Kronig-Penneyev model v približku šibkega potenciala

V tej nalogi bomo izračunali širino energijske vrzeli iz točne rešitve Kronig-Penneyevega modela in primerjali dobljeno vrednost s približno vrednostjo elektronov v šibkem potencialu. Potencial je oblike:

$$V(x) = \sum_n \lambda\delta(x - na)$$

Na prvih vajah, ko smo računali Kronig-Penneyev model kristala smo prišli do enačbe, ki povezuje naš valovni vektor $q = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ in valovni vektor k iz Blochove valovne funkcije

$$\cos(ka) = \cos(qa) + Qa\frac{\sin(qa)}{qa}$$

kjer je: $Q = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$. Leva stran enačbe ima vrednost med -1 in 1 rešitve so $qa = n\pi \Rightarrow q = n\frac{\pi}{a}$, pri teh vrednostih desna stran zapusti območje med -1 in 1, ponovno pa se vrne pri $qa = \pi + ax$, če $n = 1$. Da izračunamo x razvijemo desno stran okoli $qa = \pi$:

$$-1 = -1 + \frac{1}{2}(ax)^2 + \frac{Qa}{\pi + ax}(-ax)$$

$$\frac{a^2x^2}{2} + \frac{Qa}{\pi}(-ax)$$

$$x = \frac{2Qa^2}{a^2\pi} = \frac{2Q}{\pi}$$

$$q = \frac{\pi}{a} + \frac{2Q}{\pi}$$

Sedaj ko imamo celoten interval prepovedanih valovnih vektorjev lahko izračunamo velikost energijske reže: $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$.

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m}\left((\frac{\pi}{a} + \frac{2Q}{\pi})^2 - \frac{\pi^2}{a^2}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2}{a^2} + \frac{4Q\pi}{a\pi} + \frac{4Q^2}{\pi^2} - \frac{\pi^2}{a^2}\right)$$

kjer člen s Q^2 zanemarimo in dobimo:

$$\Delta E = \frac{4\hbar^2 m\lambda}{2ma\hbar^2} = \frac{2\lambda}{a}$$

V približku šibkega potenciala pa razvijemo potencial po vektorjih recipročne mreže $K = \frac{2\pi}{a}m$:

$$V(x) = \sum_n \lambda\delta(x - na) = \sum_K U_K e^{iKx}$$

$$U_K = \frac{1}{a}\int_{celica} e^{-iKx}V(x)dx$$

Ker je $V(x)$ realen in ker imamo simetrijo $V(x) = V(-x) \Rightarrow U_{-K} = U_K^* = U_K$ tudi realen: $U_K = \frac{\lambda}{a}$. Enačbo, ki opisuje energijo, smo izpeljali na predavanjih:

$$(\epsilon^0_{k-K_i} - \epsilon)C_{k-K_i} + \sum_{K_j} U_{K_j - K_i} C_{k-K_j} = 0$$

Ker je $\epsilon^0_{k-K_i}$ enaka za dva valovna vektorja recipročne mreže $K_1 = 0$ in $K_2 = \frac{2\pi}{a}$ pri $k = \frac{\pi}{a}$ imamo 2 kratno degeneracijo, sistem enačb:

$$(\epsilon^0 - \epsilon)C_1 + U_{\frac{2\pi}{a}} C_2 = 0$$

$$(\epsilon^0 - \epsilon)C_2 + U_{-\frac{2\pi}{a}} C_1 = 0$$

nam da:
$\epsilon_1 = \epsilon^0 + U$ in lastni vektor $[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}]$ in $\epsilon_2 = \epsilon^0 - U$ in $[-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}]$. Energijska reža je:

$$\Delta\epsilon = \epsilon^0 + U - (\epsilon^0 - U) = 2U = \frac{2\lambda}{a}$$

Valovna funkcija je:

$$\psi_k(r) = \sum_K C_{k-K} e^{i(k-K)r}$$

in gostota verjetnosti je $\rho(r) = |\psi|^2$
za ϵ_1:

$$\psi_{\frac{\pi}{a}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\pi}{a}x} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\pi}{a}x} = \sqrt{2}\cos\frac{\pi}{a}x$$

$$\rho(x) = 2\cos^2\frac{\pi}{a}x$$

za ϵ_2:

$$\psi_{\frac{\pi}{a}}(x) = -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\pi}{a}x} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\pi}{a}x} = -i\sqrt{2}\sin\frac{\pi}{a}x$$

$$\rho(x) = 2\sin^2\frac{\pi}{a}x$$

Če pogledamo valovne funkcije za stanja ϵ_1 in ϵ_2 in njune gostote verjetnosti, vidimo da se elektroni s stanjem ϵ_1 nahajajo na delta funkcijah, kjer je potencial večji, z večjo verjetnostjo. Zato tudi imajo večjo energijo.