

大作业：能带计算

题目：利用特征根求解的方法计算上半余弦势场对应的**简约布里渊区图景**下的能带曲线并与近自由电子近似得到的带隙和布里渊附近($\Delta k = \pm \frac{1}{10} \cdot \frac{2\pi}{a}$)的能带曲线进行对比。

已知：晶格常数 $a=5.43$ 埃, 电子质量 $m_0=9.1\text{e-}31$ kg , 普朗克常数 $h=6.63\text{e-}34$ Js

势场为：

$$V(x) = \begin{cases} 1 \times 10^{-19} \text{ J} \cdot \cos \frac{2\pi}{a} x, & -\frac{\pi}{2} \leq \frac{2\pi}{a} x \leq \frac{\pi}{2} \\ 0, & -\pi \leq \frac{2\pi}{a} x \leq -\frac{\pi}{2} \text{ and } \frac{\pi}{2} \leq \frac{2\pi}{a} x \leq \pi \end{cases}$$

要求：

(1)画出势能分布曲线

(2)至少画出前4条能带并对比带隙和能带曲线