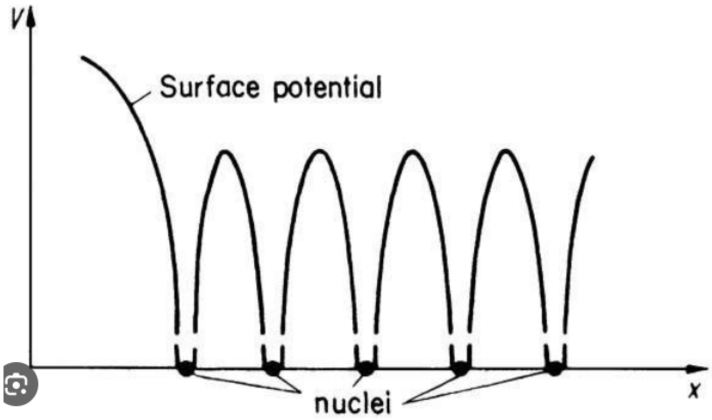
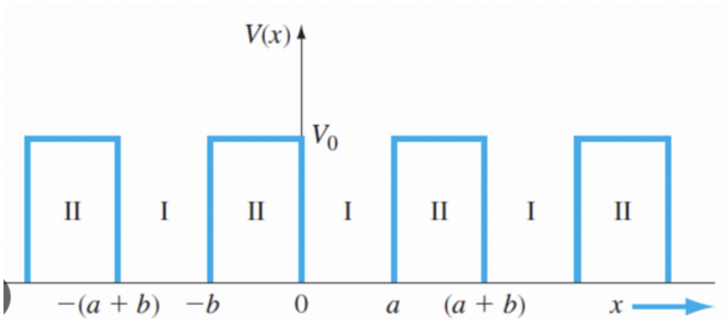
კრონიგ-პენის მოდელი

კრონიგ-პენის მოდელი არის იდეალიზირებული, გამარტივებული კვანტური სისტემა რომელიც შედგება პერიოდული მართკუთხა პოტენციალური ბარიერებისგან. მოდელი შეიქმნა მყარი სხეულებში, კრისტალურ მესერში ელექტრონების მოძრაობის აღსაწერად.
პირველ სურათზე მოცემულია ერთგანზომილებიანი მესერის პოტენციალი. ვინაიდან შროდინგერის განტოლების ანალიზური ამოხსნა შეუძლებელია მსგავსი პოტენციალისთვის, რალფ კონიგმა და ვილიამ პენიმ შემოიღეს გამარტივებული მოდელი (სურ. 2).



სურ. 1: პოტენციალი მყარ სხეულში



სურ. 2: კრონიგ-პენის პოტენციალი

კრონიგ-პენის გამარტივებულ პოტენციალში I არეში ელექტორნი თავისუფალია $V = 0$, II არეში კი $V = V_0$. a და b შესაბამისი რეგიონის სიგანეებია.
ამოცანის ამოხსნა დადის I და II რეგიონებისთვის შროდინგერის განტოლების ამოხსნაზე.

$$I: \ \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m\,\mathrm{d}\psi}{\hbar^2\mathrm{d}x} = 0$$

$$II: \ \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m(E-V_0)\,\mathrm{d}\psi}{\hbar^2\mathrm{d}x} = 0$$

შემოვიღოთ აღნიშვნები $\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ და $\beta^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$.
ვინაიდან პოტენციალი პერიოდულია, ბლოხის თეორემის თანახმად ამონახსნი უნდა ვეძებოთ შემდეგი სახით:

$$\psi(x) = e^{ikx}\,u_k(x)$$

სადაც e^{ikx} ბრტყელი ტალღაა, ხოლო $u_k(x)$ პერიოდული ფუნქცია, რომლის პერიოდი პოტენციალისას ემთხვევა.

$\psi(x)$ შეტანით შესაბამისი რეგიონისთვის დაწერილ შროდინგერის განტოლებაში მივიღებთ დიფერენციალურ განტოლებას u_1-სთვის $0 < x < a$ და u_2-სთვის $-b < x < 0$ რეგიონში, რომელთა ამონახსნია:

$$I: \; e^{-ikx}(Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x})$$

$$II: \; e^{-ikx}(Ce^{i\beta x} + De^{-i\beta x})$$

A, B, C, D კოეფიციენტების განსაზღვრისთვის ვიყენებთ სასაზღვრო პირობებს: $u_1(0) = u_2(0)$, $u_1'(0) = u_2'(0)$, $u_1(a) = u_2(-b)$, $u_1'(a) = u_2'(-b)$. შესაბამისი განტოლებათა სისტემაა:

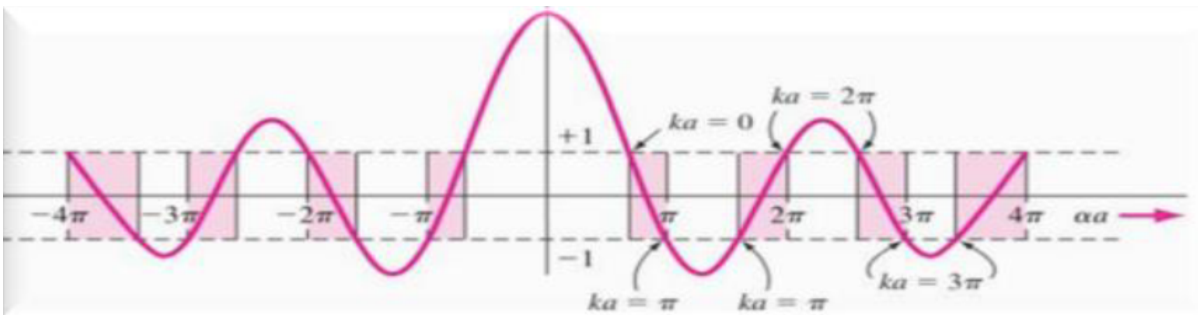
განტოლებათა სისტემას არანულოვანი A, B, C და D მნიშვნელობებისთვის ამონახსნი აქვს მხოლოდ იმ შემთხვევაში თუ A, B, C და D კოეფიციენტებით შედგენილი მატრიცის დეტერმინანტი 0-ის ტოლია. ისევე როგორც ერთი პოტენციალური ორმოს შემთხვევაში, სასაზღვრო პირობებით შედგენილი სისტემა გარკვეულ პირობას დაადებს $\psi(x)$ ფუნქციის ტალღურ ვექტორს k. კერძოდ დეტერმინანტის დათვლისას ვიღებთ შემდეგ დამოკიდებულებას.

$$\frac{\beta^2 + \alpha^2}{2\alpha\beta}\sin(\beta b)\sin(\alpha a) + \cosh(\beta b)\cos(\alpha a) = \cos(k(a+b)) \quad (1)$$

(1) განტოლება წარმოადგენს ენერგიის დამოკიდებულებას k ვექტორზე. სიმარტივისთვის მიჩნეულია რომ ბარიერის სიმაღლე უსასრულოდ დიდია $V \to \inf$, ხოლო სიგანე $b \to 0$, ისე რომ Vb სიდიდე სასრული რიცხვია. (1) გამოსახულება მარტივდება და ვიღებთ:

$$P\sin(\alpha a) + cos(\alpha a) = \cos(k\alpha) \quad (2),$$

სადაც $P = \frac{mV_0 b}{\hbar^2 \alpha}$.
(2) ტოლობის მარჯვენა მხარე იღებს მნიშვნელობებს -1 დან +1. იმისთვის რომ k-ს ფიზიკური მნიშვნელობა გააჩნდეს მაშინ განტოლების მარცხენა მხარეც -1 დან +1 უნდა იცვლებოდეს. სურ. 3 ზე მოცემულია განტოლების გრაფიკული ამონახსნი. ამონახსნიდან ვიგებთ რომ კრისტალში არსებობს ენერგიის დაშვებული და აკრძალული ზონები. ენერგიის დაშვებული ზონები



სურ. 3: გრაფიკული ამოხსნა

მიიღება კრისტალის ატომური ორბიტალების ჰიბრიდიზაციით. ვინაიდან მაკროსკოპულ სხეულში ატომთა რიცხვი ძალიან დიდია, ენერგიის დონეები იმდენად ახლოსაა ერთმანეთთან რომ საუბარია ენერგიის ზონაზე და არა დისკრეტულ ენერგეტიკულ დონეზე.