

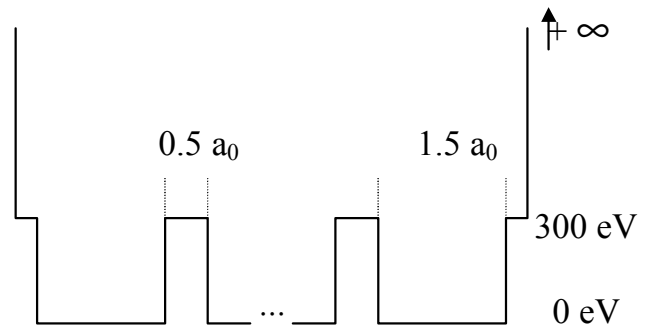
## Projekt nr C.6.3

# Stany elektronowe w jednowymiarowej sieci krystalicznej

## Wprowadzenie

### Fizyka

Niniejszy projekt opiera się na prostym modelowym podejściu do problemu własności elektronów w sieci krystalicznej. Rozważamy elektron w jednowymiarowym kryształ, którego potencjał modelujemy za pomocą dziesięciu skończonych prostokątnych studni potencjału, rozdzielonych barierami o wysokości 300 eV. Szerokość obszaru studni potencjału wynosi  $1.5 a_0$ , szerokość bariery -  $0.5 a_0$ . Cały układ zamknięty jest w studni potencjału o nieskończenie wysokich ścianach (Rys.1). Celem ćwiczenia jest znalezienie kilkudziesięciu najniższych poziomów energetycznych i odpowiadających im funkcji falowych dla elektronu znajdującego się w takim jednowymiarowym kryształ.



Rys. 1.

Hamiltonian elektronu w kryształ ma postać:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \quad (1)$$

gdzie  $V(x)$  jest energią potencjalną zobrazowaną na Rys. 1, a odpowiednie równanie własne:

$$H\psi(x) = \epsilon\psi(x) \quad (2)$$

które w postaci bezwymiarowej można zapisać jako:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = [U(x) - E]\psi(x) \quad (3)$$

gdzie jednostką długości jest promień Bohra  $a_0$ , a energia elektronu  $\epsilon$ , mierzona zwykle w eV, została w równaniu (3) zastąpiona przez bezwymiarową dodatnią liczbę  $E$ , zdefiniowaną jako:

$$E \equiv \left( \frac{2ma_0^2}{\hbar^2} \times 1\text{eV} \right) \frac{\epsilon}{\text{eV}} = 0.07357 \frac{\epsilon}{\text{eV}} \quad (4)$$

Bezwymiarowa energia potencjalna  $U$  jest związana poprzez ten sam czynnik z energią potencjalną  $V(x)$  w równaniu (1):

$$U(x) \equiv 0.07357 \frac{V(x)}{eV} \quad (5)$$

## Numeryka

*Poniżej podajemy schemat numerycznego rozwiązywania równania (3).*

Jeżeli wartość  $E$  jest znana, to równanie (3) jest zwyczajnym równaniem różniczkowym drugiego stopnia, które można rozwiązać numerycznie korzystając z różnicowej aproksymacji drugiej pochodnej. Korzystamy przy tym z warunków brzegowych na końcach rozważanego obszaru. Z tego, że potencjał na końcach sieci krystalicznej został przyjęty jako nieskończony (nieprzenikliwe ścianki pudła), wynikają następujące warunki brzegowe dla funkcji falowej:

$$\psi(x=0) = \psi(x=20) = 0 \quad (\text{rozmiar naszego kryształu} = 10 \times a_0 = 20 a_0). \quad (6)$$

Metoda różnicowa dla równania (3) o znanej wartości  $E$  wygląda następująco:

1. definiujemy siatkę węzłów dla zmiennej  $x$  (zadając wielkość kroku  $h$ );
2. drugą pochodną w równaniu (3) zastępujemy odpowiednim przybliżeniem różnicowym (można przebadać różne przybliżenia o różnej dokładności);
3. równanie (3) przyjmuje postać formuły rekurencyjnej, np. wyrażającej wartość  $\psi(x_{i+2})$  za pomocą  $\psi(x_i)$  oraz  $\psi(x_{i+1})$ ;
4. kładziemy  $\psi(x_0) = 0$  i rozwiązujemy równanie (3) krok po kroku jak zwykle równanie algebraiczne;
5. równanie różniczkowe posiada jednoznacznie określone rozwiązania, jeżeli np. w jednym punkcie na brzegu obszaru zadamy wartości dwóch parametrów: wartość funkcji i jej pierwszej pochodnej. W równaniu jednorodnym (a z takim mamy tu do czynienia) drugi parametr ma wpływ wyłącznie na unormowanie rozwiązania i wobec tego możemy go przyjąć dość dowolnie; rozsądną brzegową pierwszą pochodną jest 1 (co odpowiada to położeniu  $\psi(x_1) = h$ ).
6. rozwiązujemy równanie krok po kroku od  $x_1 = 0$  do  $x_N = 20$ . Jako wynik otrzymujemy szukaną funkcję  $\psi(x)$  określoną na sieci węzłów.

Jeżeli energia  $E$  nie jest znana, to stosujemy metodę “prób i błędów” (“shooting”), zgodnie z którą:

1. przyjmujemy (zgadujemy) pewną wartość  $E$ ;
2. dla tej wartości  $E$  rozwiązujemy równanie (3) metodą podaną powyżej;
3. sprawdzamy warunek brzegowy na prawym brzegu obszaru. Jeżeli  $\psi(x_N = 20) = 0$ , to  $E$  jest energią stanu kwantowego elektronu. Jeżeli nie, to zmieniamy wartość  $E$  zgodnie z pewną procedurą poszukiwawczą (np. bisekcja, reguła fałsi, itp.) i wracamy do punktu (2). Tę pętlę iteracyjną powtarzamy aż do uzyskania poprawnej wartości funkcji falowej na prawym brzegu obszaru.

## Zadania do wykonania

1. Wyznaczyć  $n = 50$  najniższych poziomów energetycznych elektronu. Wyniki przedstawić na wykresie  $E(n)$ . Poziomy powinny ułożyć się w wyraźne pasma.
2. Jeżeli położymy wysokość barier pomiędzy studniami równą zero, otrzymamy pojedynczą prostokątną, nieskończoną studnię potencjału o szerokości  $20a_0$ . Wyznaczyć numerycznie zależność  $E(n)$  dla elektronu w tym przypadku i porównać otrzymany wynik ze wzorem analitycznym (przypomnienie z ćwiczeń z zakresu mechaniki kwantowej). Sporządzić odpowiedni wykres i porównać z wykresem z punktu (1).
3. Przygotować moduł graficzny, pozwalający na obserwację na ekranie funkcji falowych dla wybranych stanów elektronu.
4. Wprowadzić „defekt” do kryształu, np. zmniejszając szerokość jednej ze studni o 25%. Wyznaczyć zmienione funkcje falowe i poziomy energetyczne elektronu. Zaobserwować pojawiający się poziom energetyczny w przerwie wzbronionej. Jak wygląda odpowiadająca mu funkcja falowa?
5. Umieścić kryształ w zewnętrznym statycznym jednorodnym polu elektrycznym, dodając do energii potencjalnej  $V(x)$  funkcję liniową taką, że, np.

$$\begin{aligned} V(x=0) &\rightarrow V(x=0) - 20\text{eV} \\ V(x=20) &\rightarrow V(x=20) + 20\text{eV} \end{aligned}$$

Wyznaczyć zmienione energie i funkcje falowe elektronu. W szczególności zwrócić uwagę na funkcje falowe elektronu odpowiadające minimum i maksimum pasma energetycznego.

## Literatura