

Reikniverkefni í EPI

Viðar Guðmundsson

Sigurður I. Erlingsson

Halldór Ö. Ólafsson

1. október 1997

1 Lýsing á verkefni

Verkefnið skiptist í tvo hluta

1. Reikna orkuróf rafeindar í einvíða lotubundna mættinu

$$V(x) = \pm V_0 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (1)$$

þar sem reikninga og niðurstöður á að skala í stærðunum

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\hbar^2}{m^* e^2} \\ E_{Ryd} &= \frac{e^2}{2a_0} = \frac{m e^4}{2\hbar^2}. \end{aligned}$$

2. Reikna líkindadreifingu grunnástand og örvaðs ástands.

Þægilegt er að nota sléttar bylgjur sem grunn og vinna verkefnið í Maple en annars hafa menn frjálsar hendur með útfærslur á lausninni, eins lengi og tölvur eru notaðar.

2 Rafeindir í einvíðu lotubundnu mætti

Athugum Hamiltonvirkjann

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (2)$$

Mættið V er lotubundið með lotu a .

Samkvæmt setningu Bloch, sjá [1], þá eru eiginföll \hat{H}

$$\psi_{nk}(x) = e^{ikx} u_{nk}(x) \quad (3)$$

þar sem $u_{nk}(x) = u_{nk}(x+a)$. Heppilegt er að skrifa

$$\begin{aligned} u_{nk} &= \sum_{K'} C_{k,K'} e^{-iK'x} \\ \Rightarrow \psi(x)_{nk} &= \sum_{K'} C_{k,K'} e^{i(k-K')x}. \end{aligned}$$

með $K' = \frac{2\pi n'}{a}$, $n' \in \mathbf{Z}$. Framsetning u_{nk} er jafngild fourier röð fyrir fall með lotu a . Fyrir óendaleg kerfi tekur Bloch fasinn öll möguleg rauntölugildi á fyrsta Brillouin svæðinu $ka \in [-\pi, \pi]$, sjá [1] þar sem fjallað er um Born-Von Karman jaðarskilyrðið.

Látum $E_{nk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ vera orku frjálsu agnarinnar og skiptum yfir í Dirac ritháttin. Þá verður Schrödinger jafnan

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |n, k\rangle &= E_{n,k} |n, k\rangle \\ \hat{H} |n, k\rangle &= \varepsilon_{n,k} |n, k\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

og verkefnið er að finna róf \hat{H} . Tengsl $|n, k\rangle$ og $|n, k\rangle$ eru

$$|n, k\rangle = \sum_{K'} C_{k, K'} |n, k - K'\rangle \quad (5)$$

þ.e. $|n, k\rangle$ er línuleg samantekt allra sléttra bylgna með bylgjuvígur $k - K'$.

Til að ákvarða róf Hamiltonvirkjans þá er jafna (4) innfölduð með $|n, k - K\rangle$

$$\begin{aligned} \langle n, k - K | \hat{H} | n, k \rangle &= \sum_{K'} C_{k, K'} \langle n, k - K | \hat{H} | n, k - K' \rangle \\ &= \sum_{K'} C_{k, K'} \langle n, k - K | \hat{H}_0 + \hat{V} | n, k - K' \rangle \\ &= \sum_{K'} C_{k, K'} \left(E_{n, k - K'} \delta_{KK'} + \langle n, k - K | \hat{V} | n, k - K' \rangle \right) \end{aligned}$$

Berum síðustu jöfnu saman við innfeldið við hægri hlið Schrödinger jöfnunnar og fáum

$$\sum_{K'} C_{k, K'} \left(E_{n, k - K'} \delta_{KK'} + \langle n, k - K | \hat{V} | n, k - K' \rangle \right) = \varepsilon_{n, k} C_{k, K}. \quad (6)$$

Lítum á síðustu jöfnu sem óendanlegt fylki með vísun K og K' , þ.e. við getum skrifað síðustu jöfnu á fylkjaformi

$$\mathbf{H}\mathbf{C}_k = \varepsilon_k \mathbf{C}_k \quad (7)$$

Þetta eigingildisverkefni er svo leyst fyrir ákveðið gildi á k með því að nota aðeins takmarkað hlutfylki. Fyrir hvert k fást N orkugildi þ.s. N er stærð fylkisins sem er notað.

3 Dæmi um notkun á Maple við truflanareikning

Skoðum einvíða mættisbrunninn

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ef } 0 < x < a \\ \infty & \text{annars} \end{cases} \quad (8)$$

þar sem a er breidd brunnsins. Tímaóháða Schrödinger jafnan er

$$\hat{H}_0 \phi = E \phi \quad (9)$$

þar sem Hamiltonvirkinn er gefinn með

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (10)$$

Eiginföll Hamiltonvirkjans eru

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (11)$$

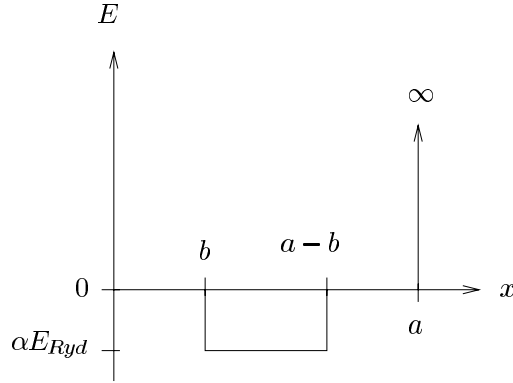
og meðfylgjandi eigingildi

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^* a^2} \quad (12)$$

þar sem $n = 1, 2, 3, \dots$

Tökum sem dæmi um truflun á Hamiltonvirkjanum mætti á forminu

$$W = -\alpha E_{Ryd} \theta\left(\frac{b-a}{a_0}\right) \theta\left(\frac{x-(a-b)}{a_0}\right) \quad (13)$$



Mynd 1: Truflunarmættið W

þar sem θ er Heaviside fallið. Styrkur truflunar ræðst af víddarlausu breytunni α .

Stuðullinn α getur verið það stór að 1. stigs truflanareikningur eigi ekki við. Viljum því koma Hamiltonvirkjanum á hornalínuform með því að nota takmarkaðan grunn, sjá kafla 2.

Skölum stærðir í E_{Ryd} og a_0 .

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2 m^{*2} e^4}{2m^* \left(\frac{a_0^2}{a}\right) \hbar^4} = n^2 \pi^2 \left(\frac{a_0}{a}\right)^2 \frac{m^* e^4}{2\hbar^2} \\ &= n^2 \pi^2 \left(\frac{a_0}{a}\right)^2 E_{Ryd} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a_0}} \sqrt{\frac{2a_0}{a}} \sin\left(n\pi \left(\frac{a_0}{a}\right) \frac{x}{a_0}\right) \quad (15)$$

Fylkjastakið verður því

$$W_{ij} = -\alpha E_{Ryd} \int_{\frac{b}{a_0}}^{\frac{a-b}{a_0}} \frac{dx}{a_0} \left(\frac{2a_0}{a}\right) \sin\left(i\pi \left(\frac{a_0}{a}\right) \frac{x}{a_0}\right) \sin\left(j\pi \left(\frac{a_0}{a}\right) \frac{x}{a_0}\right) \quad (16)$$

Jaðarskilyrðin eru þannig að best er að vinna með þverhluta sléttu bylgnum, þ.e. sínus-grunnföll. Samanburður við jöfnu 6 gefur

$$\sum_j (E_j \delta_{ij} + W_{ij}) C_j^n = \varepsilon C_i^n \quad (17)$$

þar sem gert hefur verið ráð fyrir að eiginföll truflaða Hamiltonvirkjans sé hægt að skrifa

$$\psi_n(x) = \sum_j C_j^n \phi_j(x). \quad (18)$$

Þessi jafna segir að lausnina sé hægt að skrifa sem sem línulega samantekt af eiginföllum ótruflaða Hamiltonvirkjans.

Heimildir

- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin. *Solid State Physics*. 1976 HOLT, RINEHART AND WINSTON.

```

> a0a:=0.1;
a0a := .1
> N:=5;
N := 5
> Eryd:=5.92;
Eryd := 5.92
> alpha:=1;
alpha := 1
> a:=1/a0a;
a := 10.
> b:=0.2*a;
b := 2.
> phi:=seq(sqrt(2*a0a)*sin(k*Pi*a0a*x),k=1..N);
phi := .4472135955 sin(.1 pi x), .4472135955 sin(.2 pi x),
.4472135955 sin(.3 pi x), .4472135955 sin(.4 pi x),
.4472135955 sin(.5 pi x)
> with(linalg):
> Epot:=matrix(N,N,(n,m)->(alpha*Eryd^n*(2*a0a*sin(n*Pi*a0a*x))^sin(m*Pi*a0
a*x),x=b..a-b));
Epot :=
[-5.344165692, 0, 1.238356038, .2368 10^-8,
.9230160920]
[0, -4.105809654, .2368 10^-8, 2.161372130, 0]
[1.238356038, .2368 10^-8, -3.182793562, .592 10^-9,
2.240207115]
[.2368 10^-8, 2.161372130, .592 10^-9, -3.103958576,
-.592 10^-9]

```

1

```

[.9230160920, 0, 2.240207115, -.592 10^-9,
-3.551999998]
> En:=seq(evalf(((k*Pi)^2*(a0a^2)^Eryd),k=1..N);
En := .5842805807, 2.337122323, 5.258525226,
9.348489291, 14.60701452
> Ekin:=diag(En);
Ekin :=
[.5842805807, 0, 0, 0, 0]
[0, 2.337122323, 0, 0, 0]
[0, 0, 5.258525226, 0, 0]
[0, 0, 0, 9.348489291, 0]
[0, 0, 0, 0, 14.60701452]
> Hmat:=evalm(Ekin+Epot);
Hmat :=
[4.759885111, 0, 1.238356038, .2368 10^-8,
.9230160920]
[0, -1.768687331, .2368 10^-8, 2.161372130, 0]
[1.238356038, .2368 10^-8, 2.075731664, .592 10^-9,
2.240207115]
[.2368 10^-8, 2.161372130, .592 10^-9, 6.244530715,
-.592 10^-9]
[.9230160920, 0, 2.240207115, -.592 10^-9,
11.05501452]
> Ehn:=eigenvals(Hmat);
Ehn := -4.995122876, -2.314489244, 1.697486831,
6.790332631, 11.66849712

```

4

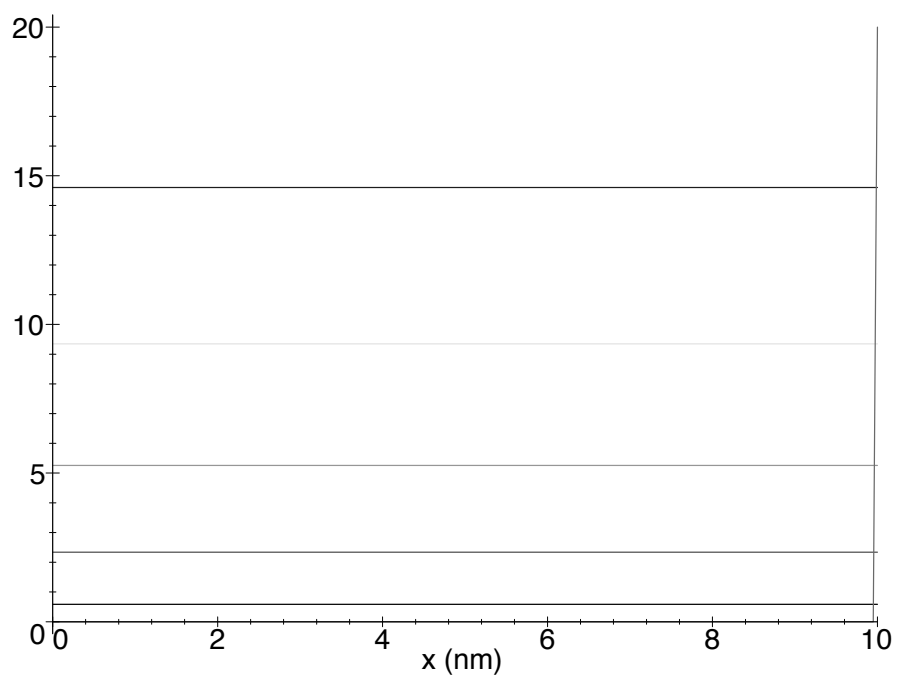
2

```

> TV:=piecewise(1, x<0, 20, x<b, 0, x<a-b, -alpha*Eryd, x<a, 0, 20);
V := piecewise(1, x < 0, 20, x < 2., 0, x < 8., -5.92, x < 10.,
0, 20)
> plot({TV, EIn}, x=0..a);
> FE:=piecewise(1, x<0, 20, x<b, 0, x<a, 0, 20);
F := piecewise(1, x < 0, 20, x < 2., 0, x < 10., 0, 20)
> plot({FE, En}, x=0..a);

```

Orka (meV)



Orka (meV)

