Московский государственный ТЕХнический университет им. Н.Э.Баумана

Кафедра "Технологии Приборостроения"

Отчет по лабраторной работе №1

Студент: Е. Ю. Власов
Преподаватель: Н. А. Ветрова

Москва, 2017

Содержание

1. Условие

Задачи на лабораторную работу №1:

- Оценка основногосостояния в симметричной и несимметричной конечной потенциальной яме
- Численный метод расчета химического потенциала для 3d-электронного газа при заданной температуре и концентрации (ДЗ№2, см. Publish 2 в конце)

2. Теоретическая часть

Рассмотрим частицу, находящуюся в области несимметричной прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины. Потенциальную энергию такой частицы представим как

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & \text{x} < 0 \\ 0 & 0 < \text{x} < \text{a} \\ U_2 & \text{x} > \text{a} \\ U_2 < U_1 \end{cases}$$

Будем изучать внутреннюю область ямы, т.е. $E < U_0$ (в случае несимметричной ямы необходимо рассматривать случай $E < U_{min}$), т.е. связанное состояние частицы внутри несимметричной потенциальной ямы, в нашем случае U_2). Записывая уравнение Шредингера в областях за пределами ямы:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_1 - \frac{2m_0}{\hbar^2}(U_1 - E)\psi_1 = 0$$
$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_3 - \frac{2m_0}{\hbar^2}(U_2 - E)\psi_3 = 0$$

После чего, обозначим k_1, k_3 как:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_1 - E)}$$

$$k_3 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_2 - E)}$$

Внутри потенциальной ямы уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_2 + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E)\psi_2 = 0$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar}E}$$

Тогда общее решение можно представить в виде (принимая во внимание, что в областях за пределами ямы должны отсутсвовать набегающая и отраженные волны соответственно):

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{k_1 x} & \text{x} < 0 \\ Csin(k_2 x + \varphi) & 0 < \text{x} < \text{a} \\ Be^{-k_3 x} & \text{x} > \text{a} \end{cases}$$

При ширине ямы a и в результате наложения условий сшивки на волновую функцию, получаем, что

$$\tan(\varphi) = \frac{k_2}{k_1}$$
$$\tan(k_2 a + \varphi) = -\frac{k_3}{k_1}$$

Последнее приводится к виду

$$\sin(\varphi) = \frac{\hbar k_2}{\sqrt{2m_0 U_1}}$$
$$\sin(k_2 a + \varphi) = -\frac{\hbar k_2}{2m_0 U_2}$$

Выражая k_2:

$$k_2 = \frac{1}{a}\left(\pi n - \arcsin(\frac{\hbar k_2}{\sqrt{(2m_0 U_1)}}) - \arcsin(\frac{\hbar k_2}{\sqrt{(2m_0 U_2)}})\right) \tag{1}$$

где $n = 1, 2, 3, 4, 5..$ которое и определяет вид энергетического спектра частицы в потенциальной яме. Отметим, что отрицательные значения n и $n = 0$ не удовлетворяет условию задачи, поскольку левая часть соотношения выше неотрицательна. В силу того, что аргумент функции $arcsin$ не превосходит 1, значения k_2 всюду ограничены величиной $k_2^{max} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_0 U_{min}}$ Левая часть уравнения 1 - линия, проходящая через начало координат, правая часть преставляет семейство кривых при целых значениях параметра n. Точки пересечения этих функций определяют решения трансендентного уравнения 1.

С уменьшением глубины ямыU_0 величина k_2^{max}, а следовательно, и число уровней в яме уменьшаются. В случае, когда $k_2^{max} < \frac{\pi}{a}$, т.е. при

$$U_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}$$

в яме остается лишь один энергетический уровень. Подчеркнем, что в симметричной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины всегда имеется по крайней мере один энергетический уровень, т.е. существует одно связанное состояние частицы.

1. Условие

Рассчитайте химический потенциал, если известна концентрация электронов $n = 10^{18}$ cm^{-3} и температура $T = 300$ K. Эффективная масса $m_{eff} = 0.067m0$. Сравните результаты с приближением второго и четвертого порядка.

2. Решение

По определению, число состояний G заданного значения энергии E, определяется как:

$$G = J_z \frac{V_{phase}}{(2\pi\hbar)^3}$$

где J_z – определяет число возможных проекций спина,тогда для любого электрона $J_z = 2$. Плотность состояний же находится как отношение числа состояний на интервал энергии, или, переходя к дифференциалам

$$g(E) = \frac{dG}{dE} = \frac{m\sqrt[2]{2mE}}{\pi^2\hbar^3}$$

Откуда следует, что $dE = \frac{dG}{g(E)}$.
С другой стороны известно, что фермионы подчиняются статистике Ферми-Дирака и среднее число электронов n с энергией E и определяется как

$$< n >= \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}}$$

Очевидно, что $n = \frac{N}{V}$, тогда, определив N как

$$N = \int\limits_0^{+\infty} g(E)\, dE$$

для случая $T = 0$ получаем, что

$$E_F(0) = \frac{(3\pi^2\hbar^3 n)^{\frac{2}{3}}}{2m}$$

Для описания случая ненулевых температур прибегают к использованию специальной термодинамической функции $\mu = \mu(T)$, применяемой для описания состояний систем с непостоянным числом частиц. Физически данная функция отражает количество энергии, необходимое для добавления одной частицы в систему за вычетом совершенной работы, затрачиваемой на добавление этой частицы. Для случая $T = 0$ имеем, что $\mu(T) = \mu(0) = E_F$, что представляет из себя максимальную возможную энергию ферми-частиц в основном состоянии при нулевых температурах.

Как было показано выше, концетрацию частиц системы можно найти в явном виде из уравнения

$$N = \int\limits_0^{+\infty} g(E)\, dE = \int\limits_0^{+\infty} \frac{m\sqrt{2mE}}{\pi^2\hbar^3} \cdot \frac{1}{1 + e^{\frac{E-\mu}{kT}}}\, dE$$

Для того, чтобы в явной форме выразить μ воспользуемся следующим преобразованием. Произведем замену переменной $z = \frac{E-\mu}{kT}$. Тогда пределы интегрирования $E = 0 \to z = -\frac{\mu}{kT}$, $E \to +\infty \longleftrightarrow z \to +\infty$. А дифференциал представим в виде

$$dE = d(kTz + \mu) = kTdz$$

Подставляя в предыдущую формулу получим выражение

$$n = kT \int\limits_{-\frac{\mu}{kT}}^{+\infty} g(\mu + kTz) \frac{1}{1+e^z}\, dz$$

Пользуясь свойством аддитивности интеграла разобьем интегральную сумму на два слагаемых

$$n = kT \int\limits_{-\frac{\mu}{kT}}^{0} \frac{g(\mu + kTz)}{1+e^z}\, dz + kT \int\limits_{0}^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1+e^z}\, dz$$

Затем в первом слагаемом выполними эквивалентное преобразование, которое заключается в изменении пределов интерировании,а так же замене знака переменной $z \to -z$

$$n = kT \int\limits_{0}^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{1+e^{-z}}\, dz + kT \int\limits_{0}^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1+e^z}\, dz$$

Очевидна справедливость тождественного преобразования выражения

$$\frac{1}{1+e^{-z}} = 1 - \frac{1}{1+e^z}$$

и подставляя в исходное выражение имеем

$$n = kT \int\limits_{0}^{\frac{\mu}{kT}} g(\mu - kTz)\, dz - kT \int\limits_{0}^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{1+e^z}\, dz + kT \int\limits_{0}^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1+e^z}\, dz$$

В первом слагаемом выполним замену $\varepsilon = \mu - kTz$, $d\varepsilon = -kTdz \to dz = -\frac{1}{kT}d\varepsilon$. Тогда пределы

$$z = 0 \to \varepsilon = \mu$$

$$z = \frac{\mu}{kT} \to \varepsilon = 0$$

Тогда

$$n = \int\limits_0^{\mu} g(\varepsilon)\,d\varepsilon - kT\int\limits_0^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{1+e^z}\,dz + kT\int\limits_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1+e^z}\,dz$$

Из графического анализа становится ясно разложение первого слагаемого выражения как сумма площадей анализируемой части плоскости

$$\int\limits_0^{\mu} g(\varepsilon)\,d\varepsilon = n - (E_F - \mu)g(E_F)$$

И подставляя в исходное выражение имеем

$$n = n - (E_F - \mu)g(E_F) - kT\int\limits_0^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{1+e^z}\,dz + kT\int\limits_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1+e^z}\,dz$$

Полагая $\mu >> kT$ и собирая интеграл получим выражение вида

$$-(\mu - E_F)g(E_F) = kT\int\limits_0^{+\infty} \frac{g(\mu - kTz) + g(\mu + kTz)}{1+e^z}\,dz$$

Выражая μ из последнего имеем выражение в явном виде

$$\mu = E_F - \frac{kT}{g(E_F)}\int\limits_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz) - g(\mu - kTz)}{1+e^z}\,dz$$

Выполним разложение в ряд Тейлора в точке подинтегральных выражений

$$g(\mu + kTz) = g(\mu) + zkT\dot{g}(\mu) + \frac{z^2}{2}(kT)^2\ddot{g}(\mu) + \frac{z^3}{6}(kT)^3\dddot{g}(\mu)$$
$$g(\mu - kTz) = g(\mu) - zkT\dot{g}(\mu) + \frac{z^2}{2}(kT)^2\ddot{g}(\mu) - \frac{z^3}{6}(kT)^3\dddot{g}(\mu)$$

Подставляя и упрощая выражения, а также воспользовавшись табличными интегралами приходим к конечному виду уравнения

$$\mu = E_F - \frac{\pi^2}{12}\frac{(kT)^2}{E_F} - \frac{7}{8}\frac{\pi^4}{120}\frac{(kT)^4}{(E_F)^3}.$$

Теперь осталось расписать реализацию численного метода нахождения значений функций $\mu = \mu(T)$ для сравнений показаний аналитического и численного решения.

Исходя из конечности интервалов разбиения E заменим интеграл интегральной суммой, тогда точность расчета будет зависеть от числа отрезков разбиения. Тогда полагая размерность векторов E и μ равной числу точек разбиения (1000). Тогда запишем $\mu_{min} = \mu[0] = kT \log\left(\frac{n}{2}\left[\frac{2\pi\hbar^2}{m_{eff}k_BT}\right]^{\frac{3}{2}}\right)$, $\mu_{max} = E_F$, $E[0] = E_{min} = 0$, $E_{max} = E_F + 15kT$. Тогда μ и E будут представлены 3-мерными матрицами.

$$\mu_{max} = E_F;$$
$$\overline{\mu}_{min} = \left[k_BT_1 \log\left(\frac{n}{2}\left[\frac{2\pi\hbar^2}{m_{eff}k_BT_1}\right]^{\frac{3}{2}}\right), \quad \ldots, \quad k_BT_{countT} \log\left(\frac{n}{2}\left[\frac{2\pi\hbar^2}{m_{eff}k_BT_{maxT}}\right]^{\frac{3}{2}}\right)\right];$$

$$E_{min} = 0;$$
$$\overline{E}_{max} = \left[E_F + 15k_BT_1, \quad E_F + 15k_BT_2, \quad \ldots, \quad E_F + 15k_BT_{maxT}\right].$$

$$\mu = \begin{bmatrix} \mu_{min,\,1} & \cdots, & \mu_{max} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ & & \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \mu_{min,\,maxT} & \cdots, & \mu_{max} \end{bmatrix}$$
$$E = \begin{bmatrix} E_{min} & \cdots, & E_{max,\,1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ & & \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ E_{min} & \cdots, & E_{max,\,maxT} \end{bmatrix}$$

В этом случаем число частиц будет определяться выражением

$$N = \sum_{i=1}^{n_{points}} F(E);$$
$$F(E) = g(E)f(E);$$
$$N_{i=1}^{n_{points}} = \frac{E_{max,i}}{n_{points}} \sum_{j=1}^{n_{points}} \frac{m\sqrt{2m}}{\pi^2\hbar^3} \frac{\sqrt{E_j}}{e^{\frac{E_j-\mu_j}{k_BT_i}} + 1}.$$

Минимизируя найдем необходимое количество

$$\left|\frac{N_j^{countT} - n}{n}\right|.$$

3. Расчет в MATLAB

Приведенная постоянная Планка	$\hbar = 1.0546 * 10^{-34}$	hbar = 1.0546e-34	$J \cdot s$
Масса свободного электрона	$m_0 = 9.11 * 10^{-31}$	m0 = 9.11e-10	kg
Переход от Дж в эВ	$J2eV = eV2J^{-1}$	J2eV=eV2J^(-1);	1/Кл
Константа Больцмана	$k = 1.38 \cdot 10^{-23}$	k = 1.380e-23	$J * K^{-1}$

Входные данные:

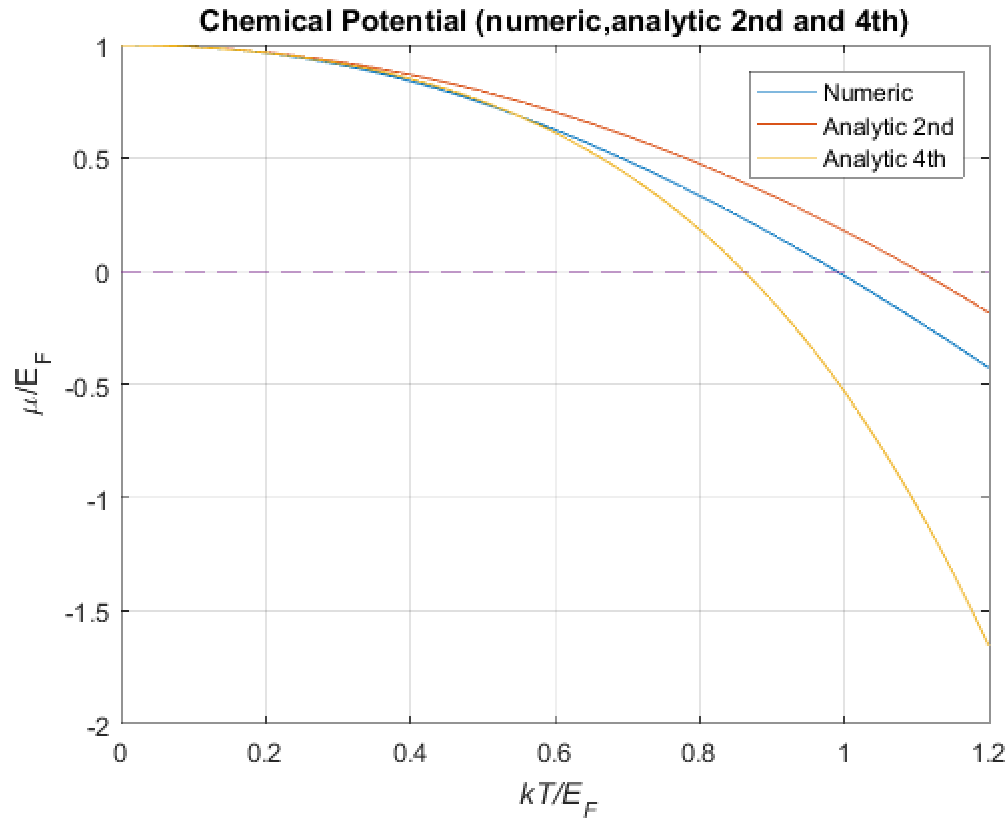
Концентрация электронов	10^{18}	10e18	cm^{-3}
Температура	[1:1000]	1:1000	K

```
clear all;
clc;
hbar = 1.054e-34;
m0 = 9.1e-31;
meff = 0.1;
melec = meff*m0;
eV2J = 1.6e-19;
J2eV = 1/eV2J;


U = [1 1]*eV2J;
a=1e-9;


if (U(1)~=0 && U(2)~=0)
     k_max = sqrt(2*melec*min(U))/hbar;
     k = linspace(0,k_max);
     F_1 = pi-asin(k*hbar/sqrt(2*melec*U(1)))-asin(k*hbar/
sqrt(2*melec*U(2)));
     F_2 = k*a;
     difference = abs(F_2-F_1);
     difference1 =min(difference);
     inDex = 0;
     for i = 1:length(k)
         if difference(i) == difference1
             inDex = i;
         end
     end
     k_find = k(inDex);
     %[x,y]=max(difference1);
     %k_fin=k(y);
     E = hbar^2*k_find^2/(2*melec)*J2eV;
else

    E = pi^2*hbar^2/(2*melec*a^2)*J2eV;
end
```

Published with MATLAB® R2016a

```
clear;
clc;
load ('const_here.mat');


n = 1e24;
m_eff = 0.067*m0;

E_f = FermiEnergy(n,m_eff);
T_f = E_f/k;
steps = 100;
count = 1000;
%count = 10000;
T = linspace(0.1, 1.2*T_f, steps);

%AnalyticalPart
%mu_2 = mu_analytical_2nd(T,m_eff,n);
%mu_4 = mu_analytical_4thbar(T,m_eff,n);




%NumericaPart
i = 1;
for t = linspace(0.1,1.2*T_f,steps)
mu_2(i) = E_f-pi^2/12.*(k*t).^2./(E_f);
mu_4(i)= E_f-pi^2/12.*(k*t).^2./(E_f)-(7*pi^4)/(960)*(k.*t).^4./
(E_f).^3;

mu_min=k*t*log(n/2*((2*pi*hbar^2)/(m_eff.*k.*t))^(3/2));
mu=linspace(mu_min,E_f,count);

E_max=15*k*t+E_f;
E=linspace(0,E_max,count)';
MU=repmat(mu,count,1);
EB=repmat(E,1,count);
delta=E(2)-E(1); %no matter which E(i) - E(i-1) was taken for this

g_part=(sqrt(2*m_eff)*m_eff)/(pi^2*hbar^3);
F=g_part*(sqrt(EB)./(1+exp((EB-MU)/(k*t))));
N=sum(F)*delta;

[demp,indicator]=min(abs((N-n)/n));
mu_numeric(i)=mu(indicator);
i=i+1;
end
%Plotting part
plot_mu(T,mu_numeric,mu_2,mu_4,E_f,steps);

T= 300;
n = 1e24;
solving300K(T,n,m_eff,count);
```

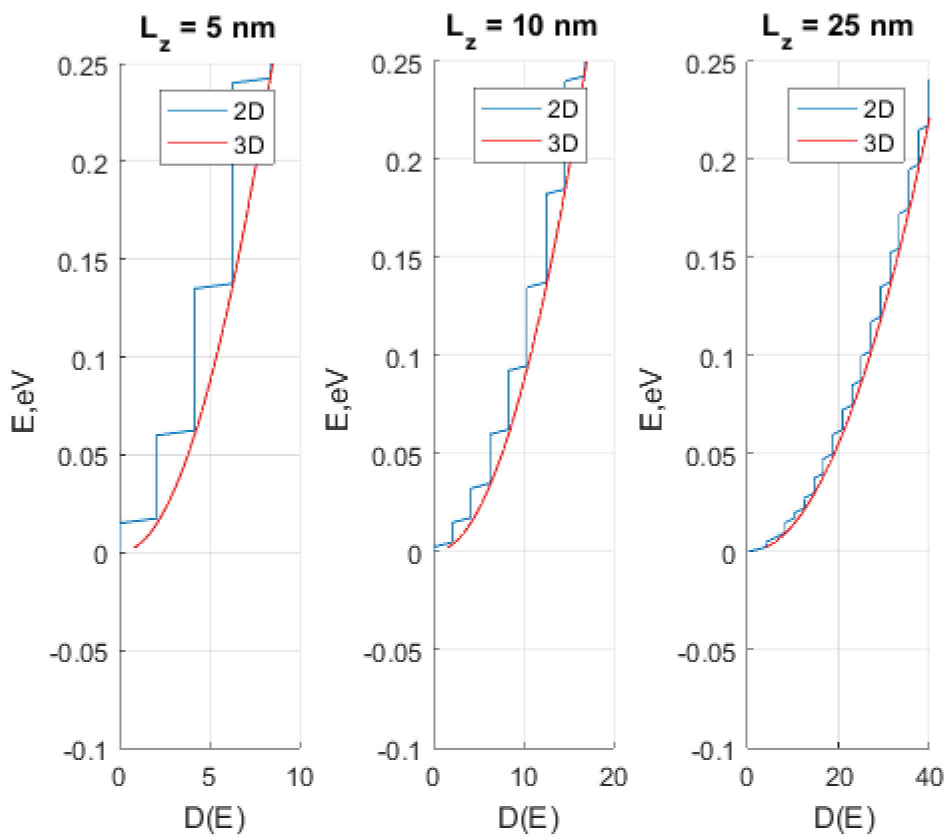
```
Analytical Solving for mu 2nd = 0.04438496 eV
Analytical Solving for mu 4th = 0.04241452 eV
Numerical Solving mu = 0.05410197 eV
```



Published with MATLAB® R2016a

```
clc
clear all

hbar=1.055e-34;
m=9.110e-31;
e=1.602e-19;
L=1e-9;


Lz1=5e-9;
E0_1=(hbar^2)*(pi^2)/(2*m*Lz1^2);
E0_1 = E0_1/e;
D_2d_1=zeros(1,101);
for p=1:25
E=linspace(0,0.25,101);
thet=(E+abs(E))./(2*E);
EE=E-(p*p*E0_1);
theta=(EE+abs(EE))./(2*EE);
D_2d_1=D_2d_1+((L^2)*e*m*theta./(2*pi*hbar^2));
D_max_3D_1=(L^3)*e*m*thet.*real((2*m*E*e).^0.5)./(2*pi^2*hbar^3);
end


clear thet
clear theta
Lz2=10e-9;
E0_2=(hbar^2)*(pi^2)/(2*m*Lz2^2);
E0_2 = E0_2/e;
D_2d_2=zeros(1,101);
for p=1:25
E=linspace(0,0.25,101);
thet=(E+abs(E))./(2*E);
EE=E-(p*p*E0_2);
theta=(EE+abs(EE))./(2*EE);
D_2d_2=D_2d_2+((L^2)*e*m*theta./(2*pi*hbar^2));
D_max_3D_2=(L^3)*e*m*thet.*real((2*m*E*e).^0.5)./(2*pi^2*hbar^3);
end

clear thet
clear theta
Lz3=25e-9;
E0_3=(hbar^2)*(pi^2)/(2*m*Lz3^2);
E0_3 = E0_3/e;
D_2d_3=zeros(1,101);
for p=1:25
E=linspace(0,0.25,101);
thet=(E+abs(E))./(2*E);
EE=E-(p*p*E0_3);
theta=(EE+abs(EE))./(2*EE);
D_2d_3=D_2d_3+((L^2)*e*m*theta./(2*pi*hbar^2));
D_max_3D_3=(L^3)*e*m*thet.*real((2*m*E*e).^0.5)./(2*pi^2*hbar^3);
end
```

```
subplot(1,3,1)
hold on
plot(D_2d_1,E);
plot(D_max_3D_1.*Lz1/L,E,'r');
axis([0 10 -0.1 0.25]);
legend('2D','3D');
xlabel(' D(E)')
ylabel(' E,eV')
grid on
title('L_z = 5 nm')

subplot(1,3,2)
hold on
plot(D_2d_2,E);
plot(D_max_3D_2.*Lz2/L,E,'r');
axis([0 20 -0.1 0.25]);
legend('2D','3D');
xlabel(' D(E)')
ylabel(' E,eV')
grid on
title('L_z = 10 nm')

subplot(1,3,3)
hold on
plot(D_2d_3,E);
plot(D_max_3D_3.*Lz3/L,E,'r');
axis([0 40 -0.1 0.25]);
legend('2D','3D');
xlabel(' D(E)')
ylabel(' E,eV')
grid on
title('L_z = 25 nm')
```



Published with MATLAB® R2016a