

# FP5

**Numeriska beräkningar av  
ELEKTRONTILLSTÅND  
i en-dimensionella potentialer**

Laborationsprojekt i fasta tillståndets fysik

Oktober 1987

Per-Olof Nilsson  
Fysiska institutionen  
Chalmers Tekniska Högskola

## PROJEKTLABORATIONER

I labkursen i Fasta tillståndets fysik ingår en projektinriktad laboration. Varje labgrupp utför försök inom ett och samma ämnesområde under tre laborationstillfällen.

Till varje projektlaboration finns en skriven handledning, men grupperna skall självständigt planera och utföra sina försök. Vid de tre schemalagda labtillfällena finns handledare tillgänglig för rådfrågning, men tänk i första hand själva. Det experimentella arbetet kan lämpligen fördelas inom gruppen, men var och en skall sedan kunna svara för hela gruppens resultat.

Instuderingsfrågorna i respektive handledning skall lämnas in vid första labtillfället.

Varje grupp skall skriva en rapport och lämna den till handledaren inom en vecka efter sista labtillfället. Högst två returer tas emot. Efter retur skall ny version inlämnas tillsammans med den tidigare. Rapporten skall innehålla följande:

	Titelblad
	Förord
	Innehållsförteckning (inkl. tabeller och figurer)
	Sammanfattning + Summary på engelska
	Inledning
Huvuddel:	Teori
	Experiment
	Resultat (inkl. figurer och diagram)
	Diskussion
Avslutning:	Slutsatser
	Referenser
Appendix (om så behövs)	

I teoriavsnittet skall de modeller och formler, som utnyttjas för utvärderingen, finnas kortfattat beskrivna, Förklara använda beteckningar och giv lämplig referens.

I resultatavsnittet skall noggrannheten uppskattas. Jämför resultaten med teori och publicerade experimentella data. Diskutera orsaken till eventuella avvikelser.

För rapportskrivningen refereras till:

T. Eriksson och A. Rosen, Mäta Analysera Rapportera, CTH, 1985

Lars Forslund, Tekniska Rapporter, Esselte, 1980.

Nancy Fjällbrant, Muntlig och Skriftlig presentation, CTH Bibl. 1979

## 1. Målsättning

Ett materials makroskopiska egenskaper (elektriska, magnetiska, optiska...) går att härleda till dess mikroskopiska struktur. Av speciellt stor betydelse är den s.k. elektronstrukturen, dvs en kvantmekanisk beskrivning av elektronernas tillstånd i termer av energi, impuls, lägen m.m. Trots att elektronerna påverkar varandra starkt via coulombpotentialen kan ofta en en-partikelbeskrivning användas. Detta har sin orsak i att varje elektron skärmas av de andra elektronerna. Tillsammans med skärmningsmolnet utgör elektronen en "kvasipartikel". Vi kommer att göra beräkningar av elektronstrukturen inom denna approximation utnyttjande enkla modeller av potentialen. Beräkningarna utföres med program som redan är installerade i en minidator. Vissa allmänna problemställningar ges nedan i detta PM, men detaljer i projektet utformas av laboranterna själva. Datorberäkningarna utföres under tre schemalagda laborationstillfällen. Handledare finns tillgänglig för rådfrågning. Resultaten skall sammanställas i en gemensam rapport, vilken inlämnas till handledaren senast en vecka efter sista laborationstillfället. Om laboranterna finner det lämpligt kan arbetet fördelas inom gruppen. Var och en skall dock kunna svara för gruppens alla resultat.

## 2. Teori

### 2.1. Allmänt.

Vi kommer i detta laborationsprojekt att helt begränsa oss till det en-dimensionella fallet för att undvika numeriska komplikationer. Den väsentliga fysiken kvarstår i denna approximation även om man inte kan tillämpa den på reella material. Uppgiften är att lösa Schrödingerekvationen i en *given* potential  $V(x)$ . I en mer realistisk situation måste potentialen tas fram genom ett självkonsistent (iterativt) förfarande. Vi väljer atomära enheter<sup>1)</sup> och skriver Schrödingerekvationen som

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (1)$$

Vi kommer att använda två metoder för att lösa denna ekvation. I den första utnyttjar vi en metod från diffraktion med lågenergielektroner (LEED). I den andra används en linjärkombination av fixa basfunktioner (här benämnd LKB).

### 2.2. LEED-teori

Problemet förenklas drastiskt om vi antar en styckevis konstant potential, uppbyggd av segment och steg enligt figur 1. Detta är ingen stark begränsning eftersom längden av varje segment kan göras mycket liten. Lösningen för en viss energi  $E$  inom ett segment är plana vågor

---

1) Man sätter  $\hbar = m = 1$ . Längd mäts då i atomära enheter, 1 a.u. = 0.52 Å och energi i Hartree (H) = 27.2 eV.

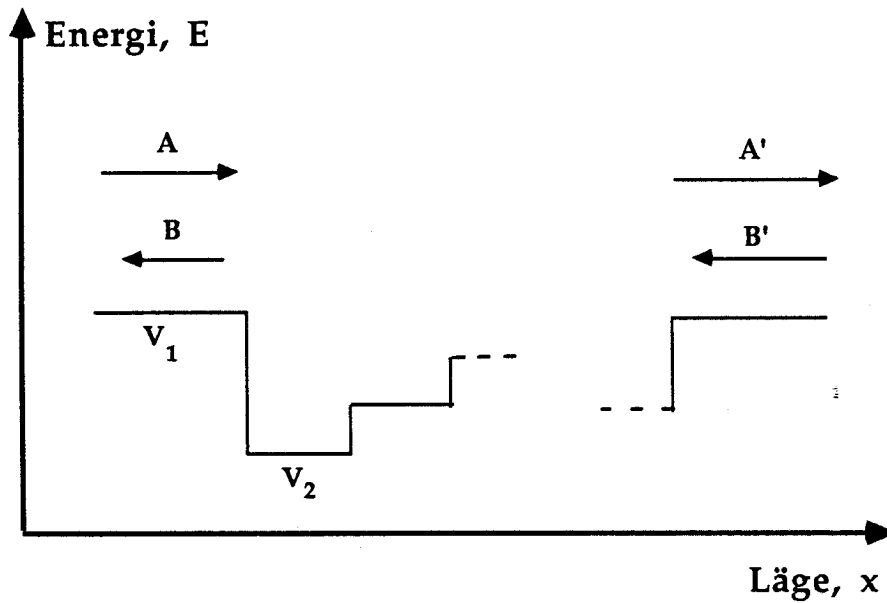


Figure 1. En-dimensionell, styckevis konstant potential.

$$\varphi = e^{\pm i\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{2(E-V)} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2)$$

där  $\kappa$  är propagationskonstant (vågvektor) och  $\lambda$  våglängd för elektronen. Allmänna lösningen blir då

$$\Psi(x) = A e^{i\kappa x} + B e^{-i\kappa x} \quad (3)$$

En förflyttning längs segmentet från  $x$  till  $x' > x$  ändrar koefficienterna  $A$  och  $B$  och vi skriver allmänt

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (4)$$

Vi inför beteckningen  $M$  för överföringsmatrisen

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{pmatrix} \quad (5)$$

Som en följd av eventuell rumssymmetri i problemet och invarians under tidsinversion kan samband mellan matriselementen sättas upp, vilket vi emellertid ej skall utnyttja här. Förflyttning från  $x = x_0$  till  $x' = x_0 + l$  inom ett segment genereras av

$$M_1^c = \begin{pmatrix} e^{ikl} & 0 \\ 0 & e^{-ikl} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Vid ett steg kräver vi kontinuitet hos  $\Psi$  och  $\delta\Psi/\delta x$ . Med  $\kappa_1 = \sqrt{2(E-V_1)}$  och  $\kappa_2 = \sqrt{2(E-V_2)}$ , se figur 1, får vi då

$$M_1^s = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa_1}{\kappa_2} & 1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \\ 1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} & 1 + \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \end{pmatrix} \quad (7)$$

Uppenbarligen får vi sammantaget efter segment nr 1 och följande steg

$$M_1 = M_1^s M_1^c \quad (8)$$

och för hela strukturen

$$M = \prod_{i=1}^N M_i \quad (9)$$

Denna matris innehåller all information om systemet vi behöver för att beräkna olika egenskaper. Antag att en elektron infaller från vänster i figur 1. Elektronen representeras kvantmekaniskt med ett vågpaket. För att förenkla räkningarna använder vi emellertid en plan våg med amplitud  $A$ , se figur 1. Vi erhåller en reflekterad plan våg med amplitud  $A'$  och en transmitterad med amplitud  $B$ . Tydligt måste i denna situation  $B' = 0$ . Vi erhåller bråkdelen transmitterad intensitet (transmittansen)

$$T(E) = \left[ \frac{A'}{A} \right]^2 = \left[ -\frac{\beta}{\delta} \right]^2 \quad (10)$$

Långt från ytan bortser vi från interferensen mellan  $A$  och  $A'$  eftersom vi i praktiken har ett vågpaket med ändlig utsträckning. Bråkdelen reflekterad intensitet (reflektansen) blir

$$R(E) = \left[ \frac{B}{A} \right]^2 = \left[ \alpha - \gamma \frac{\beta}{\delta} \right]^2 \quad (11)$$

Vi har hittills antagit positiva energier  $E > V$ , där vi har ett kontinuum av lösningar. Vi undersöker nu egenlösningar för negativa energier  $E < V$ . Vågvektorn blir då rent imaginär och vågfunktionen kan skrivas

$$\Psi(x) = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x}, \quad \kappa \text{ reell} \quad (12)$$

För ändlig amplitud på  $\Psi(x)$  krävs  $A=B'=0$ . Vi finner bundna, diskreta tillstånd för villkoret

$$\text{Re } \alpha(E) = 0 \quad (13)$$

Om gropen svarar mot en atom är de bundna tillstånden atomens bundna elektronstillstånd, core-elektroner. Gropen kan också svara mot ett tunt skikt av t.ex. en halvledare. Sådana "kvantbrunnar" med diskreta tillstånd kan testas med en elektrisk ström. Då elektronernas energi i strömmen svarar mot de bundna elektronernas energi uppstår en resonans. Exempel på resultat ges i figur 2.

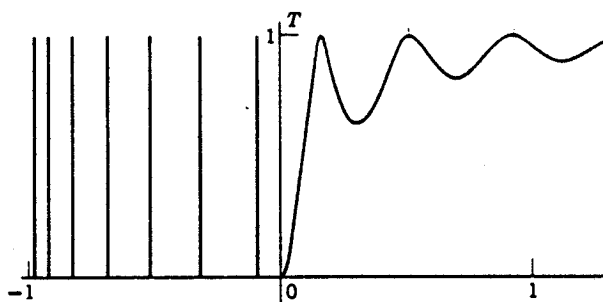


Fig 2a

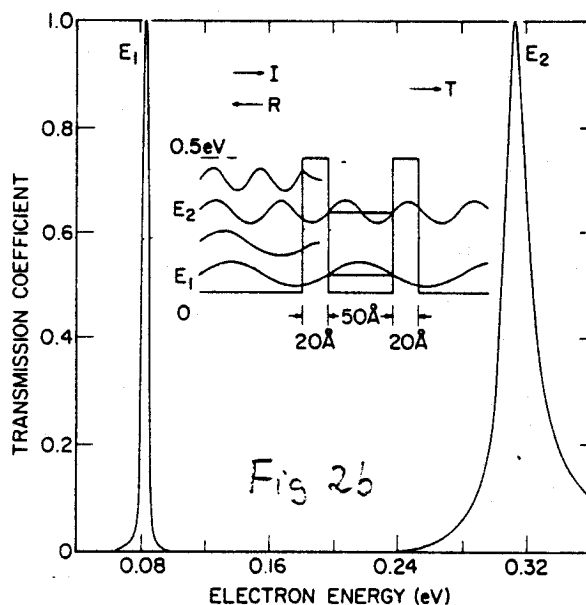


Fig 2b

Figur 2a. Transmittansen hos en potentialgrop samt dess bundna nivåer.

Figur 2b. Transmittansen hos en dubbelbarriär samt schematisk bild av vågfälten.

Ett annat intressant fall är då en uppsättning av gropar, bildande en s.k. enhetscell, upprepas periodiskt i oändlighet. Om varje grop svarar mot en atom är detta en modell för en kristall med potentialen

$$V(x) = V(nc + x), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

Vi söker systemets normalmoder. Motsvarande vågfunktioner benämnes Blochvågor. Dessa erhålls som egenlösningar till matrisen  $M$

$$\det \begin{bmatrix} \alpha - m & \gamma \\ \beta & \delta - m \end{bmatrix} = 0 \quad (15)$$

vilket ger egenlösningarna

$$\Psi'_+ = m_+ \Psi_+, \quad \Psi'_- = m_- \Psi_-$$

$$m_{\pm} = \frac{1}{2} \left( \text{trace } M \pm \sqrt{(\text{trace } M)^2 - 4 \det M} \right) \quad (16)$$

Vi kräver att  $\Psi(x)_\pm$  överallt är begränsad, vilket kan uttryckas

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [m_\pm^n] \neq 0 \quad (17)$$

Vi sätter

$$m_\pm = e^{\pm ikc} \quad (18)$$

där  $k$  är kristallvågvektorn och skall skiljas från den förut introducerade vågvektorn  $\kappa$ . Vi erhåller funktionen

$$k_\pm(E) = \pm \frac{1}{ic} \ln m_\pm(E) \quad (19)$$

som bildar bandstrukturen, se figur 3. Man kan visa att vågfunktionerna i ekvation 16 kan skrivas på s.k. Blochform

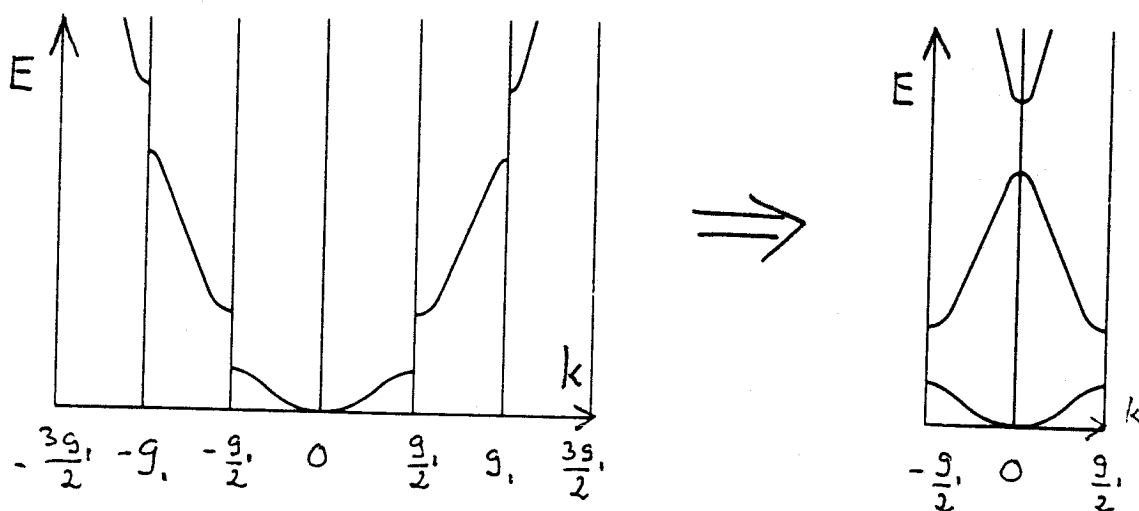
$$\Psi(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad (20)$$

där  $u_k(x)$  är lika i varje cell. Tillstånd med vågvektorer

$$k + \frac{2n\pi}{c} = k + g_n, \quad n=0,1,2,\dots \quad (21)$$

har samma energi. Vektorn  $g_n$  benämnes reciprok gittervektor. Bandstrukturen kan därför beskrivas i ett s.k. reducerat zonschema( se figur 3) där

$$-\frac{g_1}{2} \leq k \leq \frac{g_1}{2} \quad (22)$$



Figur3. Frielektronliknande bandstruktur samt dess representation i reducerat zonschema.

### 2.3. Linjärkombination av fixa basfunktioner (LKB).

I metoden ovan beräknade vi Bloch-k för en given energi  $E$ . I följande metod beräknas omvänt energispektrum för ett givet Bloch-k. Totala vågfunktionen  $\Psi(x)$  utvecklas linjärt i en komplett ortonormal uppsättning av basfunktioner  $\chi_j$

$$\Psi(x) = \sum_{j=1}^N c_j \chi_j \quad (23)$$

För en godtycklig potential ger metoden exakt lösning för  $N \rightarrow \infty$ . [I exemplet med spridningsteori ovan behövdes bara två basfunktioner eftersom man kunde bilda en exakt lösning med dessa för en konstant potential.] Insättning i Schrödingerekvationen, multiplikation med  $c_i^*$  och integration över  $x$  leder till ekvationssystemet

$$\sum_{j=1}^N H_{ij} c_j = E_i c_i, \quad i=1,2,\dots,N \quad (24)$$

med matriselementen

$$H_{ij} = \int \chi_i^*(x) H(x) \chi_j(x) dx \quad (25)$$

[Man kan med den s.k. variationsprincipen att ta fram denna lösning mer rigoröst]. Icke-triviala lösningar erhålles nu för

$$\begin{bmatrix} H_{11}-E & H_{12} & \dots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22}-E & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ H_{N1} & & & H_{NN}-E \end{bmatrix} = 0 \quad (26)$$

där  $E(k)$  är egenvärdena. Vi väljer en symmetrisk potential  $V(x) = V(-x)$  och ansätter  $\cos(jgx)$  som basfunktioner

$$\Psi_k(x) = \sum_{i=-N}^N c_i e^{i(k+g_i)x} = e^{ikx} \sum_{i=-N}^N c_i e^{ig_i x} = e^{ikx} u(x), \quad c_i = c_{-i}, \quad g_i = g_{-i} \quad (27)$$

Matriselementen blir då



$$H_{ij}(k) = \begin{cases} f_{i-j}, & i \neq j \\ (k+g_i)^2 + f_0 & i=j \end{cases} \quad (28)$$

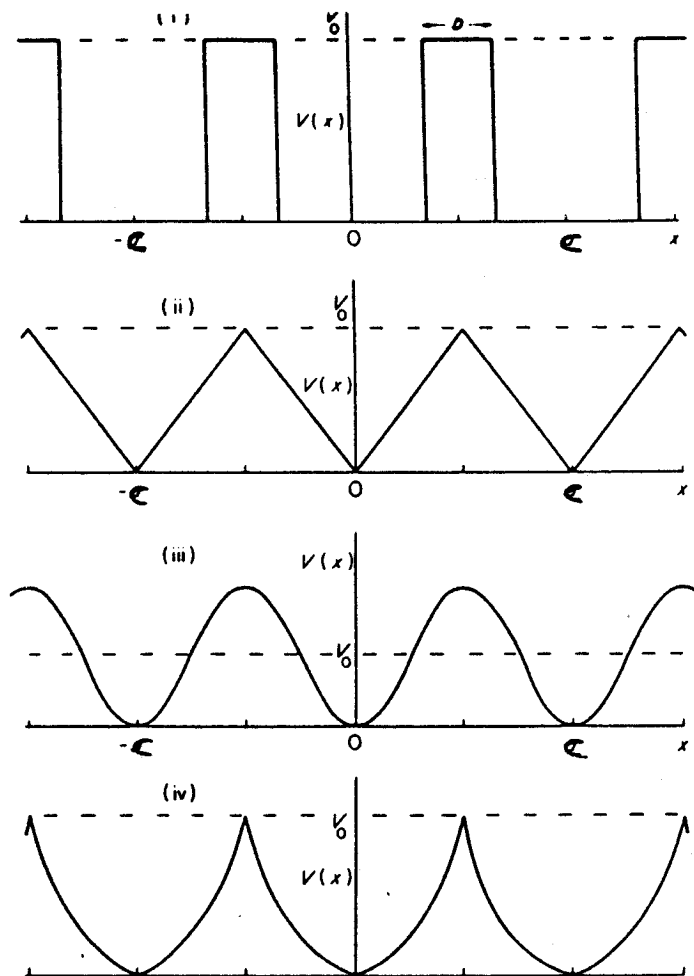
Här är  $f_k$  fourierkomponenten av den symmetriska gropen  $V(x)$

$$f_k = \frac{1}{c} \int_{-\frac{c}{2}}^{\frac{c}{2}} e^{-ig_k x} V(x) dx, \quad V(x) = \sum_{k=-N}^N f_k e^{ig_k x} \quad (29)$$

Exempel på olika potentialmodeller ges i figur 4. Vi kan också beräkna laddningstätheten

$$\rho(x) = \Psi_k^*(x) \Psi_k(x) dx = u_k^*(x) u_k(x) = \dots = 1 + 2 \sum_{m=-N}^N \sum_{l=m+1}^N c_m c_l \cos(g_{l-m} x) \quad (30)$$

vilken är lika i alla celler.



Figur 4. Tillgängliga förprogrammerade potentialer.

### 3. Uppgifter

#### 3.1 Förberedelser

*Innan* första laborationstillfället:

- i) Studera detta PM noga och, om behövt, repetera tillämpliga delar av kurserna i fasta tillståndets fysik och kvantfysik
- ii) Härled ekvationerna 7, 10, 11, 16 och 28.

Dessa två punkter redovisas vid första laborationstillfället.

#### 3.2 Projektets genomförande

Projektet genomföres vid tre schemalagda tillfällen:

Vid första tillfället diskuterar vi ovanstående två uppgifter, definierar projektet, bekantar oss med datorsystemet, programmen och de grafiska möjligheterna.

Laboranterna fördelar uppgifter mellan sig och projektarbetet startar.

Vid andra tillfället slutföres beräkningarna, vilka dokumenteras.

Vid tredje tillfället diskuterar vi resultaten och gör eventuella kompletteringar. Författandet av rapporten planeras och genomföres som hemuppgift.

#### 3.3 Problemställningar

##### 3.3.1 LEED-teori.

A. Transmittansen för en rektangulär grop beräknas som funktion av energin. Särskilt noteras maxvärdena. De bundna tillstånden beräknas också. Diskutera resultaten och sök analytiskt uppskatta de erhållna energierna.

B. Studera två gropar. Variera parametrarna och förklara effekterna. Problemet kan tillämpas på två skikt av olika material och elektrontransport (tunneling) genom dessa. Vad händer när elektronenergin succesivt ökas i ett sådant system?

C. Studera energispektrum för många lika equidistanta gropar. Erhålles något asymptotiskt uppförande för mycket stort antal gropar?

D. Låt antalet gropar bli oändligt, dvs beräkna bandstrukturen  $k(E)$ . Vad händer om enhetscellen har två (olika) gropar?

##### 3.3.2. LKB-metoden

E. Beräkna storleken  $E_g$  av lägsta bandgapet ( $k = \pi/c$ ) med de fyra potentialerna i figur 4. Slutsats?

F. Studera laddningsfördelningen vid övre och nedre bandkanten. Förklara utseendet.

G. Studera hur bandgapet  $E_g$  varierar som funktion av djupet  $V_0$  hos en rektangulär grop. Rita upp  $\ln(E_g)$  som funktion av  $\ln(V_0)$ . Jämför med följande analytiska uttryck för stora och små  $V_0$ . För  $V_0 \rightarrow \infty$  gäller corenivå-approximationen med

$$E_{g,n} \rightarrow \left( \frac{\pi n}{\Delta x} \right)^2, \quad n=1,2,3,\dots$$

där  $\Delta x$  är gropens bredd. För  $V_0 \rightarrow 0$  fås nästan fria elektroner. Nära zongränsen,  $k = \pi/c$ , gäller då

$$E_{2,1} = k^2 + f_0 \pm f_1$$

$$E_g = 2f_1$$

där  $f_0$  och  $f_1$  är fourierkomponenter av potentialen enligt ovan. För vilka värden på  $V_0$  är respektive approximation giltig?