

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

**М.В. Денисенко
А.С. Деробенко
С.М. Кашин
А.М. Сатанин**

**ВЫЧИСЛЕНИЕ БЛОХОВСКИХ ФУНКЦИЙ
ЭЛЕКТРОНА В ОДНОМЕРНОМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ
ПОТЕНЦИАЛЕ**

Учебно-методическое пособие

Рекомендовано методической комиссией физического факультета для студентов ННГУ, обучающихся по направлениям подготовки 010700 «Физика», 210600 «Нанотехнология», 210100 «Электроника и микроэлектроника», специальностям 010701 «Физика», 210601 «Нанотехнология», 010803 «Микроэлектроника и полупроводниковые приборы»

Нижний Новгород
2010

Аннотация к методической работе: **«ВЫЧИСЛЕНИЕ БЛОХОВСКИХ ФУНКЦИЙ ЭЛЕКТРОНА В ОДНОМЕРНОМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ»**; авторы: Денисенко М.В., Деробенко А.С., Кашин С.М., Сатанин А.М.

Пособие посвящено изложению оригинального метода численного решения уравнения Шредингера для электрона, движущегося в одномерном периодическом потенциале. Суть метода состоит в сведении расчета блоховской функции и дисперсионных кривых к задаче рассеяния на элементарной ячейке, которая решается с использованием устойчивой численной процедуры. Приведен алгоритм и программа численного расчета, которая тестируется на примере точно решаемой модели.

Данное пособие предназначено для студентов старших курсов физического факультета ННГУ, обучающихся по направлениям подготовки 010700 «Физика», 210600 «Нанотехнология», 210100 «Электроника и микроэлектроника», специальностям 010701 «Физика», 210601 «Нанотехнология», 010803 «Микроэлектроника и полупроводниковые приборы» и специализирующихся в области физики наноструктур.

Рецензент: доцент, к.ф.м.н. **В.В. Карзанов**

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1. Общие представления об электронной теории твердых тел	4
2. Теорема Блоха	6
3. Зоны Бриллюэна	8
4. Метод вычисления блоховских функций и зонного спектра	12
5. Модель Кронига–Пенни	18
6. Алгоритм отыскания зонного спектра	24
7. Численный алгоритм	26
8. Программа в среде <i>Mathematica</i>	26
Заключение	30
Литература	30

Введение

Как известно, твердые тела – металлы и полупроводники – представляют собой многочастичные системы: в них электроны движутся в поле ядер и взаимодействуют друг с другом. Однако часто можно оправдать приближение самосогласованного поля, согласно которому движение выделенного электрона можно рассматривать в сглаженном поле других частиц. В этом случае применимо одноэлектронное приближение, а для расчета волновой функции электрона можно использовать одночастичное приближение, когда потенциал определяется периодической плотностью зарядов – периодической функцией. Согласно теореме Блоха состояние электронов с энергией, принадлежащей разрешенной зоне, описываются блоховской волновой функцией, представляющей собой произведение периодической функции на плоскую волну. Аналитический расчет блоховских функций возможен только для определенного класса модельных потенциалов, поэтому необходимо использовать численные методы для получения результатов.

Цель данной работы: разработать простой численный метод расчета блоховских функций и нахождения зонного спектра электрона в одномерном периодическом потенциале.

1. Общие представления об электронной теории твердых тел

Уравнения Шредингера для системы многих частиц включает кинетическую энергию всех электронов и ядер, потенциальную энергию взаимодействия электронов, ядер и электронов с ядрами. Понятно, что в общем виде решение такого уравнения не представляется возможным, поскольку оно содержит слишком много переменных. Поэтому задачи, связанные с поведением электронов в кристалле, решаются при некоторых упрощающих приближениях, правдоподобность которых определяется конкретными свойствами кристалла. Подобный путь решения приводит к зонной теории твердого тела.

Кратко рассмотрим несколько основных используемых приближений.

Адиабатическое приближение. Известно, что скорости электронов в кристаллах приблизительно на два порядка больше, чем скорости ядер, поэтому для любой, даже неравновесной конфигурации ядер, всегда будет устанавливаться соответствующее ей электронное равновесие. По этой причине движением ядер можно пренебречь и считать их неподвижными. В этом представлении исключается обмен энергией между электронной и ядерной системами, поэтому приближение называется адиабатическим. Естественно, что в адиабатическом приближении нельзя рассматривать такие явления, как диффузия, ионная проводимость и др., связанные с движением атомов или ионов.

Валентное приближение. Электроны атомов в кристалле можно разделить на внутренние и внешние (валентные). Внутренние электроны сильно связаны с ядром, они формируют так называемый остов атома (core). Взаимодействие

Одноэлектронное приближение. В этом приближении вместо взаимодействия данного электрона с остальными электронами и ядрами по отдельности рассматривают его движение в некотором результирующем усредненном поле остальных электронов и ядер. Такое поле называют *самосогласованным*. В одноэлектронном приближении, таким образом, задача сводится к независимому описанию каждого электрона в среднем внешнем поле с потенциальной энергией $V(\vec{r})$. Вид функции $V(\vec{r})$ определяется свойствами симметрии кристалла. Основное свойство самосогласованного поля заключается в том, что оно имеет тот же период, что и поле ядер.

Аналитическое решение одноэлектронного уравнения Шредингера также невозможно получить в общем виде для произвольного потенциала $V(\vec{r})$. Здесь необходимо сделать дополнительные предположения. Часто используют следующие приближения:

1) *Приближение слабой связи.* В этом приближении электроны в кристалле рассматривают как почти свободные частицы, на движение которых оказывает слабое возмущение поле кристаллической решетки. Данное допущение применимо, когда потенциальная энергия взаимодействия электрона с решеткой много меньше его кинетической энергии. Такой подход, который иногда называют "приближением почти свободных электронов", позволяет получить решение некоторых задач, связанных с поведением валентных электронов в металлах.

2) *Приближение сильной связи.* В этом приближении состояние электрона в кристалле мало отличается от его состояния в изолированном атоме. Приближение сильной связи применимо, когда потенциальная энергия электрона значительно больше его кинетической энергии. Этот метод применим чаще всего в полупроводниках для анализа их физических свойств.

Рассмотрим немного подробнее одноэлектронное приближение. Исходя из качественных соображений, можно примерно представить вид типичного кристаллического потенциала: вблизи иона он должен напоминать потенциал отдельного атома и выравниваться в области между ионами (Рис.1.1).

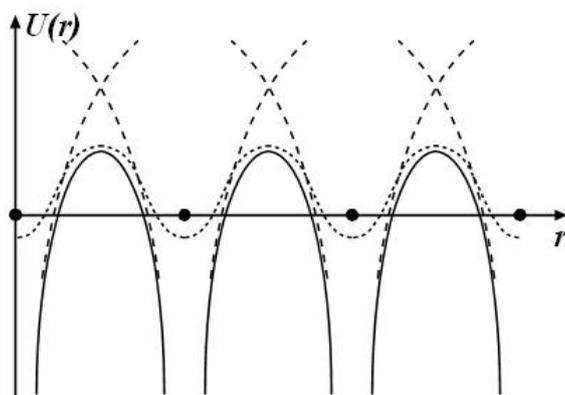


Рис. 1.1 Типичный кристаллический периодический потенциал, изображенный вдоль линии местонахождения ионов и вдоль линии, проходящей посередине между плоскостями ионов. Черные кружки — равновесные положения ионов, сплошные кривые — потенциал вдоль линии ионов, точечная кривая — потенциал вдоль линии между плоскостями ионов, а штриховые кривые — потенциал отдельных изолированных ионов.

Итак, нам необходимо изучить те общие свойства одноэлектронного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi = \varepsilon\psi, \quad (1.1)$$

которые обусловлены периодичностью потенциала $V(\vec{r})$.

Независимые электроны, каждый из которых подчиняется одноэлектронному уравнению Шредингера с периодическим потенциалом, называют *блоховскими* (в отличие от «свободных», к которым блоховские электроны сводятся, если периодический потенциал тождественно равен нулю). Из периодичности потенциала $V(\vec{r})$ вытекает одно очень важное свойство стационарных состояний блоховских электронов.

2. Теорема Блоха

Феликс Блох в 1928 году [1] доказал замечательную теорему, которая лежит в основе одноэлектронной теории твердых тел [2-6]. Согласно теореме Блоха, волновые функции, являющиеся решениями одноэлектронного уравнения Шредингера (1.1) с периодическим потенциалом, имеющим период решетки, представляют собой плоские волны, модулированные периодической функцией, то есть



Феликс Блох (1905-1983) – один из основоположников современной физики. Лауреат Нобелевской премии по физике за создание теории ядерного магнитного резонанса (1952).

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}. \quad (2.1)$$

Здесь $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ некоторая периодическая функция с периодом решетки, зависящая от величины квазиволнового вектора \vec{k} , характеризующего квантовое состояние электрона в кристалле. Ниже, для полноты изложения и введения необходимых понятий, мы приведем доказательство теоремы Блоха (в основном следуя [3]).

Запишем условия периодичности потенциальной энергии электрона в кристалле:

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{n}), \quad (2.2)$$

где вектор \vec{n} :

$$\vec{n} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}. \quad (2.3)$$

В (2.3) \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} – векторы единичных трансляций; n_1 , n_2 , n_3 – произвольные числа. При смещении кристалла на вектор \vec{n} он совмещается сам с собой. Из условия трансляционной симметрии следует, что волновая функция электрона $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ отличается от волновой функции $\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n})$ некоторым постоянным множителем, т. е.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = C \psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.4)$$

Из условия нормировки следует, что

$$|C|^2 = 1. \quad (2.5)$$

Условию (2.5) можно удовлетворить, если положить

$$C = e^{i\vec{k}\vec{n}}. \quad (2.6)$$

Действительно,

$$|C|^2 = |e^{i\vec{k}\vec{n}}|^2 = 1.$$

Естественно, что показатель степени экспоненты должен быть безразмерной величиной. Поскольку \vec{n} имеет размерность длины, \vec{k} должен иметь размерность, обратную длине, т. е. см^{-1} .

Модуль вектора \vec{k} называется квазиволновым числом:

$$|\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (2.7)$$

С учетом (2.6) перепишем (2.4) в виде

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = e^{i\vec{k}\vec{n}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.8)$$

или

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\vec{n}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (2.9)$$

здесь через $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ обозначена функция

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}(\vec{n}+\vec{r})} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}), \quad (2.10)$$

являющаяся периодической с периодом решетки. В силу (2.8) и (2.10) имеем

$$\begin{aligned} u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}') &= e^{-i\vec{k}(\vec{n} + \vec{r} + \vec{n}')} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n} + \vec{n}') = \\ &= e^{-i\vec{k}(\vec{n} + \vec{r} + \vec{n}')} e^{i\vec{k}\vec{n}'} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = e^{-i\vec{k}(\vec{n} + \vec{r})} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Таким образом, действительно, волновая функция электрона в кристалле представляет собой стоячую волну $e^{i\vec{k}\vec{r}}$, модулированную периодической функцией $u_{\vec{k}}(\vec{r})$, имеющей период решетки и зависящей от квазиволнового вектора \vec{k} . Функция $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$, определяемая выражением (2.1), получила название *функции Блоха*. От квазиволнового вектора \vec{k} зависит также и энергия электрона. Конкретный вид этой зависимости может быть найден при решении уравнения Шредингера $\hat{H} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$.

3. Зоны Бриллюэна

Состояние свободно движущегося электрона характеризуется энергией ε и импульсом \vec{p} . При этом

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}. \quad (3.1)$$

Этому электрону соответствует волна де Бройля с длиной

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu}, \quad (3.2)$$

где ν – скорость электрона. Учитывая, что $|\vec{k}| = k = 2\pi/\lambda$, перепишем (3.2) в виде

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (3.3)$$

Видим, что волновой вектор пропорционален импульсу электрона. Энергия свободного электрона связана с \vec{k} соотношением

$$\varepsilon = \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}. \quad (3.4)$$

Если на электрон никакие силы не действуют, то его энергия остается постоянной ($\varepsilon(\vec{k}) = const$). Это означает, что не меняется \vec{k} , и остается постоянным импульс \vec{p} . По существу, это есть законы сохранения энергии и им-

пульса. На электрон, движущийся в кристалле, всегда действует периодическое поле решетки. Энергия этого взаимодействия является периодической функцией координат. Следовательно, энергия и импульс электрона в кристалле изменяются со временем под действием этого поля, т. е. не сохраняются. Однако, пользуясь понятием квазиволнового вектора \vec{k} , введенного для электрона в кристалле, т. е. входящего в функцию Блоха (2.1), можно ввести характеристику, аналогичную импульсу:

$$\vec{P} = \hbar \vec{k}. \quad (3.5)$$

Чтобы подчеркнуть сходство и одновременно отметить отличие фигурирующей в (3.5) величины $\hbar \vec{k}$ от истинного импульса, эту величину называют *квазиимпульсом электрона*. Если какая-либо физическая величина сохраняется, то оператор этой величины коммутирует с оператором Гамильтона. Таким образом, квазиимпульсу \vec{P} должен соответствовать некоторый оператор \hat{P} , коммутирующий с гамильтонианом кристаллической решетки:

$$\left[\hat{P}, \hat{H} \right] = 0. \quad (3.6)$$

Следовательно, можно утверждать, что при движении электрона в периодическом поле решетки собственные функции операторов \hat{P} и \hat{H} должны быть одинаковы, а между их собственными значениями должна быть определенная функциональная связь:

$$\varepsilon = \varepsilon(\hat{P}). \quad (3.7)$$

Это означает, что энергия электрона должна быть функцией квазиимпульса. Ясно, что оператор \hat{P} не может иметь вид обычного оператора импульса $\hat{p} = -i\hbar \nabla$, поскольку он не коммутирует с гамильтонианом решетки

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}):$$

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{p} \hat{H} - \hat{H} \hat{p} \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[i\hbar \nabla \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V(\vec{r}) \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) i\hbar \nabla \right] = -(\nabla V). \quad (3.8)$$

С другой стороны, ясно и то, что между оператором квазиимпульса \hat{P} и оператором импульса должна быть связь. Предположим, что потенциальная энергия решетки становится некоторой константой, т.е. $\nabla V \rightarrow 0$. В этом случае

квазиимпульс тождественно переходит в импульс. Представим оператор квазиимпульса в виде

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla + i\hbar\hat{g}(\vec{r}), \quad (3.9)$$

где $\hat{g}(\vec{r})$ – некоторый оператор, обеспечивающий коммутацию \hat{H} и \hat{P} . Очевидно, что $\hat{g}(\vec{r}) \rightarrow 0$ при $\nabla V \rightarrow 0$. Для отыскания оператора $\hat{g}(\vec{r})$ запишем уравнение:

$$\hat{P}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \vec{P}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (3.10)$$

в которое подставим \hat{P} в виде (3.9), а волновую функцию в виде функции Блоха:

$$\begin{aligned} \hat{P}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= -i\hbar\vec{k}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\vec{r}}(-i\hbar\nabla u_{\vec{k}}(\vec{r}) + i\hbar\hat{g}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})) = \\ &= \hbar\vec{k}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + i\hbar[\hat{g} - \nabla \ln u_{\vec{k}}(\vec{r})]\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = P\psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Отсюда можно записать:

$$\vec{P} = \hbar\vec{k}; \quad \hat{g} \equiv \nabla \ln u_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (3.12)$$

Если $\nabla V \rightarrow 0$, то $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ в функции Блоха (2.1) будет стремиться к некоторой константе. При этом $\hat{g}(\vec{r}) \rightarrow 0$ и квазиимпульс тождественно обращается в обычный импульс.

Волновой вектор электрона в кристалле, в отличие от волнового вектора свободного электрона, неоднозначен. Чтобы показать это, рассмотрим трансляционное условие (2.8), накладываемое на волновую функцию электрона, движущегося в периодическом поле решетки. Это условие не нарушится, если волновой вектор \vec{k} заменить на вектор $\vec{k} + 2\pi\vec{H}$, где $\vec{H} = \hbar\vec{a}^* + \hbar\vec{b}^* + \hbar\vec{c}^*$ – вектор обратной решетки. Действительно,

$$e^{i(\vec{k}+2\pi\vec{H})\vec{n}} = e^{i\vec{k}\vec{n}} e^{i2\pi(\vec{H}\vec{n})} = e^{i\vec{k}\vec{n}}, \quad (3.13)$$

в силу того, что $\vec{H}\vec{n} = m$ и $e^{2\pi im} = 1$. Таким образом, мы приходим к выводу, что состояния, характеризуемые волновым вектором \vec{k} и волновым вектором $\vec{k} + 2\pi\vec{H}$, физически эквивалентны. Следовательно, энергия электронов, находящихся в этих двух состояниях, одинакова. Другими словами, и волновая функция, и энергия электрона в кристалле являются периодическими функциями волнового вектора \vec{k} с периодом $2\pi\vec{H}$ (или квазиимпульса \hat{P} с периодом $2\pi\hbar\vec{H}$).

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k} + 2\pi\vec{H}), \quad (3.14)$$

$$\varepsilon(\vec{P}) = \varepsilon(\vec{P} + 2\pi\hbar\vec{N}). \quad (3.15)$$

Если в \vec{k} – пространстве построить обратную решетку, растянутую в 2π раз, т.е. решетку с векторами $2\pi\vec{a}^*$, $2\pi\vec{b}^*$, $2\pi\vec{c}^*$ то все \vec{k} -пространство можно разделить на области, в которых имеются физически эквивалентные состояния. Эти области называются *зонами Бриллюэна*. Многогранник минимального объема, построенный вокруг начала координат в \vec{k} , содержащий все возможные различные состояния, называется *первой*, или *основной*, *зоной Бриллюэна*. С помощью векторов обратной решетки любую точку \vec{k} можно перевести в первую зону Бриллюэна, которая представляет собой элементарную ячейку Вигнера – Зейтца для обратной решетки, растянутой в 2π раз. Для определения вида первой зоны Бриллюэна нужно построить обратную решетку с параметрами ячейки $2\pi\vec{a}^*$, $2\pi\vec{b}^*$, $2\pi\vec{c}^*$ и построить в ней ячейку Вигнера-Зейтца. Вторая зона Бриллюэна строится аналогичным образом. В обратной решетке, параметры которой увеличены в 2π раз, узел выбранный при построении первой зоны Бриллюэна за начало отсчета соединяют прямыми линиями с ближайшими эквивалентными узлами, но уже лежащими на поверхности второй координационной сферы. Затем, как и при построении первой зоны, строят плоскости, перпендикулярные этим прямым и проходящие через их середину. В результате получают вторую зону Бриллюэна в виде замкнутого многогранника. Третья и последующие зоны строятся таким же образом, используя ближайшие эквивалентные узлы обратной решетки, лежащие на третьей, четвертой и т. д. координационных сферах.

На рис. 3.1. для простой кубической решетки построены несколько зон Бриллюэна. Эквивалентность физических состояний, принадлежащих различным зонам Бриллюэна, позволяет при движении электрона в \vec{k} -пространстве рассматривать его траекторию только в пределах первой зоны Бриллюэна. Любой реальный кристалл является ограниченным. Эта ограниченность приводит к тому, что *волновой вектор электрона в кристалле может принимать только дискретный ряд значений*. Для того чтобы подсчитать число допустимых состояний в зоне Бриллюэна, необходимо учесть граничные условия.

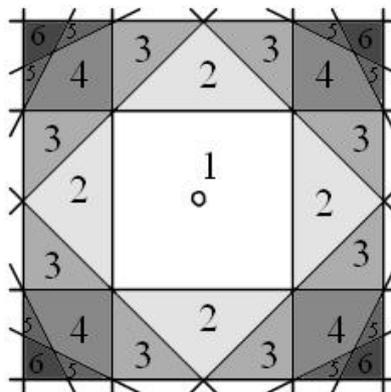


Рис. 3.1. Зоны Бриллюэна для простой кубической решетки: 1 – первая; 2 – вторая; 3 – третья зона Бриллюэна и т.д.

Рассмотрим одномерный (линейный) кристалл с постоянной решетки равной a ; такой, чтобы кристалл был построен из N элементарных ячеек длиной a . Разрешенные значения волнового вектора электрона в первой зоне Бриллюэна определяются:

$$k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \frac{N\pi}{L}. \quad (3.16)$$

Ограничили этот ряд значением $k = \pi N/L = \pi/a$ поскольку, $k = \pi/a$ служит границей зоны Бриллюэна. Значение $-\pi N/L = -\pi/a$ надо исключить, так как оно не является независимым, будучи кратным вектору обратной решетки π/a . Тогда полное число значений \vec{k} , задаваемое (3.16), точно равно N – числу элементарных ячеек. Отсюда следует, что каждая элементарная ячейка в каждой энергетической зоне дает точно одно независимое значение \vec{k} . Это справедливо и для случая трех измерений.

Итак, для полного описания всей совокупности состояний электрона в кристалле достаточно рассматривать только область значений \vec{k} , ограниченную первой зоной Бриллюэна. Тем не менее, иногда полезно считать, что волновой вектор может изменяться по всему \vec{k} -пространству. Поскольку для любых двух значений \vec{k} , отличающихся на вектор $2\pi\vec{H}$, все волновые функции и уровни энергии одинаковы, энергетическим уровням можно приписать индексы n так, чтобы при заданном n собственные функции и собственные значения уравнения Шредингера были периодическими функциями вектора \vec{k} в обратной решетке:

$$\begin{aligned} \psi_{n, \vec{k}+2\pi\vec{H}(\vec{r})}(\vec{r}) &= \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}), \\ \varepsilon_{n, \vec{k}+2\pi\vec{H}(\vec{r})} &= \varepsilon_{n, \vec{k}}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Совокупность всех энергетических уровней электрона, описываемых функций $\varepsilon_{n, \vec{k}}$ (или $\varepsilon_n(\vec{k})$) при фиксированном значении n , называют *энергетической зоной*. Так как каждая функция $\varepsilon_n(\vec{k})$ периодична и квазинепрерывна, у нее существует верхний и нижний пределы. Все уровни энергии данной энергетической зоны заключены в интервале между этими двумя пределами.

4. Метод вычисления блоховских функций и зонного спектра

Для вычисления блоховских функций развиты различные методы, подробно изложенные в литературе [2-6]. В данном разделе мы изложим оригинальный метод численного решения уравнения Шредингера для электрона в одномерном периодическом потенциале. Достоинство метода – простота, легкость программирования и численная устойчивость.

Пусть мы имеем одномерный периодический потенциал $V(x+a) = V(x)$. Удобно считать, что ионы покоятся в точках минимума потенциала $V(x)$, которые, по предположению, определяют нулевые значения энергии. Будем рассматривать периодический потенциал как суперпозицию потенциальных барьеров $v(x)$ с шириной a , центры которых находятся в точках $x = \pm na$:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v(x - na). \quad (4.1)$$

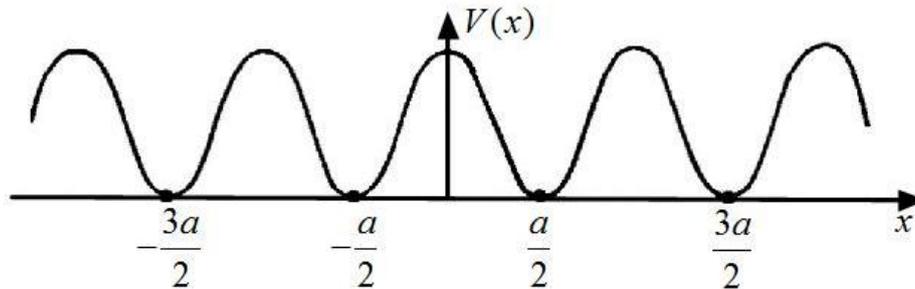


Рис. 4.1. Одномерный периодический потенциал $V(x)$.

Каждое слагаемое $v(x-na)$ представляет собой потенциальный барьер, сквозь который электрон может туннелировать, переходя от иона к иону. Сначала предположим, что $v(x) = v(-x)$.

Попытаемся выразить блоховские функции и закон дисперсии через характеристики отдельного барьера $v(x)$. Рассмотрим электрон, падающий слева на потенциальный барьер и имеющий энергию $\varepsilon = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m}$. Для него справедливо уравнение Шредингера:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \psi(x) = \varepsilon \psi(x), \quad (4.2)$$

поскольку $v(x) = 0$ при $|x| \geq a/2$. В этих областях волновая функция $\psi_L(x)$ будет иметь вид:

$$\psi_L(x) = \begin{cases} e^{i\chi x} + re^{-i\chi x}, & x \leq -a/2, \\ te^{i\chi x}, & x \geq a/2. \end{cases} \quad (4.3)$$

Схематически процесс рассеяния изображен на рис. 4.2.

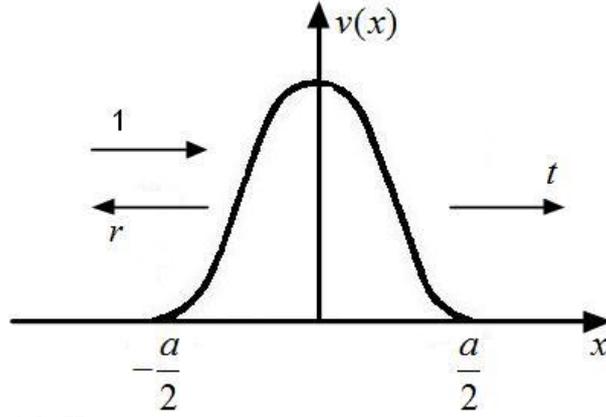


Рис. 4.2. Частицы, падающие слева на один из барьеров.

Коэффициенты прохождения t , t' и отражения r , r' входят в так называемую матрицу рассеяния [8, 9]

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}.$$

Из закона сохранения потока вероятности находим $S^+ = S^{-1}$, а из инвариантности уравнения Шредингера относительно обращения времени следует $S = S^T$. Отсюда можно получить: $t = t'$, $|r| = |r'|$, $|r|^2 + |t|^2 = 1$, $r't^* + r^*t = 0$. Если написать

$$t = |t|e^{i\theta}, \quad r = |r|e^{i\varphi_1}, \quad r' = |r|e^{i\varphi_2},$$

то нетрудно показать что $\varphi_1 + \varphi_2 = \pi + 2\theta$.

Коэффициенты прохождения t и отражения r дают амплитуду вероятности того, что электрон протуннелирует сквозь барьер или отразится от него, соответственно. Зависимость амплитуд рассеяния от волнового вектора χ падающей волны определяется детальными свойствами потенциала $v(x)$. Однако, многие характерные черты зонной структуры, соответствующей периодическому потенциалу $V(x)$, можно определить, используя лишь наиболее общие свойства коэффициентов t и r . В силу четности потенциала $v(x)$ функция $\psi_R(x) = \psi_L(-x)$ также будет решением уравнения Шредингера с энергией ε . Из (4.2) следует, что функция $\psi_R(x)$ имеет вид:

$$\psi_R(x) = \begin{cases} e^{-i\chi x} + r'e^{i\chi x}, & x \geq a/2, \\ te^{-i\chi x}, & x \leq -a/2. \end{cases} \quad (4.4)$$

Эта функция описывает частицу, которая падает на барьер справа рис. 4.3.

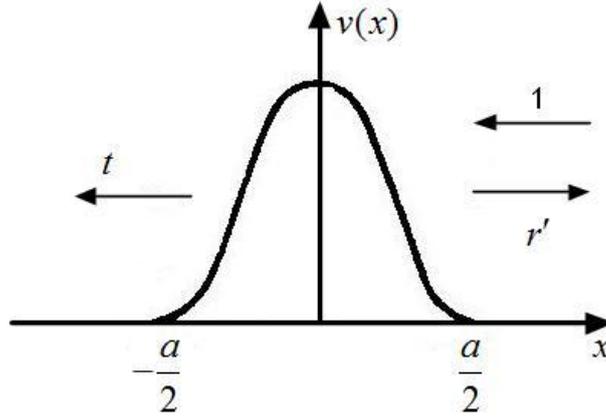


Рис. 4.3. Частицы, падающие справа на один из барьеров.

Так как $\psi_L(x)$ и $\psi_R(x)$ представляют собой два независимых решения уравнения Шредингера для случая одного барьера, соответствующие одинаковой энергии, любое другое решение той же энергии будет их линейной комбинацией:

$$\psi(x) = A\psi_L(x) + B\psi_R(x), \quad |x| \leq a/2. \quad (4.5)$$

Учтем, что в соответствии с теоремой Блоха функцию $\psi(x)$ можно выбрать таким образом, чтобы для некоего k выполнялось соотношение

$$\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x). \quad (4.6)$$

Дифференцируя (4.6), находим также, что производная $\psi' = \frac{d\psi}{dx}$ должна удовлетворять условию:

$$\psi'(x+a) = e^{ika}\psi'(x). \quad (4.7)$$

Налагая условия (4.6) и (4.7) при $x = -a/2$ и используя формулы (4.3), (4.1.4) получим:

$$\psi(a/2) = e^{ika}\psi(-a/2), \quad (4.8)$$

$$\psi'(a/2) = e^{ika}\psi'(-a/2). \quad (4.9)$$

Подставим в (4.8) и (4.9) вид функции (4.5):

$$\begin{cases} A\psi_L(a/2) + B\psi_R(a/2) = e^{ika}(A\psi_L(-a/2) + B\psi_R(-a/2)), \\ A\psi'_L(a/2) + B\psi'_R(a/2) = e^{ika}(A\psi'_L(-a/2) + B\psi'_R(-a/2)). \end{cases} \quad (4.10)$$

$$\begin{pmatrix} e^{ika}\psi_L(-a/2) - \psi_L(a/2) & e^{ika}\psi_R(-a/2) - \psi_R(a/2) \\ e^{ika}\psi'_L(-a/2) - \psi'_L(a/2) & e^{ika}\psi'_R(-a/2) - \psi'_R(a/2) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad (4.11)$$

Из решения системы (4.11) получаем, что энергия блоховского электрона связана с волновым вектором k следующим образом:

$$\cos ka = \frac{(t^2 - r^2)e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}}{2t}. \quad (4.12)$$

Уравнение (4.12) становится более содержательным, если воспользоваться некой дополнительной информацией о коэффициентах прохождения и отражения. Запишем для этого комплексные амплитуды t и r через модуль и фазу:

$$\begin{aligned} t &= |t|e^{i\theta}, \\ r &= |r|e^{i\varphi}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Оказывается, что для четного потенциала фазы связаны соотношением:

$$\varphi = \theta + \pi(n + 1/2). \quad (4.14)$$

Докажем формулу (4.14) проведя следующий мысленный эксперимент.

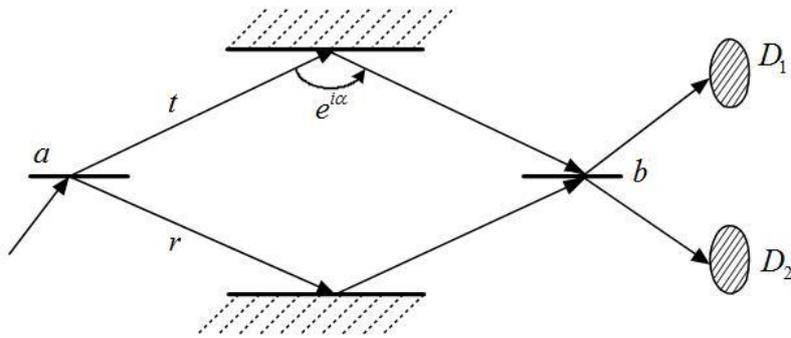


Рис. 4.4. Схема мысленного эксперимента.

Пусть имеется два полупрозрачных зеркала a и b , два экрана и соответственно два детектора (см. рис. 4.4). Если на полупрозрачное зеркало a падает электронный пучок, то часть пучка зеркало пропустит и часть отразит с амплитудами t и r . На верхнем экране пучок наберет фазу $e^{i\alpha}$. Итак, детекторы примут соответственно:

$$\begin{aligned} D_1 &: e^{i\alpha}tr + tr, \\ D_{21} &: e^{i\alpha}tt + rr. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Воспользуемся условием, что сумма вероятностей прохождения и отражения должна быть равна единице:

$$|r|^2 + |t|^2 = 1. \quad (4.16)$$

Используя выражения (4.15) и (4.16):

$$\left| e^{i\alpha} tr + tr \right|^2 + \left| e^{i\alpha} tt + tr \right|^2 = 1. \quad (4.17)$$

Подставляя выражения (4.13) в формулу (4.17), при условии, что $e^{2i(\theta-\varphi)} = -1 = e^{-i\pi(2n+1)}$, так как интенсивность не должна зависеть от α , то получаем искомое выражение:

$$\varphi = \theta + \pi(n + 1/2).$$

Итак, энергия и волновой вектор блоховского электрона связаны между собой следующим образом:

$$\begin{aligned} \cos ka &= \frac{(t^2 - r^2)e^{i\chi a} + e^{-i\chi a}}{2t} = \frac{(|t|^2 e^{2i\theta} - |r|^2 e^{2i\varphi})e^{i\chi a} + e^{-i\chi a}}{2|t|e^{i\theta}} = \\ &= \frac{1}{2|t|} [e^{i(\theta+\chi a)} + e^{-i(\theta+\chi a)}] = \frac{\cos(\theta + \chi a)}{|t|}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

т.е.

$$\cos ka = \frac{\cos(\theta + \chi a)}{|t|}, \quad (4.19)$$

при $\varepsilon = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m}$. Поскольку $|t|$ всегда меньше единицы, но стремится к ней в пределе больших χ (барьер становится всё менее эффективным с ростом энергии падающего электрона), правая часть выражения (4.18), рассматриваемая как функция от χ , обнаруживает поведение, представленное на рис. 4.5.

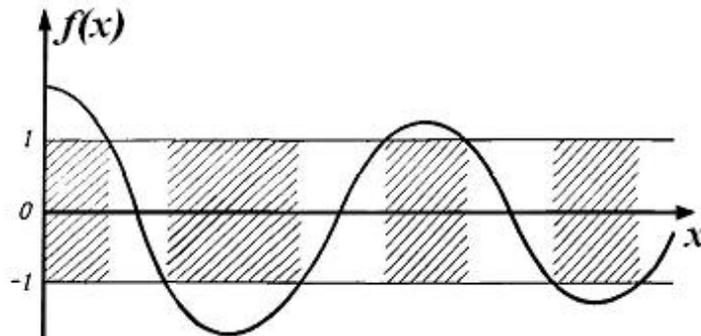


Рис. 4.5. Характерный вид функции $\frac{\cos(\theta + \chi a)}{|t|}$.

Для данного k разрешенные значения χ (и, следовательно, разрешенные энергии $\varepsilon = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m}$) определяются пересечениями кривой на рис. 4.5 с горизонтальной линией $\cos ka$. Границы разрешенных зон определяются условием

$$\theta + \chi a = n\pi, \quad (4.20)$$

а запрещенные зоны имеют место для энергий в интервале, определяемом неравенством

$$\left| \frac{\cos(\theta + \chi a)}{|t|} \right| \geq 1.$$

Если θ – ограниченная функция от χ , то существует бесконечно запрещенных и разрешенных зон.

1) Если барьер является очень «слабым» (т.е. что $|t| \approx 1$, $|r| \approx 0$, $|\theta| \approx 0$). В этом случае энергетические щели очень узкие, а ширина щели содержащей $\chi = \pi n/a$, равна $\varepsilon \approx 2\pi n \frac{\hbar^2}{ma^2} |r|$.

2) Если барьер очень «сильный», так что $|t| \approx 0$, $|r| \approx 1$, тогда разрешенные зоны энергий очень узкие.

Обобщим предыдущую задачу на случай периодического потенциала общего вида (см. рис. 4.6). Хотя рассеяние на потенциале элементарной ячейки отличается от проделанного выше (отсутствует соотношение (4.14) для фаз коэффициентов отражения и прохождения), аналогичные вычисления все равно приводят к дисперсионному соотношению (4.19).

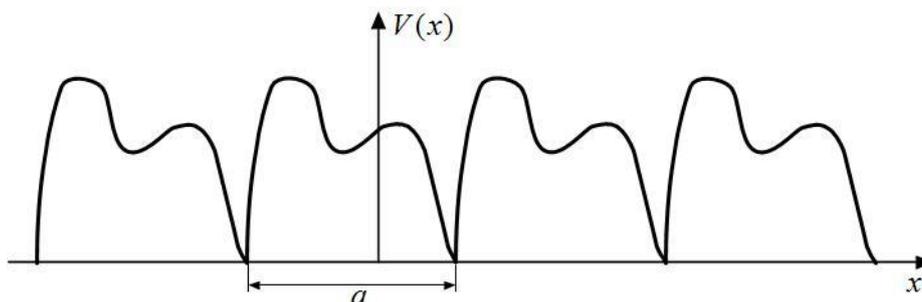


Рис. 4.6. Периодический потенциал не обладающий центром инверсии.

Совпадение результатов объясняется тем, что в силу симметрии относительно обращения времени должно выполняться соотношение $\varepsilon(k) = \varepsilon(-k)$ (см. подробней [4]), поэтому вид дисперсионного соотношения не должен зависеть от четности потенциала.

5. Модель Кронига–Пенни

В качестве конкретного примера и для тестирования программы рассмотрим простую одномерную модель периодического потенциала, предложенную Кронигом и Пенни [5, 7]. Зависимость потенциальной энергии электрона от расстояния для одномерной решетки в данной модели показана на рис. 5.1. Это последовательность δ -функций (интервал между соседними особыми точками постоянен и равен a):

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \nu \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na). \quad (5.1)$$

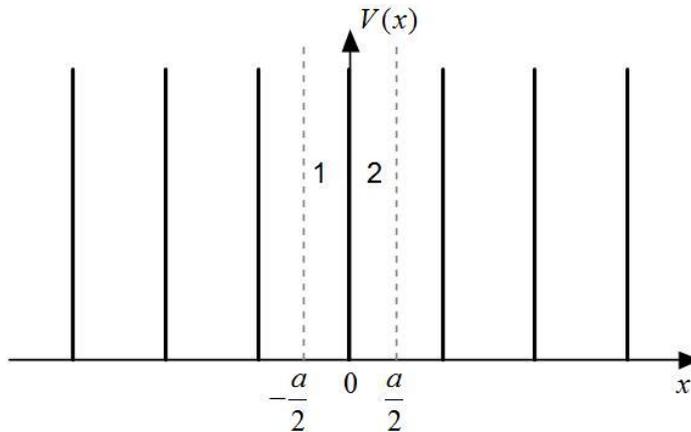


Рис. 5.1. Зависимость потенциальной энергии электрона от расстояния для одномерной решетки в модели Кронига–Пенни.

Запишем одноэлектронное уравнение Шредингера для одномерного случая:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x), \quad (5.2)$$

где $V(x)$ — периодическая функция с периодом решетки, то есть $V(x) = V(x+a)$. Решение этого уравнения ищем в виде функций Блоха на интервале $-a/2 \leq x \leq a/2$

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}. \quad (5.3)$$

В областях 1 и 2 (см. рис. 5.1) представим волновые функции в виде плоских волн:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= a_1 e^{i\lambda x} + a_2 e^{-i\lambda x}, \\ \psi_2(x) &= b_1 e^{i\lambda x} + b_2 e^{-i\lambda x}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

В начале координат находится δ -функция, поэтому на границе областей 1 и 2 функции будут непрерывны, а их первые производные подчиняются граничному условию для δ -функций, следовательно, запишем условия сшивания в $x=0$:

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0), \\ \psi'_2(0) - \psi'_1(0) = 2v\psi_1(0). \end{cases} \quad (5.5)$$

Подставляя в систему (5.5) явный вид функций (5.4) получим:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 = b_1 + b_2, \\ b_1 - b_2 = a_1 - a_2 + \frac{2v}{i\chi}(a_1 + a_2). \end{cases} \quad (5.6)$$

Из системы (5.6) выразим выражения для коэффициентов b_1 и b_2 :

$$\begin{cases} b_1 = a_1 \left(1 + \frac{v}{i\chi} \right) + \frac{v}{i\chi} a_2, \\ b_2 = a_2 \left(1 - \frac{v}{i\chi} \right) - \frac{v}{i\chi} a_1. \end{cases} \quad (5.7)$$

Так как функции подчиняются теореме Блоха (5.3), то

$$\begin{cases} \psi_2\left(\frac{a}{2}\right) = e^{ika} \psi_1\left(-\frac{a}{2}\right), \\ \psi'_2\left(\frac{a}{2}\right) = e^{ika} \psi'_1\left(-\frac{a}{2}\right). \end{cases} \quad (5.8)$$

С учётом формулы (5.4), (5.7) и (5.8):

$$\begin{cases} a_1 \left(1 + \frac{v}{i\chi} - e^{i(ka-2\gamma)} \right) + a_2 \frac{v}{i\chi} = 0, \\ a_2 \left(1 - \frac{v}{i\chi} - e^{i(ka+2\gamma)} \right) - a_1 \frac{v}{i\chi} = 0, \end{cases} \quad (5.9)$$

где $\gamma = \chi \frac{a}{2}$. Мы получили однородную систему уравнений (5.9) относительно a_1 и a_2 — её детерминант должен обращаться в нуль.

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{v}{i\chi} - e^{i(ka-2\gamma)} & \frac{v}{i\chi} \\ -\frac{v}{i\chi} & 1 - \frac{v}{i\chi} - e^{i(ka+2\gamma)} \end{pmatrix} = 0. \quad (5.10)$$

Простые преобразования (5.10) дают:

$$\cos(ka) = \frac{v}{\chi} \sin(2\gamma) + \cos(2\gamma),$$

или учитывая, что $\gamma = \chi a/2$ получим:

$$\cos(ka) = \frac{v}{\chi} \sin(a\chi) + \cos(a\chi). \quad (5.11)$$

Следовательно, зоны разрешенных значений энергий определяются неравенством:

$$\left| \frac{v}{\chi} \sin(a\chi) + \cos(a\chi) \right| \leq 1, \quad (5.12)$$

а собственные значения энергии равны

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m}. \quad (5.13)$$

Перепишем выражение (5.11) в другой форме:

$$|\cos(a\chi - \arctg(v/\chi))| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + (v/\chi)^2}}. \quad (5.14)$$

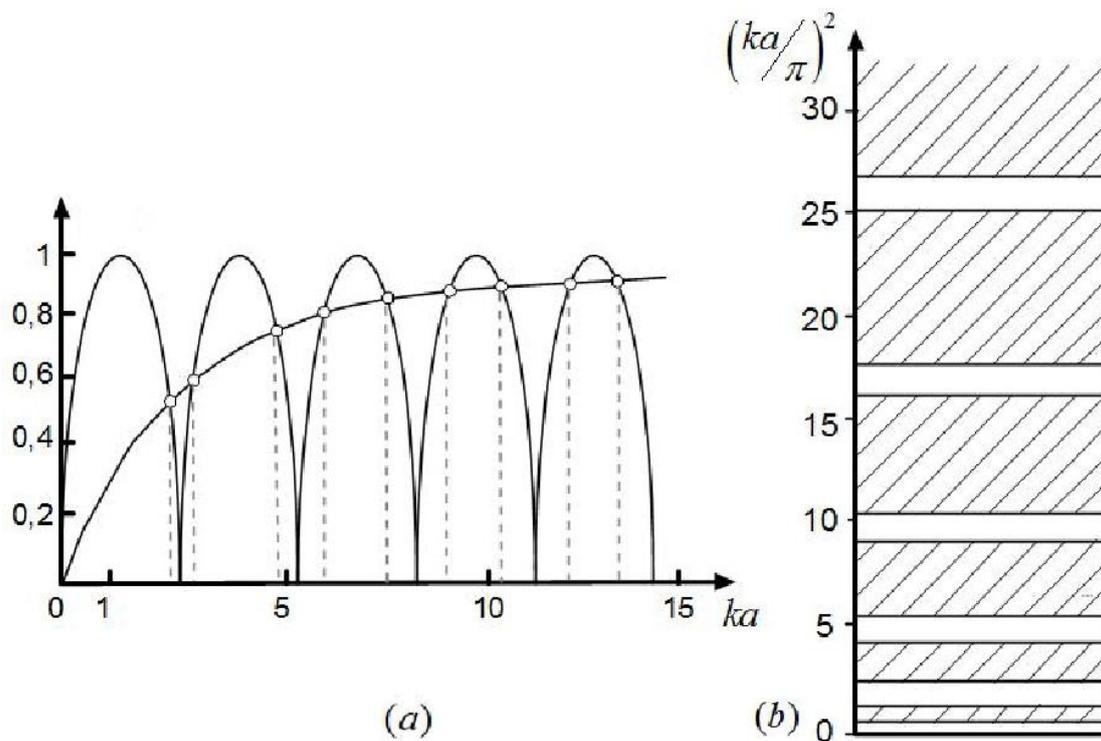


Рис. 5.2. Графическое определение (а) и схематическое изображение зонной структуры (б) в случае дираковской потенциальной гребенки.

На рис. 5.2а и 5.2б приведены результаты расчетов для случая $va = 4$. Функции переменной χa , стоящие в правой и левой частях неравенства (5.14), показаны на рис. 5.2а. Точки пересечения соответствующих кривых изображены кружками, а интервалы, в которых выполняется неравенство (5.14), отмечены на оси χa жирными линиями. Верхним границам зон соответствуют точки, кратные π ; согласно уравнению (5.11), в этих точках $\cos ka = \cos \chi a$. Положение зон на энергетической шкале, найденное с помощью рис. 5.2а, показано на рис. 5.2б, где разрешенные энергетические зоны заштрихованы. По мере роста энергии разрешенные зоны расширяются, так что энергетический спектр приближается к непрерывному. Тем не менее, он никогда полностью не совпадает с ним: даже при самых высоких энергиях всегда имеются запрещенные зоны, примыкающие сверху к точкам $\chi a = m$. На рис. 5.3а,б показана зависимость энергии (в безразмерных единицах) от переменной ka для первых трех зон.

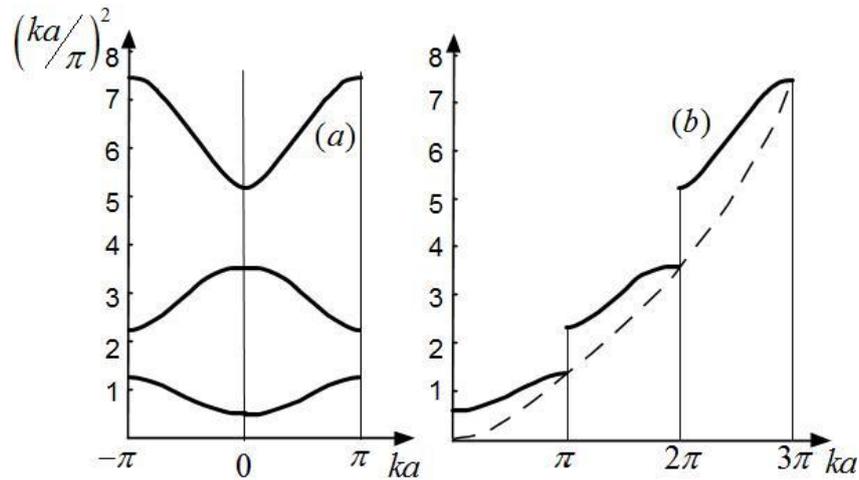


Рис. 5.3. Зависимость энергии от переменной ka . Для трех первых зон (одномерные зоны Бриллюэна). Пунктирная кривая – парабола, отвечающая свободной частице.

На рис. 5.3а изменение переменной ka ограничено интервалом $-\pi \leq ka \leq \pi$, а на рис. 5.3б она монотонно возрастает от зоны к зоне. Пунктирная кривая на рис. 5.3б представляет собой параболу проходящую через точки, соответствующие верхним границам разрешенных зон.

Все приведенные графики относятся к случаю $va = 4$, поэтому по ним нельзя судить о влиянии проницаемости стенки на энергетический спектр. Для меньших значений va правая часть неравенства (5.14) будет быстрее приближаться к единице, и соответствующая кривая на рис. 5.2б будет пересекать косинусоиду в точках, более близких к максимумам последней. Это, разумеется, означает, что запрещенные зоны станут уже. Так как положения верхних границ разрешенных зон (точки $\chi a = \pi$) не зависят от va , то по мере уменьшения этой величины будут смещаться вниз на рис. 5.2б лишь одни нижние границы этих зон. При $va = 0$ запрещенные зоны исчезают, но при этом исчезает и наш потенциал, и мы приходим к случаю свободного движения, которому соответствует непрерывный спектр. С другой стороны, если $va \rightarrow \infty$, то разрешенные зоны вырождаются в дискретные уровни $\chi a = \pi$.

Представляет интерес несколько видоизменить модель Кронига–Пенни, добавив еще одну δ -функцию в периодический потенциал, как показано на рис. 5.4.

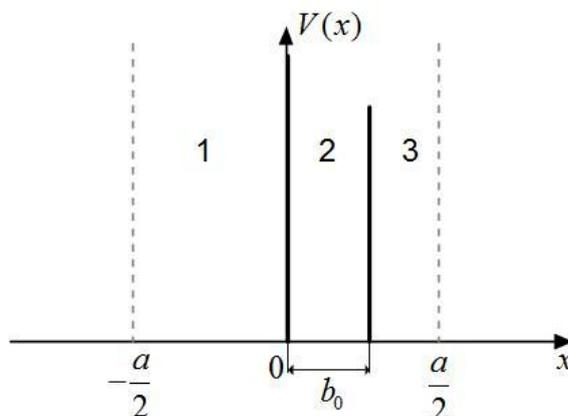


Рис. 5.4. Зависимость потенциальной энергии электрона от расстояния в элементарной ячейке для одномерной решетки.

Здесь a – период одномерной решетки, а δ -функции, изображенные на рисунке (в общем случае), имеют разную мощность. Последовательность δ -функций в нашем случае запишется как:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (v_1 \delta(x + na) + v_2 \delta(x - b + na)). \quad (5.15)$$

Как и для модели Кронига–Пенни будем искать решение уравнения Шредингера на интервале $-a/2 \leq x \leq a/2$ в виде плоских волн соответственно в областях 1, 2 и 3 (см. рис. 5.4):

$$\begin{cases} \psi_1(x) = a_1 e^{i\chi x} + a_2 e^{-i\chi x}, \\ \psi_2(x) = b_1 e^{i\chi x} + b_2 e^{-i\chi x}, \\ \psi_3(x) = c_1 e^{i\chi x} + c_2 e^{-i\chi x}, \end{cases} \quad (5.16)$$

а граничные условия имеют вид:

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0), \\ \psi_2(b_0) = \psi_3(b_0), \\ \psi_2'(0) - \psi_1'(0) = 2v_1 \psi_1(0), \\ \psi_3'(b_0) - \psi_2'(b_0) = 2v_2 \psi_2(b_0). \end{cases} \quad (5.17)$$

Проводя вычисления, аналогичные проделанным выше для стандартной модели Кронига–Пенни, мы получим уравнение

$$\cos\left(\chi a - \arctg\left(\frac{D}{C}\right)\right) = \frac{\cos(ka)}{\sqrt{C^2 + D^2}}, \quad (5.18)$$

где

$$C = 1 - \frac{2v_1 v_2 \sin^2(\chi b_0)}{\chi^2}$$

$$D = \frac{v_1 + v_2}{\chi} - \frac{v_1 v_2 \sin(2\chi b_0)}{\chi^2}.$$

При $v_2 = 0$ ($v_1 = v$) выражение (5.18) совпадает с (5.11).

Таким образом, соотношение (5.18) приводит к закону дисперсии, который обладает явной симметрией $\varepsilon(k) = \varepsilon(-k)$, хотя элементарная ячейка не обладает четностью.

6. Алгоритм нахождения зонного спектра

Для вычисления блоховских функций и зонного спектра электронов в периодическом потенциале воспользуемся формулой:

$$\cos(ka) = \frac{\cos(\theta + \chi a)}{|t|}, \quad (6.1)$$

где энергия электрона связана с параметром χ соотношением $\varepsilon = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m}$, а коэффициент отражения связан с θ выражением: $t = |t|e^{i\theta}$. Амплитудные коэффициенты t можно найти, как в задаче рассеяния (решение которой приведено в работе [9]).

Пусть источник электронов располагается слева от рассеивателя (см. рис. 4.2), тогда падающая волна при $x \rightarrow -\infty$ имеет вид

$$\psi(x) = e^{i\chi x} + r e^{-i\chi x},$$

а прошедшая волна (при $x \rightarrow \infty$) определяется функцией вида

$$\psi(x) = t e^{i\chi x}.$$

Запишем уравнение Шредингера для волновой функции $\psi_n = \psi(x_n)$ ($n = 0, 1, \dots, N-1, N$), заданной на дискретном множестве точек $x_n = n\Delta$:

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + u_n \psi_n = 0, \quad (6.2)$$

где

$$u_n = -2 + \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2} (E - V_n), \quad V_n \equiv V(x_n).$$

Граничные условия с учётом теоремы Блоха (4.6) и условий (4.8) – (4.9) в случае дискретной сетки имеют вид:

$$\psi_1 + (u_0/2 + i\chi\Delta)\psi_0 = 2i\chi\Delta e^{-i\chi\frac{a}{2}}, \quad (6.3)$$

$$\psi_{N-1} + \left(\frac{u_N}{2} + i\chi\Delta^2 \right) \psi_N = 0. \quad (6.4)$$

Ищем решение уравнения (6.2) в виде

$$\psi_{n+1} = R_n \psi_n. \quad (6.5)$$

Подставив в (6.3) и, сопоставив с (6.5), получим рекуррентное соотношение для вспомогательных функций R_n :

$$R_{n-1} = -\frac{1}{u_n + R_n}. \quad (6.6)$$

Граничное условие для R_n запишем на правой границе, поскольку в этом случае оно будет однородным и независимым от волновой функции. Для вывода подставим $\psi_n = R_{N-1}\psi_{n-1}$ в (6.4) и ввиду произвола ψ_{n-1} :

$$R_{N-1} = -\frac{1}{\frac{u_N}{2} + i\chi\Delta^2}. \quad (6.7)$$

Теперь можно начинать с R_{n-1} и двигаться в обратном направлении ($N-2, \dots, 1, 0$), находя все вспомогательные функции. Зная R_0 , мы можем получить начальное условие для волновой функции

$$\psi_0 = \frac{2i\chi\Delta e^{-i\chi\frac{a}{2}}}{R_0 + \left(\frac{u_0}{2} + i\chi\Delta\right)}. \quad (6.8)$$

Таким образом, начиная с (6.8) и используя рекуррентное уравнение для волновой функции (6.5), найдём волновую функцию во всех внутренних узлах сетки. Амплитудный коэффициент отражения:

$$t = \psi_n e^{-i\chi\frac{a}{2}}. \quad (6.9)$$

7. Численный метод

На основе результатов предыдущего раздела сформулируем численный алгоритм расчёта:

- 1) задаём потенциал $V(x)$ в элементарной ячейке в явном виде;
- 2) задаём энергию туннелирующего электрона \mathcal{E} ;
- 3) вычисляем $\chi = \frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar}$ и $u_n = -2 + \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2}(E - V_n)$, $V_n \equiv V(x_n)$;
- 4) вычисляем $R_{N-1} = -\frac{1}{\frac{u_N}{2} + i\chi\Delta^2}$;

5) из рекуррентной формулы $R_{n-1} = -\frac{1}{u_n + R_n}$ находим

$R_{N-2}, R_{N-3}, \dots, R_1, R_0$

6) вычисляем $\psi_0 = \frac{2i\chi\Delta e^{-i\chi\frac{a}{2}}}{R_0 + \left(\frac{u_0}{2} + i\chi\Delta\right)}$;

7) из рекуррентного соотношения $\psi = R_{n-1}\psi_{n-1}$ находим $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$;

8) определяем $t = \psi_n e^{-i\chi\frac{a}{2}}$;

9) решаем уравнение для зонного спектра $\cos(ka) = \frac{\cos(\theta + \chi a)}{|t|}$, при усло-

вии, что $\left| \frac{\cos(\theta + \chi a)}{|t|} \right| \leq 1$;

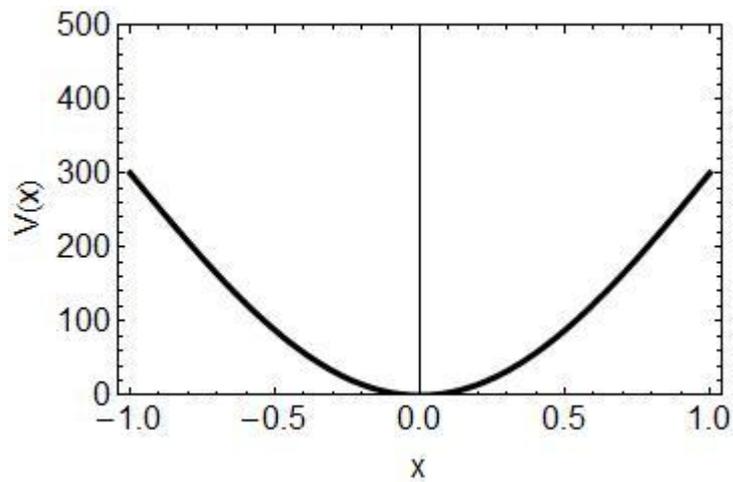
8. Программа в среде *Mathematica*

В качестве примера рассмотрим нахождение зонного спектра электрона в потенциальном поле $V(x) = V_0(1 - \cos(\pi x/a))$. Программа, реализующая описанный выше алгоритм, представлена ниже.

```

V0 = 200;
α = 2;
V[x_] := V0*(1-Cos[(π*x)/α]); (* Потенциальное поле *)
xmax = 1; (* a/2 *)
xmin = -xmax;
(* Диапазон поиска энергии *)
Emin = 0.01;
Emax = 500;
Plot[
  V[x],
  {x, xmin, xmax},
  FrameLabel->{"x", "V(x)"},
  PlotRange->{0, 500},
  Frame->True,
  FrameTicks->Automatic,
  BaseStyle->{FontFamily->"Helvetica", FontSize->16}
]

```



```

NN = 500.0;
Δ = (xmax-xmin)/NN; (* Шаг по оси k *)
NE = 10000;
dE = (Emax-Emin)/NE; (* Шаг по оси E *)
k = Sqrt(Energ);
U[x_] := -2+Δ2*(Energ-V[x]);
T = {};
Do[
  Energ = Emin+dE*j;
  R = {-1/(U[xmax]/2.0+i*k*Δ)}
  For[n = 1, n ≤ NN-1, n = n+1,
    R = Prepend[R,-1/(U[xmax-n*Δ]+R[[1]])]];
  ψ = {(2*i*k*Δ*Exp[-i*k*xmax])/(R[[1]]+U[xmin]/2.0+i*k*Δ)};
  For[n = 1, n ≤ NN-1, n = n+1,
    ψ = AppendTo[ψ, R[[n]]*ψ[[n]]]
  ];
  If[
    Abs[Cos[Arg[ψ[[Length[ψ]]]]*Exp[-i*k*xmax]+2*xmax*k]/
      Abs[ψ[[Length[ψ]]]]] ≤ 1,
    AppendTo[T, {(1/xmax)*ArcCos[Cos[Arg[ψ[[Length[ψ]]]]*
      Exp[-i*k*xmax]] +2*xmax*k]/Abs[ψ[[Length[ψ]]]]},Energ}],
    AppendTo[T,{0, Energ}]
  ],
  {j,0,NE}
];
ListPlot[T,

```

```

PlotStyle→Directive[Red,
PointSize→0.01],
Joined→False,
Frame→True,
FrameLabel→{"k", "E"},
PlotRange→{{0., Pi},
{0., Emax}},
FrameTicks→{{Automatic,
None}, {{0, Pi/2, Pi}, None}},
GridLines→Automatic,
GridLinesStyle→
Directive[Gray, Dashed],
AspectRatio→4.5,
BaseStyle→
{FontFamily→"Helvetica",
FontSize→16}]

```

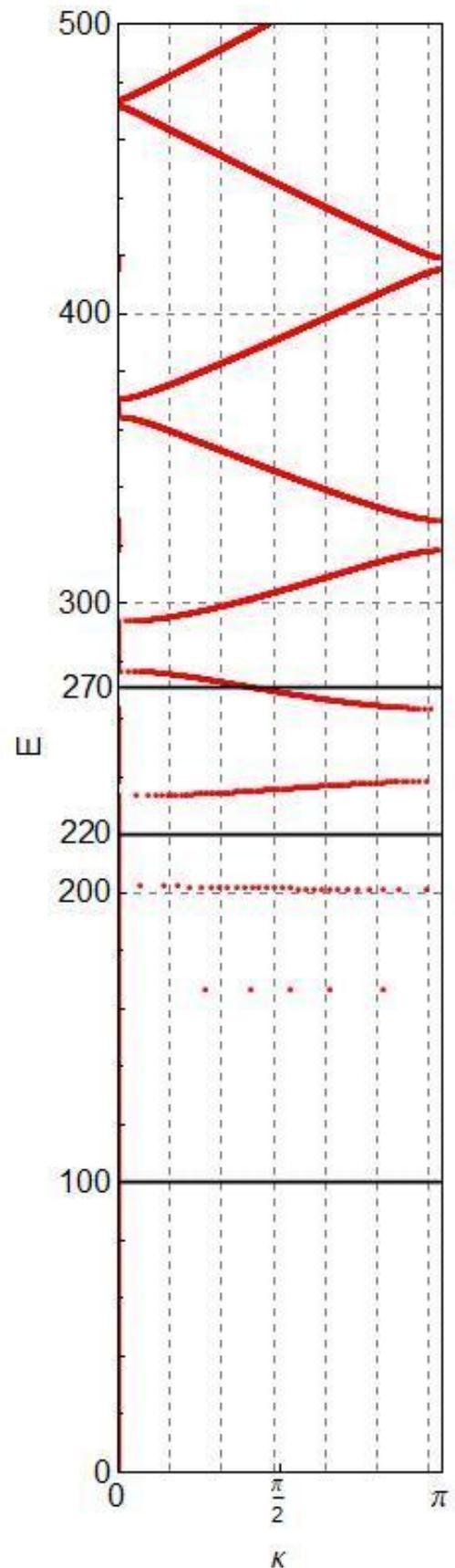


Рис. 6.1. Результат численного расчета зонного спектра для потенциала $V(x) = V_0(1 - \cos(\pi x/a))$ в первой зоне Бриллюэна.

Отметим, что тестирование алгоритма программы изложенного выше было проведено для расчета зонного спектра в модели Кронига–Пенни. Сравнение результатов точного решения с результатом численного моделирования по разработанному алгоритму представлено на рис. 6.2.

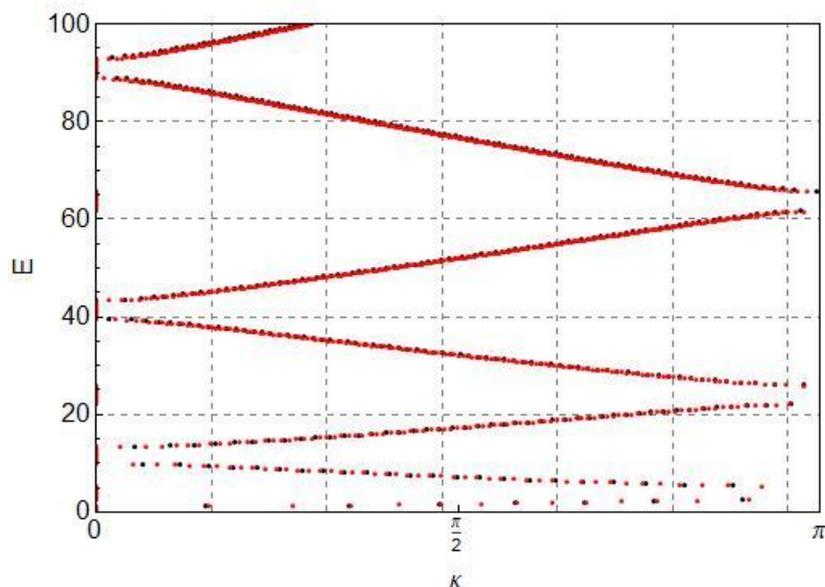


Рис. 6.2 Зонный спектр электронов для модели Кроннига–Пенни, где красные точки – численное моделирование с использованием матрицы рассеяния, черные точки – аналитический результат.

Как видно, полученные решения для модели Кроннига–Пенни (черные точки и красные на рис. 6.2) хорошо совпадают, что говорит об адекватности разработанного алгоритма и возможности его применения для расчёта зонного спектра любых периодических потенциалов, а также данный алгоритм позволяет вычислять блоховские функции.

При численном расчёте блоховских функций, показано, что плотность вероятности нахождения электрона существенно зависит от положения уровня энергии E см. рис. 6.1 (черные прямые). Наглядно показано, что вероятность нахождения электрона в запрещенной зоне ($E=100$ и $E=220$) экспоненциально убывает вблизи $a/2$ ($x=1$ в программе) для волны падающей справа (красная и чёрная кривые на рис. 6.3), в разрешенной зоне при $E=270$ (синяя кривая) плотность вероятности существенно возрастает и осциллирует.

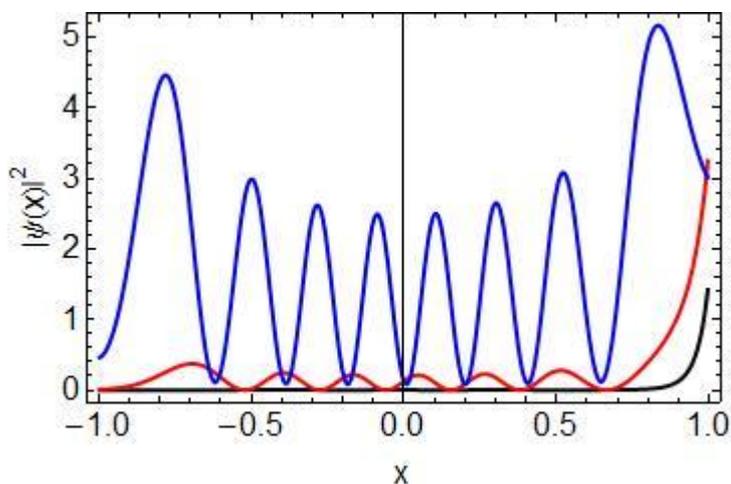


Рис. 6.3 Плотность вероятности нахождения электрона в $V(x) = V_0(1 - \cos(\pi x / a))$, где синяя кривая соответствует $E=270$, красная – $E=220$ и черная – $E=100$.

Заключение

В работе рассмотрена задача о движении электрона в одномерном периодическом потенциале. Обсуждаются основные приближения, которые делаются при формулировке одноэлектронного уравнения Шредингера, приводится простое доказательство теоремы Блоха и основные свойства закона дисперсии для электрона в периодическом потенциале. Формулируется метод расчета блоховских функций и зонного спектра на основе матрицы рассеяния. Описан и реализован численный алгоритм (в пакете *Mathematica*) для нахождения блоховских функций и зонного спектра для одномерного периодического потенциала с помощью амплитудного коэффициента прохождения. Программа была протестирована на модели Кронига-Пенни, которая может быть решена аналитически. Для иллюстрации приведены расчеты зонного спектра в потенциальном поле: $V(x) = V_0(1 - \cos(\pi x/a))$.

Вопросы и задания

1. Исходя из закона сохранения потока вероятностей, доказать соотношение унитарности $S^+ = S^{-1}$ (см. [8]).
2. Используя инвариантность уравнения Шредингера относительно обращения времени, доказать соотношение $S = S^T$ (см. [8]).
3. Используя численный алгоритм расчета блоховской функции на основе матрицы рассеяния, произвести расчеты плотности вероятности нахождения электрона в элементарной ячейке.
4. Найти численно зонный спектр в поле:

$$V(x) = \alpha x^2, \quad |x| \leq a/2$$

$$V(x) = -\alpha(x^2 - a^2/4), \quad |x| \leq a/2$$

$$V(x) = \alpha(x + a/2), \quad |x| \leq a/2$$

5. Исследовать роль резонансных состояний в потенциальном поле $V(x) = -\alpha(x^2 - a^2/4), |x| \leq a/2$ на формирование разрешенной зоны и запрещенных зон.

Литература

1. Bloch F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern// Z. Phys., v. **52**, p. 555 (1928).
2. Пятаевский Л.П., Лифшиц Е.М. Статистическая физика (часть 2). – М.: Физматлит, 2004.
3. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. – Н.Н.: ННГУ, 1993.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: МедиаСтар, 2006.
5. Флюгге З. Задачи по квантовой механике (том 1). – М.: Мир, 1974.
6. Акшрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела (том 1). – М.: Мир, 1979.
7. Kronig R. de L., Penney W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices // Proc. Roy. Soc. London, v. 130A, p. 499 (1931).
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (Нерелятивистская теория). – М.: Физматлит, 2002.
9. Сатанин А.М. Численные методы в нанозифике. – Н.Н.: ННГУ, 2006.

Марина Валерьевна Денисенко
Александр Сергеевич Дребенко
Сергей Михайлович Кашин
Аркадий Михайлович Сатанин

**ВЫЧИСЛЕНИЕ БЛОХОВСКИХ ФУНКЦИЙ ЭЛЕКТРОНА В
ОДНОМЕРНОМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ**

Учебно-методическое пособие

Издается в электронном формате в Центре информатизации ННГУ в 2010.