

## 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 beginnen 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 niederenergetischsten Eigenvektoren  $|\psi_i(x)|^2$  (d.h. der Aufenthaltswahrscheinlichkeit) bei einem angelegten elektrischen Feldes  $E_{el}$  (*wannierAllEVE.gif*), *plotAllEnergies.sh* ein GnuPlot .gif mit dem Betragsquadrat der 20 niederenergetischsten 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 *wannier.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**.