QM i 2D og 3D

Plan uke 43 - 46:

- Harmonisk oscillator og partikkel i boks
- Degenerasjon
- Dreieimpuls i 2D og 3D
- Hydrogenatomet
- Spinn
- Atomer og molekyler

Harmonisk oscillator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

TUSL har produktløsninger og separerer i 3 ligninger for 1D harm. osc.:

$$E = (n_x + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_y + (n_z + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_z$$

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \phi_{n_x}(x)\,\phi_{n_y}(y)\,\phi_{n_z}(z)$$

$$\phi_{n_x}(x) = C_{n_x} \exp(-m\omega_x x^2/2\hbar)\, H_{n_x}\left(\sqrt{\frac{m\omega_x}{\hbar}}\, x\right) \quad \text{osv.}$$

$$n_x,\ n_y,\ n_z = 0, 1, 2, \ldots$$

Hvis $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$:

$$V = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 = V(r)$$

dvs <u>isotropt</u> (kulesymmetrisk, retningsuavhengig) potensial,

med $E_N = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega$; $N = 0, 1, 2, \dots$

og $$\psi_{n_x n_y n_z} = C \cdot \exp(-m\omega r^2/2\hbar) \cdot H_{n_x}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) \cdot H_{n_y}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, y\right) \cdot H_{n_z}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, z\right)$$

<u>Partikkel i boks</u>

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0<x<L_x,\ 0<y<L_y \text{ og } 0<z<L_z \\ \infty & \text{ellers} \end{cases}$$

TUSL separerer ; $\psi = 0$ på boksens 6 grenseflater :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right) \; ; \; n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\frac{n_x \pi x}{L_x} \sin\frac{n_y \pi y}{L_y} \sin\frac{n_z \pi z}{L_z}$$

Hvis $L_x = L_y = L_z = L$ (kubisk boks) :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\frac{n_x \pi x}{L} \sin\frac{n_y \pi y}{L} \sin\frac{n_z \pi z}{L}$$

Degenerasjon

1D : ingen degenerasjon; en egenfunksjon $\psi_n(x)$ pr energiegenverdi E_n

2D og 3D : med symmetri i $V(\vec{r})$ kan flere ψ tilsvare samme E

Degenerasjonsgrad :

g_N = antall tilstander med energi E_N

Eks 1 : 3D isotrop harmonisk oscillator

$$E_N = (N + \tfrac{3}{2})\hbar\omega = (n_x + n_y + n_z + \tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

$$g_N = \sum_{n_x=0}^{N} (N - n_x + 1)\cdot 1$$

$n_z = N - n_x - n_y$ = 1 mulig for gitt n_x, n_y

$n_x = 0, 1, \cdots, N$

$n_y = 0, 1, \cdots, N - n_x$
$= N - n_x + 1$ mulige

$$= \sum_{j=1}^{N+1} j = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

$g_0 = 1 \quad (\psi_{000})$

$g_1 = 3 \quad (\psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001})$ osv

Eks 2 : Partikkel i kubisk boks

$$E_N = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\cdot N \; ; \; N = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 3, 6, 9, 11, 12, 14, \ldots$$

$g_3 = 1 \quad (\psi_{111})$; $g_6 = 3 \quad (\psi_{211}, \psi_{121}, \psi_{112})$;

$g_9 = 3 \quad (\psi_{221}, \psi_{212}, \psi_{122})$; .... ; $g_{14} = 6$; ....

Eks 3: Spinndegenerasjon for elektroner

Hver orbital i Eks 1 og 2 kan kombineres med spinntilstand "opp" (χ_+) eller "ned" (χ_-).
Gir total degenerasjonsgrad

$$g = g_N \cdot g_s = 2 g_N$$

g_N = orbital deg.grad

g_s = spinndeg.grad = 2

Eks 4: Grunntilstanden for 20 (ikke-vekselvirkende!) elektroner i kubisk boks med sidekanter 4.0 nm; effektiv masse $m^* = 0.1\, m_e$. Hva er total energi?

Løsn: Energinivåene er $E_N = N \cdot E_0$ med
$N = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ og $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2m^* L^2 = 0.233$ eV
Fylles nedenfra med 2 elektroner i hver orbital $\psi_{n_x n_y n_z}$:

$$E_{TOT} = 2 \cdot E_3 + 2 \cdot 3 \cdot E_6 + 2 \cdot 3 \cdot E_9 + 2 \cdot 3 \cdot E_{11}$$
$$= E_0 \cdot \{6 + 36 + 54 + 66\} = 162 E_0 = \underline{\underline{37.8 \text{ eV}}}$$

Eks 5: Hva blir E_0, og dermed (ca) avstanden mellom energinivåene, for en makroskopisk kubisk boks, med f.eks. $L = 1$ mm?

Løsn: $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2 \cdot 0.1 \cdot m_e \cdot (10^{-3})^2$ J $= 3.7 \cdot 10^{-12}$ eV

Dvs, essensielt et kontinuerlig energispektrum.

Tilstandstetthet (Density of states ; DOS)

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \text{antall tilstander pr energienhet}$$

$$N(E) = \int_0^E g(E)\, dE = \text{antall tilstander på intervallet } (0, E)$$

1D: $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$

$\Rightarrow$ 2 tilstander ($g_s = 2$) pr lengdeenhet langs n-aksen

$\Rightarrow N_1(E) = 2 \cdot \sqrt{2mL^2 E / \pi^2 \hbar^2} = \#$ tilst. på $(0, E)$

$\Rightarrow g_1(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \cdot L \cdot E^{-1/2}$ = DOS i 1D

2D: $E = (n_x^2 + n_y^2) \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \qquad (n_x, n_y = 1, 2, 3, \ldots)$

$\Rightarrow$ 2 tilstander ($g_s = 2$) pr flateenhet i $(+,+)$-kvadranten av (n_x, n_y)-planet

$\Rightarrow N_2(E) = 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \pi (n_x^2 + n_y^2) = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot E$

$= \#$ tilst. på $(0, E)$

$\Rightarrow g_2(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot L^2$ = DOS i 2D (uavh. av E)

3D: $E = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \qquad (n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots)$

$\Rightarrow$ 2 tilst. pr volumenhet i $(+,+,+)$-oktanten av (n_x, n_y, n_z)-rommet

$\Rightarrow N_3(E) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2} = \frac{\pi}{3} \cdot \left(\frac{2mL^2 E}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2}$

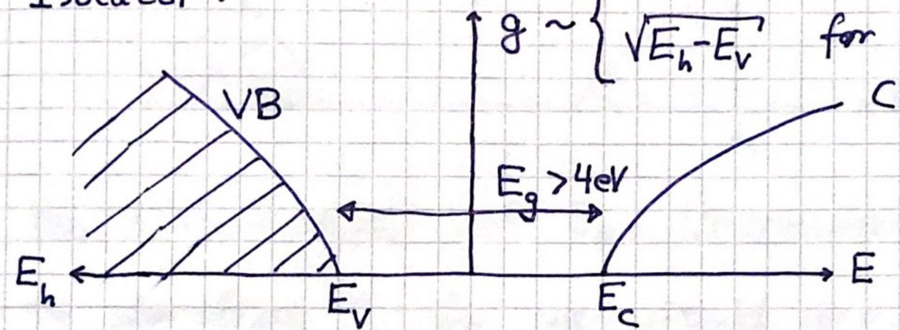
$\Rightarrow g_3(E) = \frac{\sqrt{2}\, m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot L^3 \cdot E^{1/2}$ = DOS i 3D

Energibånd, tilstandstetthet og materialtyper

Elektrisk ledningsevne $\sigma > 0$ (Ohms lov: $\vec{J} = \sigma \vec{\mathcal{E}}$) dersom det er ledige tillatte tilstander like over okkuperte tilstander. Da kan en påtrykt spenning U (og el. felt $\vec{\mathcal{E}} = -\nabla U$) akselerere de mest energirike elektronene (og evt. hullene) og sette i gang en elektrisk strøm I i materialet – dvs $\sigma > 0$.

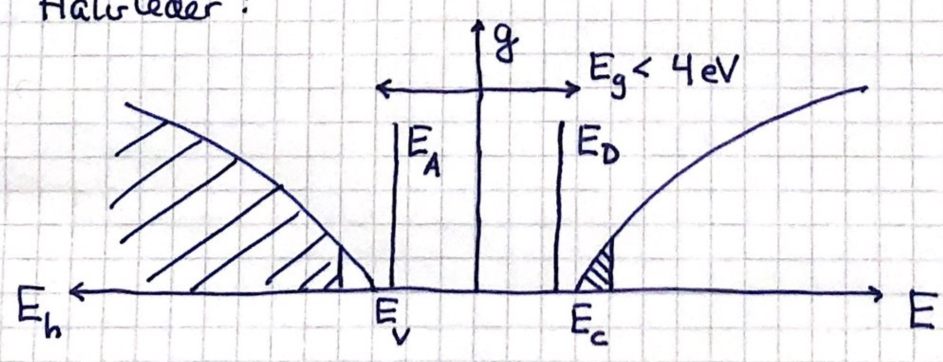
Isolator:

$$g \sim \begin{cases} \sqrt{E-E_c} & \text{for elektroner i CB} \\ \sqrt{E_h - E_v} & \text{for hull i VB} \end{cases}$$

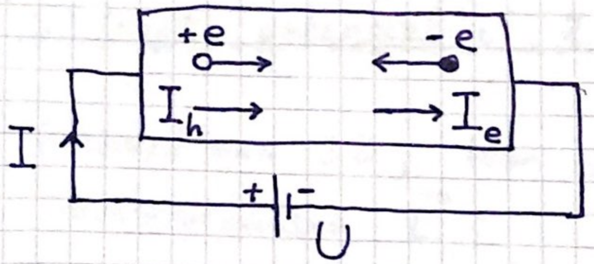


Ingen ledige tilstander for elektroner like over E_v (eller for hull med $E_h \gtrsim E_c$) $\Rightarrow I = 0$ selv om $U > 0$

Halvleder:

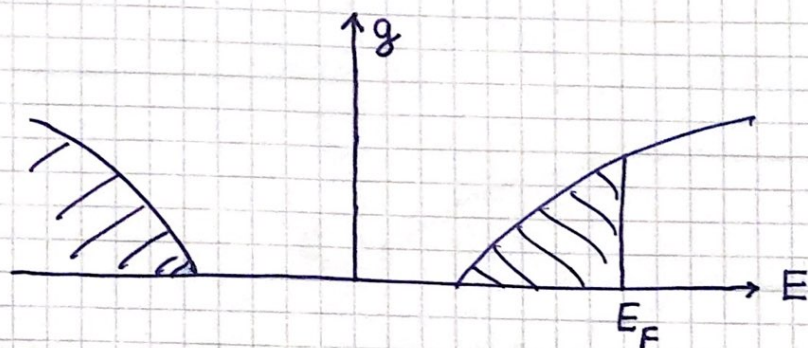


Elektroner og/eller hull eksiteres termisk, fra hhv E_D til E_c og fra E_A til E_v. Materialet blir "svakt metallisk", med ledige tilstander umiddelbart over okkuperte tilstander, $\Rightarrow I > 0$ når $U > 0$



$$I = I_e + I_h$$

Metall :

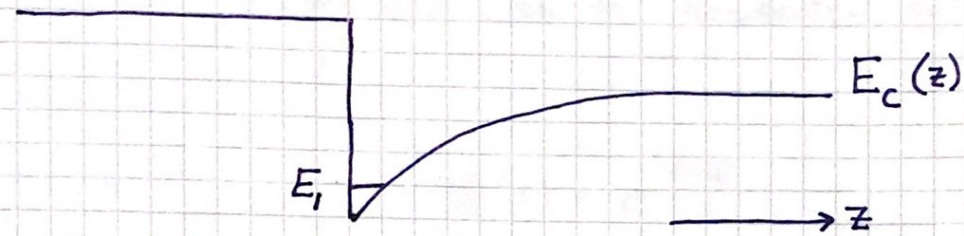


Høy tilstandstetthet ved E_F (Fermienergien)

$\Rightarrow$ stor strøm I for liten påtrykt spenning U

Isotropt potensial i 2D

- Enklere enn 3D; kun en komponent av dreieimpulsen $\vec{L}$
- Kan realiseres i ulike materialer, f.eks. nær grenseflaten mellom to halvledere:



Elektroner i nivået med energi E_1 "ser" et todimensjonalt potensial $V(x,y)$.
Vi har laget en todimensjonal elektrongass (2DEG).
(Se f.eks. TFY4340 Nanofysikk)

Dersom $V(\vec{r})$ er isotropt, dvs $V(r)$, er gjerne polarkoordinater mest hensiktsmessig.

TUSL: $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(r,\varphi) + V(r)\Psi(r,\varphi) = E\Psi(r,\varphi)$

μ = massen ; bruker m for å angi et kvantetall

$r = \sqrt{x^2+y^2}$, $\tan\varphi = y/x$, $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$

$$\Rightarrow \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \dots = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

(med kjerneregel; se notater og video fra tidligere årganger)

Produktløsning, $\Psi(r,\varphi) = R(r)\,\Phi(\varphi)$, og multiplikasjon av TUSL med $-2\mu r^2/\hbar^2\Psi$ gir

$$\frac{r^2 R''}{R} + \frac{rR'}{R} - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(V-E) = -\frac{\Phi''}{\Phi} = \text{samme konstant},$$

som vi "f.eks." kan kalle m^2. (Her er $R'' = \frac{d^2R}{dr^2}$, $\Phi'' = \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}$)

Med kjent $V(r)$ kan $R(r)$ og tilhørende energier E bestemmes (for gitt verdi av konstanten m).

Vinkeldelen:

$$\Phi'' + m^2\Phi = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$$

Entydige løsninger, $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$, hvis

$$e^{im\varphi}\, e^{im\cdot 2\pi} = e^{im\varphi}$$

$$\Rightarrow \quad e^{im\cdot 2\pi} = 1 \quad \Rightarrow \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Dette er egenfunksjoner til $\hat{L}_z$ (og for 2D bevegelse i xy-planet er $\vec{L} = L_z\hat{z}$):

$$L_z\hat{z} = (\vec{r}\times\vec{p})_z = (x\hat{x} + y\hat{y}) \times (p_x\hat{x} + p_y\hat{y})$$

$$= (xp_y - yp_x)\,\hat{z}$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$= \underset{y = r\sin\varphi}{\overset{x = r\cos\varphi}{\ldots}} \ldots = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z\Phi_m = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{im\varphi} = m\hbar\,\Phi_m$$

$\Rightarrow$ I 2D isotrop $V(r)$ er L_z kvantisert, med egenverdier $m\hbar$; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$