



# Politechnika Wroclawska

Obliczanie struktury pasmowej  
jednowymiarowego kryształu  
z potencjałem prostokątnym

Mariusz Adamski



## Plan prezentacji:

1. Przybliżenie elektronów prawie swobodnych.
2. Rozwinięcie potencjału w szereg Fouriera.
3. Szkic algorytmu.
4. Uzyskane rezultaty



# Przybliżenie elektronów prawie swobodnych

W przybliżeniu elektronów prawie swobodnych zakłada się, że funkcje falowe elektronów są dane przez superpozycję fal płaskich. Takie przybliżenie działa dopóty, dopóki periodyczny potencjał jest słaby i posiada ograniczoną liczbę wektorów sieci odwrotnej. Model ten, podobnie jak model elektronów swobodnych nie bierze pod uwagę oddziaływań między elektronami.



# Przybliżenie elektronów prawie swobodnych

Niech  $U(x)$  oznacza energię potencjalną elektronu w sieci jednowymiarowej o stałej  $a$ . Jeśli rozwiniemy  $U(x)$  w szereg Fouriera sumowany na wszystkie wektory sieci odwrotnej  $G$  ( $= 2\pi/a$ )

$$U(x) = \sum_G U_G e^{iGx},$$

możemy hamiltonian zapisać jako

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_G U_G e^{iGx}$$



# Przybliżenie elektronów prawie swobodnych

Następnie możemy rozwinąć funkcję falową na fale płaskie:

$$\psi(x) = \sum_k C_k e^{ikx}.$$

Teraz równanie Schödingera przybiera postać

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_G U_G e^{iGx} \right) \sum_k C_k e^{ikx} = \mathcal{E} \sum_k C_k e^{ikx}.$$



# Przybliżenie elektronów prawie swobodnych

Taka postać prowadzi nas do

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sum_k C_k e^{ikx} + \sum_G \sum_k U_G C_k e^{i(G+k)x} = \mathcal{E} \sum_k C_k e^{ikx}.$$

Wprowadźmy oznaczenia:  $\lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $k' = G + k$ ;

$$\lambda_k \sum_k C_k e^{ikx} + \sum_{k'} \sum_G U_G C_{k'-G} e^{ik'x} = \mathcal{E} \sum_k C_k e^{ikx}$$
$$\sum_k \left( \lambda_k C_k + \sum_G U_G C_{k-G} \right) e^{ikx} = \sum_k \mathcal{E} C_k e^{ikx}.$$



# Przybliżenie elektronów prawie swobodnych

Z ostatniej równości wynika, że

$$\forall_k (\lambda_k - \mathcal{E})C_k + \sum_G U_G C_{k-G} = 0.$$

Powyższy układ równań na współczynniki  $C_k$  ma nietrywialne rozwiązania tylko wtedy, gdy

$$\begin{vmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \cdots & \lambda_{k-G} - \mathcal{E} & U_1 & U_2 & \cdots \\ \cdots & U_{-1} & \lambda_k - \mathcal{E} & U_1 & \cdots \\ \cdots & U_{-2} & U_{-1} & \lambda_{k+G} - \mathcal{E} & \cdots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0.$$



# Przybliżenie elektronów prawie swobodnych

Zatem diagonalizując macierz

$$\begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \cdots & \lambda_{k-G} & U_1 & U_2 & \cdots \\ \cdots & U_{-1} & \lambda_k & U_1 & \cdots \\ \cdots & U_{-2} & U_{-1} & \lambda_{k+G} & \cdots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \equiv \hat{\mathcal{H}}$$

otrzymamy dozwolone wartości energii  $\mathcal{E}$ , a wektory własne złożone ze współczynników  $\{C_{k-G}\}$ , pozwolą znaleźć funkcje własne odpowiadające danym wartościom  $\mathcal{E}$ .

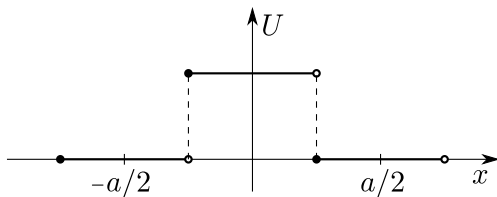




# Rozwinięcie potencjału w szereg Fouriera

Dla wygody zdefiniujemy potencjał  $U(x)$  jako

$$U(x) = \begin{cases} V_0 & \text{gdy } x \in [-\frac{a}{4} + na; \frac{a}{4} + na) \\ 0 & \text{gdy } x \in [\frac{a}{4} + na; \frac{3}{4}a + na) \end{cases} ; n \in \mathbb{Z}.$$





# Rozwinięcie potencjału w szereg Fouriera

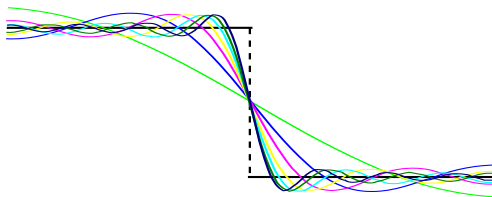
Dzięki takiemu przedstawieniu, w rozwinięciu pojawią się tylko funkcje cosinus:

$$2U_n = \frac{4}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} U(x) \cos \frac{2\pi}{a} nx dx = \frac{4V_0}{\pi n} \sin \left( n \frac{\pi}{2} \right)$$
$$U(x) = \sum_n 2U_n \cos Gnx = \sum_n U_n \left( e^{iGnx} + e^{-iGnx} \right)$$



# Rozwinięcie potencjału w szereg Fouriera

Jednakże twierdzenie o rozwijalności funkcji w szereg Fouriera gwarantuje zbieżność szeregu do wartości funkcji jedynie w punktach różniczkowalności. W istocie w punktach nieciągłości pojawia się tzw. fenomen Gibbsa.





# Rozwinięcie potencjału w szereg Fouriera

Fenomen Gibbsa może być usunięty dzięki współczynnikom  $\sigma$  Lanczosa, zdefiniowanym jako  $\text{sinc} \frac{n\pi}{m}$ , gdzie funkcja

$$\text{sinc } x \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{\sin x}{x} & \text{gdy } x \neq 0 \\ 1 & \text{gdy } x = 0 \end{cases} .$$

Jeśli szereg zapiszemy jako

$$U(x) = \sum_{n=1}^{m-1} \text{sinc} \frac{n\pi}{m} 2U_n \cos(Gnx),$$

fenomen Gibbsa znika.



# Szkic algorytmu

Obliczenia dogodnie jest prowadzić w jednostkach atomowych, gdzie m. in. masa elektronu  $m$  oraz  $\hbar$  są równe 1. Jednostką odległości w takim układzie jednostek jest promień Bohra  $a_0 \approx 5,292 \cdot 10^{-11}$  m, a jednostką energii jest tzw. energia Hartree  $E_h = 2Ry \approx 27,211$  eV.

Dzięki temu unikniemy błędów utraty precyzji związanych z dużymi różnicami rzędów wielkości.



# Szkic algorytmu

Dla otrzymania struktury pasmowej należy policzyć wartości własne hamiltonianu w bazie fal płaskich dla interesujących nas  $k$ :

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \cdots & \lambda_{k-G} & U_1 & U_2 & \cdots \\ \cdots & U_{-1} & \lambda_k & U_1 & \cdots \\ \cdots & U_{-2} & U_{-1} & \lambda_{k+G} & \cdots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$



# Szkic algorytmu

Pętla obliczeniowa może wyglądać np. tak:

```
1:  $dk \leftarrow 2G/n$ 
2: for  $i = 0$  to  $n$  do
3:    $k \leftarrow i \cdot dk - G$ 
4:   BUDUJ_HAMILTONIAN( $k$ )
5:   DIAGONALIZUJ()
6:   for all  $E \in$  WARTOŚCI_WŁASNE do
7:     DRUKUJ( $k, E$ )
8:   end for
9: end for
```



# Szkic algorytmu

Funkcje własne dla ustalonego  $k$  można otrzymać dzięki wektorom własnym;  $i$ -ta funkcja własna będzie wtedy postaci

$$\psi_k^{(i)} = \sum_G C_{k-G}^{(i)} e^{z(k-G)x},$$

gdzie  $\{C_{k-G}^{(i)}\}$  są składowymi  $i$ -tego wektora własnego.

Wektory oraz wartości własne można policzyć wykorzystując kolejno algorytmy redukcji Householdera (sprowadzając do postaci trójdiagonalnej) i QL z niejawnymi przesunięciami (diagonalizując macierz trójdiagonalną).

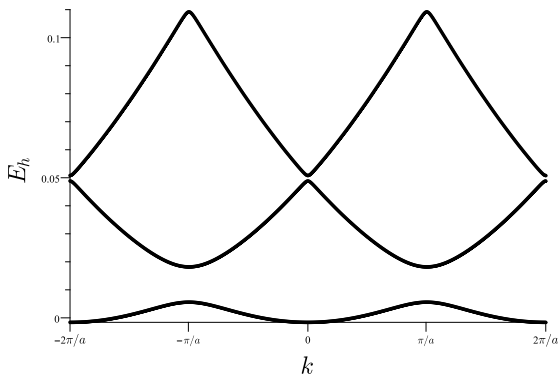




# Uzyskane rezultaty

Przykładowa struktura pasmowa dla stałej sieci

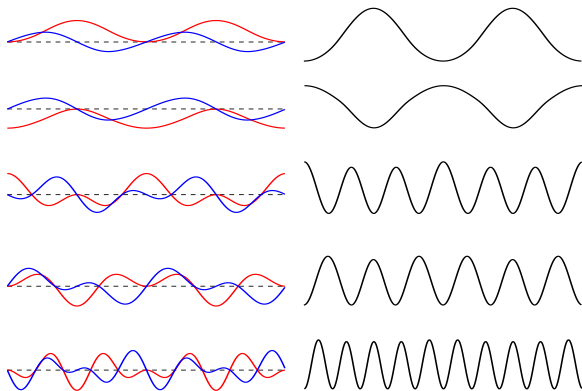
$a = 20a_0 \approx 10,6 \text{ \AA}$ , amplitudy potencjału  $V_0 = 0,2E_h \approx 5,4 \text{ eV}$   
i 10 harmoniczných.





# Uzyskane rezultaty

Kilka pierwszych funkcji własnych na granicy strefy Brillouina dla tej samej konfiguracji:





## Bibliografia:

- [1] *Wstęp do fizyki ciała stałego* – C. Kittel
- [2] *Fizyka ciała stałego* – N. W. Ashcroft, N. D. Mermin
- [3] *Numerical Recipes in C* – W. H. Press et al.
- [4] *Solid State Physics* – C. Nayak
- [5] *Z mikrokomputerem w świat fizyki półprzewodników*  
– pod red K. Jezierskiego

Kod źródłowy programu jest dostępny na

<https://opensvn.csie.org/marian/pasma>, lub

<http://nplot.republika.pl/inne/zabawki.html> (również binaria dla Windows™).