Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики
УЧЕБНЫЙ ЦЕНТР ОБЩЕЙ ФИЗИКИ ФТФ

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Группа М32011 К работе допущен

Студент Мирошниченко Александр Работа выполнена

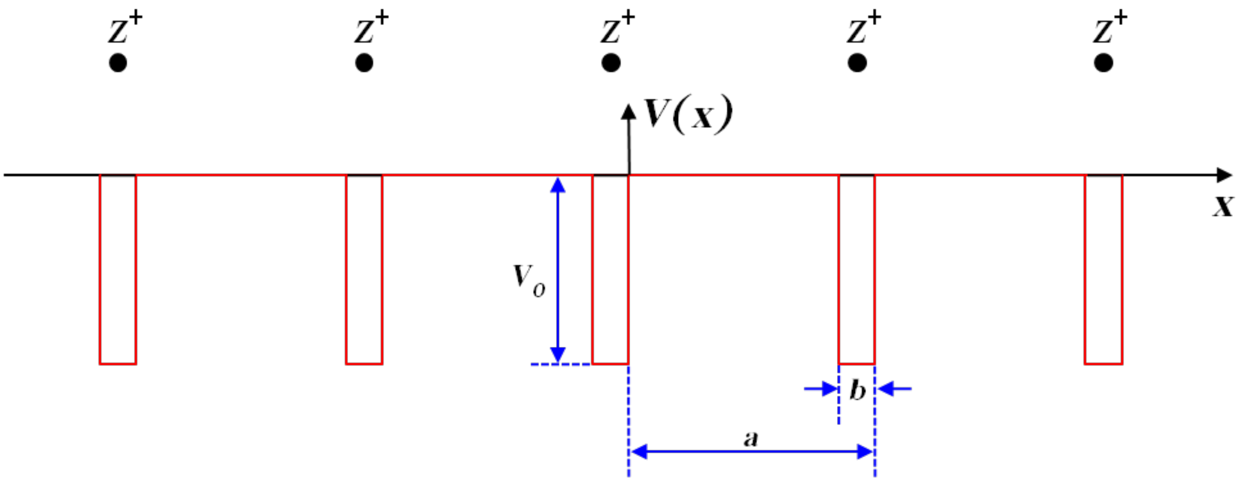
Преподаватель Зинчик Александр Адольфович Отчет принят

Рабочий протокол и отчет моделированию № 2

Зонная структура одномерного кристалла

1. Теория

Электрон движется в одномерном кристалле длиной L. Потенциал внутри кристалла приближен к форме прямоугольной ступени.



Согласно модели Кронига—Пенни, электрон, находящийся в периодической решетке, при движении испытывает периодическое ускорение и замедление под действием электрического поля атома.
Задача с одним электроном описывается уравнением Шредингера (с учетом граничного условия), приведенного ниже:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \beta^2\psi = 0$$

где

$$\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2Em_n}$$

$$\beta = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2(U_0 - E)m_n}$$

$$m_n - \text{эффективная масса}$$

(Эффективная масса отражает влияние периодического потенциала решетки на движение электрона в кристалле под действием внешней силы)

Решением этого является:

$$\psi = u_k(x)exp(ikx)$$

Приведенное выше уравнение проблематично решить численно, поскольку оно включает в себя решения собственных векторов и определителя собственных значений. Рассмотрим прямое решение уравнения:

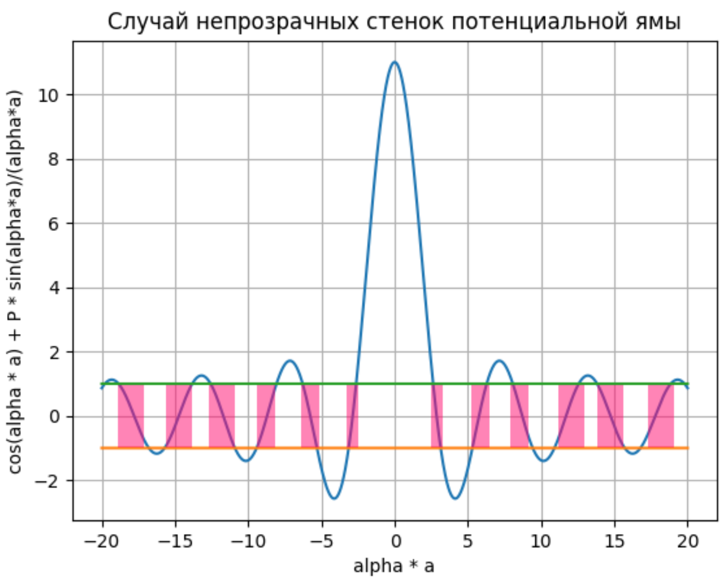
$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} sin(h\beta\alpha)sin(a\alpha) + cos(h\beta\alpha)cos(a\alpha) = cos(a + b)$$

Приведенное выше уравнение было упрощено Кронигом и Пенни, предположив, что V_0 настолько велико, что стремится к бесконечности, в то время как b настолько мал, что стремится к 0, но $V_0 b$ остается конечным.

$$p\frac{sin\ \alpha}{\alpha a} + cos\ \alpha a = cos\ a$$

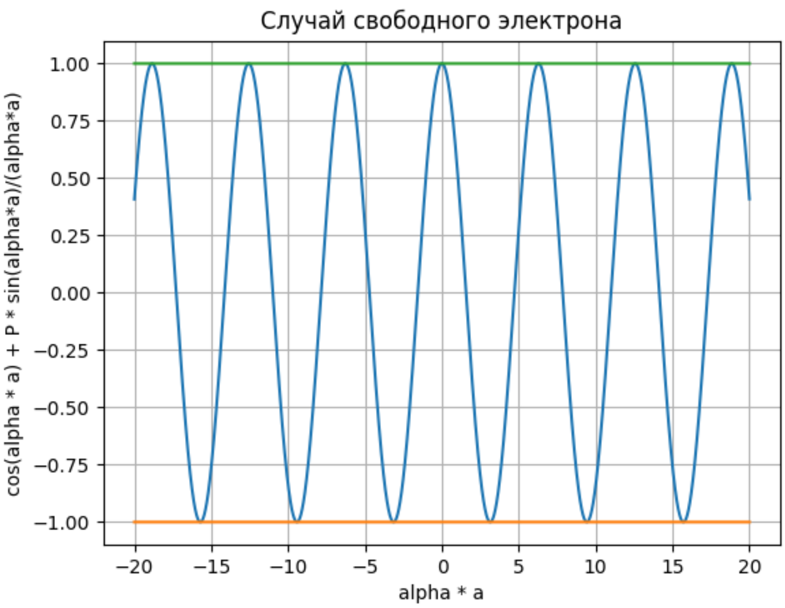
Где $p = \frac{mV_0 ab}{\hbar^2}$ - мера силы, с которой электроны в кристалле притягиваются к ионам в узлах кристаллической решетки.

Действительные корни уравнения выше существуют только при тех значениях αa, при которых левая часть уравнения принимает значения в интервале [−1;1]. На рисунке ниже можно увидеть области допустимых значений αa: чем меньше P, тем шире области.



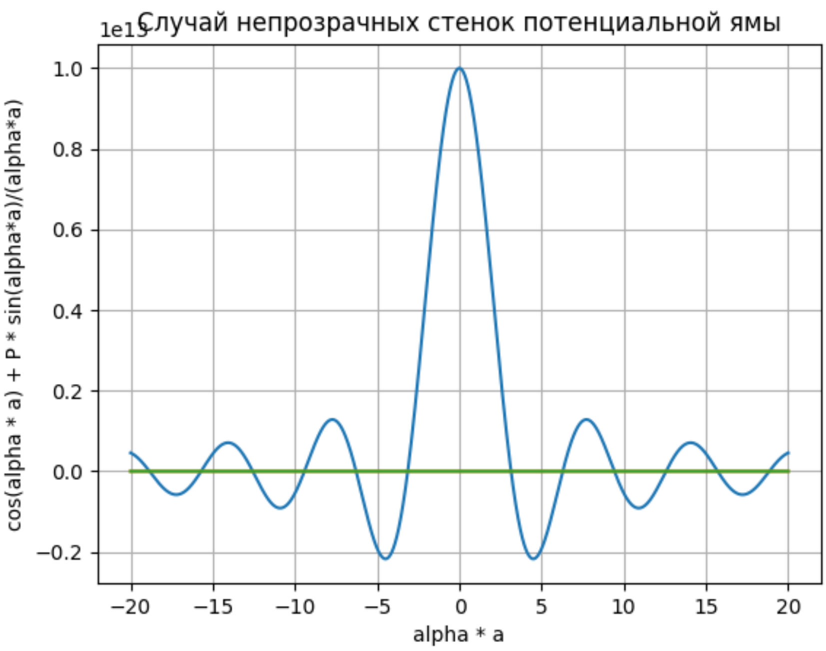
Энергия электрона в периодическом поле не может принимать любое значение, как для свободного электрона. Она ограничена рядом полос (зон) разрешенных значений, отделенных друг от друга запрещенными зонами энергетический спектр электрона в периодическом поле имеет зонную структуру. Ширина разрешенных зон определяется степенью связанности электрона внутри потенциальной ямы.

2. Результаты

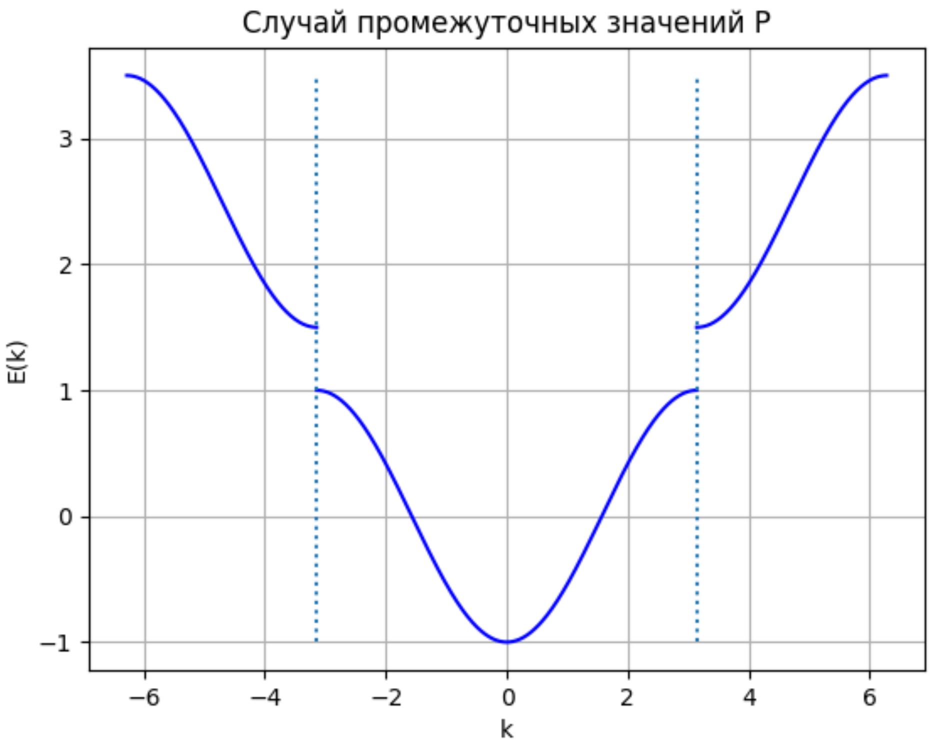


(рис.1)

Весь график состоит из запрещенных зон.



(рис.2)



(рис.3)

Две горизонтальные линии, отстоящие от оси x на расстоянии ± 1 показывают границы изменения cos λa

3. Выводы

С увеличением энергии электрона ширина разрешенных зон увеличивается, а запрещенных уменьшается. При $P \to \infty$ разрешенные зоны сужаются, превращаясь в дискретные уровни, соответствующие $a\alpha = \pi n$, где $n = \pm 1, \pm 2, \dots$. Тем самым мы приходим к случаю электрона в изолированном атоме. При стремлении прозрачности барьера к нулю $P \to 0$, наоборот, исчезают запрещенные зоны, и электрон становится свободным.

4. Код

5.
```
from math import sin, cos, pi
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

state_free = 0  # Свободный электрон
state_not_transparent = 10e12  # Случай непрозрачных стенок потенциальной ямы


def solve_equation(alpha_a, p):
    if alpha_a != 0:
        return cos(alpha_a) + p * sin(alpha_a) / alpha_a


class DefaultCase:
```

```
    func = []
    up = []
    down = []

    delta = 20
    x_min = -delta
    x_max = delta
    x = np.arange(x_min, x_max, 0.001)

    def __init__(self, p):
        self.p = p

    def show_plot(self):
        for i in self.x:
            self.func.append(solve_equation(i, self.p))
            self.down.append(-1)
            self.up.append(1)

        plt.title(
            "Случай свободного электрона" if self.p == state_free else "Случай непрозрачных стенок потенциальной ямы")
        plt.plot(self.x, self.func)
        plt.plot(self.x, self.down)
        plt.plot(self.x, self.up)
        plt.xlabel("alpha * a")
        plt.ylabel("cos(alpha * a) + P * sin(alpha*a)/(alpha*a)")
        plt.grid()
        plt.show()


class SpecialCase:
    m = 9.1093837 * 10e-31
    h = 6.62607015 * 10e-34
    a = 1
    list_k = np.arange(-1 * pi / a, 1 * pi / a, 0.01)
    list_e = []
    n = 2

    def draw_graph(self, n, a):
        list_k = np.arange(-n * pi / a, -(n - 1) * pi / a, 0.01)
        list_e = []
        sign = 1 if n % 2 == 0 else -1
        shift = (n - 1) * 2.5
        for k in list_k:
            list_e.append(shift + k ** 2 * self.h ** 2 / (2 * self.m) + cos(k * a) * sign)
        plt.plot(list_k, list_e, color=(0, 0, 1))

        list_k = np.arange((n - 1) * pi / a, n * pi / a, 0.01)
        list_e = []
        for k in list_k:
            list_e.append(shift + k ** 2 * self.h ** 2 / (2 * self.m) + cos(k * a) * sign)
        plt.plot(list_k, list_e, color=(0, 0, 1))

    def show_plot(self):
        for k in self.list_k:
            self.list_e.append(k ** 2 * self.h ** 2 / (2 * self.m) - cos(k * self.a))

        plt.plot(self.list_k, self.list_e, color=(0, 0, 1))

        for i in range(2, self.n + 1):
```

```
                self.draw_graph(i, self.a)

            y_start, y_end = -1, 1 + (2.5 * (self.n - 1))

            for i in range(1, self.n):
                plt.vlines(i * pi / self.a, y_start, y_end, linestyle=':')
                plt.vlines(-i * pi / self.a, y_start, y_end, linestyle=':')

            plt.title('Случай промежуточных значений P')
            plt.xlabel('k')
            plt.ylabel('E(k)')
            plt.grid()
            plt.show()


    freeElectron = DefaultCase(state_free)
    freeElectron.show_plot()

    # nonTransparentBorder = DefaultCase(state_not_transparent)
    # nonTransparentBorder.show_plot()
    #
    # specialCase = SpecialCase()
    # specialCase.show_plot()
```