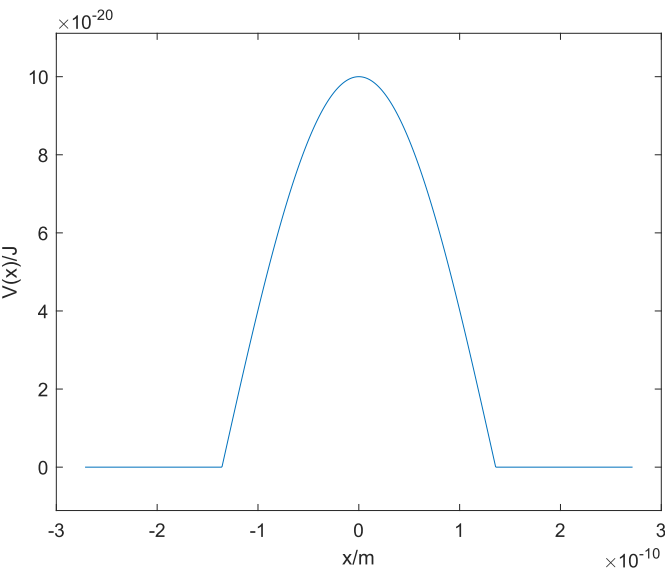


固物大作业-能带计算

绘制势能分布曲线

根据函数方程画出势能分布曲线：



特征根法求解能带曲线

对势场函数V(x)进行傅里叶展开，得到展开系数：

$$V_n = \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} V(x) e^{-j\frac{2n\pi}{a}x} dx = \begin{cases} -\frac{\cos(\frac{n\pi}{2})V_a}{(n^2-1)\pi} & n \neq \pm 1 \\ \frac{1}{4}V & n = \pm 1 \end{cases}$$

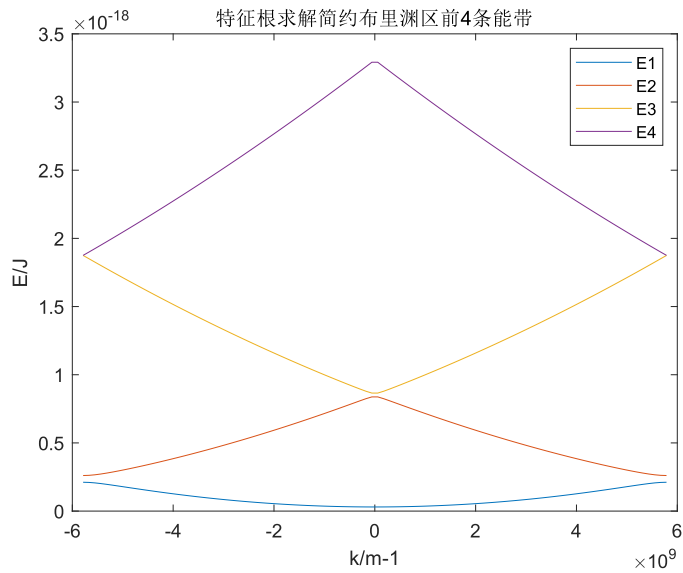
保留 $V_{-100} \sim V_{100}$ 系数 (m=100) 作为势场函数的近似: $V(x) \approx \sum_{n=-m}^m V_n e^{j\frac{2n\pi}{a}x}$

根据特征根求解，E与k_j满足的方程截断为：

$$\det \left(\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(k + \frac{2(-m)\pi}{a} \right)^2 + V_0 - E & V_{-1} & \cdots & V_{-m} & \cdots & V_{-2m} \\ V_1 & \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(k + \frac{2(-m+1)\pi}{a} \right)^2 + V_0 - E & \cdots & V_{-m+1} & \cdots & V_{-2m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{2m} & V_{2m-1} & \cdots & V_m & \cdots & \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(k + \frac{2m\pi}{a} \right)^2 + V_0 - E \end{bmatrix} \right) = 0$$

特征根法结果

绘制前4条能带曲线为：



带隙为：

$\Delta E_1/J$	4.9340e-20
$\Delta E_2/J$	2.8102e-20
$\Delta E_3/J$	7.2437e-22

近自由电子近似求解能带曲线

在布里渊边界处有近似公式 $E_{\pm} = V_0 + T_n \pm |V_n| \pm \Delta^2 T_n (\frac{2T_n}{|V_n|} \pm 1)$

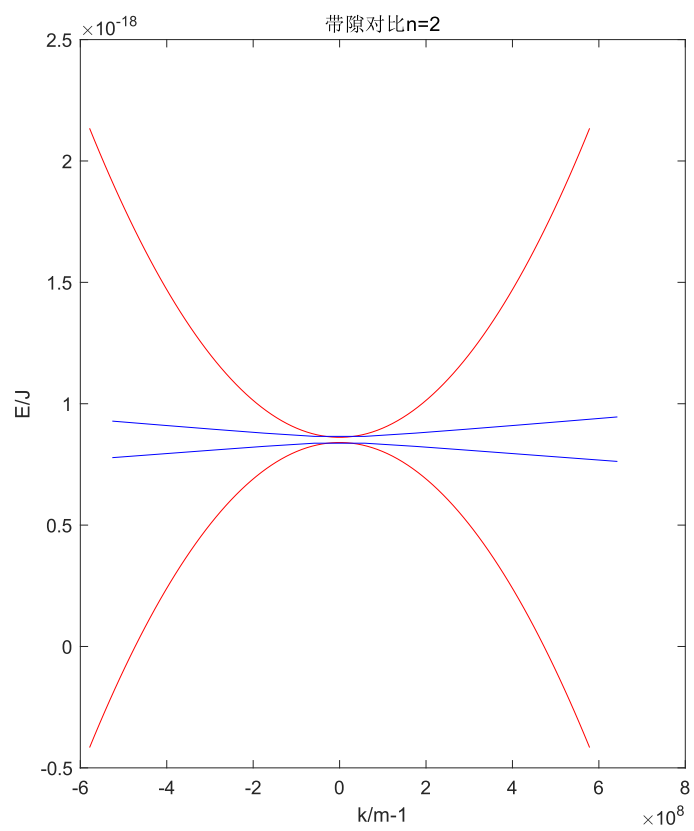
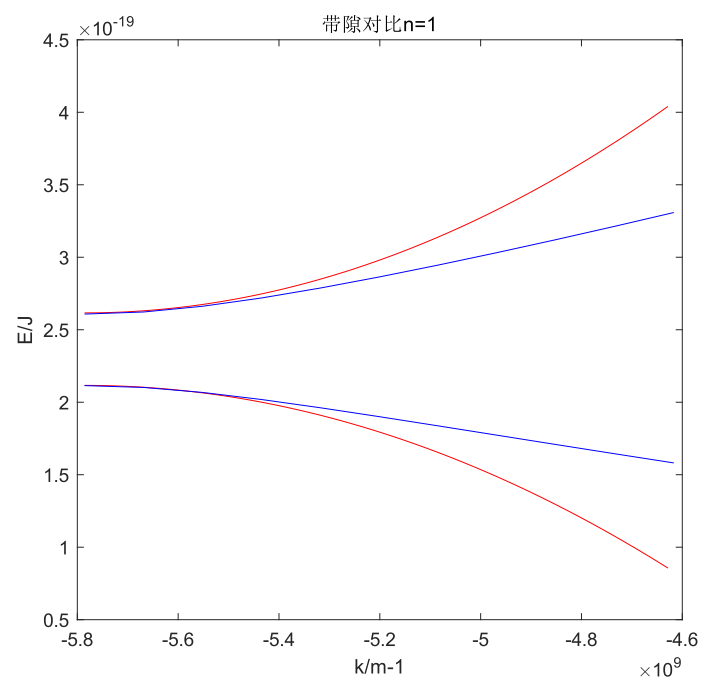
其中 $T_n = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\frac{\pi n}{a})^2$, $k = -\frac{\pi n}{a} (1 - \Delta)$, $k' = \frac{\pi n}{a} (1 + \Delta)$, 故带隙宽度为 $2|V_n|$

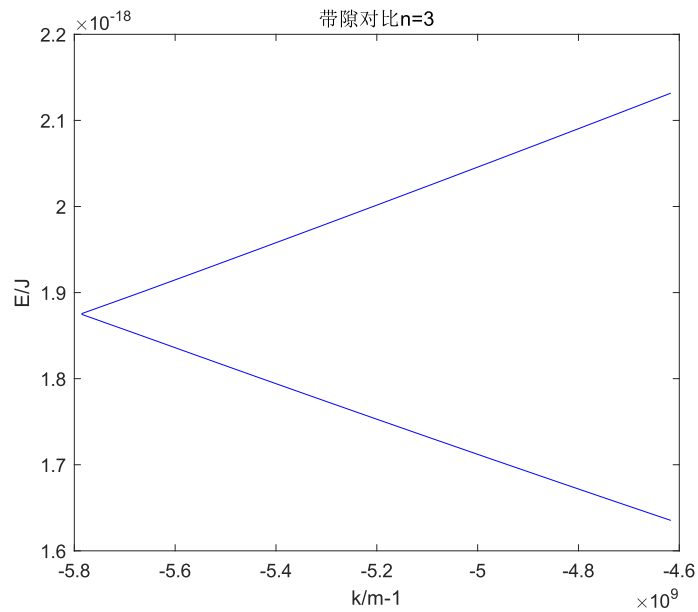
近自由电子结果

带隙为：

$\Delta E_1/J$	5.0000e-20
$\Delta E_2/J$	2.1221e-20
$\Delta E_3/J$	0

带隙对比（红色为近自由电子近似，蓝色为特征根求解，n=3时|Vn|=0无法使用近自由电子近似）：





结果对比分析

比较来看，在带隙附近特征根求解和近自由电子近似得到的结果非常接近，说明两种方法在特定情况下均合理。特征根法主要误差来源于 V_n 的截断。对比能带曲线可以看出，近自由电子在靠近布里渊边界时与特征根吻合；远离边界时相差较大，这是因为近自由电子近似依赖于 $|E_k^0 - E_{k'}^0| \ll |V_n|$ ，故在远离边界时条件不满足，计算得到的误差较大。

MATLAB代码

```
%势能函数
v0=1e-19;
a=5.43e-10;
x=linspace(-a/2,a/2,1000);
interval0=(x>-a/4) & (x<a/4);
y=v0*cos(2*pi*x/a) .* interval0;
%plot(x,y)
%ylim([-v0/9 10/9*v0]);
%xlabel('x/m');
%ylabel('V(x)/J');

%特征根法
m=100;
n=[-2*m:1:2*m];
vn=-cos(n*pi/2)*v0./(n.^2-1)/pi;
vn(2*m)=v0/4;
vn(2*m+2)=v0/4;

h=6.63e-34;
m0=9.1e-31;
E=[];
for k = linspace(-pi/a,pi/a,100)
    mat=vn(2*m+1:-1:1);
    mat(1) = mat(1) + h^2/2/m0/4/(pi^2)*(k+2*(-m)*pi/a)^2;
    for i=1:2*m
        row=vn(2*m+1+i:-1:1+i);
        row(i+1) = row(i+1) + h^2/2/m0/4/(pi^2)*(k+2*(-m+i)*pi/a)^2;
        mat=[mat;row];
    end
    e=sort(eig(mat));%求解特征根E
    E=[E,e];
end
k = linspace(-pi/a,pi/a,100);
%plot(k,E(1:4,:));
%min(E(4,:)-E(3,:)); %特征根带隙计算
%title('特征根求解简约布里渊区前4条能带')
```

```

xlabel('k/m-1');
ylabel('E/J');
legend('E1','E2','E3','E4');

%近自由电子
2*vn(2*m+4)%自由电子带隙计算

delta=linspace(-1/10,1/10,100);
n=2;
tn=h^2/2/m0/4/(pi^2)*(pi*n/a)^2;
Ep=vn(2*m+1)+tn+abs(vn(2*m+n+1))+delta.^2*tn*(2*tn/abs(vn(2*m+n+1))+1);
En=vn(2*m+1)+tn-abs(vn(2*m+n+1))-delta.^2*tn*(2*tn/abs(vn(2*m+n+1))-1);
Ee=[Ep;En];
%p1=plot(delta*pi/a,Ee,color='r');
%hold on;
%p2=plot(k(45+1:45+11),E(2:3,45+1:45+11),color='b');
xlabel('k/m-1');
ylabel('E/J');
title('带隙对比n=2')

```