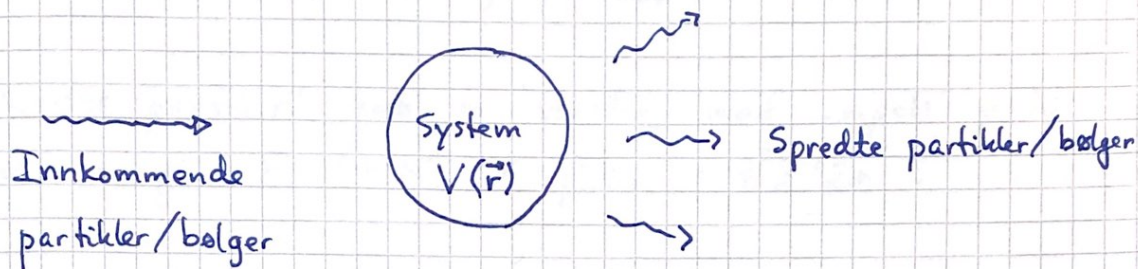


Spredning i én dimensjon

Spredning har mange anvendelser:



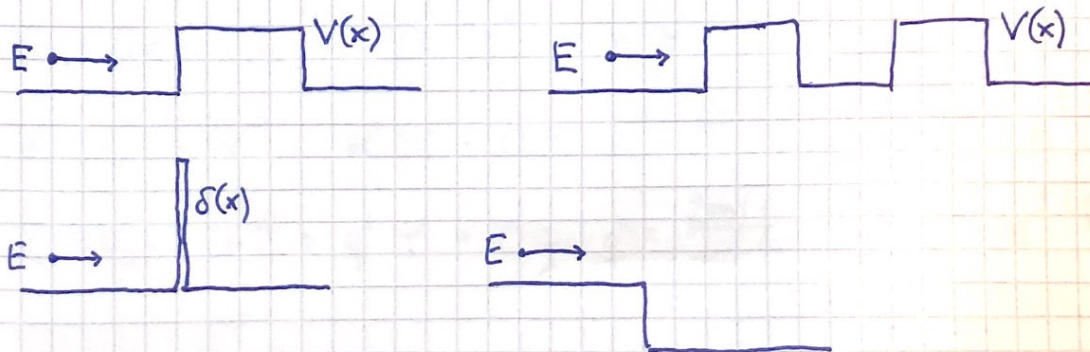
Røntgen (fotoner), ultralyd (lydbølger), TEM (elektronmikroskop), ARPES (angle resolved photo-emission spectroscopy; fotoelektrisk effekt), SANS (small-angle neutron scattering),...

Spredning i fysikkemner:

TFY 4345	Klassisk mekanikk	(3H)
TFY 4220	Faste stoffers fysikk	(3V)
TFY 4205	Kvantemekanikk 2	(4H)
TFY 4320	Fysikk i medisinsk bildning	

⋮

TFY 4215: Enkle modellpotensialer i 1D; elastisk spredning.



Bruker firkantbarriere som konkret eksempel, dvs

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & ; \quad 0 < x < L \\ 0 & ; \quad \text{ellers} \end{cases}$$

Sender partikkel inn fra venstre, med impuls $p = \hbar k$ og energi $E (=K) = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$:



Spredning med to mulige utfall,
refleksjon med sanns. R

transmisjon med sanns $T = 1 - R$

Bølge inn: $\psi_i(x) = e^{ikx}$

Bølge refl.: $\psi_r(x) = r e^{-ikx}$

$\Rightarrow$ Bølgefunksjon for $x < 0$:

$$\psi(x) = \psi_i(x) + \psi_r(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}$$

Bølge transm.: $\psi_t(x) = t e^{ikx} \quad (x > L)$

$$\text{For } 0 < x < L: -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V_0 \psi = E \psi$$

$$E < V_0: \psi'' - \kappa^2 \psi = 0; \quad \kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}; \quad \psi \sim e^{\pm \kappa x}$$

$$E > V_0: \psi'' + q^2 \psi = 0; \quad q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}; \quad \psi \sim e^{\pm i q x}$$

Bevaring av sannsynlighet :

$$\text{Sanns. strøm inn} = \text{Sanns. strøm ut}$$

$$j_i = |j_r| + j_t \quad (j_r < 0, \text{ mot venstre})$$

$$\text{med } j = \text{Re} \left\{ \psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} \psi \right\}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Transm. sanns. : } T = j_t / j_i \\ \text{Refl. sanns. : } R = |j_r| / j_i \end{array} \right\} T + R = 1$$

De ulike sanns. strømmene :

$$j_i = \text{Re} \left\{ e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik e^{ikx} \right\} = \frac{\hbar k}{m}$$

$$j_r = \text{Re} \left\{ r^* e^{ikx} \frac{\hbar}{im} (-ik) r e^{-ikx} \right\} = -|r|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

$$j_t = \text{Re} \left\{ t^* e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik t e^{ikx} \right\} = |t|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

$$\Rightarrow R = |r|^2, \quad T = |t|^2$$

Skarp energi E innebærer stasjonær (sprednings-) tilstand med tidsuavhengig ρ og posisjonsuavhengig j :

$$\begin{aligned} j(x < 0) &= \text{Re} \left\{ (\bar{e}^{-ikx} + r^* e^{ikx}) \frac{\hbar}{im} ik (e^{ikx} - r e^{-ikx}) \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2) + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \{ r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \} \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - R) + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \{ 2i \text{Im}(r^* e^{2ikx}) \} \\ &= \frac{\hbar k}{m} \cdot T = j(x > L) \quad ; \quad \text{OK!} \end{aligned}$$

Anta, for $0 < x < L$, $\Psi(x)$ på formen

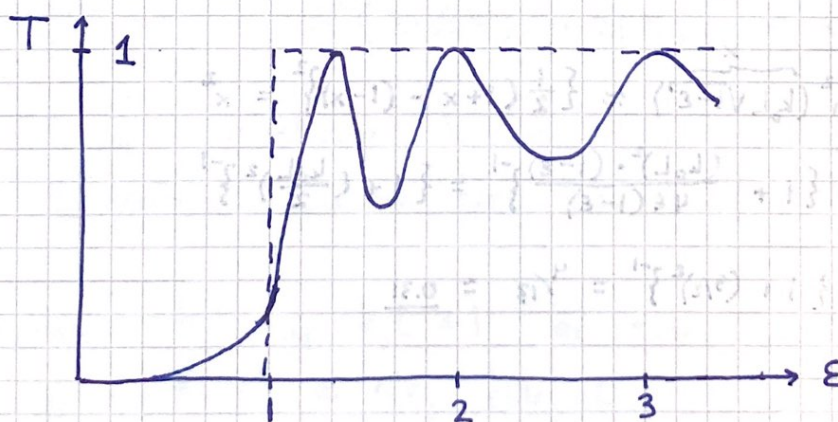
$$\Psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} & ; E < V_0 \\ a e^{iqx} + b e^{-iqx} & ; E > V_0 \end{cases}$$

Kontinuerlige Ψ og Ψ' i $x=0$ og $x=L$ gir

$$\left[1 + \frac{\sinh^2(k_0 L \sqrt{1-E'})}{4E(1-E)} \right]^{-1} ; E < 1$$

$$T = |t|^2 = \left[1 + \frac{\sin^2(k_0 L \sqrt{E-1'})}{4E(E-1)} \right]^{-1} ; E > 1$$

Her er $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$ og $E = E/V_0$



Klassisk (----) : $T = \begin{cases} 0 & ; E < 1 \\ 1 & ; E > 1 \end{cases}$

Belyser noen poeng med konkret eksempel
a la tidligere gitte eksamensoppgaver.

Eks: Anta $V_0 = 230 \text{ meV}$, $m = 0.067 m_e$
og $L = 47 \text{ \AA}$.

(61)

- Bestem T når $E = 23 \text{ meV}$.
- Vis at $T \approx 16\varepsilon \cdot \exp(-2k_0L)$ når $\varepsilon \ll 1$ ($E \ll V_0$)
og $k_0L \gg 1$.
- Hvor stor blir feilen med T som i b) og E som i a) ?
- Hva er T når $E = V_0$?
- Hvilke verdier av K ($= E - V_0$) og λ på $0 < x < L$
gir $T = 1$?

a) Her er $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar = 0.638 \text{ nm}^{-1}$, dvs
 $k_0L = 0.638 \cdot 4.7 = 3.00$, og $\varepsilon = E/V_0 = 0.1$
 $\Rightarrow T = \left\{ 1 + \sinh^2(3 \cdot \sqrt{0.9}) / 4 \cdot 0.1 \cdot 0.9 \right\}^{-1} \approx \underline{\underline{0.0049}}$

[Poeng: Partikkelen har en viss sanns. for å
tunnelere gjennom det klassisk forbudte området.]

b) Hvis $\varepsilon \ll 1$ og $k_0L \gg 1$, er $\sinh(k_0L\sqrt{1-\varepsilon}) \approx \frac{1}{2}e^{k_0L} \gg 1$
og $4\varepsilon(1-\varepsilon) \approx 4\varepsilon$, slik at
 $T \approx \left\{ \frac{1}{16\varepsilon} e^{2k_0L} \right\}^{-1} = 16\varepsilon \cdot e^{-2k_0L} \ll 1$ [Poeng:
Enklere formel.]

c) Her: $T \approx 1.6 \cdot \exp(-6) \approx \underline{\underline{0.0040}}$,
en feil på ca 18%. (Skyldes først og fremst at vi
satte $\sqrt{1-\varepsilon} \approx 1$ i argumentet til sinh-funksjonen.)

d) Når $\varepsilon \rightarrow 1$, er $\sinh^2(k_0L\sqrt{1-\varepsilon}) = \sin^2(k_0L\sqrt{\varepsilon-1}) = (k_0L)^2 \cdot |\varepsilon-1|$
slik at $T = \left\{ 1 + (k_0L/2)^2 \right\}^{-1}$. Med $k_0L = 3$ blir $\underline{\underline{T = 4/13}}$

$$e) \quad T=1 \text{ når } E>V_0 \text{ og } \sin(k_0 L \sqrt{E-V_0}) = 0 \quad (62)$$

$$\Rightarrow k_0 L \sqrt{E-V_0} = n\pi \quad (n=1,2,\dots)$$

$$\Rightarrow \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \left(\frac{E}{V_0} - 1\right) = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

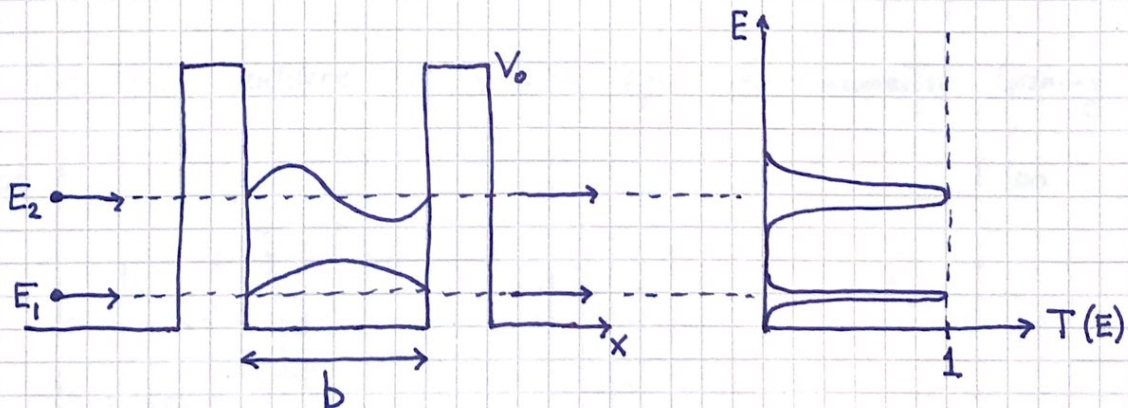
$$\Rightarrow E - V_0 = \underline{\underline{K = \frac{(n\pi\hbar/L)^2}{2m}}}$$

$$\Rightarrow p = \hbar/\lambda = 2\pi\hbar/\lambda = n\pi\hbar/L$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\lambda_n = 2L/n}}$$

Poeng: Stående bølger på bariereintervallet $0 < x < L$.
Resonansfenomen!

Resonant tunnelering:



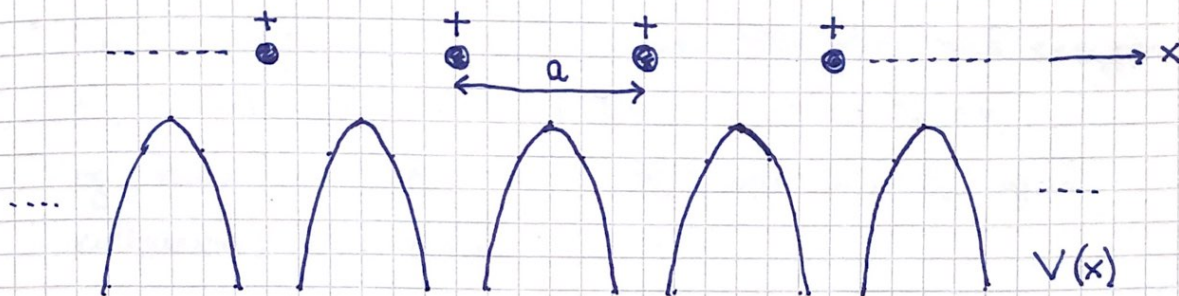
Resonans og stående bølger i "brønnen" mellom barrierene gir $T=1$ når $\lambda_n = 2b/n$, dvs

$$E_n = K_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{\lambda_n}\right)^2 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m b^2} \quad (n=1,2,\dots)$$

(63)

Krystaller, periodisk potensial, og realisering av barrierer og brønner i halvledere

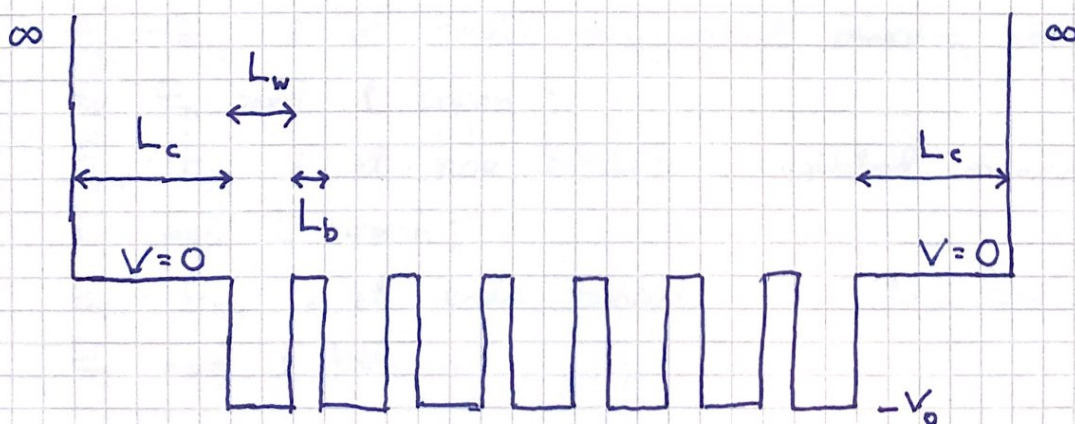
Et elektron i en regulær krystall "ser" et periodisk potensial:



$$\text{dvs } V(x + j \cdot a) = V(x) \quad ; \quad -\infty < j < \infty$$

a = gitterkonstant

En enda enklere 1D modell, egnet for numerisk løsning:



$$\text{gitterkonstant } a = L_w + L_b$$

N_A = antall "atomer" (dvs brønner)

$$L_k \approx N_A \cdot a = \text{krystallens utstrekning}$$

$$[\text{strengt tatt: } L_k = N_A \cdot L_w + (N_A - 1) \cdot L_b]$$

(64)

Programmet `periodisk.py` plottet $V(x)$ og E for bundne tilstander ($E < 0$), samt en "valgbar" $\Psi(x)$, med $V_0 = 14 \text{ eV}$, $L_w = 4 \text{ \AA}$, $L_b = 2 \text{ \AA}$ (dvs $a = 6 \text{ \AA}$) og $L_c = 50 \text{ \AA}$.

Noen observasjoner:

- $N_A = 1$ brønn gir her 3 bundne tilstander, med energier $E_0 = -12.54 \text{ eV}$, $E_1 = -8.33 \text{ eV}$, $E_2 = -2.16 \text{ eV}$ og tilhørende Ψ_0 , Ψ_1 og Ψ_2 med hhv 0, 1 og 2 nullpunkter, som ventet.
- $N_A = 2$ brønner gir $2 \cdot 3 = 6$ bundne tilstander, med E_0 og E_1 nær -12.54 eV (E_0 med 1 brønn); E_2 og E_3 nær -8.33 eV (E_1 —" —); E_4 og E_5 "nær" -2.16 eV (E_2 —" —)
- $N_A = 20$ brønner gir $20 \cdot 3 = 60$ bundne tilstander, med $E_0 \dots E_{19}$ i et smalt energibånd omkring verdien av E_0 med 1 brønn; $E_{20} \dots E_{39}$ i et noe bredere energibånd omkring E_1 med 1 brønn; $E_{40} \dots E_{59}$ i et enda bredere energibånd omkring E_2 med 1 brønn

Bølgefunksjonene: Periodiske funksjon $u(x)$, dvs slik at $u(x + j \cdot a) = u(x)$, modulert med stående bølger med bølgelengde $2L_k$, L_k , $2L_k/3$,, dvs:

$$\Psi_n(x) = u(x) \cdot \sin(k_n x) ; \quad k_n = \frac{n\pi}{L_k} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Med $N_A \rightarrow \infty$ er sannsynligheten periodisk,

$$|\psi(x+j \cdot a)|^2 = |\psi(x)|^2,$$

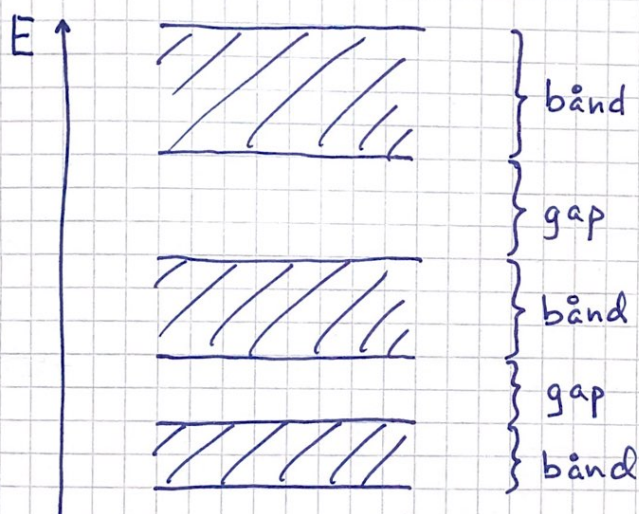
og bølgefunksjonene på formen

$$\psi(x) = e^{ikx} \cdot u(x) ; \quad u(x+j \cdot a) = u(x)$$

(Blochs teorem)

Vi har "nesten plane bølger" og "nesten frie elektroner"!

Kontinuerlige energibånd er adskilt med forbudte energigap:



N_A atomer i krystallen $\Rightarrow N_A$ romlige tilstander pr energibånd.

Elektroner har "indre dreieimpuls" - spin - som er kvantisert:

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar ; \quad s = 1/2$$

Måling av en komponent, f.eks. S_z , gir enten $+\hbar/2$ eller $-\hbar/2$.

Dvs: Et elektron kan være i to spintilstander, (66)

χ_+ (med spinn "opp" ; $S_z = \hbar/2$) og χ_- (med spinn "ned" ; $S_z = -\hbar/2$).

Elektronets "totale tilstand" kombinerer den romlige delen (orbitalen) $\Psi(x)$ og spinndelen χ :

$$\Phi(x; +) = \Psi(x) \chi_+$$

$$\Phi(x; -) = \Psi(x) \chi_-$$

Konklusjon : $2N_A$ unike tilstander pr energibånd

Elektroner er såkalte fermioner, og to fermioner kan ikke okkupere samme enpartikkeltilstand Φ .

(Pauliprinsippet; mer senere.)

Systemets grunntilstand tilsvarer lavest mulig total energi.

Oppnås med 2 elektroner i hver orbital (1 med spinn opp og 1 med spinn ned), fra laveste energi og oppover.

Anta energibånd som ikke overlapper.

Anta Z elektroner pr atom (evt. pr enhetscelle, dvs gruppen med atomer som gjentas periodisk og danner krystallen), dvs totalt $Z \cdot N_A$ elektroner.

Hvis Z er oddetall: $\frac{Z-1}{2}$ fulle energibånd, 1 halvfullt, resten tomme. Materialet er et metall.