

Solid State Physics Simulations ***The Consortium for*** ***Upper-Level Physics Software***

Ian Johnston

Department of Physics, University of Sydney
Sydney, Australia

Graham Keeler

Department of Physics, University of Salford
Salford, United Kingdom

Roger Rollins

Department of Physics, Ohio University
Athens, Ohio

Steven Spicklemire

Department of Physics, University of Indianapolis
Indianapolis, Indiana

Series Editors

William MacDonald

Maria Dworzecka

Robert Ehrlich



JOHN WILEY & SONS, INC.

NEW YORK · CHICHESTER · BRISBANE · TORONTO · SINGAPORE

Contents

Chapter 1	Introduction	1
1.1	Using the Book and Software	1
1.2	Required Hardware and Installation of Programs	2
1.3	User Interface	3
1.4	The CUPS Project and CUPS Utilities	5
1.5	Communicating With the Authors	6
1.6	CUPS Courses and Developers	7
1.7	Descriptions of all CUPS Programs	8
Chapter 2	Phonon Dispersion Curves and the Density of States	23
2.1	Introduction	23
2.2	The Linear Atomic Chain	24
2.2.1	Dispersion Curves	24
2.2.2	The Density of States	27
2.2.3	More Than One Atom per Unit Cell	28
2.3	Three-Dimensional Crystal Lattice	30
2.3.1	The Normal Mode Frequencies in Terms of the Dynamical Matrix	30
2.3.2	Two-Atom Unit Cell	33
2.3.3	Three-Dimensional Brillouin Zone	33
2.4	Computational Approach	34
2.4.1	Preliminary Calculations	34
2.4.2	Phonon Dispersion Curves for Various Crystal Lattices	35

2.4.3	Density of States	36
2.4.4	Van Hove Critical Points	38
2.5	Running the PHONONS.EXE Program	38
2.5.1	Main Menu	39
2.5.2	Sliders, Radio Buttons, and Hot Keys	43
2.5.3	The Crystal Structure Display	44
2.6	Exercises	45
2.6.1	Calculations	45
2.6.2	Investigations Using PHONONS.EXE Program	46
2.6.3	Extensions of the Program	48
2.7	Calculation of the Dynamical Matrix	48
2.8	Two-Atom Unit Cell	51
2.9	Calculation of the Interatomic Force Constants	52
2.10	Calculation of the Dynamical Matrix for up to Sixth-Nearest Neighbors	53
Chapter 3	Lattice Specific Heat of Solids	56
3.1	Introduction	56
3.2	Theory of the Lattice Specific Heat	57
3.2.1	Classical Theory of Specific Heat	57
3.2.2	The Einstein Model for Specific Heat	57
3.2.3	The Debye Model for Specific Heat	60
3.2.4	Deviations From the Debye Theory	64
3.3	Schottky Specific Heat	65
3.4	Computational Approach	66
3.4.1	Preliminary Calculations	66
3.4.2	Specific Heat for Various Models	67
3.4.3	Display of Debye Temperature	69

3.5	Running the Program	69
3.5.1	Main Menu	69
3.5.2	Sliders, Radio Buttons, and Hot Keys	74
3.6	Exercises	76
3.6.1	Calculations	76
3.6.2	Investigations Using the Program	76
3.6.3	Extensions of the Program	79
3.7	Calculation of the Equivalent Debye Temperature	80
Chapter 4	Electron States in a One-Dimensional Lattice	82
4.1	Introduction	82
4.2	The Band Theory of Solids	83
4.2.1	The Free Electron Model	83
4.2.2	The Bloch Theorem	84
4.2.3	The Tight Binding Approximation	84
4.2.4	The Kronig-Penney Model	85
4.2.5	Applications to Semiconductors	86
4.3	Computational Approach	87
4.3.1	Energy Levels in Regular Lattices	87
4.3.2	Symmetries of the Wave Functions	88
4.4	Exercises	88
4.5	Details of the Program	93
4.5.1	Running the Program	93
4.5.2	Possible Modifications to the Program	99
Chapter 5	Energy Bands, Gaps, and Eigenfunctions in an Infinite Lattice	101
5.1	Introduction	101
5.2	Exact Result for Periodic Potentials in One Dimension	102
5.2.1	Bloch's Theorem	103

5.2.2	Electron Scattering From Potential Barrier of Single Unit Cell	104
5.2.3	Generalized Kronig-Penney Function	107
5.3	Computational Approach	108
5.3.1	Reduced Units	108
5.3.2	Determination of Energy Dispersion Curves, $E(k)$	109
5.3.3	Determination of the Wave Function	109
5.3.4	Infinite V_0 Approximation	110
5.3.5	The Perturbation Approximation	110
5.4	Running the BANDS Program	111
5.4.1	Menu Options	111
5.4.2	Short Tutorial	114
5.5	Exercises	114
5.5.1	Possible User Modifications	116
Chapter 6	Forced Motion of a Wave Packet in a 1-D Lattice	118
6.1	Introduction	118
6.2	Motion of an Electron in a Crystal Lattice	119
6.2.1	Standard Tight Binding Model	119
6.2.2	Placing a Localized Electron in the Lattice	121
6.2.3	Adding an External Force	122
6.2.4	Embedding an Added Potential in the 1-D Lattice	122
6.2.5	The Energy of a Wave Packet	123
6.2.6	The Semiclassical Model and the Effective Mass	123
6.3	Computational Approach	124
6.3.1	Quick Overview	124
6.3.2	Reduced Units	126
6.3.3	Direct Numerical Solution	126

6.3.4	Program Procedures and Some Details	127
6.4	Running the PACKET Program	129
6.4.1	Menu Options	129
6.4.2	Short Tutorial	131
6.5	Exercises	131
6.5.1	Possible User Modifications	137
Chapter 7	Inhomogeneous Semiconductor Laboratory	139
7.1	Introduction	139
7.2	Charged Particle Dynamics—The Semiclassical Limit	140
7.2.1	Diffusion	140
7.2.2	Drift	141
7.2.3	Generation and Recombination	141
7.3	Performing Transport Calculations in a 2-D Model	142
7.3.1	Satisfying Electrostatic Boundary Conditions	142
7.3.2	Transport Via Diffusion and Drift	144
7.3.3	Adding/Removing Charge Via Generation/Recombination	145
7.4	Running the Program	145
7.5	Exercises	148
Chapter 8	LCAO Workbench	151
8.1	Introduction	151
8.2	Two-Dimensional Atoms	151
8.3	LCAO Theory	152
8.4	Running the Program	155
8.5	Exercises	157

Appendix	Walk-Throughs for All Programs	160
A.1	Walk-Through for PHONONS Program	160
A.2	Walk-Through for SPHEAT Program	161
A.3	Walk-Through for LATTICE Program	163
A.4	Walk-Through for BANDS Program	164
A.5	Walk-Through for PACKET Program	166
A.6	Walk-Through for SOLIDLAB Program	168
A.7	Walk-Through for LCAO Program	168

Gerhard Hübner

Stochastik

Eine anwendungsorientierte Einführung
für Informatiker, Ingenieure und Mathematiker

3., überarbeitete Auflage



Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Was ist Stochastik?	1
1.2	Anwendungsbereiche der Stochastik	1
1.3	Modell und Realität	3
1.4	Fragestellungen und Ziele	4
1.5	Beschreibende Statistik	6
1.6	Aufgaben	9
2	Wahrscheinlichkeits-Modelle	11
2.1	Die Modell-Bausteine	11
2.2	Der Merkmalraum Ω	12
2.3	Zusammengesetzte Merkmale	13
2.4	Ereignisse	14
2.5	Das Ereignis-System $\mathcal{A}$	17
2.6	Darstellung von Ereignissen durch Zufallsvariable	19
2.7	Relative Häufigkeit und Wahrscheinlichkeit	21
2.8	Weitere Eigenschaften von Wahrscheinlichkeitsmaßen	26
2.9	Elementare bedingte Wahrscheinlichkeiten	27
2.10	Aufgaben	30
3	Darstellungen von Wahrscheinlichkeitsmaßen	33
3.1	Diskrete W-Maße und Zähldichten	33
3.2	Stetige W-Maße und Riemann-Dichten	36
3.3	Verteilungsfunktionen	41
3.4	Aufgaben	45
4	Mehrstufige W-Modelle, Koppelung	47
4.1	Koppelung diskreter W-Modelle	47
4.2	Koppelung stetiger W-Modelle	49
4.3	Unabhängige Koppelung	49

4.4	Markov-Koppelung	52
4.5	Zufälliges Ziehen ohne Zurücklegen	53
4.6	Folgen von Koppelungsmodellen	56
4.7	Aufgaben	57
5	Zufallsvariable und Bildmodelle	59
5.1	Zufallsvariable und messbare Abbildungen	59
5.2	Bildmodelle und Verteilungen von Zufallsvariablen	60
5.3	Hypergeometrische und Binomial-Modelle	62
5.4	Die Poisson-Approximation der Binomial-Verteilung	64
5.5	Die Normal-Approximation der Binomial-Verteilung	65
5.6	Wartezeiten – die geometrische Verteilung	66
5.7	Mehrfaches Warten – die negative Binomialverteilung	68
5.8	Bild-Verteilungen für stetige W-Modelle	69
5.9	Randverteilung und gemeinsame Verteilung	71
5.10	Stochastische Unabhängigkeit von Zufallsvariablen	74
5.11	Summen-Verteilungen und Faltung	78
5.12	Aufgaben	82
6	Kenngrößen	87
6.1	Modalwert, Median, Quantile	87
6.2	Erwartungswert: Einführung	89
6.3	Erwartungswert: diskrete Modelle	90
6.4	Erwartungswert: stetige und gemischte Modelle	96
6.5	Streuung und Varianz	100
6.6	Kovarianz	103
6.7	Mehrdimensionale Normalverteilung	105
6.8	Zufällige Summen und bedingte Erwartungswerte	109
6.9	Aufgaben	113
7	Modelle für stochastische Prozesse	117
7.1	Vorbemerkungen	117
7.2	Markov-Ketten – einige Grundbegriffe	118
7.3	Markov-Ketten im Gleichgewicht	121
7.4	Aufgaben	126

8 Bediensysteme	127
8.1 Vorbemerkungen	127
8.2 Das Bedienmodell $M M 1 \infty$	129
8.3 Das $M M 1$ -Bediensystem im Gleichgewicht	133
8.4 Leistungsmaße im $M M 1$ -Bediensystem	135
8.5 $M M s c$ -Bediensysteme	139
8.6 Andere Bedienzeitverteilungen	146
8.7 Gekoppelte Bediensysteme – Bediennetze	147
8.8 Bedienmodelle mit stetiger Zeit	151
8.9 Aufgaben	153
9 Zufallszahlen und Simulation	157
9.1 Vorbemerkungen	157
9.2 Erzeugen gleichverteilter Zufallszahlen	157
9.3 Zufallszahlen mit anderen Verteilungen	159
9.4 Anwendung von Simulationsverfahren	163
9.5 Aufgaben	165
10 Grundfragen der Statistik	167
10.1 Typische Problemstellungen	167
10.2 Punktschätzung	169
10.3 Intervallschätzung	171
10.4 Statistische Tests	174
10.5 Testen von Hypothesen	176
10.6 Chi-Quadrat-Anpassungstest	178
10.7 Test auf Unabhängigkeit	180
10.8 Aufgaben	181
A Tabellen	185
A.1 Die wichtigsten diskreten Verteilungen	185
A.2 Die wichtigsten stetigen Verteilungen	186
A.3 Werte der Standard-Normalverteilung	187
A.4 Quantile der Standard-Normalverteilung	188
A.5 Quantile der Student-Verteilung	188
A.6 Quantile der Chi-Quadrat-Verteilung	189

Literaturverzeichnis	191
Symbole und Abkürzungen	194
Stichwortverzeichnis	195