

2. Übungseinheit vom 17.04.2018

1 Wannier-Stark Effekt

Im Festkörper sind Elektronen über das gesamte Gitter delokalisiert (mit Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Rumpfonen). Mit einem hinreichend starken äußeren, elektrischen (konstanten) Feld $E_{el} = konst.$ bekommt man ein linear mit dem Ort anwachsendes Potential $V(x) = -\int_0^x E_{el} dx' = E_{el} \cdot x$, woraus folgt, dass die niederenergetischsten Elektronenzustände beginne sich in den tiefsten Potentialtöpfen des Kristallgitters zu lokalisieren.

Für die Berechnung der ersten 20 stationären Elektroneigenzustände $|\phi_i(x)\rangle$ soll ein Gitter mit 10 Potentialtöpfen der Breite 5 a.u. und Abstand 5 a.u. (und genug Vakuum am Rand) simuliert werden. Diese Berechnung soll für externe Felder $E_{el} = 0 - 10^{-2} a.u.$ durchgeführt werden.

Das fortran script *wannier.f95* implementiert die Simulation durch Lösung der stationären Schrödingergleichung

$$\hat{H} |\phi(x)\rangle = E |\phi(x)\rangle \quad (1)$$

als Eigenwertgleichung mit den Energieeigenwerten E und der Matrixdarstellung des Hamiltonoperators in Ortsdarstellung $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + E_{el} \cdot x$ und gibt die Eigenvektoren $|\phi_i(x)\rangle$ im file *wannierEV.dat* und die Energieeigenwerte E_i im file *wannierEW.dat* aus.

Das bash script *plot20EV.sh* erzeugt ein GnuPlot .gif mit dem Betragsquadrat der 20 niedenergetischsten Eigenvektoren $|\psi_i(x)|^2$ (d.h. der Aufenthaltswahrscheinlichkeit) bei einem angelegten elektrischen Feldes E_{el} (*wannier.gif*), *plotAllEnergies.sh* ein GnuPlot .gif mit dem Betragsquadrat der 20 niedenergetischsten Eigenvektoren für die Felder $E_{el} = 0.0, 0.001, 0.002, 0.004, 0.006, 0.008, 0.01, 0.012, 0.014, 0.016, 0.018, 0.02$. (die gifs mit Namen *wannierALLEVE???.gif*)

Die zur Simulation verwendete Auflösung des Gitters liegt bei $dx = 0.07 a.u.$.

NOTE: Das script *wannier.f95* verwendet die LAPACK Subroutine **ssyyev**.