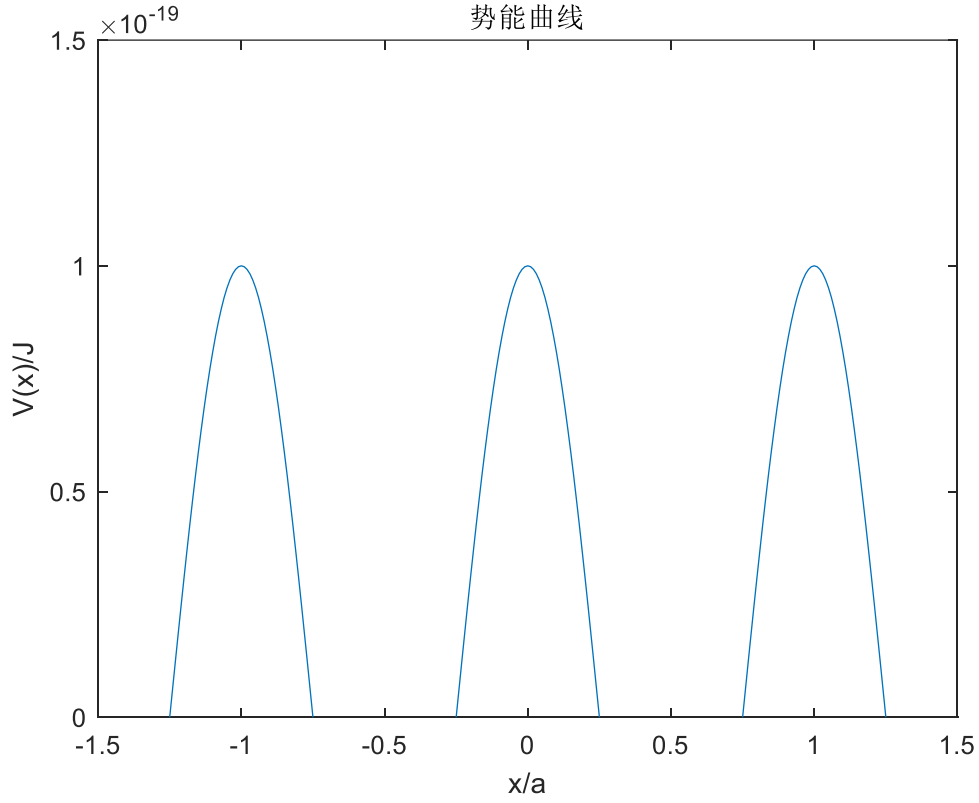


固体物理大作业

张子扬 无 06 2020010790

势能分布曲线（三个周期）



简约布里渊区图景

下面分别使用特征根法和近自由电子近似两种方法求解该势场对应的简约布里渊区图景，并对比带隙和能带曲线。

特征根法

在这部分中，采用特征根法，对自由电子 $E - k$ 关系进行求解，具体如下。

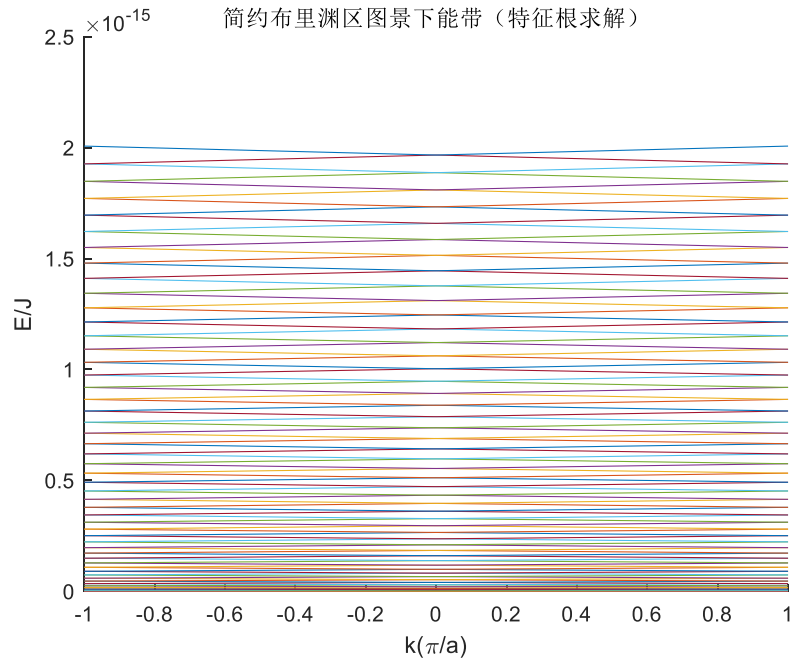
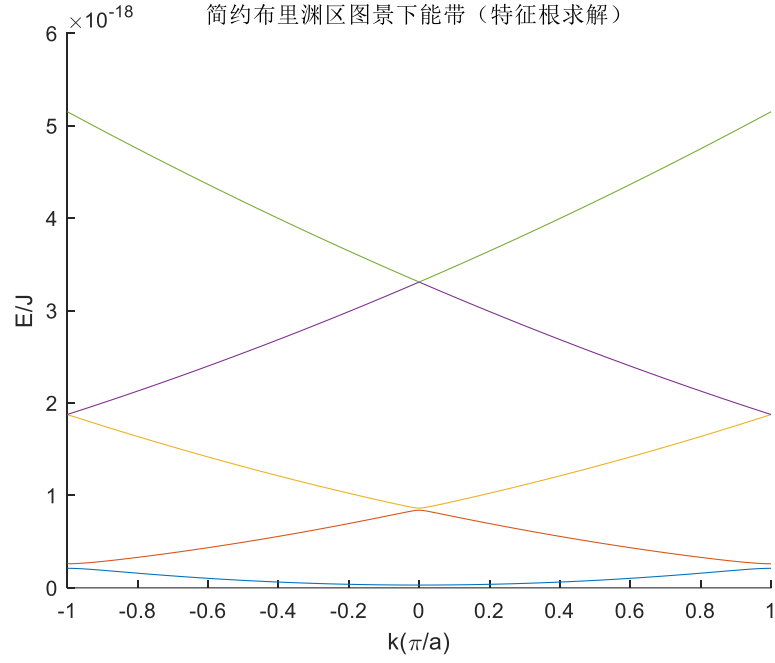
(1) 求解势场的傅里叶级数 V ，截断到 $[-m, m]$ 阶。

(2) 遍历 $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ ，在每一个 k 下构造 n 阶矩阵。

$$\begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_{-1} & \frac{(\frac{h}{2\pi})^2}{2m_0} (k - \frac{2\pi}{a})^2 + V_0 & V_1 & \dots & \dots \\ \dots & V_{-1} & \frac{(\frac{h}{2\pi})^2}{2m_0} k^2 + V_0 & V_1 & \dots \\ \dots & \dots & V_{-1} & \frac{(\frac{h}{2\pi})^2}{2m_0} (k + \frac{2\pi}{a})^2 + V_0 & V_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

(3) 求解其特征值 E 。

本次实验的最大创新点在于可以通过设置 `n_size` 的大小求解任意个能带。下面简单展示求解 5 条能带和求解 99 条能带的图像。



近自由电子近似

在这部分中，采用近自由电子近似，对自由电子 $E - k$ 关系进行修正，具体如下。

(1) 布里渊区边界处，即 $k = n\pi/a$ ，利用简并微扰论进行修正，能级发生劈裂

$$E_{\pm} = E_0 \pm |V_n|$$

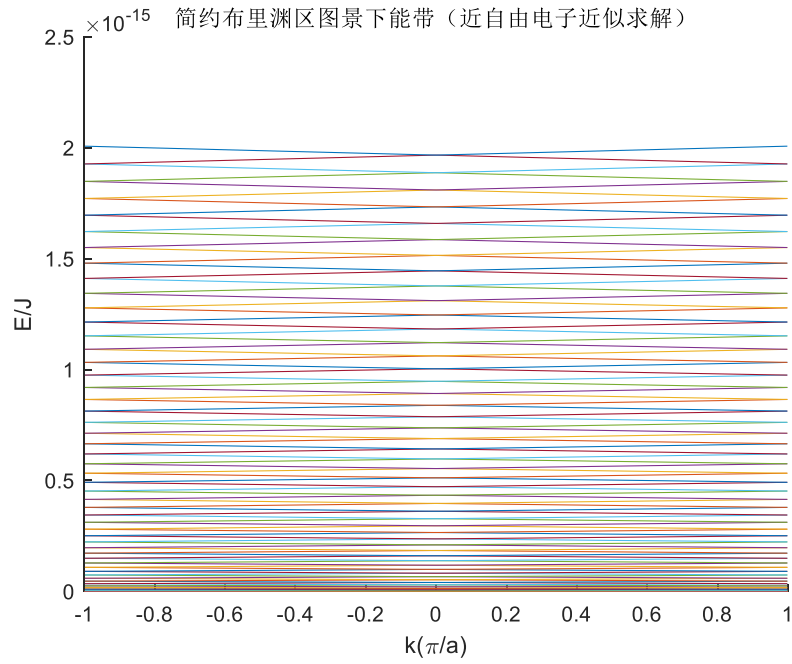
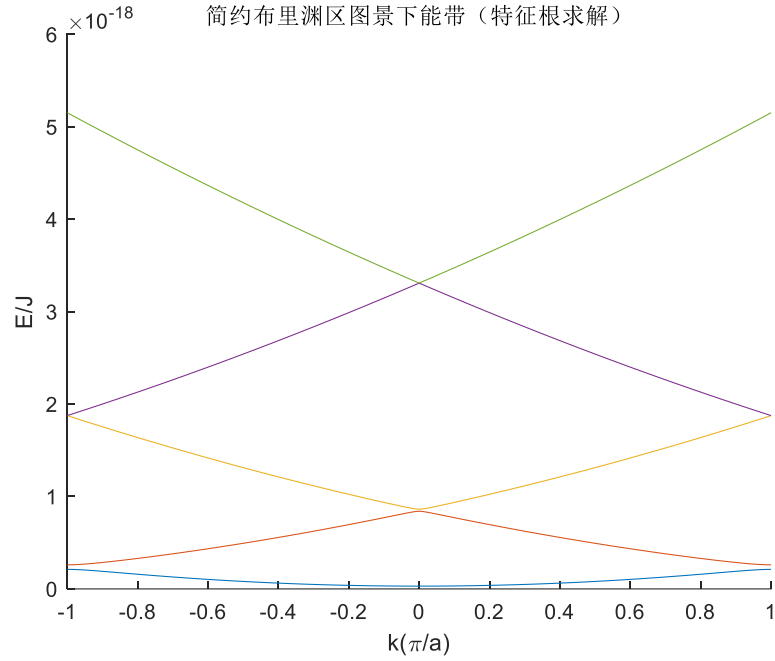
(2) 在布里渊区边界附近时，利用简并微扰论进行修正

$$E = \frac{1}{2} \left\{ (E_k^{(0)} + E_{k'}^{(0)}) \pm \left[(E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)})^2 + 4V_n^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

(3) 在距离布里渊区较远时, 用非简并微扰论进行修正, 只进行二阶修正, 如下式。

$$E_{k(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|V_n|^2}{\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[k^2 - \left(k + \frac{2\pi}{a} n \right)^2 \right]}$$

由此, 得到的基于近自由电子近似的简约布里渊区图景下的能带曲线如下。



带隙的比较

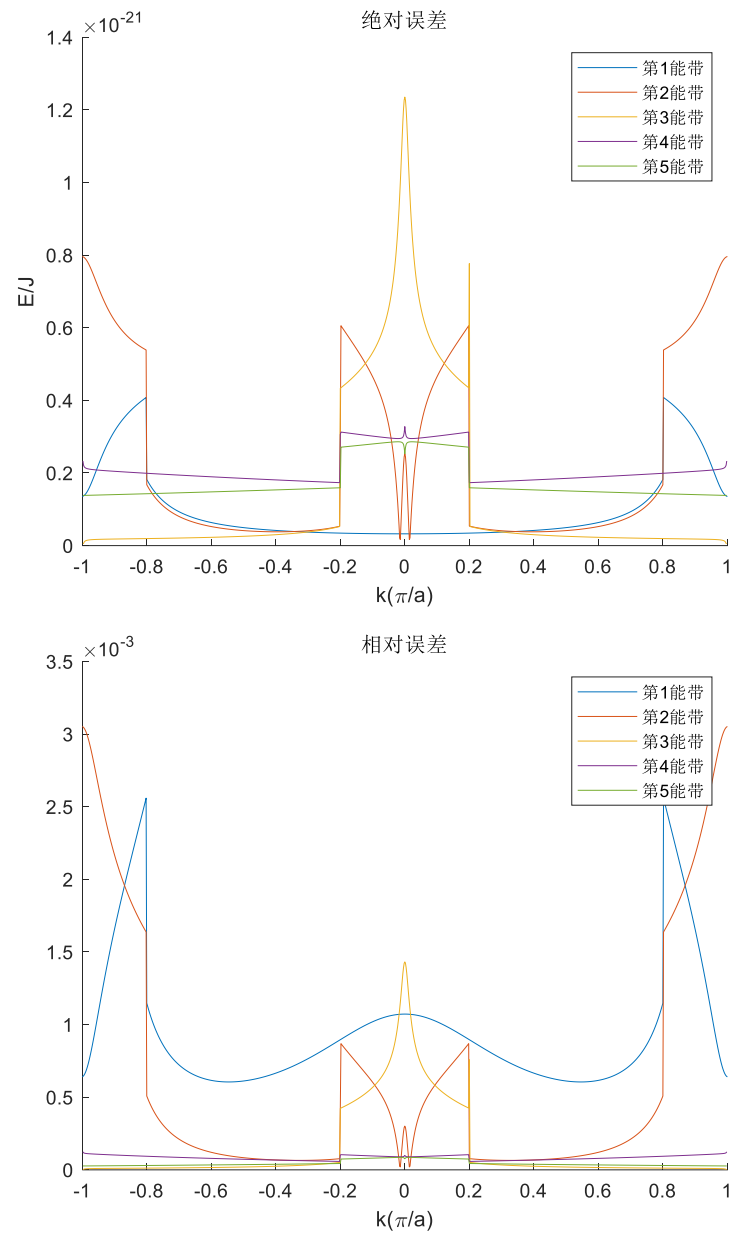
以 $n_size=5$ 为例比较特征根法和近自由电子近似法所得到的的结果。

带隙编号	1	2	3	4
特征根(J)	4.933929e-20	2.270891e-20	7.187846e-22	4.169385e-21
近自由电子近似(J)	5.000000e-20	2.122066e-20	4.913974e-21	4.244132e-21

可以看出两者的带隙差距不大，主要的差距出现在第 3 个带隙，相差大约一个数量级。

绝对误差与相对误差

比较两者的绝对误差与相对误差如下。



由以上两图可得，在布里渊区边界处，两者的误差较大，而在距离布里渊区边界较远处两者差距较小，这也体现了近自由电子近似中，微扰修正主要发生在布里渊区边界附近。但整体上可以看出，两者的相对误差较小，所以近自由电子近似的精确度也是可以接受的。

总结

此次实验的主要创新点在于编写可以求解任意条能带数量的特征根法函数和近自由电子近似函数。事实上，特征根法和近自由电子近似两个函数还支持传入任意形式的势能函数、设置 $E - k$ 关系的求解精度，具体可以参考代码中的注释。通过此次试验，我熟悉了 `syms` 库和特征根求解等函数的使用，也对特征根法的实现和近自由电子近似中具体的微扰调整有了更加清晰的理解。

文件清单如下。

my_eig.m	使用特征根法求解 E-k 关系
appro.m	使用近自由电子近似求解 E-k 关系
main.m	主函数，调用另外两个函数求解并作图