**Министерство Образования, Молодежи и Спорта**

**Республики Молдова**

**Государственный университет Молдовы**

**Курсовая Работа**

**Тема: Электрон в слое.**

Работу выполнил

студент 3-го курса:

**Радченко Андрей**

**Кишинёв 1997 г.Микрочастица (электрон) в слое.**

Собственно говоря, одномерная задача, которая сейчас будет рассмотрена, во многих учебных руководствах довольно подробно разобрана путём введения некоторых упрощений.

Она состоит в следующем :

Микрочастица (электрон) движется вдоль оси **x**, и её движение полностью определяется следующим гамильтонианом :

⎧ −2/(2m)⋅∂2/∂x2 + U0 , x < −a

∧ ⎪

H = ⎨ −2/(2m0)⋅∂2/∂x2 , −a < x < a

⎪

⎩ −2/(2m)⋅∂2/∂x2 + U0 , x > a

Где m - эффективная масса электрона в областях I , III ;

m0 - эффективная масса электрона в области II.

Запишем уравнение Шрёдингера для каждой области :

⎧ ∂2ΨI/∂x2 + 2m/2⋅(E − U0)ΨI = 0 , x ≤ −a

⎪

⎨ ∂2ΨII/∂x2 + 2m0/2⋅E⋅ΨI = 0 , −a ≤ x ≤ a

⎪

⎩ ∂2ΨIII/∂x2 + 2m/2⋅(E − U0)⋅ΨI = 0 , x ≥ a



**Область I :**

Общий вид решения уравнения Шрёдингера для 1-ой области записывается сразу :

ΨI(x) = A⋅exp(n⋅x) + B⋅exp(−n⋅x).

Используя свойство ограниченности волновой функции, мы придём к тому что B = 0. Значит,

ΨI(x) = A⋅exp(n⋅x).

Волновая функция для второй области тоже элементарно определяется :

ΨII(x) = C⋅exp(**i**⋅k⋅x) + D⋅exp(−**i**⋅k⋅x).

Функция состояния для третьей области выглядит так :

ΨIII(x) = F⋅exp(−n⋅x).

Где

k = (2m0⋅E/2)1/2

n = (2m⋅(U0−E)/2)1/2.

Стратегия наших дальнейших действий будет состоять в следующем :

1. Напишем систему из 4 уравнений, удовлетворение которых эквивалентно удовлетворению функциями граничным условиям.
2. В этой системе из 4 уравнений будут фигурировать неизвестные коэффициенты A,C,D и F. Мы составим линейную однородную систему относительно них.
3. Ясно, что существование нетривиальных решений допускается только в случае когда детерминант системы равен нулю. Как выяснится чуть позже, из этого весьма полезного факта мы извлечём уравнение, корнями которого будут возможные уровни энергии.

Приступим к осуществлению первого пункта, т.е. запишем условия сшивания волновых функций :

ΨI(x=−a) = ΨII(x=−a)

ΨII(x=a) = ΨIII(x=a)

ΨI′(x=−a)/m = ΨII′(x=−a)/m0

ΨII′(x=a)/m0 = ΨIII′(x=a)/m

А в наших определениях этих функций это выглядит так :

A⋅exp(−n⋅a) = C⋅exp(−**i**⋅k⋅a) + D⋅exp(**i**⋅k⋅a)

m−1⋅A⋅ n⋅exp(−n⋅a) = **i**⋅k⋅/m0⋅(C⋅exp(−**i**⋅k⋅a) − D⋅exp(**i**⋅k⋅a))

C⋅exp(**i**⋅k⋅a) + D⋅exp(−**i**⋅k⋅a) = F⋅exp(−n⋅a)

**i**⋅k⋅/m0⋅(C⋅exp(**i**⋅k⋅a) − D⋅exp(−**i**⋅k⋅a)) = − n/m⋅F⋅exp(−n⋅a).

Теперь составим определитель :

|exp(−n⋅a) −exp(−**i**⋅k⋅a) −exp(**i**⋅k⋅a) 0 |

|m−1⋅n⋅exp(−n⋅a) −1/m0⋅**i**⋅k⋅exp(−**i**⋅k⋅a) 1/m0⋅**i**⋅k⋅exp(**i**⋅k⋅a) 0 |

|0 exp(**i**⋅k⋅a) exp(−**i**⋅k⋅a) −exp(−n⋅a) |

|0 1/m0⋅**i**⋅k⋅exp(**i**⋅k⋅a) −1/m0⋅**i**⋅k⋅exp(−**i**⋅k⋅a) 1/m⋅n⋅exp(−n⋅a)|

Если теперь раскрыть этот определитель по обычным правилам и приравнять его к нулю, то мы получим следующее уравнение для уровней энергии:

((n/m)2 − (k/m0)2)⋅Sin(2⋅k⋅a) + 2⋅k⋅n/(m⋅m0)⋅Cos(2⋅k⋅a) = 0.

Это уравнение решается численным методом, а именно, методом Ньютона.

Найдём неизвестные коэффициенты A, C, D, F для более полного описания волновой функции. Для этого воспользуемся некоторыми соотношениями, которые непосредственно вытекают из условий сшивания и условия нормировки.

C = F⋅exp(−n⋅a)⋅{exp(**i**⋅k⋅a) + exp(−3⋅**i**⋅k⋅a) ⋅( **i**⋅k/m0 − n/m)/(n/m + **i**⋅k/m0)}

D = C⋅exp(−2⋅**i**⋅k⋅a)⋅( **i**⋅k/m0 − n/m)/(n/m + **i**⋅k/m0)

A = exp(n⋅a)⋅(C⋅exp(−**i**⋅k⋅a) + D⋅exp(**i**⋅k⋅a)) .

Поскольку A, C и D линейно зависят от F, то целесообразно ввести обозначения :

A = RA⋅F

C = RC⋅F

D = RD⋅F.

RA, RC, RD - известные постоянные.

Таким образом, если мы каким-то образом узнаем константу F, то мы определим остальные константы A, C, D. А сделаем мы это с помощью условия нормировки.

Действительно :

ΨI(x) = F⋅RA⋅exp(n⋅x)

ΨII(x) = F⋅( RC⋅exp(**i**⋅k⋅x) + RD⋅exp(−**i**⋅k⋅x)).

ΨIII(x) = F⋅exp(−n⋅x).

I1 + I2 + I3 = 1

Где

I1 = |F|2⋅|RA|2⋅∫Θexp(2⋅n⋅x)⋅dx = |F|2⋅|RA|2⋅(2⋅n)−1⋅exp(2⋅n⋅x) =

= |F|2⋅|RA|2⋅(2⋅n)−1⋅exp(−2⋅n⋅a)

I2 = |F|2⋅{ ∫Λ|RC|2⋅dx + ∫Λ|RD|2⋅dx + RC⋅RD\*⋅∫Λexp(2⋅**i**⋅k⋅x)⋅dx +

+ RC\*⋅RD⋅∫Λexp(−2⋅**i**⋅k⋅x)⋅dx } = |F|2⋅{ 2⋅a⋅(|RC|2 + |RD|2) +

((exp(2⋅**i**⋅k⋅a) − exp(−2⋅**i**⋅k⋅a))⋅RC⋅RD\*/(2⋅**i**⋅k) +

+ **i**⋅((exp(−2⋅**i**⋅k⋅a) − exp(2⋅**i**⋅k⋅a))⋅RC\*⋅RD/(2⋅k) }

I3 = |F|2⋅∫Ωexp(−2⋅n⋅x)⋅dx = |F|2⋅(2⋅n)−1⋅exp(−2⋅n⋅a)

|F|2 = { |RA|2⋅(2⋅n)−1⋅exp(−2⋅n⋅a) + 2⋅a⋅(|RC|2 + |RD|2) +

((exp(2⋅**i**⋅k⋅a) − exp(−2⋅**i**⋅k⋅a))⋅RC⋅RD\*/(2⋅**i**⋅k) +

+ **i**⋅((exp(−2⋅**i**⋅k⋅a) − exp(2⋅**i**⋅k⋅a))⋅RC\*⋅RD/(2⋅k) + (2⋅n)−1⋅exp(−2⋅n⋅a) }−1.

Теперь, когда мы знаем F, нетрудно определить коэффициенты A, C, D, а значит и волновую функцию, характеризующую состояние электрона.

**Электрон в слоях**

Задача, которая сейчас будет описана, характеризуется тем, что потенциал обладает пространственной периодичностью. Схематически это изображается так.



То есть, это ни что иное как одномерное движение электрона в периодическом поле. Графически это можно изобразить серией потенциальных барьеров или, как говорят, серией потенциальных ступенек.

Аналитически условие периодичности потенциала записывается весьма просто:

U(x)=U(x+2a) (1)

Соотношение (1) записано в предположении, что ширина каждой потенциальной ямы равна ширине всякого потенциального барьера.

Ясно, что волновые функции, соответствующие областям I, III, удовлетворяют одному и тому же уравнению Шредингера:

∂2Ψ/∂x2 + 2m/2⋅(E − U0)Ψ = 0

следовательно эти функции отличаются только постоянным множителем, который называется фазовым множителем.

Этот фазовый множитель мы будем обозначать следующим образом:

ρ = exp(**i** 2ak)

Тогда Ψ(x+2ma) = Ψ(x)⋅ρm , где m=0, ±1, ±2,... (2)

Оказывается, что достаточным для определения дискретного энергетического спектра (рассматривается только случай когда E<U0) и волновой функции является рассмотрение областей I, II, III. Действительно, пользуясь соотношением (2), мы определим волновую функцию на всей действительной оси.

**Рассмотрим область I:**

Уравнение Шредингера для нее записывается в виде:

∂2ΨI/∂x2 + 2m2/2⋅(E − U0)ΨI = 0 , 0 > x > −a

его решение выглядит просто:

ΨI(x) = A⋅exp(n⋅x) + B⋅exp(−n⋅x).

Где n = (2m2 (U0-E) /2)1/2

**Рассмотрим область II:**

Уравнение Шредингера для нее записывается в виде:

∂2ΨII/∂x2 + 2m1/2⋅E ΨII = 0 , a ≥ x ≥ 0

его решение выглядит просто:

ΨII(x) = C⋅exp(**i**⋅p⋅x) + D⋅exp(−**i**⋅p⋅x).

Где p = (2m1E/2)1/2

**Рассмотрим область III:**

∂2ΨIII/∂x2 + 2m2/2⋅(E − U0)ΨIII = 0 , 2a > x > a

его решение выглядит просто:

ΨIII(x) = ρ (A⋅exp(n⋅x) + B⋅exp(−n⋅x)).

Запишем граничные условия:

ΨI(x=0) = ΨII(x=0)

ΨII(x=a) = ΨIII(x=a)

ΨI′(x=0)/m = ΨII′(x=0)/m0

ΨII′(x=a)/m0 = ΨIII′(x=a)/m

Подставляя волновые функции в эту систему уравнений, мы получим некоторые связи между коэффициентами A, B, C, D:

A+B=C+D

C exp(**i** p a)+D exp(-**i** p a) = exp(**i** 2 a k) (A exp(n a)+B exp(-n a))

(A-B) n/m2 = (C-D) **i** p / m1

(C exp(**i** p a)-D exp(-**i** p a)) **i** p / m1 = exp(**i** 2 a k) n/m2 (A exp(n a)-B exp(-n a))

Следуя приведённым выше соображениям, мы составим определитель :

|1 1 −1 −1 |

|exp(**i**⋅k⋅2a+n⋅a) exp(**i**⋅k⋅2a−n⋅a) −exp(**i**⋅p⋅a) −exp(−**i**⋅p⋅a) |

|n/m2 −n/m2 −**i**⋅p/m1 **i**⋅p/m1 |

|n/m2exp(**i**⋅k⋅2a+n⋅a) −n/m2⋅exp(**i**⋅k⋅2a−n⋅a) − **i**⋅p/m1⋅exp(**i**⋅p⋅a) **i**⋅p/m1⋅exp(−**i**⋅p⋅a) |

и приравняем его к нулю.

Результатом раскрытия определителя будет весьма громоздкое уравнение содержащее в качестве неизвестного энергию электрона.

Рассчитанные уровни энергии для различных эффективных масс приведены ниже.

a=10; U=10; m1=4; m2=1

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 0.1135703312666857 | 0.6186359585387896 | 0.2019199605676639 |
| 0.3155348518478819 | 0.05047267055441365 | 1.263391478912778 |
| 0.4544326758658974 | 2.137353840637548 | 0.808172718170137 |
| 2.479933076698526 | 0.4544326758658974 | 6.168062551132728 |
| 5.611693924351967 | 1.820461802850339 | 1.529165865668653 |
| 1.023077302091622 |  |  |

a=10 U=10 m1=2 m2=1

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 0.1032788024178655 | 0.2324238959628721 | 0.41331603936642 |
| 0.6460490460448886 | 0.930750939555283 | 1.26759057783714 |
| 1.656787195799296 | 2.098624192369327 |  |
| 2.593469359607937 | 3.141805331837109 |  |
| 3.744277072860902 | 5.887485640841992 |  |

a=10 U=10 m1=1 m2=1

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 0.05408120469105441 | 0.2163802958297131 | 0.4870681554965061 |
| 0.86644533469418 | 1.354969224117534 | 1.953300729714778 |
| 2.662383817919513 | 4.418966218448088 | 7.961581805911094 |

a=10 U=10 m1=0.5 m2=1

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 0.118992095909544 | 4.249561710930034 | 1.068004282376146 |
| 0.4754473139332004 | 5.78216724725356 | 2.955345679469631 |
| 1.895012565781256 |  |  |

a=10 U=10 m1=.25 m2=1

|  |  |
| --- | --- |
| 0.2898665804439349 | 4.30026851446248 |
| 2.479039415645616 | 1.132264393019809 |