

1. Ηλεκτρόνια σε περιοδικό δυναμικό

Προαπαιτούμενες γνώσεις

- ✓ Ενεργειακές ζώνες
- ✓ Πρότυπο Kronig-Penney

Περιεχόμενο της άσκησης

Όταν N άτομα έλθουν κοντά το ένα στο άλλο, η αλληλεπίδραση τους - ιδιαίτερα αισθητή στα ηλεκτρόνια των εξωτερικών στιβάδων - έχει ως αποτέλεσμα να μην έχουμε πλέον γι' αυτά διακριτές ενεργειακές στάθμες, εντοπισμένες στο κάθε άτομο. Λόγω της αλληλεπίδρασης δημιουργούνται για το σύστημα των N ατόμων νέες στάθμες, η μια κοντά στην άλλη. Σ' ένα στερεό, όπου έχουμε έναν πολύ μεγάλο αριθμό ατόμων, οι στάθμες αυτές βρίσκονται τόσο κοντά μεταξύ τους ώστε μπορούμε πρακτικά να μιλάμε για συνεχείς **ενεργειακές ζώνες**. Σ' έναν κρύσταλλο, οι ζώνες αυτές είναι δυνατό να διακόπτονται από απαγορευμένες περιοχές, που ονομάζονται **ενεργειακά χάσματα**, και είναι αποτέλεσμα καταστροφικής κυματικής συμβολής των ηλεκτρονίων που σκεδάζονται από το περιοδικό δυναμικό του κρυστάλλου.

Για να μελετήσουμε την ηλεκτρονική δομή κρυσταλλικών στερεών και τις φυσικές ιδιότητες που απορρέουν, θεωρούμε αρχικά ότι κάθε ηλεκτρόνιο αισθάνεται ένα ηλεκτροστατικό δυναμικό (αυτό προέρχεται από τους πυρήνες και τα άλλα ηλεκτρόνια των ατόμων του κρυστάλλου) το οποίο έχει την περιοδικότητα του κρυσταλλικού πλέγματος. Ο προσδιορισμός αυτού του δυναμικού και η επίλυση της αντίστοιχης εξίσωσης Schrödinger, στη γενική περίπτωση, είναι ένα δύσκολο πρόβλημα. Στην άσκηση αυτή θα θεωρήσουμε ένα απλό μονοδιάστατο πρότυπο περιοδικού δυναμικού [R. Kronig and W. Penney, Proc. Roy. Soc. (London) **A130**, 499 (1931)] και θα μελετήσουμε με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή τις ηλεκτρονικές καταστάσεις και ιδιότητες που απορρέουν, αποκαλύπτοντας με τρόπο άμεσο ορισμένα γενικά χαρακτηριστικά της ενεργειακής δομής των ζωνών στερεών. Συγκεκριμένα, θα υπολογίσουμε τη σχέση διασποράς, την ταχύτητα και την ενεργό μάζα των ηλεκτρονίων, και θα μελετήσουμε την εξάρτησή τους από το δυναμικό θα ερμηνεύσουμε το μηχανισμό σχηματισμού ενεργειακών ζωνών και χασμάτων από την αλληλεπίδραση διακριτών καταστάσεων μεμονωμένων ατόμων καθώς και τη διάκριση των κρυστάλλων σε μέταλλα, ημιαγωγούς και μονωτές. Τα μονοδιάστατα συστήματα είναι προσφιλή κυρίως διότι, λόγω της απλότητας που τα χαρακτηρίζει, επιτρέπουν τη δυνατότητα αναλυτικής ή ημιαναλυτικής λύσης. Τα τελευταία χρόνια όμως η ραγδαία ανάπτυξη της φυσικής και της τεχνολογίας χαμηλοδιάστατων συστημάτων τα καθιστά ενδιαφέροντα όχι μόνον ως παιδαγωγικά παραδείγματα.

Προτεινόμενη βιβλιογραφία

Π.Βαρώτσος,
Κ.Αλεξόπουλος
«Φυσική Στερεάς
Κατάστασης»

1. Μέταλλα, ημιαγωγοί και μονωτές

Ένας κρύσταλλος έχει μεταλλική συμπεριφορά εάν μία ή περισσότερες ενεργειακές ζώνες είναι μερικώς συμπληρωμένες. Στην περίπτωση αυτή τα ηλεκτρόνια με τη μεγαλύτερη ενέργεια (ενέργεια Fermi) κινούνται προς μια συγκεκριμένη κατεύθυνση με την εφαρμογή συνεχούς ηλεκτρικού πεδίου διότι, εφόσον υπάρχουν μη κατειλημμένες επιτρεπτές καταστάσεις σε άμεση ενεργειακή γειτνίαση με την ενέργεια Fermi, μπορούν να προσλάβουν μια απειροελάχιστη ενέργεια. Αντίθετα, όταν οι ενεργειακές ζώνες είναι είτε εντελώς συμπληρωμένες είτε εντελώς άδειες (σε θερμοκρασία απολύτου μηδενός) έχουμε ένα μονωτή. Οι μονωτές χαρακτηρίζονται από το εύρος του ενεργειακού χάσματος που παρεμβάλλεται ανάμεσα στην κορυφή της υψηλότερης κατειλημμένης και στον πυθμένα της χαμηλότερης κενής ζώνης. Εάν το εύρος του χάσματος είναι μικρό, υπάρχει μη αμελητέα πιθανότητα να διεγερθούν μερικά ηλεκτρόνια (π.χ. με θερμική διέγερση) και να μεταπηδήσουν από την κατειλημμένη ζώνη (ζώνη σθένους) στην κενή (ζώνη αγωγιμότητας). Τα διεγερμένα ηλεκτρόνια αφήνουν πίσω στη ζώνη σθένους μη κατειλημμένες καταστάσεις (οπές) και έτσι εμφανίζεται ηλεκτρονική αγωγιμότητα και αγωγιμότητα οπών. Στερεά που είναι μονωτές στο απόλυτο μηδέν, αλλά το χάσμα τους είναι μικρό, ώστε θερμική διέγερση να οδηγεί σε μη αμελητέα αγωγιμότητα σε θερμοκρασίες κάτω από το σημείο τήξεως, ονομάζονται ημιαγωγοί. Προφανώς τα διαχωριστικά όρια ανάμεσα σε ημιαγωγούς και μονωτές δεν είναι σαφή, μιλάμε όμως για ημιαγωγό όταν το ενεργειακό του χάσμα είναι μέχρι 2 eV.

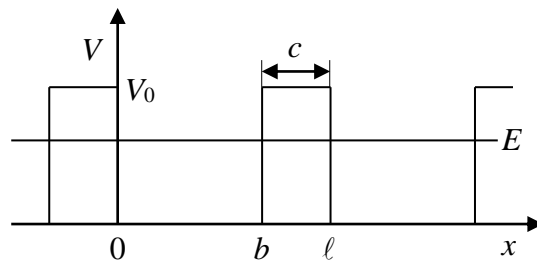
2. Περιγραφή και επίλυση του προτύπου.

Το μονοδιάστατο περιοδικό δυναμικό που θεωρούμε φαίνεται στο σχήμα 1 και έχει περίοδο $\ell = b + c$. Για ενέργειες E μικρότερες του ύψους V_0 του φραγμού, στις δύο διαφορετικές περιοχές που καλύπτουν την περίοδο του δυναμικού, η εξίσωση Schrödinger γράφεται:

$$\begin{aligned} \Psi''(x) + \kappa^2 \Psi(x) &= 0, \quad 0 < x < b \\ \Psi''(x) - \lambda^2 \Psi(x) &= 0, \quad b < x < \ell, \end{aligned} \quad (1)$$

όπου

$$\kappa \equiv \left[\frac{2m}{\hbar^2} E \right]^{1/2}, \quad \lambda \equiv \left[\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right]^{1/2} \quad (2)$$



Σχήμα 1: Μορφή μονοδιάστατου περιοδικού δυναμικού.

είναι θετικές ποσότητες και m η μάζα του ηλεκτρονίου. Οι γενικές λύσεις των εξισώσεων (1) έχουν τη μορφή:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad 0 < x < b \\ \Psi(x) &= Ce^{-\lambda x} + De^{\lambda x}, \quad b < x < \ell.\end{aligned}\tag{3}$$

Αποδεικνύεται ότι οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger σε περιοδικό δυναμικό ικανοποιούν το θεώρημα Floquet-Bloch. Εξειδικευμένο στη μία διάσταση το θεώρημα αυτό λέει ότι οι λύσεις χαρακτηρίζονται από έναν κυματαριθμό k που παίρνει τιμές:

$$k = \frac{2\pi}{N\ell} m, \quad m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots.\tag{4}$$

Για πολύ μεγάλο αριθμό κυψελίδων N του κρυστάλλου, όπως φαίνεται από την εξίσωση (4), ο κυματαριθμός παίρνει πρακτικά συνεχείς τιμές. Οι κυματοσυναρτήσεις Floquet-Bloch αν μετατοπιστούν κατά μία κυψελίδα (περίοδο) αλλάζουν μόνο κατά έναν παράγοντα $e^{k\ell}$. Δηλαδή, εφαρμόζοντας το θεώρημα Floquet-Bloch μπορούμε από τις λύσεις (3) να βρούμε τη λύση σε οποιοδήποτε σημείο x . Για παράδειγμα στο διάστημα $\ell < x < \ell + b$ παίρνουμε

$$\Psi_k(x) = (Ae^{ik(x-\ell)} + Be^{-ik(x-\ell)})e^{ik\ell}.$$

Απαιτώντας τη συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της στα σημεία b και ℓ καταλήγουμε σ' ένα σύστημα τεσσάρων ομογενών γραμμικών εξισώσεων με αγνώστους A, B, C, D , το οποίο έχει μη τετριμμένη λύση αν η ορίζουσα των συντελεστών των αγνώστων μηδενίζεται. Η συνθήκη αυτή ύστερα από πράξεις μας οδηγεί στην εξίσωση:

$$\cos kb \cosh \lambda c - \frac{\kappa^2 - \lambda^2}{2\kappa\lambda} \sin kb \sinh \lambda c = \cos k\ell, \quad \text{για } E < V_0,\tag{5}$$

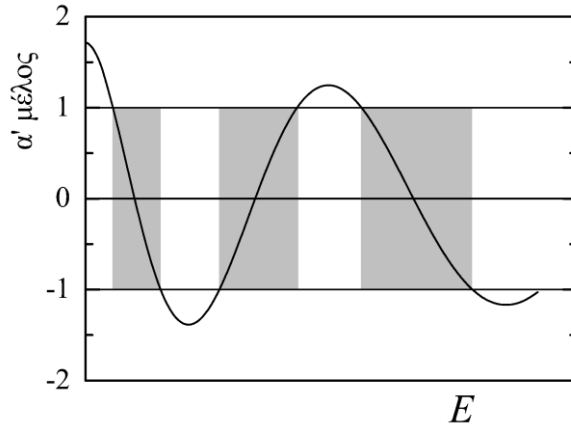
η οποία ουσιαστικά συνδέει τον κυματαριθμό k με την ενέργεια E που κρύβεται στις μεταβλητές κ, λ [βλ. εξισώσεις (2)]. Για ενέργειες $E > V_0$, ακολουθώντας εντελώς ανάλογη διαδικασία καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\cos kb \cos \mu c - \frac{\kappa^2 + \mu^2}{2\kappa\mu} \sin kb \sin \mu c = \cos k\ell, \quad \text{για } E > V_0,\tag{6}$$

όπου

$$\mu = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \right]^{1/2}\tag{7}$$

είναι θετική ποσότητα. Οι εξισώσεις (5) και (6) προσδιορίζουν τη σχέση διασποράς, δηλαδή τη σχέση της ενέργειας, που εμφανίζεται μόνο στο α' μέλος αυτών των εξισώσεων, ως προς τον κυματαριθμό, που εμφανίζεται μόνο στο β' μέλος τους. Παριστάνοντας γραφικά το α' μέλος συναρτήσει της ενέργειας για μια δεδομένη τιμή του V_0 (βλ. σχήμα 2), βλέπουμε ότι οι δύο αναλυτικές μορφές συνδέονται ομαλά στο σημείο $E = V_0$.



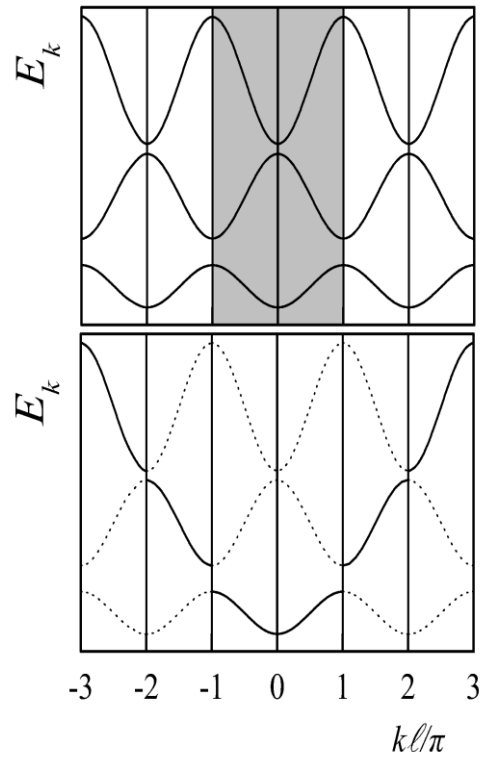
Σχήμα 2: Σχηματική παράσταση του α' μέλους των εξισώσεων (5) και (6) συναρτήσει της ενέργειας. Οι γκριζες ταινίες οριοθετούν τις ενεργειακές ζώνες.

Λύσεις των εξισώσεων (5) και (6) έχουμε προφανώς μόνον όταν το α' μέλος τους παίρνει τιμές στο διάστημα $[-1, 1]$. Τα αντίστοιχα διαστήματα της ενέργειας οριοθετούν τις επιτρεπτές ενεργειακές ζώνες. Δίνοντας διάφορες τιμές στην ενέργεια, υπολογίζουμε το α' μέλος και αν η τιμή του βρίσκεται στο διάστημα $[-1, 1]$ βρίσκουμε την αντίστοιχη τιμή του κυματαριθμού: $kl = \arccos(\alpha' \text{ μέλος})$. Οι ασυνέχειες στη σχέση διασποράς προκύπτουν όταν το α' μέλος ισούται με ± 1 , δηλαδή όταν $kl = m\pi \Rightarrow k = m\pi / \ell$, $m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$. Αυτές οι τιμές του κυματαριθμού οριοθετούν την 1^η $(-\pi / \ell, \pi / \ell)$, 2^η $[(-2\pi / \ell, -\pi / \ell), (\pi / \ell, 2\pi / \ell)]$, κλπ. ζώνη Brillouin.

Ένα σημαντικό συμπέρασμα είναι ότι οι ενεργειακές ζώνες είναι άρτιες, περιοδικές συναρτήσεις του κυματαριθμού. Πράγματι, αν αντικαταστήσουμε το k με $\pm k + m2\pi / \ell$, το β' μέλος των εξισώσεων (5) και (6) μένει το ίδιο. Επίσης προκύπτει ότι κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε κυματαριθμούς k και $k' = k + m2\pi / \ell$ είναι ίδιες:

$$\begin{aligned} E_k &= E_{k+m2\pi / \ell} \\ \Psi_k(x) &= \Psi_{k+m2\pi / \ell}(x). \end{aligned} \tag{8}$$

Το συμπέρασμα αυτό είναι γενικό και είναι απόρροια της μορφής που έχουν οι συναρτήσεις Floquet-Bloch. Για το λόγο αυτό, αρκεί να θεωρούμε τον κυματαριθμό σε μία μόνο ζώνη Brillouin (για απλότητα στην 1^η ζώνη), όπου έχει κανείς το πλήρες φάσμα των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων της χαμιλτονιανής (αναπαράσταση ανηγμένης ζώνης), το οποίο επαναλαμβάνεται περιοδικά στις άλλες ζώνες (αναπαράσταση περιοδικής ζώνης). Στις δύο αυτές αναπαραστάσεις οι ενεργειακές ζώνες παρουσιάζονται με τη μορφή μιας πλειονότιμης σχέσης $E_{n,k}$ που εμφανίζει διάφορους κλάδους n . Η αναπαράσταση περιοδικής ζώνης περιέχει την πληροφορία της περιοδικότητας που είναι δεδομένη κι έτσι συνήθως θεωρούμε την



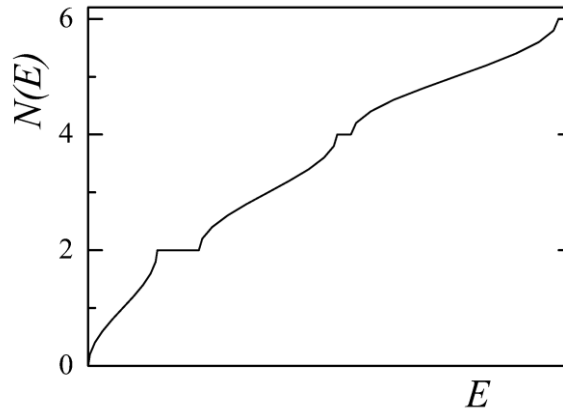
Σχήμα 3: Καμπύλες διασποράς στην αναπαράσταση περιοδικής ζώνης (πάνω), ανηγμένης ζώνης (πάνω, γκριζα περιοχή) και επεκταμένης ζώνης (κάτω).

αναπαράσταση ανηγμένης ζώνης, όπου το πεδίο ορισμού της σχέσης διασποράς είναι η 1^η ζώνη Brillouin. Μια άλλη ενδιαφέρουσα αναπαράσταση που φαίνεται μαζί με τις άλλες δύο στο σχήμα 3 είναι αυτή της επεκταμένης ζώνης. Για να την κατασκευάσουμε θεωρούμε την πρώτη ενεργειακή ζώνη στην 1^η ζώνη Brillouin, τη δεύτερη ενεργειακή ζώνη στη 2^η ζώνη Brillouin κ.ο.κ. Έτσι μπορούμε να θεωρήσουμε ένα μόνο, αλλά ασυνεχή κλάδο. Μιλάμε δηλαδή για μια (μονότιμη) συνάρτηση διασποράς E_k , που έχει πεδίο ορισμού όλον τον αντίστροφο χώρο.

3. Αριθμός καταστάσεων

Η σχέση (4) μας λέει ότι, στον αντίστροφο χώρο, το στοιχειώδες μήκος του κυματάρθμου είναι σταθερό, ίσο με:

$$\Delta k = k_{(m+1)} - k_{(m)} = \frac{2\pi}{N\ell}. \quad (9)$$



Σχήμα 4: Αριθμός καταστάσεων ηλεκτρονίων ανά κυψελίδα μέχρι ενέργεια E .

Επομένως, ο κυματαριθμός έχει $2\pi / (\ell\Delta k) = N$ επιτρεπτές τιμές σε κάθε ζώνη Brillouin. Στο μονοδιάστατο πρόβλημα που εξετάζουμε, ο συνολικός αριθμός των καταστάσεων των ηλεκτρονίων μέχρι ενέργεια E μπορεί να υπολογιστεί με απλό τρόπο από την αναπαράσταση της επεκταμένης ζώνης (κάτω διάγραμμα στο σχήμα 3) ως εξής. Οι επιτρεπτές τιμές του κυματαριθμού εκτείνονται από $-k(E)$ έως $k(E)$, όπου η συνάρτηση $k(E)$ είναι αύξουσα, επομένως αυτές είναι $2k(E)/\Delta k = N\ell k(E)/\pi$. Σε κάθε τιμή του κυματαριθμού όμως αντιστοιχεί μία κβαντική κατάσταση που μπορεί, όπως είναι γνωστό, να φιλοξενήσει δύο ηλεκτρόνια με αντίθετο σπιν. Έτσι βρίσκουμε τελικά ότι ο ολικός αριθμός καταστάσεων των ηλεκτρονίων μέχρι ενέργεια E είναι:

$$N_{ολ}(E) = \frac{2N\ell}{\pi} k(E), \quad \text{για } 0 < k(E) < \infty. \quad (10)$$

Επομένως, ο αριθμός καταστάσεων των ηλεκτρονίων ανά κυψελίδα μέχρι ενέργεια E δίνεται από τη σχέση:

$$N(E) = \frac{N_{ολ}(E)}{N} = \frac{2\ell}{\pi} k(E), \quad \text{για } 0 < k(E) < \infty, \quad (11)$$

που παριστάνεται γραφικά στο σχήμα 4. Προφανώς κάθε ενεργειακή ζώνη εκτείνεται σε μία ζώνη Brillouin (βλ. κάτω διάγραμμα στο σχήμα 3) και περιλαμβάνει 2 καταστάσεις ηλεκτρονίων ανά κυψελίδα γιατί όπως είπαμε σε μία ζώνη Brillouin υπάρχουν N δυνατές τιμές του κυματαριθμού, ενώ στις περιοχές των χασμάτων δεν προστίθενται νέες καταστάσεις.

4. Ημικλαστική δυναμική ηλεκτρονίων σε κρύσταλλο

Για να περιγράψουμε την απόκριση των ηλεκτρονίων ενός κρυστάλλου σε εξωτερικό πεδίο, είναι δυνατόν υπό ορισμένες προϋποθέσεις να διαχωρίσουμε την επίδραση του εξωτερικού πεδίου από αυτήν των εσωτερικών αλληλεπιδράσεων και να χειριστούμε την πρώτη κλασικά. Στα πλαίσια ενός κλασικού χειρισμού βέβαια, μιλάμε για κίνηση σωματιδίου με συγκεκριμένη θέση και ορμή υπό την επίδραση μιας δύναμης. Χρειάζεται επομένως να συμβιβάσουμε την κλασική εικόνα με την κβαντική περιγραφή των ηλεκτρονίων, τα οποία δεν είναι χωρικά εντοπισμένα. Αυτό γίνεται αν από καταστάσεις Floquet-Bloch με κυματανύσματα εντός ενός σχετικά στενού εύρους $\Delta\mathbf{k}$ περί μια τιμή \mathbf{k} κατασκευάσουμε ένα χωρικά εντοπισμένο κυματοπακέτο. Η ταχύτητα ομάδας του κυματοπακέτου δίνεται από τη σχέση:

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} \quad (12)$$

Το έργο εξωτερικής δύναμης \mathbf{F} για μια μετατόπιση του κέντρου του κυματοπακέτου κατά $\Delta\mathbf{r}$ ισούται με τη μεταβολή της ενέργειάς του $\Delta E_{n\mathbf{k}}$. Χρησιμοποιώντας τη σχέση (12) καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt} \hbar\mathbf{k}. \quad (13)$$

Παραβάλλοντας την εξίσωση (13) με το νόμο του Newton: "Δύναμη=ρυθμός αλλαγής της ορμής" καθίσταται προφανές ότι πρέπει να αποδώσουμε στο ηλεκτρόνιο του κρυστάλλου μια φαινόμενη ορμή ίση με $\hbar\mathbf{k}$, της οποίας ο ρυθμός μεταβολής μας δίνει μόνο την εξωτερική, και όχι τη συνολική, δύναμη που ασκείται στο ηλεκτρόνιο.

Στα πλαίσια της ημικλαστικής προσέγγισης, η κίνηση ενός ηλεκτρονίου σ' ένα περιοδικό δυναμικό και υπό την επίδραση εξωτερικής δύναμης, είναι ισοδύναμη με την κίνηση ενός ελεύθερου ψευδοσωματιδίου (κρυσταλλικό ηλεκτρόνιο), ορμής $\hbar\mathbf{k}$, υπό την επίδραση της εξωτερικής δύναμης και μόνο. Στην ταυτότητα του ψευδοσωματιδίου ενσωματώνουμε κατ' αυτόν τον τρόπο όλη τη δυναμική της αλληλεπίδρασής του με το κρυσταλλικό δυναμικό. Μπορούμε τώρα να διατυπώσουμε το νόμο του Newton για το ψευδοσωματίδιο ως εξής: "Η εξωτερική δύναμη που ασκείται σ' ένα ηλεκτρόνιο που κινείται μέσα σ' έναν κρύσταλλο είναι ανάλογη της συνολικής επιτάχυνσης που αποκτά αυτό, από εσωτερικές και εξωτερικές δυνάμεις". Έτσι οδηγούμαστε στο να αποδώσουμε στο ψευδοσωματίδιο μια μάζα σε κάθε κατάσταση \mathbf{k} :

$$m_{ij}^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E_{nk}}{\partial k_i \partial k_j} \right]^{-1}. \quad (14)$$

Η φαινόμενη αυτή μάζα λέγεται ενεργός μάζα και στη γενική περίπτωση είναι ένας τανυστής που εξαρτάται από το κυματόνισμα. Σε μονοδιάστατα προβλήματα εκφυλίζεται σε βαθμωτό μέγεθος:

$$m^* = \hbar^2 \left[\frac{d^2 E_{nk}}{dk^2} \right]^{-1}. \quad (15)$$

5. Περιγραφή του προγράμματος

Στους υπολογισμούς ηλεκτρονικής δομής, για λόγους απλούστευσης των εξισώσεων χρησιμοποιούμε κατάλληλο σύστημα ατομικών μονάδων (au) θέτοντας $\hbar = 1$, $m = 1/2$, $e^2 = 2$.

Έτσι η εξίσωση Schrödinger για ένα ηλεκτρόνιο σε δυναμικό $V(\mathbf{r})$ γράφεται:

$$[-\nabla^2 + V(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}).$$

Η μονάδα μήκους ισούται με την ακτίνα Bohr (ακτίνα της πλησιέστερης στον πυρήνα του υδρογόνου ηλεκτρονικής τροχιάς, σύμφωνα με τη θεωρία του Bohr):

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 1 \text{ au} = 0.529177 \times 10^{-8} \text{ cm}.$$

Η ατομική μονάδα ενέργειας ισούται με 1 Ry (ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου):

$$1 \text{ Ry} = \frac{e^2}{2a_0} = 1 \text{ au} = 13.6058 \text{ eV}.$$

Η άσκηση πραγματοποιείται με εκτέλεση του προγράμματος "KRONIG", το οποίο επιλύει τις εξισώσεις (5) και (6). Το πρόγραμμα θεωρεί δεδομένες τις αποστάσεις: $b = 1 \text{ au}$ και $c = 2 \text{ au}$. Έτσι το μήκος της ατομικής κυψελίδας είναι: $\ell = 3 \text{ au}$ [βλ. σχήμα 1]. Ως μεταβλητές παραμέτρους στην είσοδο έχουμε:

- Το ύψος V_0 (Ry) του φραγμού δυναμικού ($V_0 > 0$).
- Το ενεργειακό διάστημα (E_1, E_2) (Ry) όπου θέλουμε να λύσουμε τις εξισώσεις (5), (6) ($0 < E_1 < E_2$).
- Τον αριθμό NE των σημείων E που θεωρούμε ισοκατανεμημένα στο διάστημα (E_1, E_2) ($NE > 2$).

Ως αποτέλεσμα παίρνουμε για κάθε τιμή της ενέργειας E (Ry) τον αντίστοιχο κυματαριθμό k στην 1^η ζώνη Brillouin, πολλαπλασιασμένο με ℓ/π (δηλ. αδιάστατο).

ΕΚΤΕΛΕΣΗ ΤΗΣ ΑΣΚΗΣΗΣ

1. Σχεδιάστε το ευθύ και το αντίστροφο πλέγμα για το πρόβλημά μας. Οριοθετήστε την 1^η ζώνη Brillouin.

2. Θεωρήστε ύψος φραγμού $V_0 = 0.5$ Ry και ενέργεια $E = 1$ Ry. Λύστε με μια αριθμομηχανή τσέπης την εξίσωση (6) και βρείτε τον ανηγμένο κυματαριθμό $k\ell/\pi$ της 1^{ης} ζώνης Brillouin που αντιστοιχεί σ' αυτήν την ενέργεια. Οι πράξεις που κάνετε γίνονται αυτόματα από το πρόγραμμα KRONIG.

3. Δώστε στο ύψος του φραγμού V_0 μια τιμή μεταξύ 0.4 και 0.5 Ry. Εκτελώντας το πρόγραμμα KRONIG προσδιορίστε ένα ενεργειακό διάστημα (E_1, E_2) στο οποίο να βρίσκονται οι δύο πρώτες ζώνες και τα δύο πρώτα χάσματα. Σαρώστε το διάστημα (E_1, E_2) με ένα βήμα της τάξης του 0.1 Ry, και αν χρειαστεί κάνετε στη συνέχεια μια λεπτομερέστερη υποδιαίρεση του διαστήματος.

Υπόδειξη: Μια προσεγγιστική εκτίμηση του διαστήματος (E_1, E_2) έχετε αν θεωρήσετε ότι η σχέση διασποράς στην αναπαράσταση της επεκταμένης ζώνης (βλ. κάτω διάγραμμα στο σχήμα 3) δε διαφέρει πολύ από αυτήν των ελεύθερων ηλεκτρονίων ($E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, δηλαδή $E_k = k^2$ σε μονάδες Ry).

4. Προσδιορίστε με ακρίβεια 1 mRy τη θέση και το εύρος των δύο πρώτων ενεργειακών ζωνών και των δύο πρώτων ενεργειακών χασμάτων.

Υπόδειξη: Εκτελέστε το πρόγραμμα KRONIG για λεπτομερέστερες ενεργειακές υποδιαίρεσεις κοντά στα άκρα των ζωνών, μέχρι να τα προσδιορίσετε με τη ζητούμενη ακρίβεια.

5. Παραστήστε γραφικά τη σχέση διασποράς στην πρώτη ζώνη του Brillouin, καθώς και τον αριθμό καταστάσεων μέχρι ενέργεια E , στο διάστημα (E_1, E_2) .

6. Θεωρήστε ότι κάθε κυψελίδα έχει ένα άτομο με 1, 2, 3 ή 4 ηλεκτρόνια σθένους. Οριοθετήστε σε κάθε περίπτωση, για $T = 0^\circ \text{K}$ (ώστε να αγνοήσετε κάθε θερμική διέγερση ηλεκτρονίων), τις κατειλημμένες ενεργειακές καταστάσεις. Αποδώστε ανάλογα στον κρύσταλλο το χαρακτηρισμό του μετάλλου, ημιαγωγού ή μονωτή.

7. Υπολογίστε την ταχύτητα και την ενεργό μάζα για τις καταστάσεις της πρώτης ενεργειακής ζώνης που έχετε βρει και σχολιάστε το αποτέλεσμα.

Υπόδειξη: Χρειάζεστε την 1^η και 2^η παράγωγο της ενέργειας ως προς τον κυματριθμό. Θεωρήστε ότι ανά τρία γειτονικά σημεία που υπολογίσατε περνάει ένα πολυώνυμο β' βαθμού. Από το εκάστοτε σύστημα τριών γραμμικών εξισώσεων που προκύπτει υπολογίστε τους συντελεστές του πολυωνύμου και στη συνέχεια τα ζητούμενα μεγέθη. Με μεγαλύτερη ακρίβεια υπολογίζετε έτσι τις παραγώγους στα ενδιάμεσα σημεία.

8. Δεκαπλασιάστε το ύψος V_0 του φραγμού και εντοπίστε πάλι τις δύο πρώτες ενεργειακές ζώνες και τα δύο πρώτα ενεργειακά χάσματα. Τι παρατηρείτε; Δικαιολογήστε ποιοτικά τα συμπεράσματά σας.