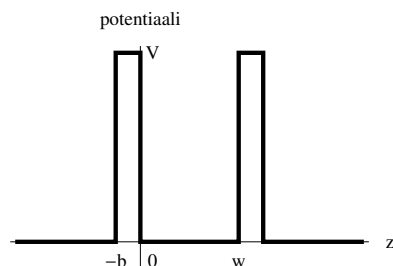


Harjoitustyö 2

Johdanto

Puolijohdesuperhila koostuu vuorottelevista kerroksista kahta erilaista puolijohdeseosta. Eri kerroksissa johtavuusvyö sijoittuu eri kohtiin energia-akselia. Tästä johtuen johde-elektronit kokevat periodisen potentiaalin (ks. kuva, asetetaan koordinaatisto siten, että z -akseli on kohtisuorassa puolijohdekerroksia vastaan),



joka on kuin sarja potentiaalikuoppia ja -valleja, missä kuopat ovat syvyydeltään V . Tällaisessa potentiaalissa liikkuvan hiukkasen, jonka energia on pienempi kuin potentiaalivallin korkeus, $E < V$, Schrödingerin yhtälö on (rajoitutaan yhden periodin alueelle)

$$\psi_w''(z) + \alpha^2 \psi_w(z) = 0 \quad \text{kun } 0 \leq z \leq w \quad (1)$$

$$\psi_b''(z) - \beta^2 \psi_b(z) = 0 \quad \text{kun } -b \leq z \leq 0 \quad (2)$$

joista ylempi pätee siis potentiaalikuopissa ja alempi vallien sisällä. Hiukkasta kuvaava aaltofunktio on siis paloittain määritelty: $\Psi(z) = \psi_w(z)$, kun $0 \leq z \leq w$ ja $\Psi(z) = \psi_b(z)$, kun $-b \leq z \leq 0$. Tässä

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad (3)$$

$$\beta = \sqrt{\frac{2m_b(V - E)}{\hbar^2}} \quad (4)$$

missä m_w ja m_b ovat elektronin *efektiiviset massat* eri puolijohdekerroksissa. Ne poikkeavat vapaan elektronin massasta m_e (ks. taulukko tehtävänannossa).

Yhtälön (2) ratkaisuna saadaan

$$\psi_w(z) = Ae^{i\alpha z} + Be^{-i\alpha z} \quad (5)$$

$$\psi_b(z) = Ce^{\beta z} + De^{-\beta z} \quad (6)$$

missä vakiot A , B , C ja D määräytyvät reunaehdoista. Huom. funktio Ψ on siis oskilloiva potentiaaliukuopissa ja eksponentiaalisesti vähenevä potentiaalivalleissa.

Funktiot ψ_w ja ψ_b toteuttavat reunaehdot (aaltofunktion Ψ ja sen derivaatan on oltava jatkuva)

$$\psi_b(0) = \psi_w(0) \quad (7)$$

$$\frac{1}{m_b}\psi'_b(0) = \frac{1}{m_w}\psi'_w(0) \quad (8)$$

$$\psi_w(w) = e^{ikd}\psi_b(-b) \quad (9)$$

$$\frac{1}{m_w}\psi'_w(w) = e^{ikd}\frac{1}{m_b}\psi'_b(-b) \quad (10)$$

missä k on hiukasta kuvaavan aallon aaltovektorin pituus (ns. Bloch-aaltoluku), $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ja $d = w + b$. Nämä reunaehdot, kuten sanottua, määräävät vakiot A , B , C ja D , mutta lisäksi ne määräävät, mitkä ominaisarvon E arvot ovat mahdollisia.

Tehtävänanto

1. Sijoita funktiot (5) ja (6) reunaehtoihin (10), jolloin saat neljä lineaarista yhtälöä kertoimille A , B , C ja D . Tällä yhtälöryhmällä on olemassa epätriviaaleja ratkaisuja vain jos kerroinmatriisin M determinantti on nolla. Muodosta kerroinmatriisi M ja laske sen determinantti. Sieventämällä yhtälöä $\det M = 0$, osoita että

$$\cos(kd) = \cosh(\beta b) \cos(\alpha w) + \frac{1}{2} \left(\zeta - \frac{1}{\zeta} \right) \sinh(\beta b) \sin(\alpha w) \quad (11)$$

missä

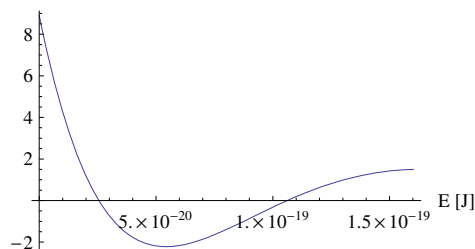
$$\zeta = \frac{m_b \alpha}{m_w \beta} = \sqrt{\frac{(V - E)m_w}{Em_b}} \quad (12)$$

Tämä yhtälö määrää *dispersiorelaation* $E(k)$, ts. mahdolliset energian arvot.

2. Tarkastellaan yhtälöä (11). Anna parametreille arvot

w	4 nm
b	1 nm
m_w	$0.067m_e$
m_b	$0.11m_e$
V	1.06 eV

Merkitään yhtälön oikeaa puolta $f(E)$. Piirrä funktion f kuvaaja energian E funktiona. Huom. energia esiintyy oikealla puolella parametreissa $\alpha = \sqrt{2m_w E}/\hbar^2$, $\beta = \sqrt{2m_b(V - E)}/\hbar^2$ ja ζ .



- Kosinifunktio on aina itseisarvoltaan pienempi kuin yksi, joten yhtälöllä (11) ei voi olla ratkaisua $E(k)$, kun $f(E) > 1$. Piirrä edellisessä tehtävässä piirtämäsi kuvaajan kanssa samaan kuvaan suorat $y = \pm 1$. Ratkaise `FindRoot`-funktioilla kahden ensimmäisen sallittun energia-alueen, eli *energiavyön* rajat ja laske energiavöiden leveydet. Voit ottaa alkuarvaukset kuvaajasta.
- Yhtälö (11) määrää implisiittisesti *dispersiorelaation*, eli funktion $E(k)$, jokaiselle energiavyölle erikseen. Hahmottele funktion $E(k)$ kuvaaja 1. ja 2. energiavyölle ratkaisemalla energian arvo E yhtälöstä

$$\cos k_i d = f(E),$$

missä

$$-\frac{\pi}{d} \leq k_i \leq \frac{\pi}{d}, \quad i = 1, \dots, n$$

Voit tehdä tehtävän valmiilla funktiolla `FindRoot`. Huom. alkuarvaukset on oltava erilaiset eri vöille. Voit katsoa ne funktion f kuvaajasta.

- Piirrä samaan kuvaajaan funktion $E(k)$ kanssa funktiot

$$E_i + \frac{\Delta_i}{2}(1 \pm \cos kd),$$

missä E_i on i :nnen energiavyön ”pohja” (ts. alaraja) ja Δ_i on i :nnen vyön leveys. Plusmerkki vastaa 1. vyötä, miinusmerkki 2. vyötä.

Ohjeita toteutukseen

- Tehtävässä 2 kannattaa ottaa käyttöön fysikaaliset vakiot paketista `PhysicalConstants`. Yksiköt voit supistaa pois.
- Käytännön ohjeet ovat samat kuin harjoitustyössä 1.