

Úloha č.5

Výpočet modelovej pásmovej štruktúry energetického spektra elektrónov v periodickom poli

Pozn.: Výpočet realizovať na základe Kronig-Peneyho modelu, ktorý je popísaný v študijnom texte **Fyzika tuhých látok** (Hronský) v kap. 4.3.2.

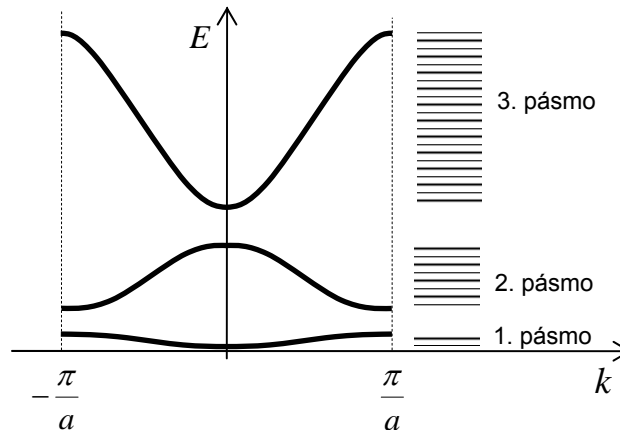
Údaje potrebné k výpočtu:

$$P = \frac{mV_0ba}{\hbar^2} ,$$

kde $m = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} ,$
 $a = 3 \text{ \AA} = 3 \cdot 10^{-10} \text{ m} ,$
 $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s} \quad (\hbar = h/2\pi) ,$
 $1\text{eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J} ,$
 $b = 1 \text{ \AA} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m} ,$
 $V_0 = 12,5 \text{ eV} = 2 \cdot 10^{-18} \text{ J} .$

Jednotlivé úlohy:

- Stručne popísať Kronig-Peneyho model a uviesť východiskové vzťahy pre ďalší výpočet.
- Určiť [v eV] minimálne a maximálne hodnoty energie pre prvé 3 energetické pásma, určiť šírky dovolených a zakázaných pásiem.
- Numerickým výpočtom určiť disperzný vzťah $E = E(k)$ pre prvé 3 energetické pásma, tj. pre k z intervalov $k \in (0, \pi/a) ,$
 $k \in (\pi/a, 2\pi/a) ,$
 $k \in (2\pi/a, 3\pi/a) .$
Výsledky $[k_i, E(k_i)]$ uviesť v tabuľke (interval k deliť ekvidistantne na 30 hodnôt).
- Znázorniť disperzné vzťahy graficky v redukovanej pásmovej schéme s popisom osí (viď nasledujúci obrázok):



e) Z dátových súborov $[k_i, E(k_i)]$ previesť regresnú analýzu na polynóm (odhadnúť stupeň polynómu), do referátu uviesť vypočítané koeficienty polynómu (3 krát – pre každé energet. pásmo).

f) Podľa vzťahu pre efektívnu hmotnosť:
$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E(k)}{d k^2}}$$

určiť $m^* = m^*(k)$ pre 30 ekvidistantných hodnôt k_i v každom energetickom pásme (k výpočtu využiť regresné polynómy $E(k_i) = a_0 + a_1 k_i + a_2 k_i^2 + a_3 k_i^3 + \dots$ – vid' bod e).

Vypočítané hodnoty efektívnych hmotností uviesť v tabuľke a previesť diskusiu hodnôt m^* , ktoré odpovedajú extrémnym hodnotám energie v prvých troch pásmach.