

M. MATUSIEWICZ, J. BIELENINIK, J. KASPERCZYK

Instytut Fizyki Wyższej Szkoły Pedagogicznej w Częstochowie,

Al. Armii Krajowej 13/15, 42-201 Częstochowa

Trójwymiarowy model Kröniga-Penneya z separowalnymi rozwiązaniami

I. Wstęp

Klasyczny model Kröniga-Penneya [1] przedstawia potencjał, który można rozwiązać w sposób ścisły. Służy on dlatego jako podstawa rozważań nad wieloma zasadniczymi zjawiskami w układach okresowych. Jego matematyczna rozwiązywalność wykorzystywana jest w podręcznikach mechaniki kwantowej [2,3,4] do nauki podstaw jak i zastosowań tej dziedziny fizyki. Model Kröniga-Penneya może być również wykorzystywany do bardziej zaawansowanych badań naukowych [5,6,7]. Używa się go jako punktu wyjściowego do opisu zjawisk związanych z domieszkami [5], skończonością układu i wielu innych np. [6]. Jest to model jednowymiarowy i dlatego stosowany jest do układów liniowych [5,6]. W niniejszej pracy próbujemy podać pewne uogólnienie modelu Kröniga-Penneya na trzy wymiary w ten sposób, aby potencjał wykazywał symetrię sieci krystalicznej oraz pozwalał rozwiązać równanie Schrödingera poprzez separację zmiennych. W części II rozważymy ogólne warunki, jakie musi spełniać potencjał w sieci krystalicznej, aby równanie Schrödingera było separowalne. W części III zapostulujemy odpowiedni potencjał dla modelu Kröniga-Penneya oraz przedstawimy rozwiązanie równania na funkcję falową. W części IV omówione zostaną pewne własności struktury pasmowej układu.

II. Separacja równania Schrödingera w sieci krystalicznej

W ogólnym przypadku sieć o symetrii translacyjnej posiada trzy różne wektory translacji $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$. Wybierając osie współrzędnych układu kartezjańskiego x^1, x^2, x^3 tak aby $\vec{a} = a\vec{e}_1$, $\vec{b} = b_1\vec{e}_1 + b_2\vec{e}_2$, $\vec{c} = c_1\vec{e}_1 + c_2\vec{e}_2 + c_3\vec{e}_3$, gdzie $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ wersory wzdłuż odpowiednio osi x^1, x^2, x^3 . Hamiltonian układu musi być niezmienniczy przy translacji

o wektor postaci $k\vec{a} + l\vec{b} + m\vec{c}$, gdzie k, l, m są liczbami całkowitymi, co implikuje niezmienniczość potencjału $V(x^1, x^2, x^3)$. W tym miejscu wprowadzimy nowe współrzędne x'^1, x'^2, x'^3 , których osie leżą wzdłuż podstawowych wektorów translacji. Będzie to układ w ogólności nieprostokątny. Ponieważ pragniemy rozwiązać równanie Schrödingera poprzez separację zmiennych, należy rozłożyć potencjał na sumę trzech potencjałów zależnych od poszczególnych zmiennych (ze względu na symetrię sieci krystalicznej muszą to być współrzędne wzdłuż podstawowych wektorów translacji) $V(x'^1, x'^2, x'^3) = V_1(x'^1) + V_2(x'^2) + V_3(x'^3)$. Wówczas równanie Schrödingera będzie w postaci:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\alpha \frac{d^2}{d(x'^1)^2} + \beta \frac{d^2}{d(x'^2)^2} + \gamma \frac{d^2}{d(x'^3)^2} \right) \Phi +$$

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\alpha_1 \frac{d^2}{d(x'^1)d(x'^2)} + \beta_1 \frac{d^2}{d(x'^2)d(x'^3)} + \gamma_1 \frac{d^2}{d(x'^3)d(x'^1)} \right) \Phi +$$

$$+ [V_1(x'^1) + V_2(x'^2) + V_3(x'^3)] \Phi = E \Phi. \quad (1)$$

Równanie powyższe można rozseparować na poszczególne zmienne jedynie, gdy współczynniki przy pochodnych mieszanych tj. $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ są równe zeru, co oznacza że układ musi być prostokątny. Dla układu prostokątnego mamy $b_1 = c_1 = c_2 = 0$. Równanie (1) przyjmie wówczas prostą postać:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\alpha \frac{d^2}{d(x^1)^2} + \beta \frac{d^2}{d(x^2)^2} + \gamma \frac{d^2}{d(x^3)^2} \right) \Phi +$$

$$+ [V_1(x^1) + V_2(x^2) + V_3(x^3)] \Phi = (E_1 + E_2 + E_3) \Phi. \quad (2)$$

gdzie nie trzeba już wprowadzać współrzędnych primowanych. Wartość własna operatora Hamiltona, całkowita energia E , została przedstawiona jako suma trzech energii E_1, E_2, E_3 . Poszczególne energie można przyporządkować każdej współrzędnej, z jedynym warunkiem, aby ich suma była równa energii całkowitej E .

III. Uogólnienie potencjału Kröniga-Penneya na trzy wymiary

Uogólnienie potencjału Kröniga-Penneya na przestrzeń trójwymiarową zgodnie z założeniami poczynionymi w części II będzie wyglądało następująco:

$$V(x^1, x^2, x^3) = V_1(x^1) + V_2(x^2) + V_3(x^3) \quad (3)$$

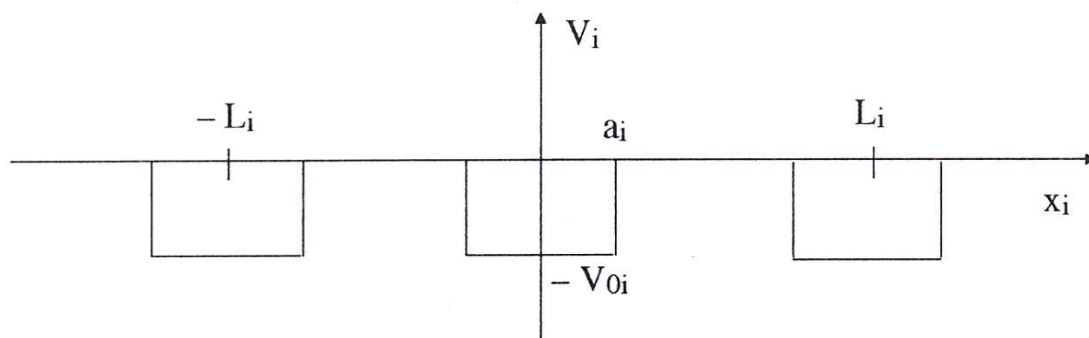
gdzie

$$V_1(x^1) = - \sum_n V_{01} \theta(a_1 - |x^1 - na_1|) \quad (4a)$$

$$V_2(x^2) = - \sum_n V_{02} \theta(a_2 - |x^2 - na_2|) \quad (4b)$$

$$V_1(x^3) = - \sum_n V_{03} \theta(a_3 - |x^3 - nL_3|) \quad (4c)$$

parametry V_{0i} , a_i , L_i dla $i = 1, 2, 3$ określone są na rysunku 1.



Rys.1. Zależność potencjału od odległości od dowolnego centrum w modelu Kröniga-Penneya.

Równanie (2) rozseparyuje się wówczas na trzy równania postaci:

$$- \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) - \sum V_0 \theta(a - |x - nL|) \Phi(x) = E \Phi(x) \quad (5)$$

Rozwiązanie powyższego równania zaczerpnięte zostało z pracy [7]. Wprowadzając odpowiednie wartości stałych K_i , k_i spełniających równania

$$\frac{\hbar k_i}{4\pi m} = E_i + V_{0i} \quad (6)$$

$$\frac{\hbar k_i}{4\pi m} = E_i \quad (7)$$

rozwiązanie możemy przedstawić w postaci sumy dwóch członów, symetrycznego Φ_+ i antysymetrycznego Φ_- :

$$\begin{aligned} \Phi_+(x) = & \cos(Kx) \Theta(a - |x|) + S(x) \Theta(x - a) \Theta\left(\frac{1}{2}1 - x\right) + \\ & + S(-x) \Theta(-x) \Theta\left(\frac{1}{2}1 + x\right) \end{aligned} \quad (8)$$

gdzie

$$S(x) = \cos(Ka) \cos[k(x - a)] - K \sin(Ka) \sin[k(x - a)] \quad (9)$$

oraz

$$\begin{aligned} \Phi_-(x) = & \left[\sin\left(\frac{Kx}{K}\right) \right] \Theta(a - |x|) + A(x) \Theta(x - a) \Theta\left(\frac{1}{2}1 - x\right) + \\ & - A(-x) \Theta(-x - a) \Theta\left(\frac{1}{2}1 + x\right) \end{aligned} \quad (10)$$

gdzie

$$A(x) = \cos \frac{(Ka)}{K} \cos [k(x-a)] + \sin (ka) \sin \frac{[k(x-a)]}{k} \quad (11)$$

Rozwiązania przedstawione są w tej postaci, aby wyraźnie było widać ich własności symetrii.

$$\Phi_+(-x) = \Phi_+(x) \quad (12)$$

$$\Phi_-(-x) = \Phi_-(x) \quad (13)$$

Ogólne rozwiązanie dla symetrycznej strefy

$$\Phi(x) = A_+ \Phi_+(x) + A_- \Phi_-(x) \quad (14)$$

Wówczas, gdy A_+ i A_- są rzeczywiste, mamy:

$$\Phi(-x)^* = \Phi(x) \quad (15)$$

Warunki na ciągłość funkcji falowej oraz jej pochodnej określają wartości A_+ i A_- .

Funkcję będącą rozwiązaniem jednowymiarowego równania (5) przedstawia funkcja Blocha

$$\Psi_q(x) = \sum_n \exp(-inql) \Phi(x - nl). \quad (16)$$

Parametr q nazywany jest pędem krystalicznym.

Pełne trójwymiarowe rozwiązanie przedstawia iloczyn funkcji postaci (16)

$$\Psi_{q^1 q^2 q^3} = \Psi_{q^1} \Psi_{q^2} \Psi_{q^3} \quad (17)$$

gdzie wektor $q = (q_1, q_2, q_3)$ jest podobnie nazwany trójwymiarowym wektorem pędu.

IV. Struktura pasmowa

Z warunków na ciągłość funkcji falowej oraz jej pochodnej na granicach poszczególnych komórek dla każdej z funkcji ψ_{q_i} otrzymujemy związek postaci:

$$\operatorname{tg}^2(q_i L/2) = \frac{-S'_i(L/2) A_i(L/2)}{S_i(L/2) A'_i(L/2)} := F(E_i) \quad (18)$$

Powyższe równanie zawiera w sposób uwikłany związek dyspersyjny [3]. Prawa strona równania (19) musi być dodatnia, stąd energia E_i może przyjmować wartości w określonych przedziałach, otrzymujemy więc strukturę pasmową. Zależności $E_i(q_i)$ nie można przedstawić w postaci analitycznej, możliwe jest jednak uzyskanie wykresu tej zależności poprzez odwrócenie związku $E_i(q_i)$. Następnie można uzyskać pełny związek dyspersyjny sumując poszczególne energie:

$$E(q) = E_1(q_1) + E_2(q_2) + E_3(q_3). \quad (19)$$

Widzimy, że dokonane przez nas uogólnienie modelu Kroniga-Penneya na pełne trzy wymiary pozwala nie tylko na wyznaczenie funkcji falowej, ale także pozwala na wyznaczenie struktury pasmowej w zależności od poszczególnych parametrów wyjściowych. Wyniki dla różnych konfiguracji parametrów zostaną opublikowane w następnych pracach.

Literatura

- [1] R. de Krönig and W.G. Penney, Proc. R. Soc. London Sect. A 130, 499 (1931).
- [2] S. Flugge, Practical Quantum Mechanics, Springer Berlin, 1971.
- [3] I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński, Teoria Kwantów, 1991.
- [4] W.A. Harrison, Teoria Ciała Stałego, 1976.
- [5] G. Biczko, w „Recent Developments in Condensed Matter Physics” Plenum Publishing Co., New York 1981, Vol 4, pp 243 – 250.
- [6] D.K. Campbell, J. Tinka Gammel, E.Y. Loh, Phys. Rev. B, Vol. 42, No 1, p 475 (1990).
- [7] N.O. Folland, Phys. Rev. B Vol. 28, No 10, 6068 (1983).

M. MATUSIEWICZ, J. BIELENINIK, J. KASPERCZYK

Three-dimensional Krönig-Penney Model with Factorized Solutions

Summary

General conditions which allowed to separate the Schrödinger equation with potential of three dimensional crystal lattice are considered. We therefore propose three dimensional generalization of the so called Krönig-Penney model. Full wave function and energies are given. We also discuss the band formation within the proposed model.