потенциальной ямы шириной , где электрон свободен. Электрон в этой области описывается уравнением Шрёдингера для свободной частицы.

: это область потенциального барьера шириной . Здесь электрон сталкивается с потенциалом . В зависимости от энергии электрона он либо будет туннелировать через барьер, либо полностью отражаться.

Такой потенциал приводит к образованию энергетических зон (разрешённых и запрещённых) для электрона.

Уравнение Кронига-Пени получается из уравнения Шрёдингера:

Уравнение Шрёдингера нужно решить отдельно для каждой части потенциала – в области ямы и в области барьера.

В области ямы:

Где – волновое число в яме – быстрота роста фазы волны

В области барьера:

Где – коэффициент затухания в барьере (волновое число)

Чтобы перейти к общему выражению для зонной структуры, нужно применить граничные условия для волновой функции – непрерывность на границах между ямой и барьером, периодичность потенциала.

После подстановки решения для в граничные условия и выполнения алгебраических преобразований (выражения для ), получаем:

Уравнение Кронига-Пени

Где – волновой вектор (определяет, как быстро изменяется волновая функция электрона в пространстве)

Это уравнение описывает, какие значения энергии являются разрешёнными (при данном ) для заданного периодического потенциала. Если разность левой части и значения в безбарьерном пространстве лежит в пределах от до , энергия разрешена; в противном случае находится в запрещённой зоне.

Моделирование зонной структуры

Параметры для исследования: .

Высота Барьера :

При малых значениях ширина запрещённых зон уменьшается, разрешённые зоны становятся широкими.

При увеличении зоны начинают сужаться, и запрещённые зоны становятся более выраженными.

Ширина ямы

Увеличение приводит к увеличению количества энергетических уровней в каждой зоне.

Уменьшение сокращает количество уровней, так как энергии становятся более разрежёнными.

Ширина барьера

Увеличение усиливает разделение между соседними ямами, увеличивая ширину запрещённых зон.

Уменьшение делает барьеры менее значимыми, и зоны начинают сливаться.

Рассмотрим крайние случаи

Крайний случай

Свободныйэлектрон, решение сводится к непрерывному энергетическому спектру.

График зависимости энергии от волнового числа будет параболой, непрерывно возрастающей без запрещенных зон:

Крайний случай

Когда барьеры становятся бесконечно высокими, электроны полностью изолируются в своих ямах. Это приводит к дискретным уровням энергии внутри каждой ямы.

Зонная структура вырождается в горизонтальные линии на графике , не зависящие от , которые соответствующие дискретным уровням энергии.

В бесконечном квантовом ящике (бесконечно высокие барьеры) энергия зависит от стоячих волн, которые определяются граничными условиями.

Это приводит к дискретизации возможных значений

Волновое число k – это входной параметр, который меняется в пределах первой зоны Бриллюэна ().

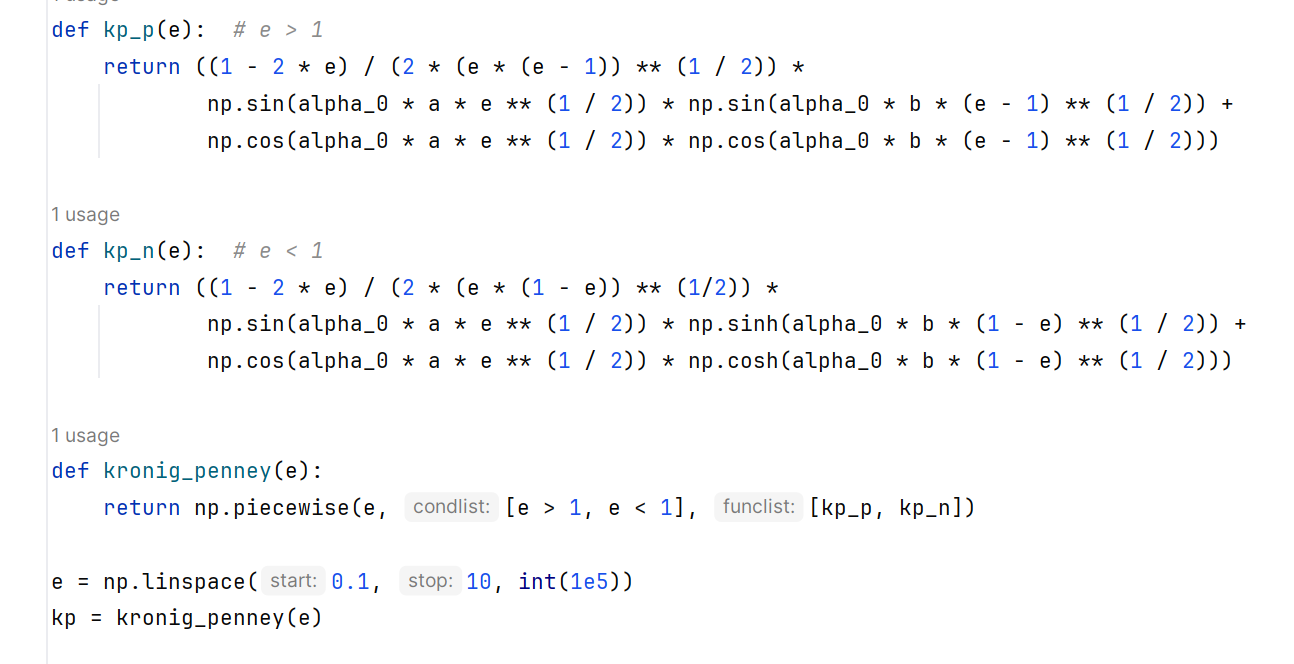
Первая зона Бриллюэна – это понятие в физике твердого тела, описывающее периодичность кристаллической решетки. Это пространство, содержащее все возможные волновые векторы , которые могут описывать поведение электронов в кристалле.

Приведённое зонное представление зависимости E−k – это способ изображения зонной структуры твёрдого тела, в котором волновой вектор k ограничивается одной зоной Бриллюэна. То есть все волновые векторы перенесены в одну зону

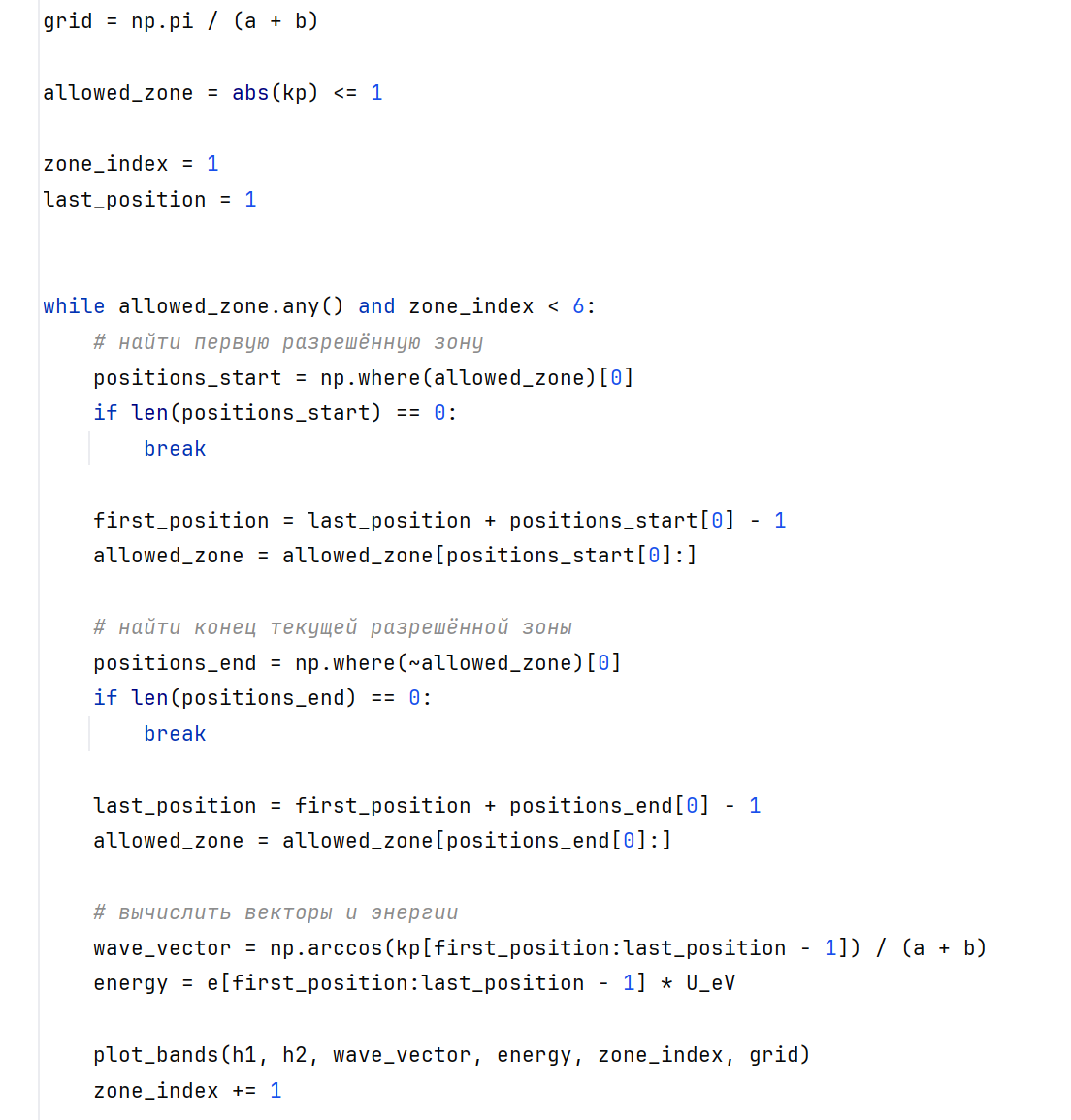
Расширенное зонное представление зависимости E−k – это способ визуализации энергетической зависимости в зонной теории твердого тела, при котором энергетические зоны отображаются для всех значений волнового вектора k, включая значения за пределами первой зоны Бриллюэна.

4) Ход решения:

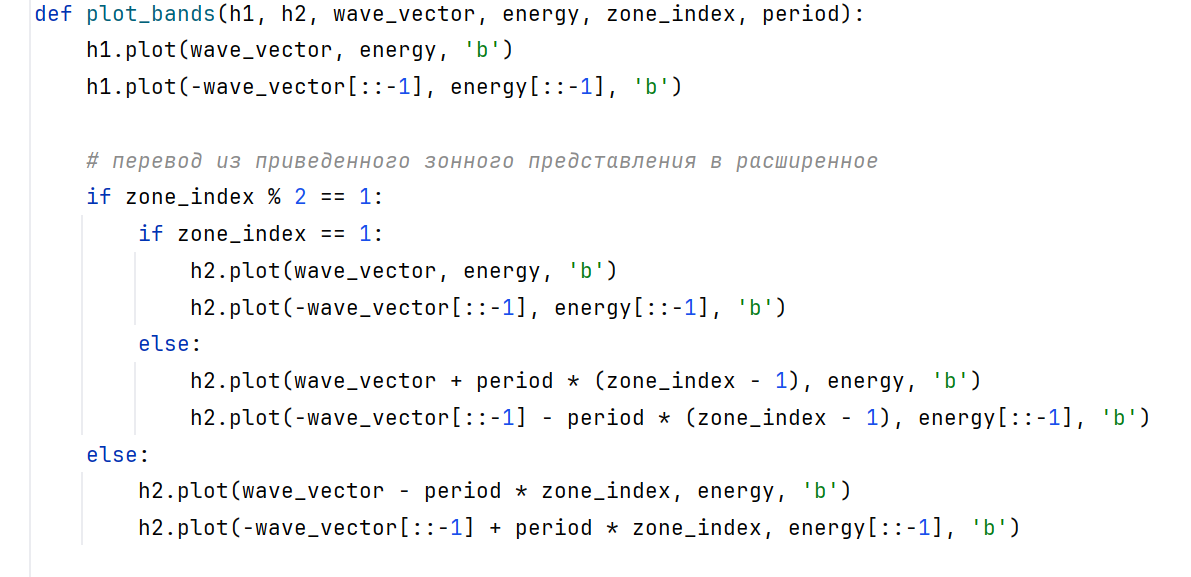
Вычисляем значения правой части уравнения Кронига-Пенни для линейного пространства точек энергии. Строим график



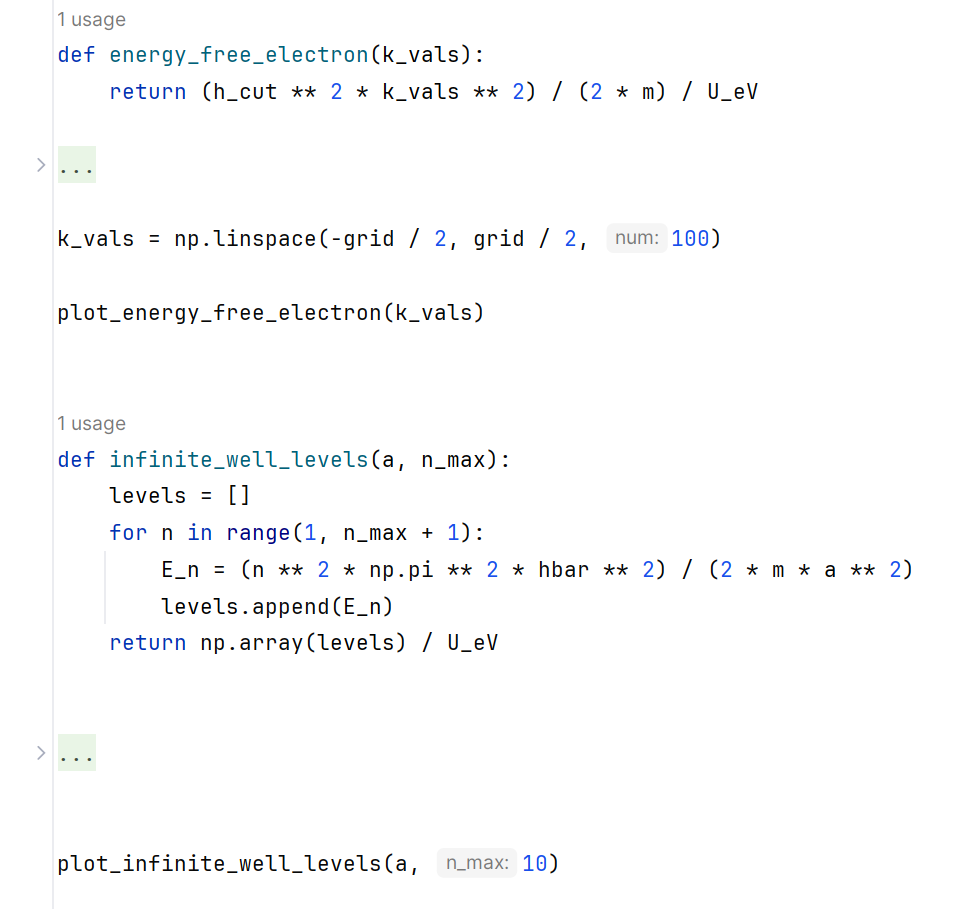
Для разрешенных значений уравнения Кронига-Пенни вычисляем волновые вектора и соответствующие им энергии



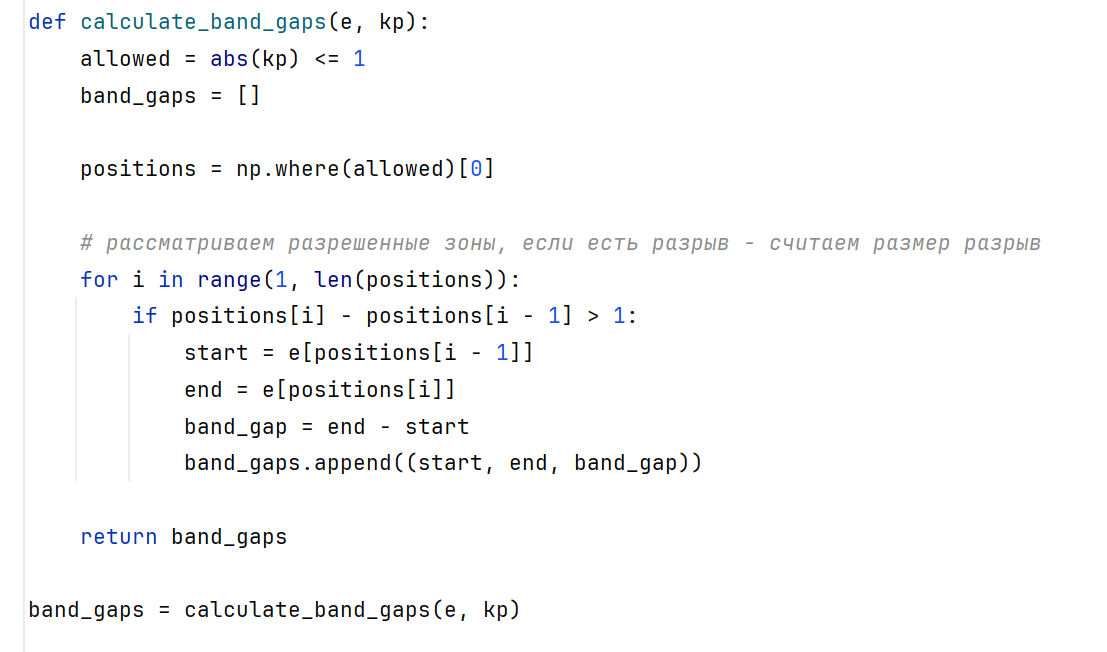
Строим графики приведенного и расширенного представлениия



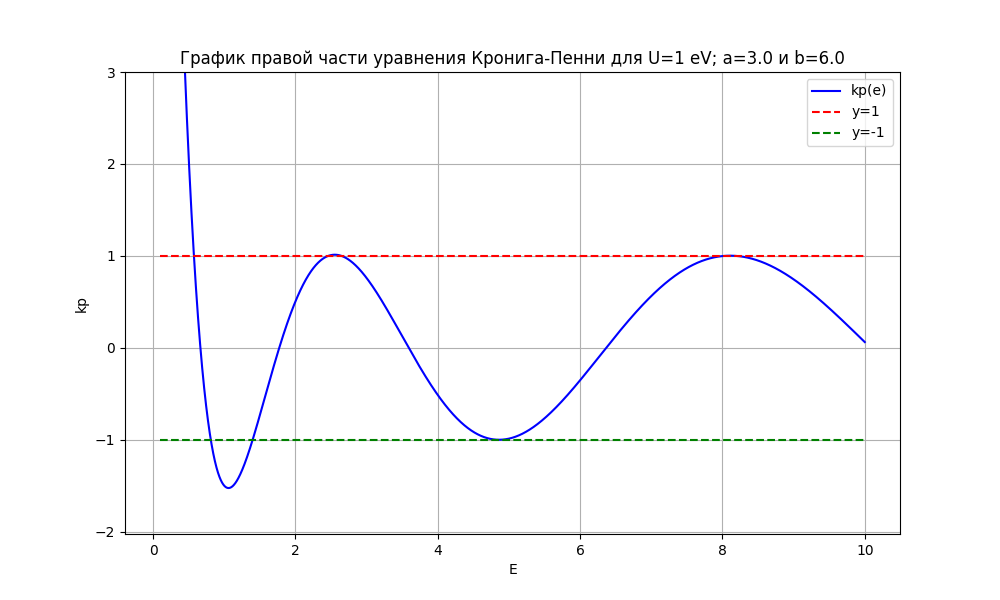
Рассматриваем краевые случаи

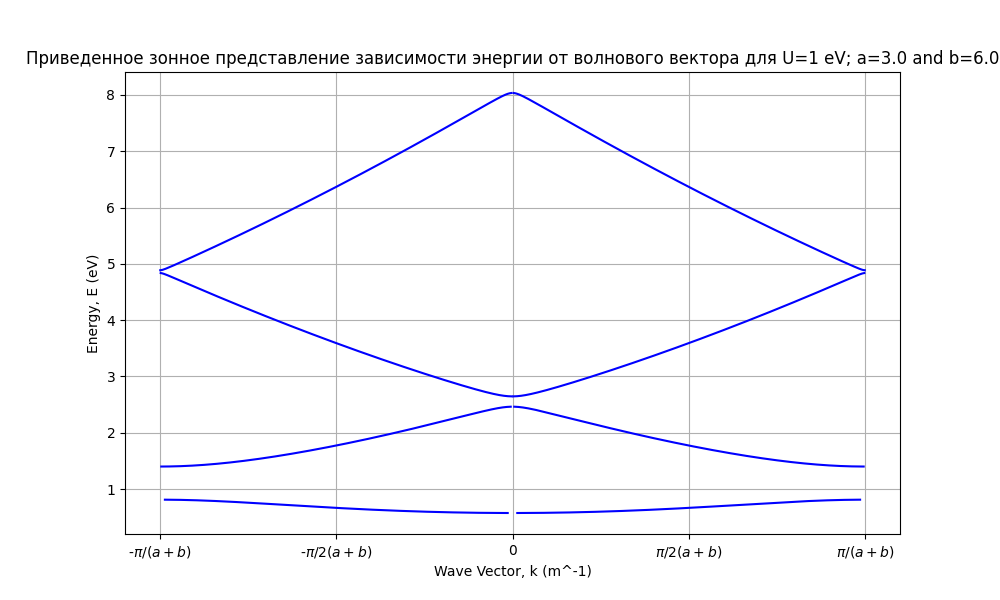


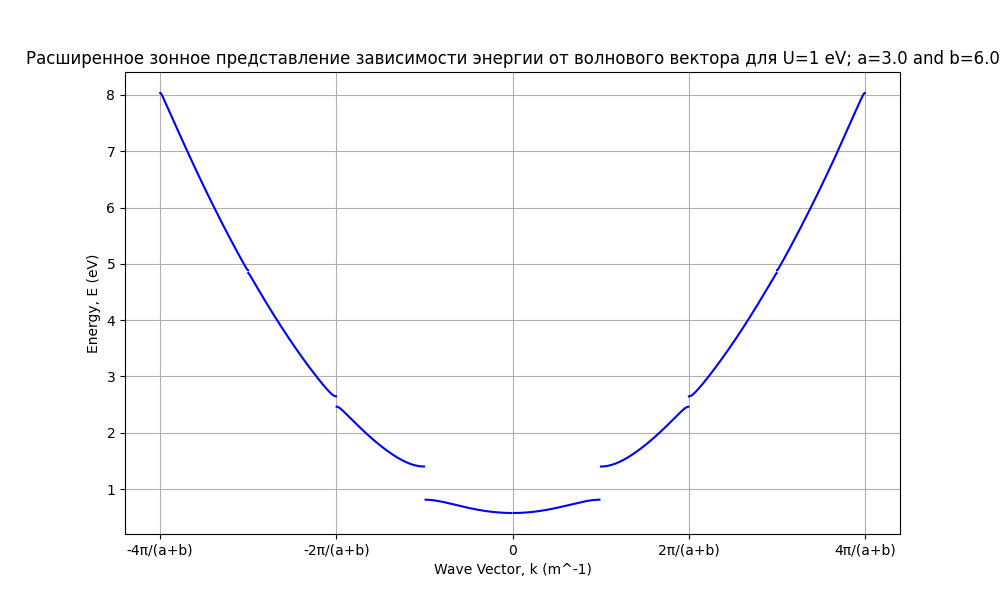
Рассчитываем размер запрещенных зон

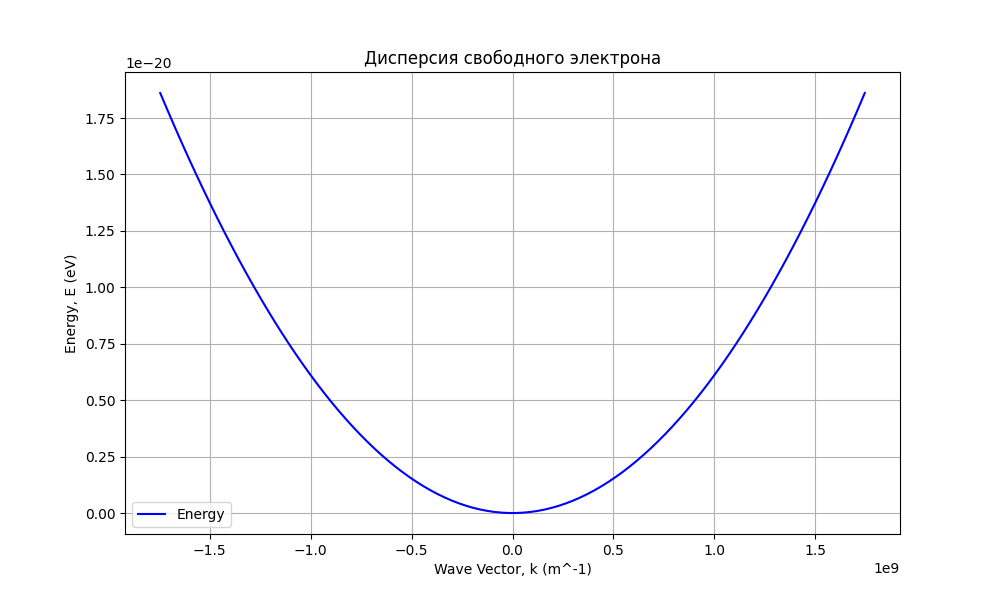


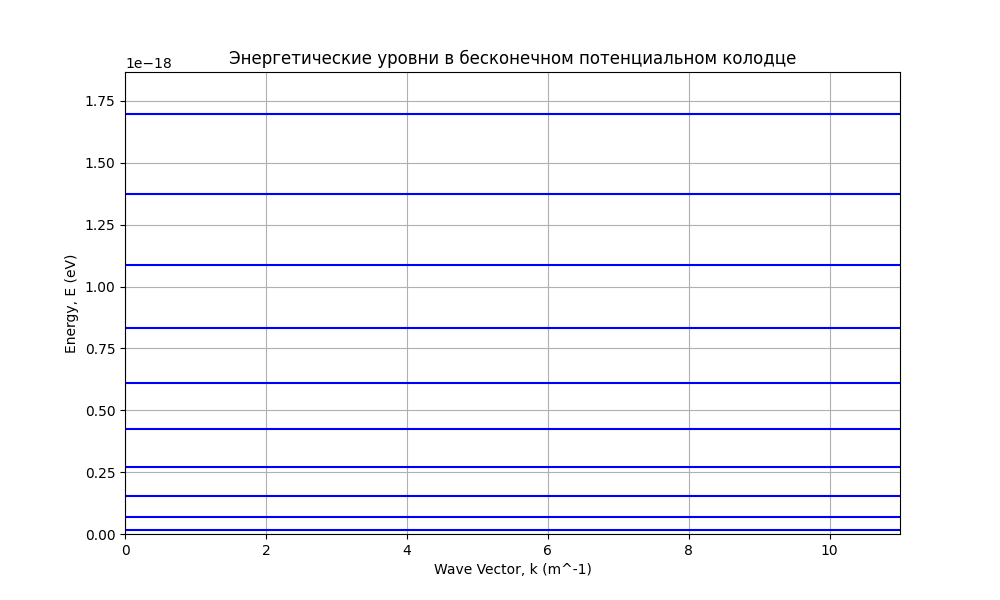
5) Результаты:











6) Вывод

В ходе работы была проведена численная модель зонной структуры в рамках модели Кронига–Пенни. Основное внимание уделялось исследованию поведения электронов в разных условиях потенциального рельефа, включая случаи с конечной и бесконечной высотой потенциального барьера.

Уравнение Кронига–Пенни позволило описать зависимость разрешенных энергий от волнового числа . Решение уравнения при помощи численных методов дало возможность построить зонные структуры для различных параметров.

Работа иллюстрирует теоретические основы и практическую реализацию модели зонной структуры одномерного кристалла.