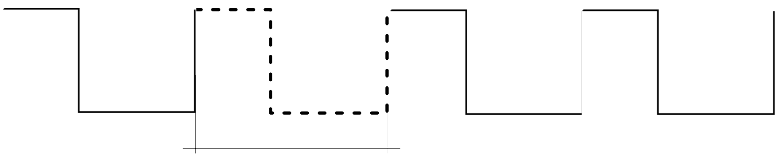
Projekt nr C.6.7

Stany stacjonarne cząstki w potencjale o symetrii translacyjnej

Wprowadzenie

Cząstka porusza się w jednowymiarowym krysztale, to jest w jednowymiarowej przestrzeni, w której określony jest potencjał o symetrii translacyjnej $V(x+a)=V(x)$, gdzie a jest stałą sieci kryształu (patrz rysunek)
Równanie własne hamiltonianu cząstki ma postać



Rys. 1. Potencjał o symetrii translacyjnej, linią przerywaną zaznaczono potencjał w pojedynczej komórce elementarnej, a jest stałą sieci.

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x). \tag{1}$$

Zgodnie z twierdzeniem Blocha funkcje własne (1) można przedstawić w postaci

$$\psi_{k,n}(x)=\exp(ikx)u_{k,n}(x), \tag{2}$$

gdzie $u_{k,n}$, tzw. *czynnik Blocha*, jest funkcją okresową o okresie a

$$u_{k,n}(x+a)=u_{k,n}(x), \tag{3}$$

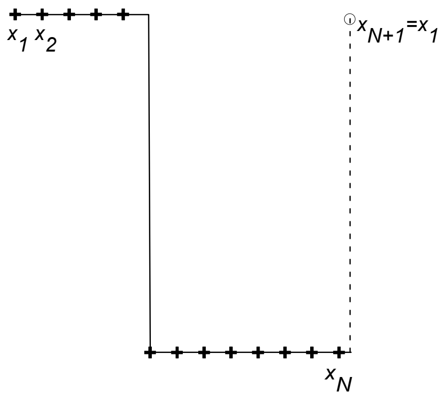
k jest wektorem falowym a n numeruje stany dla danego k względem ich energii. Liczbę kwantową n będziemy nazywać *numerem pasma.* Załóżmy, że kryształ składa się z M identycznych komórek elementarnych. Narzucenie periodycznego warunku brzegowego dla kryształu

$$\psi_{k,n}(x+Ma)=\psi_{k,n}(x) \tag{4}$$

prowadzi do kwantyzacji wektora falowego $k=\frac{2\pi}{Ma}l$, gdzie l jest liczbą całkowitą która w zasadzie jest dowolna, my jednak będziemy ją wybierać z domkniętego przedziału $[-M/2, M/2]$. W ten sposób wektor falowy k będzie leżał w tzw. *pierwszej strefie Brillouina* $[-\pi/a,\pi/a]$ (dla innych wartości l dostaniemy i tak jedno z rozwiązań z pierwszej strefy Brillouina). Wstawiając (2) do (1) otrzymujemy równanie Schroedingera dla czynnika Blocha

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}-ik\frac{d}{dx}+V(x)+\frac{1}{2}k^2\right]u_{k,n}(x)=E_{k,n}u_{k,n}(x). \tag{5}$$

Równanie (5) należy rozwiązać w pojedynczej komórce elementarnej przy narzuceniu periodycznego warunku brzegowego na czynnik Blocha (3). W pojedynczej komórce elementarnej rozpinamy siatkę N punktów o współrzędnych $x_j=(j-1)dx$, gdzie $dx=a/(N-1)$, a $j=1,2,...,N$. Przez V_j oznaczamy $V(x_j)$.



Rys. 2 Potencjał i siatka punktów w pojedynczej komórce elementarnej oraz periodyczny warunek brzegowy.

Periodyczne warunki dla czynnika Blocha wprowadzimy identyfikując punkt o numerze $N+1$ z punktem pierwszym (por. Rys. 2). Wartość czynnika Blocha w punkcie x_j oznaczymy przez $u_{k,n,j}$, w skrócie przez u_j. Zastępując pochodne w równaniu (5) przez ilorazy różnicowe ($\frac{d^2u}{dx^2}=\frac{u_{j+1}+u_{j-1}-2u_j}{dx^2}, \frac{du}{dx}=\frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2dx}$) dostajemy równanie różnicowe

$$bu_{j-1}+c_j u_j+b^* u_{j+1}=Eu_j, \tag{6}$$

gdzie $b=\left(-\frac{1}{2dx^2}+\frac{ik}{dx}\right)$ oraz $c_j=\left(\frac{1}{dx^2}+V_j+\frac{1}{2}k^2\right)$.

Równanie (6) z warunkiem brzegowym (3) można przedstawić w formie macierzowego równania własnego

$$\mathbf{H}\mathbf{u}=E\mathbf{u}, \tag{7}$$

gdzie **H** jest hermitowską macierzą Hamiltona o rozmiarze N na N, która posiada elementy niezerowe jedynie w $\mathbf{H}_{1N}$, $\mathbf{H}_{N1}$, oraz na diagonali, pod- i naddiagonali. Niezerowe elementy macierzowe **H** są następujące $\mathbf{H}_{jj}=c_j$, $\mathrm{H}_{j(j+1)}=b^*$, $\mathbf{H}_{(j+1)j}=b$, $\mathbf{H}_{1N}=b$, $\mathbf{H}_{N1}=b^*$. Rozwiązanie równania (7) dla danego k da N wartości własnych energii, z których każda przynależeć będzie do innego pasma. Dla każdej wartości własnej energii dostaniemy wektor wartości czynnika Blocha $u_{k,n}$ w węzłach siatki.

Zadania do wykonania

Przyjąć stałą sieci a=2, oraz M=10 lub 20. Przyjąć potencjał $V(x)$ w formie układu studni i barier, przedstawionej na rysunkach 1 i 2. Niech ¾ długości komórki elementarnej przypada na studnię, a reszta na barierę. Niech wartość potencjału w studni będzie równa 0, a wysokość bariery oznaczymy przez W.

1) Przygotować program rysujący osiem najniższych pasm, czyli widmo energii równania (7) w funkcji k dla k z pierwszej strefy Brillouina.
2) Zbadać dla jak dużego N wyniki przestają zależeć od liczby oczek siatki.
3) Zbadać krzywiznę pasm i szerokość przerw energetycznych w funkcji W, dla kilku wartości W z przedziału od 0 do 300.
4) Sprawdzić periodyczność czynnika Blocha. Jak wygląda gęstość prawdopodobieństwa związana z funkcją falowa (4) dla różnych pasm?
5) Jak się ona zmienia w ramach jednego pasma. Jak zmiany te zależą od W?

Literatura

C. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego