Reikniverkefni í EÞI

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

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

   þar sem reikninga og niðurstöður á að skala í stærðunum

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

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

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

Mættið V er lotubundið með lotu a.

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

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

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

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

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

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

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

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

þ.e. $|n,k)$ er línuleg samantekt allra sléttra bylgna með bylgjuvigur $k - K'$.

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

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

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

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

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

$$\mathsf{H}\mathbf{C}_k = \varepsilon_k \mathbf{C}_k \tag{7}$$

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

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

þar sem a er breidd brunnsins. Tímaóháða Schrödinger jafnan er

$$\hat{H}_0 \phi = E\phi \tag{9}$$

þar sem Hamiltonvirkinn er gefinn með

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

Eiginföll Hamiltonvirkjans eru

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\Big(\frac{n\pi x}{a}\Big) \tag{11}$$

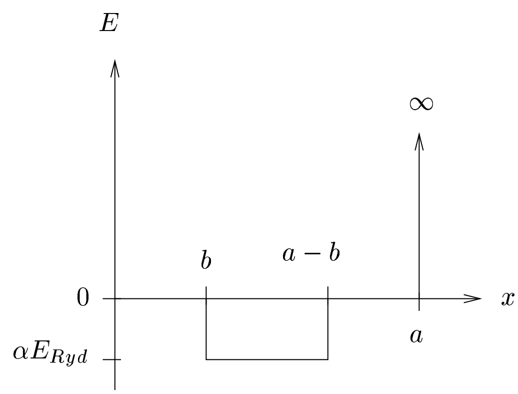
og meðfylgjandi eigingildi

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

þar sem $n = 1, 2, 3, \ldots$.

Tökum sem dæmi um truflun á Hamiltonvirkjanum mætti á forminu

$$W = -\alpha E_{Ryd}\, \theta\Big(\frac{b-a}{a_0}\Big)\ \theta\Big(\frac{x-(a-b)}{a_0}\Big) \tag{13}$$



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.

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

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

Fylkjastakið verður því

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

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

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

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

$$\psi_n(x) = \sum_j C_j^n\phi_j(x). \tag{18}$$

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*int(2*a0a*sin(n*Pi*a0a*x)*sin(m*Pi*a0
  a*x),x=b..a-b)));
```

$Epot :=$

$[-5.344165692, 0, 1.238356038, .2368\ 10^{-8}, .9230160920]$

$[0, -4.105809654, .2368\ 10^{-8}, 2.161372130, 0]$

$[1.238356038, .2368\ 10^{-8}, -3.182793562, .592\ 10^{-9}, 2.240207115]$

$[.2368\ 10^{-8}, 2.161372130, .592\ 10^{-9}, -3.103958576, -.592\ 10^{-9}]$

$[.9230160920, 0, 2.240207115, -.592\ 10^{-9}, -3.551999998]$

```
> 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);
```

$$Ekin := \begin{bmatrix} .5842805807, 0, 0, 0, 0 \\ 0, 2.337122323, 0, 0, 0 \\ 0, 0, 5.258525226, 0, 0 \\ 0, 0, 0, 9.348489291, 0 \\ 0, 0, 0, 0, 14.60701452 \end{bmatrix}$$

```
> 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);
```

$$EHn := -4.995122876,\ -2.314489244,\ 1.697486831,\ 6.790332631,\ 11.66849712$$

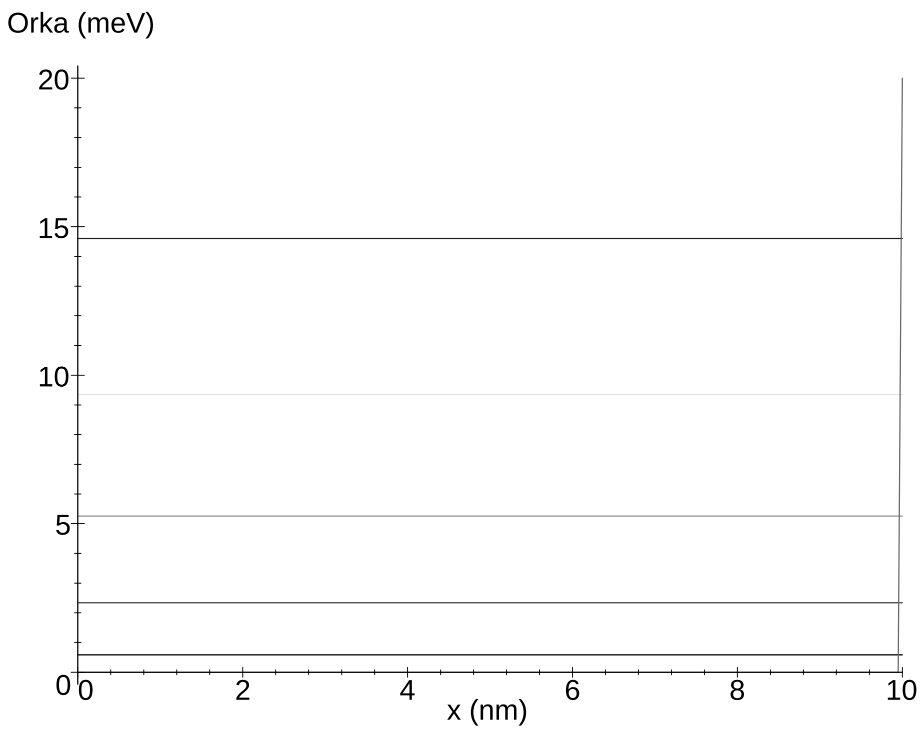
```
> fV:=piecewise(1, x<0, 20,  x<b, 0, x<a-b, -alpha*Eryd,  x<a, 0, 20);
```

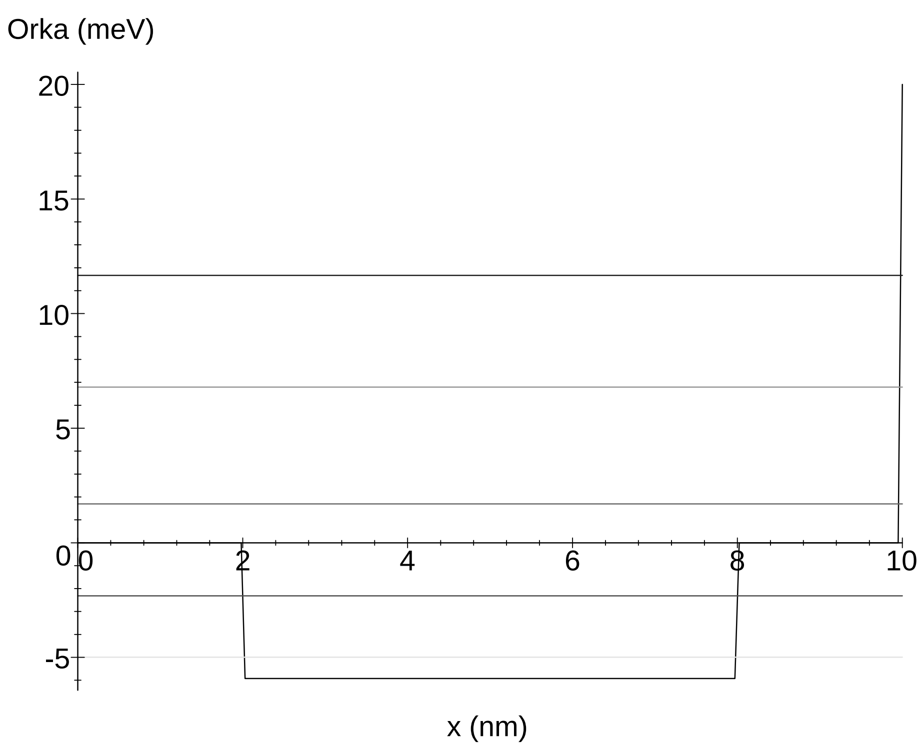
$$fV := \text{piecewise}(1,\ x < 0,\ 20,\ x < 2.,\ 0,\ x < 8.,\ \text{-}5.92,\ x < 10.,\ 0,\ 20)$$

```
> plot({fV,EHn}, x=0..a);
> fE:=piecewise(1, x<0, 20,  x<b, 0, x<a, 0, 20);
```

$$fE := \text{piecewise}(1,\ x < 0,\ 20,\ x < 2.,\ 0,\ x < 10.,\ 0,\ 20)$$

```
> plot({fE,En}, x=0..a);
>
```


Orka (meV)
20
15
10
5
0
0
2
4
6
8
10
x (nm)


Orka (meV)
20
15
10
5
0
-5
0
2
4
6
8
10
x (nm)