

Eðlisfræði þéttefnis

Reikniverkefni

Helgi Sigurðsson, Elías Rafn Heimisson, Ragna Bergmann
og Bjarki Traustason

Inngangur

Markmið verkefnisins er að rannsaka hegðun rafeindar í lotubundnu mætti. Slík mætti rísa upp í reglulegum kristallbyggingum þar sem atóm eru röðuð eftir skipulögðum strúktúr. Hamilton-virkir rafeinarinnar er í tveimur hlutum. Sá fyrri fyrir frjálsu orkuna og sá seinni fyrir lotubundna mættið

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

þar sem mættið er

$$V(x) = \pm V_0 \sin^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right).$$

Lausn Schrödingar jöfnunnar

Lausnin á tímaóháðu Schrödinger jöfnunni fyrir \hat{H} eru Bloch föll samkvæmt setningu Blochs.

$$\psi_{nk}(x) = e^{ikx} u_{nk}(x) = \sum_{K'} C_{k,K'} e^{i(k-K')x} \quad K' = \frac{2\pi n'}{a}$$

Föllin $u_{nk}(x)$ eru lotubundin með sömu lotu og mættið okkar $V(x)$. Þ.e.

$$u_{nk}(x) = u_{nk}(x+a)$$

Vegna þess að mættið er lotubundið með lotuna a er nóg að takmarka sig við fyrsta Brillouin-svæði kristallsins. Þ.e. $ka \in [-\pi, \pi]$.

Á Dirac formi getum við skrifað þetta

$$|n, k\rangle = \sum_{K'} C_{k,K'} |n, k - K'\rangle$$

Við getum ákvarðað róf Hamiltonvirkjans

$$\hat{H} \mathbf{C}_k = \sum_{K'} C_{k,K'} \left(E_{n,k-K'} \delta_{KK'} + \langle n, k - K | \hat{V} | n, k - K' \rangle \right) = \varepsilon_{nk} \mathbf{C}_k$$

Vinnsla með víddarlausum einföldum stærðum einfaldar útreikninga í forritinu. Endurskilgreinum nokkrar stærðir

$$\tilde{x} = \frac{x}{a} \quad \tilde{k} = \frac{a}{2\pi} k \quad a = 1 \quad \frac{\hbar^2}{2m} = 1$$

Lausnirnar á fylkjastökunum eru

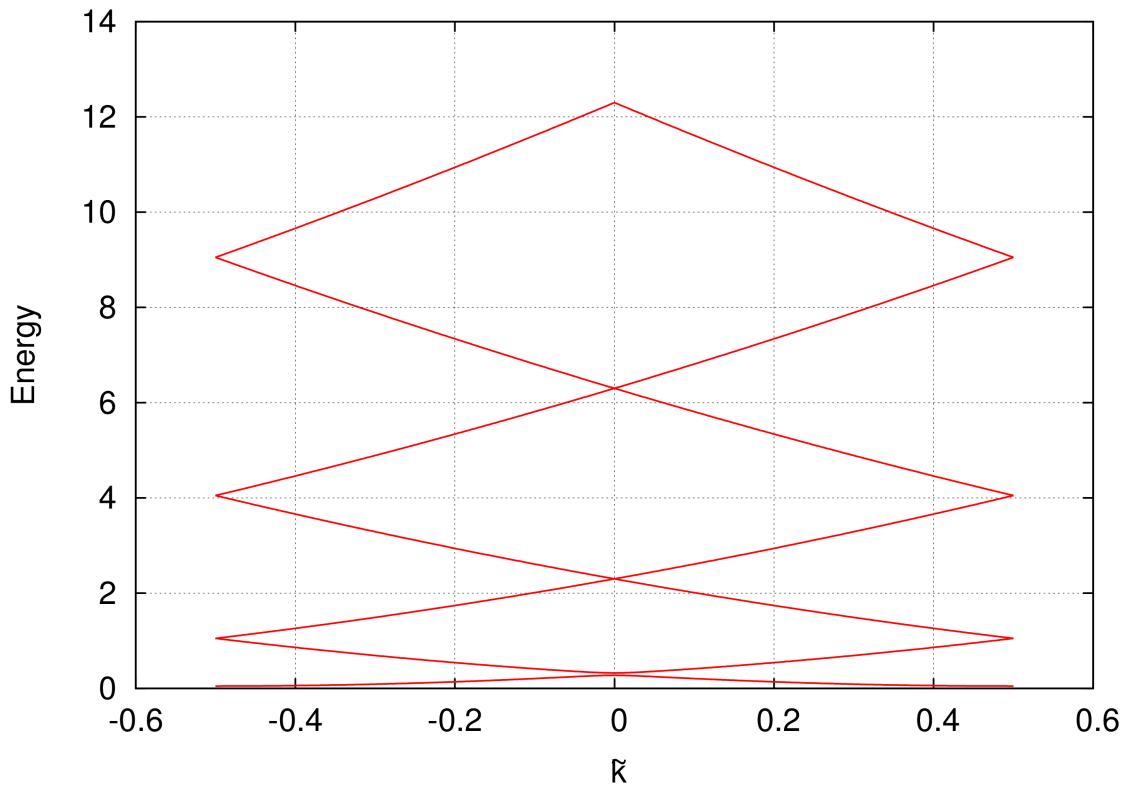
$$E_{n,k-K'}\delta_{KK'} = \frac{\hbar^2}{2m} (k - n')^2 = \left(\tilde{k} - n' \right)^2 \quad \forall \quad n = n'$$

$$\begin{aligned} \langle n, k - K | \hat{V} | n, k - K' \rangle &= \int_{-1/2}^{1/2} e^{-i(\tilde{k}-\tilde{K})\tilde{x}} V(\tilde{x}) e^{i(\tilde{k}-\tilde{K}')\tilde{x}} d\tilde{x} = \int_{-1/2}^{1/2} V_0 \sin^2(\pi \tilde{x}) e^{i(\tilde{K}-\tilde{K}')\tilde{x}} d\tilde{x} \\ &= 2V_0 \frac{((K - K')^2 - 2\pi^2) \sin\left(\frac{K - K'}{2}\right)}{(K - K')^3 + 4\pi^2(K' - K)} \end{aligned}$$

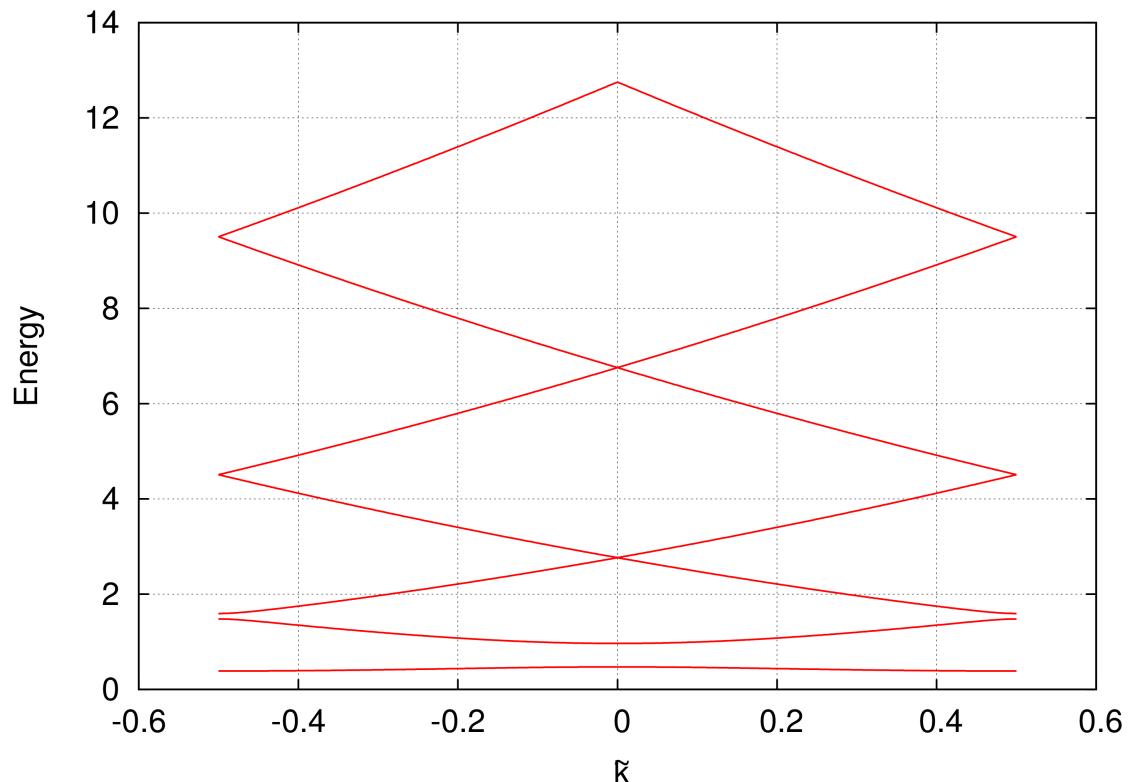
Hér koma tvö sértarfelli til greina. Athugið að $a = 1$ svo $K' = 2\pi n'$.

$$\hat{H}_{nk} = \begin{cases} \frac{V_0}{2} & n = n' \\ -\frac{V_0}{4} & |n - n'| = 1 \end{cases}$$

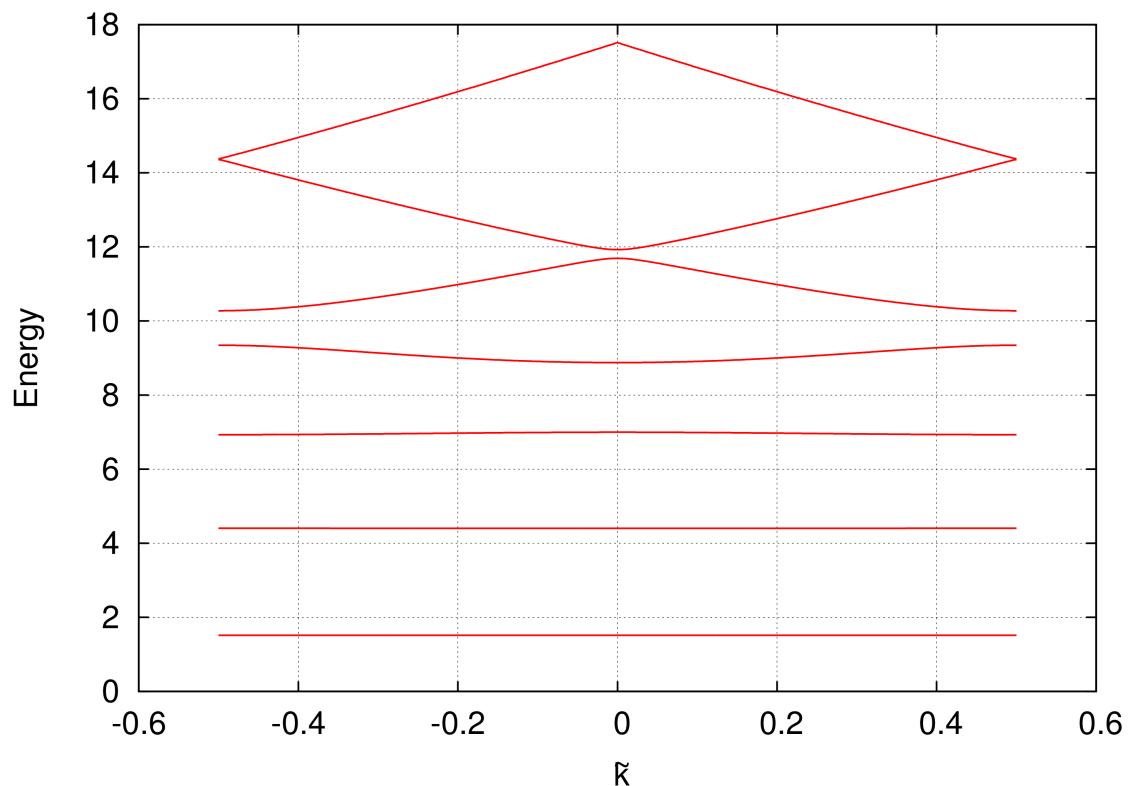
Niðurstöður



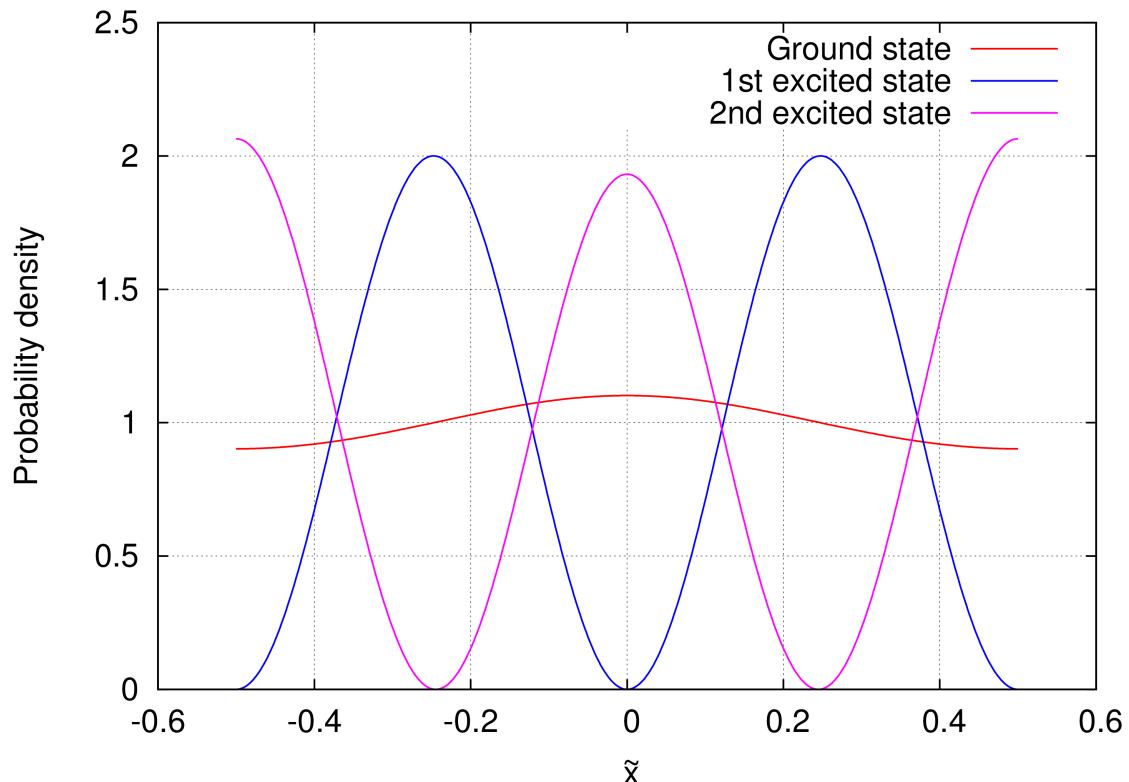
Mynd 1: Orka rafeindar fyrir $V_0/E_0 = 0.1$



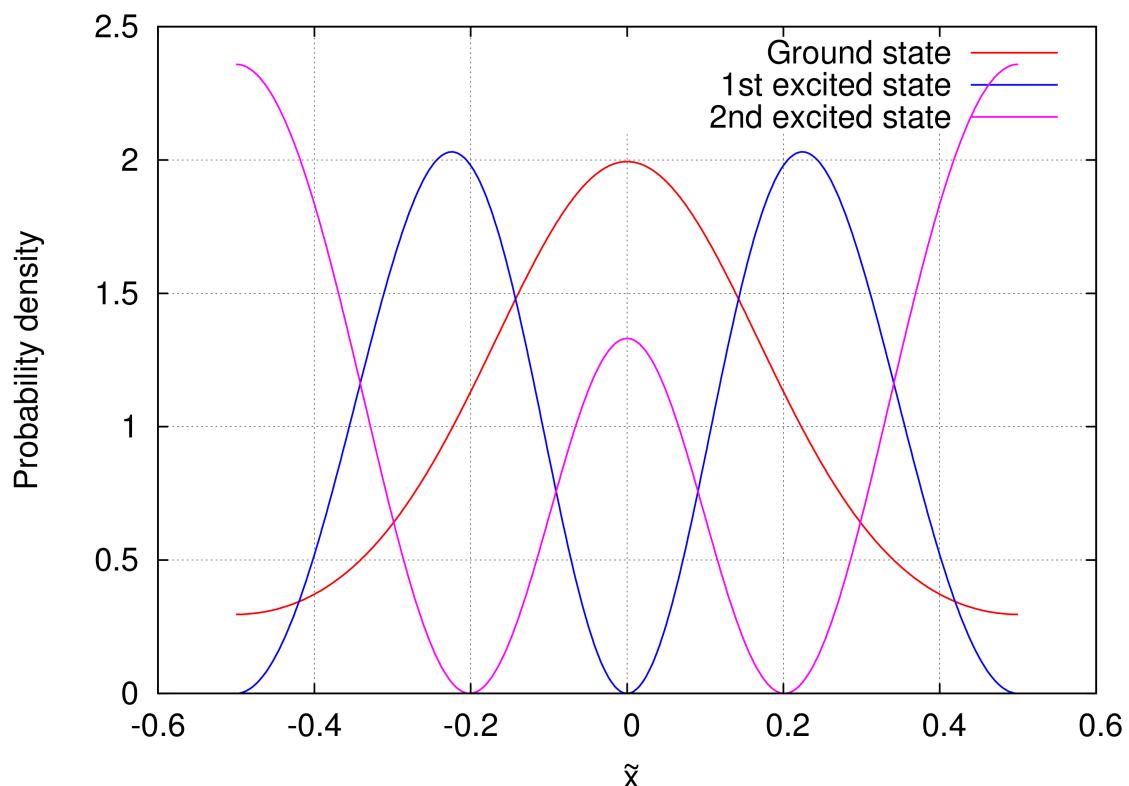
Mynd 2: Orka rafeindar fyrir $V_0/E_0 = 1$



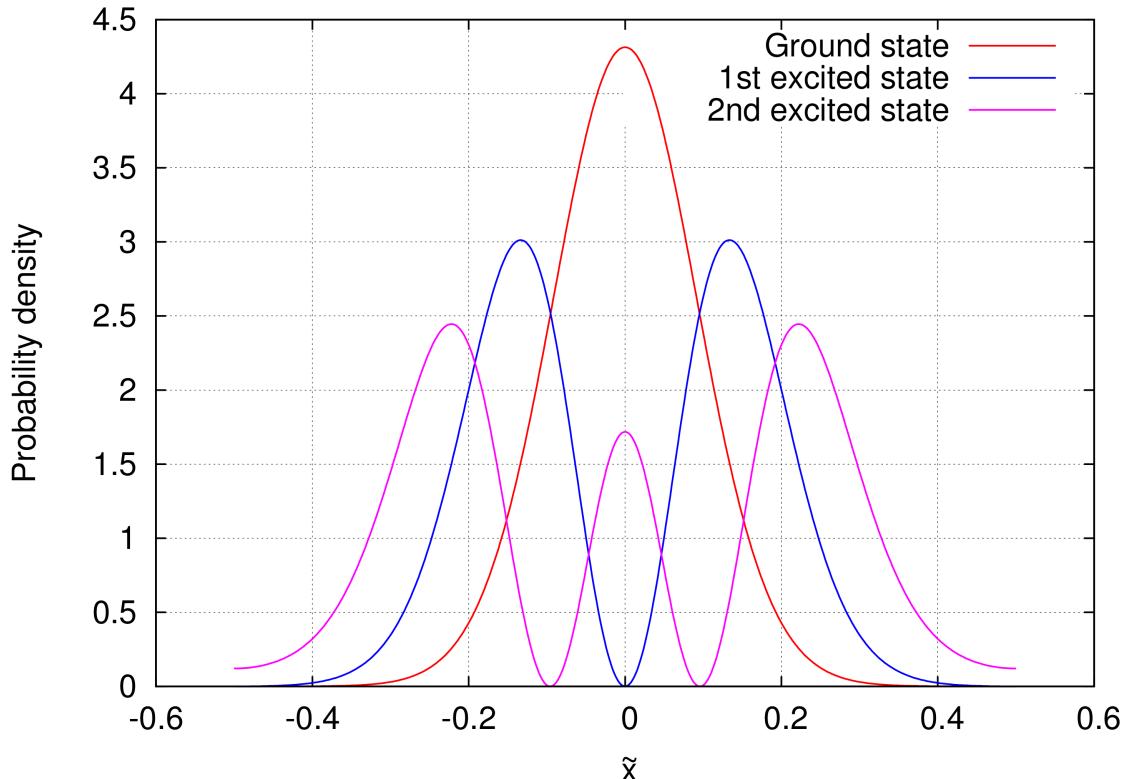
Mynd 3: Orka rafeindar fyrir $V_0/E_0 = 10$



Mynd 4: Líkindaþéttleiki rafeindar fyrir $V_0/E_0 = 0.1$ og $\tilde{k} = 1/2$



Mynd 5: Líkindaþéttleiki rafeindar fyrir $V_0/E_0 = 1$ og $\tilde{k} = 1/2$



Mynd 6: Líkindaþéttleiki rafeindar fyrir $V_0/E_0 = 10$ og $\tilde{k} = 1/2$

Af myndum 1, 2 og 3 má sjá að bilið milli orkuborða eykst þegar mættið $V(x)$ eykst. Þetta er í samræmi við að ef mættið er sett í Fourier röð

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_G e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad V_G \sim V_0$$

Með því að auka V_0 eykst V_G sem samsvarar stærra bili milli orkuborða kristallsins.

Myndir 4,5 og 6 sýna líkindaþéttleika rafeindarinnar í kristallinum. Hér er bylgjuvigurinn k látinna vera á jaðri fyrsta Brillouin-svæðisins. Áhugavert er að sjá hvernig líkindaþéttleiki rafeindarinnar forðast mættið $V(x)$ þegar hún er í grunnástandi en eltir það í fyrsta örvaða ástandi.

Forrit

Forritið var skrifað á Fortran-95. Notast var við MKL-ifort fallagrunn til að hornalínugera fylkið \hat{H} . Eftirfarandi pakkar voru einnig notaðir *Precision_mod*, *Init_Mod*, *Fields_Mod* og *Write_Mod*. Þessir pakkar voru aðeins til að auðvelda notenda að skrifa forritið en komu aðeins óbeint við megingerð forritins.

```
1 PROGRAM reikniverkefni
2 USE Precision_Mod      ! Module for defining precision
3 USE Init_Mod           ! Initial values
4 USE Fields_Mod         ! Global variables
5 USE mkl95_lapack       ! Linear algebra subroutines, only works with ifort compiler
6 USE mkl95_blas          ! Linear algebra subroutines, only works with ifort compiler
7     USE Write_Mod
8     USE Functions_Mod
9 IMPLICIT NONE
10
11 INTEGER(KIND=lg)          :: n, m, ierr, j
12 REAL(KIND=dp)             :: V_0
13 REAL(KIND=dp), DIMENSION(Ns) :: k, x_tilda
14 REAL(KIND=dp), DIMENSION(Ns,Nf) :: orka_m, apsi
15 REAL(KIND=dp), DIMENSION(Nf,Nf) :: W
16 COMPLEX(KIND=dp), DIMENSION(Nf,Nf) :: Eigvect1, Eigvect2
17
18
19 k = linspace(-0.5_dp, 0.5_dp, Ns)
20 V_0 = 1._dp
21 orka_m = Czero
22
23 ierr = 0
24 ALLOCATE(Hmat(Nf,Nf), STAT=ierr)
25 Hmat = Czero
26 ALLOCATE(Eigval(Nf), Eigvect(Nf,Nf), STAT=ierr)
27 IF (ierr /= 0) WRITE(*,*) "ALLOCATION ERROR in Eigval, Eigvect1"
28
29 DO j = 1,Ns
30   Eigvect = Czero
31   Eigval = 0._dp
32   W = Czero
33   ! Call a subroutine to create the matrix
34   CALL fylki(W, k(j), V_0)
35
36   ! Using the subroutine heevd to create the eigenvectors and eigenvalues
37   Eigvect = W
38   CALL heevd(Eigvect, Eigval, 'V', 'U')
39
40   ! Let's keep one set of eigenvectors for k = 1/2 to plot the probability density.
41   IF (j == 501) THEN
42     Eigvect1 = Eigvect
43   END IF
44   orka_m(j,:) = Eigval
45
46 END DO
47
48   ! Writing the results of the energies in a .txt document to plot later
49   CALL writeMatrix(k, orka_m, "orka.txt")
```

```

1 ! Writing the probability data on an interval x_tilda to a .txt document to plot
2      later
3 x_tilda = linspace(-0.5_dp,0.5_dp,Ns)
4 apsi = abs_psi(Eigvect1, x_tilda, 0.5_dp)
5 CALL writeMatrix(x_tilda, apsi, 'likindi.txt')
6
7 END PROGRAM reikniverkefni

```

Eftirfarandi forrit sá um að byggja fylkið okkar \hat{H} og reikna út líkindaþéttleikan. Einnig geymir það fallið *linspace* sem samvarar nafna sínum í Matlab.

```

1 MODULE Functions_Mod
2   USE Precision_Mod
3   USE Init_Mod
4   USE Fields_Mod
5   USE mkl95_lapack      ! Linear algebra subroutines, only works with ifort compiler
6   USE mkl95_blas         ! Linear algebra subroutines, only works with ifort compiler
7   IMPLICIT NONE
8
9 CONTAINS
10 ! linspace, abs_psi, orka, fylki
11
12 FUNCTION linspace(xmin,xmax,N)
13   IMPLICIT NONE
14   ! Fall sem skilar vigri med punktum a jofnu bili milli upphafspunkts og endapunkts.
15
16   INTEGER(KIND=lg), INTENT(IN) :: N
17   REAL(KIND=dp), DIMENSION(N) :: linspace
18   REAL(KIND=dp), INTENT(IN) :: xmin,xmax
19   INTEGER(KIND=lg) :: i
20   REAL(KIND=dp) :: factor, add
21
22   factor = (xmax-xmin)/(N-1)
23   linspace(1) = xmin
24   add = xmin
25
26   DO i = 2,N
27     add = add + factor
28     linspace(i) = add
29   END DO
30 END FUNCTION

```

```

1 SUBROUTINE fylki(W, k, V)
2 !_____
3 ! Fall sem reiknar ut stokin í virkja-fylkinu okkar H
4 !_____
5
6 REAL(KIND=dp) :: k, V, T, P
7 INTEGER(KIND=lg) :: m, n
8 REAL(KIND=dp), DIMENSION(Nf,Nf), INTENT(INOUT) :: W
9
10 !P er K merkt
11 !T er K
12
13 DO n = 1,Nf
14   T = 2._dp * pi * FLOAT(n)
15   DO m = 1,Nf
16     P = 2._dp * pi * FLOAT(m)
17     IF ((m .NE. n) .AND. (abs(n-m)==1)) THEN
18       W(n,m) = -V/4._dp
19     ELSEIF (m .NE. n) THEN
20       W(n,m) = (2._dp*V*((T-P)**2-2._dp*pi**2)*sin((T-P)/2._dp))/((T-P)**3+4._dp*pi
21         **2*(P-T)))
22     ELSE
23       W(n,m) = (k - (m - Nf/2._dp))**2 + V/2._dp
24     END IF
25   END DO
26 END DO
27
28 END SUBROUTINE
29
30 FUNCTION abs_psi(Eigvect, x_tilda, k)
31 !_____
32 ! Eftirfarandi er fall til ad reikna ut likindathettleika
33 !_____
34 COMPLEX(KIND=dp), DIMENSION(Nf,Nf), INTENT(IN) :: Eigvect
35 REAL(KIND=dp), DIMENSION(Ns), INTENT(IN) :: x_tilda
36 INTEGER(KIND=lg) :: m, n
37 COMPLEX(KIND=dp), DIMENSION(Ns, Nf) :: psi
38 REAL(KIND=dp), DIMENSION(Ns, Nf) :: abs_psi
39 REAL(KIND=dp) :: k
40
41 psi = Czero
42 DO n = 1,Nf
43   DO m = 1,Nf
44     psi(:,m) = psi(:,m) + Eigvect(n,m)*exp(2._dp*pi*ci*(k-(Nf/2._dp - n))*x_tilda)
45   END DO
46 END DO
47
48 ! Likindathettleiki reiknadar
49 abs_psi = abs(psi)**2
50
51 END FUNCTION
52
53
54 END MODULE

```