質量を含んだShrödinger方程式の境界条件

$$\frac{\hbar^2}{2m(x)}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=2\left(V(x)-E\right)\psi(x)$$

$m(x)$は $x_0-h\sim x_0$ と $x_0\ \sim x_0+h$ の範囲で一定とし、
両辺を x_0-h から x_0+h の範囲で積分する

$$\frac{\hbar^2}{2m(x_0+h)}\psi'(x_0+h)-\frac{\hbar^2}{2m(x_0-h)}\psi'(x_0-h)=\int_{x_0-h}^{x_0+h}\left(V(x)-E\right)\psi(x)dx$$

$$=h\left[\left(V(x_0+h)-E\right)\psi(x_0+h)+\left(V(x_0-h)-E\right)\psi(x_0-h)\right]$$

$$\sim h\left[V(x_0+h)+V(x_0-h)\right]\psi(x_0)$$

最後の変形で、x_0 において $\Psi(x)$ が連続の条件を用いた。

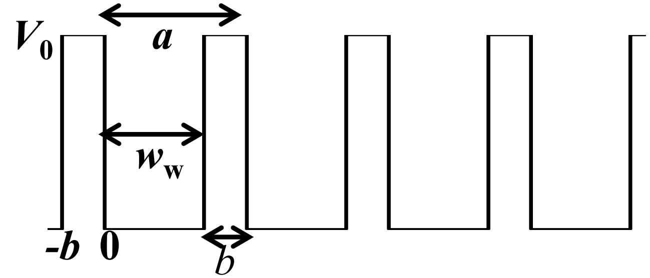
さらに、**$[V(x_0+h)+V(x_0-h)]$ が $1/h$ よりも十分小さければ、** $h=>0$ で

$$m(x_0+h)^{-1}\psi'(x_0+h)=m(x_0-h)^{-1}\psi'(x_0-h)$$

有限の井戸型ポテンシャルでは $h=>0$で $h\mathrm{V}_0=>0$ であるから、
一次微分も x_0 で連続である必要がある。

バンド理論: Kronig-Penneyモデル

$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\phi = E\phi$ **の解**



$\boldsymbol{\phi_k(x) = \exp(ikx)u(x),\ u(x+a) = u(x)}$

井戸内: $\phi(x) = A\exp(i\alpha x) + B\exp(-i\alpha x)$ $\quad \alpha = \sqrt{2mE}/\hbar$

障壁内: $\phi(x) = C\exp(\beta x) + D\exp(-\beta x)$ $\quad \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$

井戸－障壁での境界条件: $\boldsymbol{x = 0, -b}$ **で** $\boldsymbol{\phi_k(x), \phi_k'(x)}$ **が連続**

Blochの定理 $\quad$ **:** $\boldsymbol{\phi_k(x+a) = \lambda\phi_k(x),\ \lambda = \exp(ika)}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ \exp(i\alpha w_w) & \exp(-i\alpha w_w) & -\lambda\exp(-\beta b) & -\lambda\exp(\beta b) \\ i\alpha\exp(i\alpha w_w) & -i\alpha\exp(-i\alpha w_w) & -\beta\lambda\exp(-\beta b) & \beta\lambda\exp(\beta b) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

左辺の行列の行列式が 0 になる必要がある

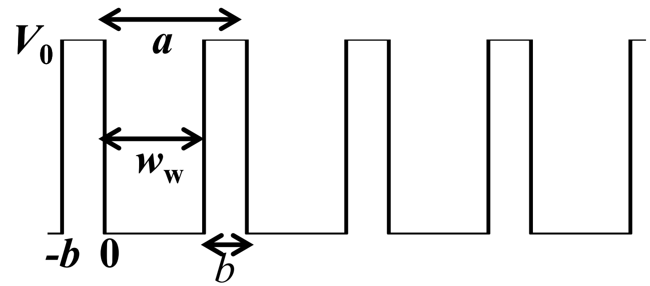
$$\cos ka = \left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta}\sin\alpha w_w \sinh\beta b + \cos\alpha w_w \cosh\beta b\right)$$

$\boldsymbol{bV_0}$ **が一定の条件で** $\boldsymbol{b \Rightarrow 0}$ **の近似を取ると**

$$\cos ka = \left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha}b\sin\alpha a + \cos\alpha a\right) \Rightarrow \cos ka = \left(\frac{mV_0}{\hbar^2}\frac{b}{2\alpha}\sin\alpha a + \cos\alpha a\right)$$

バンド理論: Kronig-Penneyモデル

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\phi = E\phi$$ **の解**



$$\boldsymbol{\phi_k(x) = \exp(ikx)u(x),\ u(x+a) = u(x)}$$

井戸内: $\phi(x) = A\exp(i\alpha x) + B\exp(-i\alpha x)$　　$\alpha = \sqrt{2mE}/\hbar$

障壁内: $\phi(x) = C\exp(\beta x) + D\exp(-\beta x)$　　$\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$

λ = exp(i*ka*)

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ \exp(i\alpha w_w) & \exp(-i\alpha w_w) & -\lambda\exp(-\beta b) & -\lambda\exp(\beta b) \\ i\alpha\exp(i\alpha w_w) & -i\alpha\exp(-i\alpha w_w) & -\beta\lambda\exp(-\beta b) & \beta\lambda\exp(\beta b) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

例えば $A = 1$として

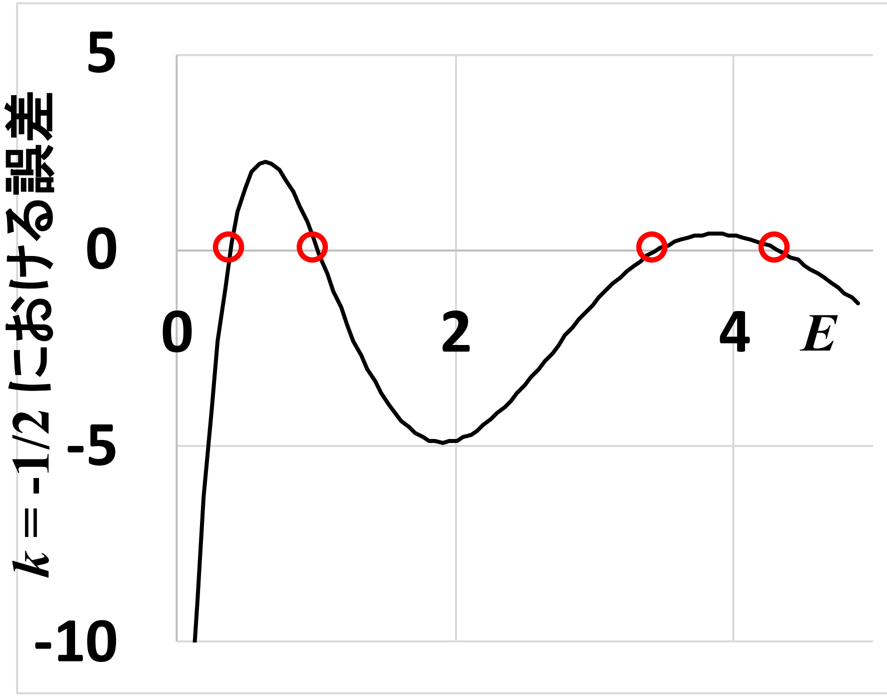
$$\begin{pmatrix} -i\alpha & -\beta & \beta \\ \exp(-i\alpha w_w) & -\lambda\exp(-\beta b) & -\lambda\exp(\beta b) \\ -i\alpha\exp(-i\alpha w_w) & -\beta\lambda\exp(-\beta b) & \beta\lambda\exp(\beta b) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\alpha A \\ -\exp(i\alpha w_w)A \\ -i\alpha\exp(i\alpha w_w)A \end{pmatrix}$$

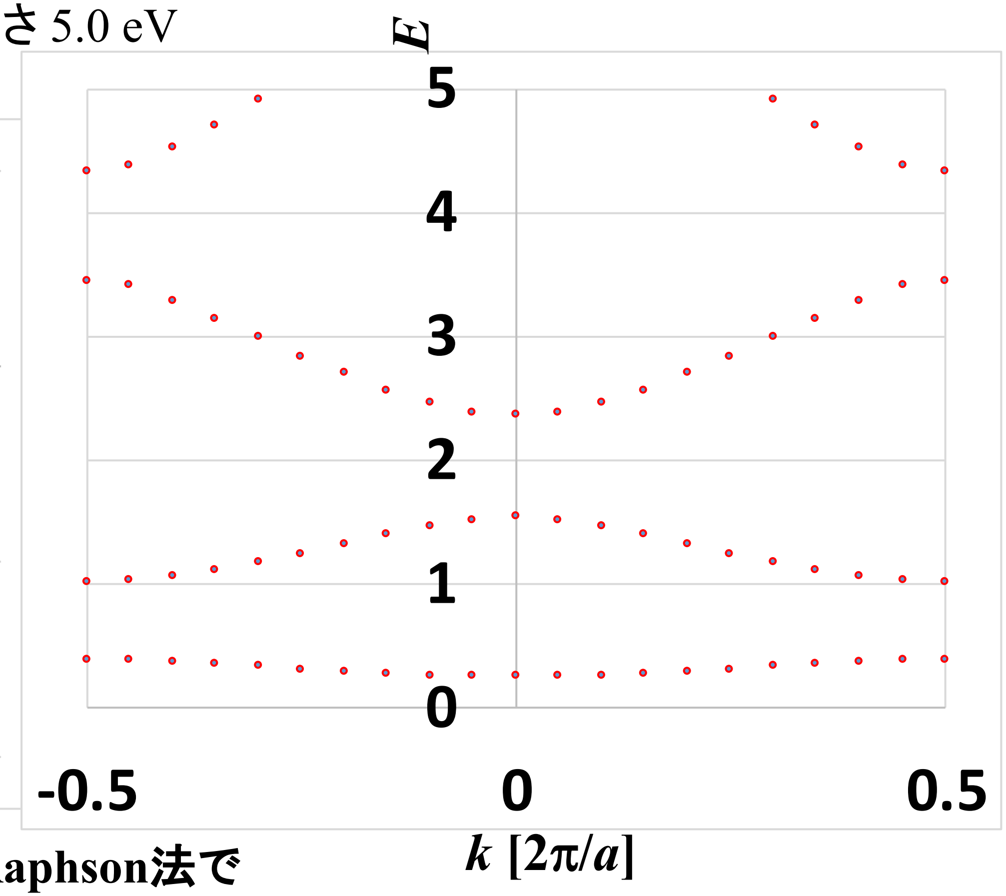
を解いて *B*, *C*, *D*を得る

Kronig-Penney方程式の解法

$$\Delta = -\left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta}\sin\alpha w_w \sinh\beta b + \cos\alpha w_w \cosh\beta b\right) + \cos ka$$

周期　a = 1 nm, 障壁厚さ 0.1 nm, 障壁高さ 5.0 eV
有効質量 m_e, $k = (2\pi/a)[-1/2, 1/2]$





左図から求めた近似値	Newton-Raphson法で誤差 10^{-10} で計算
0.3675	0.3934
1.0045	1.0244
3.4545	3.4585
4.3365	4.3345

プログラム: Kronig-Penneyモデル

http://conf.msl.titech.ac.jp/jsap-crystal/

Kronig-Penneyモデルによる一次元バンド計算
kronig_penney.py

Usage: python kronig_penney.py
Usage1: python kronig_penney.py (graph a bwidth bpot k Emin Emax nE)
Usage2: python kronig_penney.py (band a bwidth bpot nG kmin kmax nk)
Usage3: python kronig_penney.py (wf a bwidth bpot kw iLevel xwmin xwmax nxw)

実行例1: python kronig_penney.py graph 5.4064 0.5 10.0 0.0 0.0 9.5 51
格子定数 5.4064 Å、ポテンシャル幅 0.5 Å、高さ 10.0 eV
k = 0.0 についてのKronig-Penney方程式の残差 Δ を E = 0.0 ～ 9.5 eV の範囲を51分割してプロット。Δ = 0 のEが固有エネルギー。

実行例2: python kronig_penney.py band 5.4064 0.5 10.0 -0.5 0.5 21
格子定数 5.4064 Å、ポテンシャル幅 0.5 Å、高さ 10.0 eV
k = [-0.5,0.5] の範囲を21分割してバンド構造をプロット。

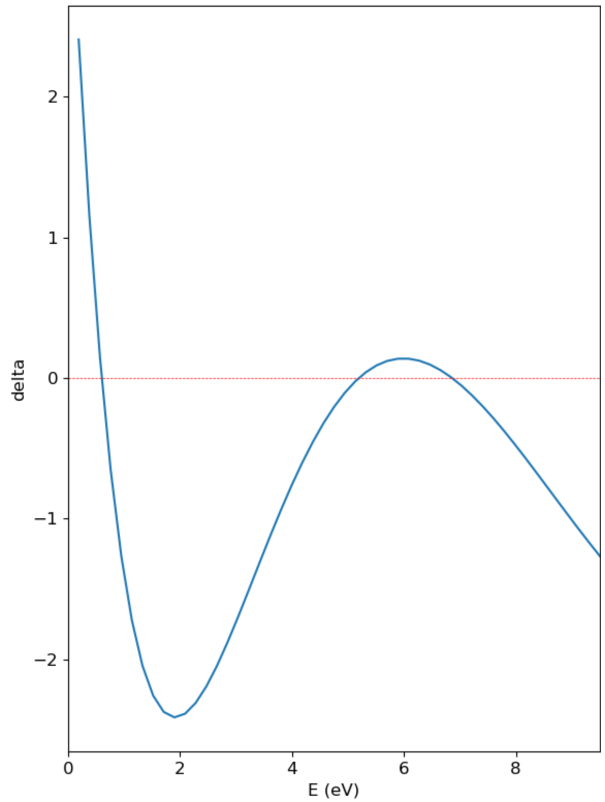
実行例3: python kronig_penney.py wf 5.4064 0.5 10.0 0.0 0 0.0 16.2192 101
格子定数 5.4064 Å、ポテンシャル幅 0.5 Å、高さ 10.0 eV
k = 0.0 における下から 0 番目の準位の波動関数をプロット。
波動関数は x = 0.0 ～ 16.2192 Å を 101 分割してプロットする。

プログラム: Kronig-Penneyモデル

Si の格子定数 a = 5.4064 Å $m^* = 1.0m_e$
障壁幅 0.5 Å 障壁高さ 10.0 eV

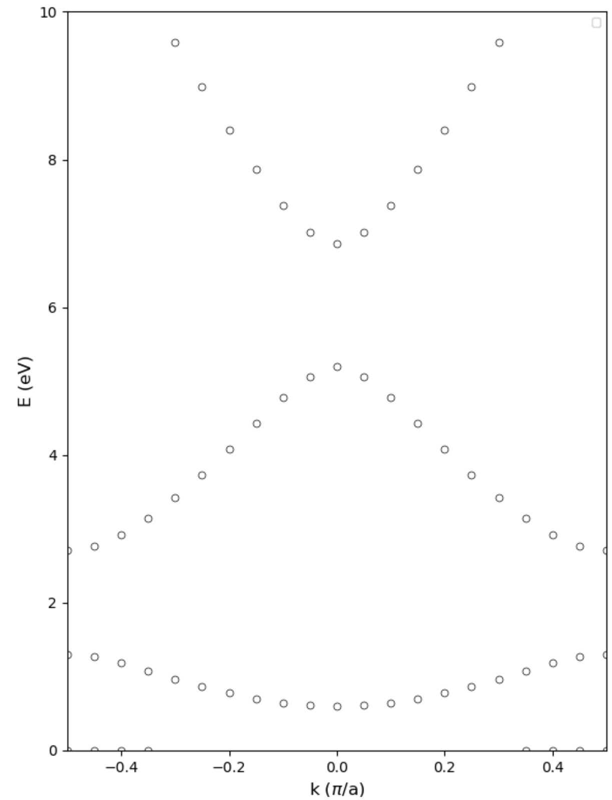
固有エネルギーの図解

python kronig_penney.py



バンド構造

python kronig_penney.py band



プログラム: Kronig-Penneyモデル

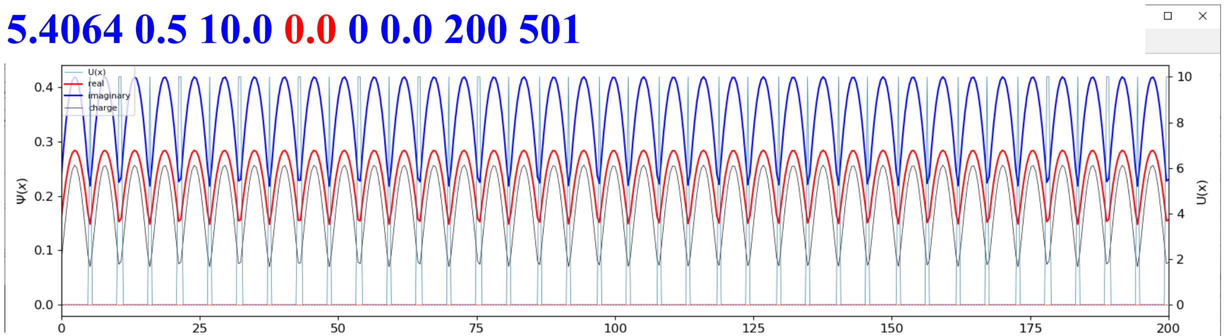
結晶波動関数の表示

python kronig_penney.py wf a bwidth bpot kw iLevel xwmin xwmax nxw

python kronig_penney.py wf 5.4064 0.5 10.0 0.0 0 0.0 200 501

$k = 0.0$

Γ点 : 結合性



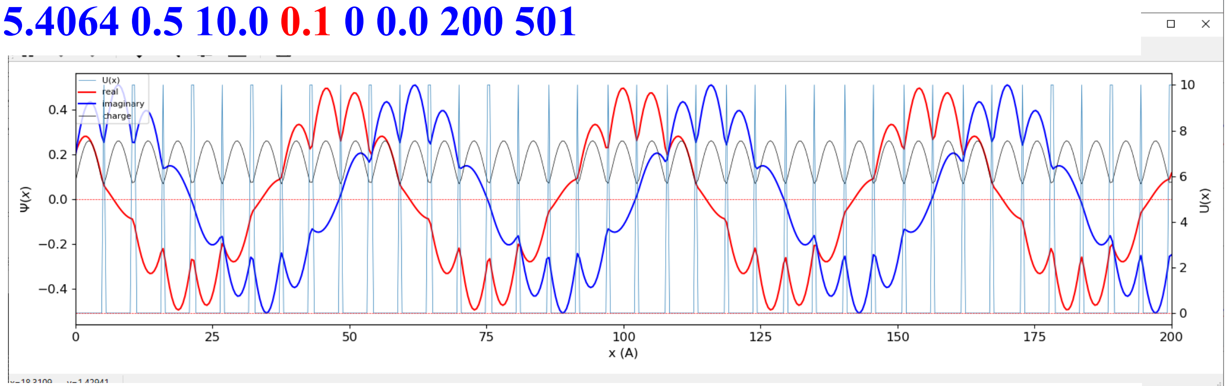
python kronig_penney.py wf 5.4064 0.5 10.0 0.1 0 0.0 200 501

$k = 0.1$

任意の$k \neq 0$:

$1/k$ 個の

単位格子の周期



python kronig_penney.py wf 5.4064 0.5 10.0 0.5 0 0.0 200 501

$k = 0.5$

BZ境界: 反結合性