

QM i 2D og 3D [PCH 5; DFG 4; IØ 5]

75

Harmonisk oscillator [PCH 5.1; DFG Problem 4.39; IØ 5.1]

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

$$\hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 \quad ; \quad \text{tilsvarende for } \hat{H}_y \text{ og } \hat{H}_z$$

TUSL, $\hat{H}\Psi = E\Psi$, har produktløsninger:

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

$$E = \frac{\hat{H}\Psi}{\Psi} = \frac{\hat{H}_x \phi_{n_x}}{\phi_{n_x}} + \frac{\hat{H}_y \phi_{n_y}}{\phi_{n_y}} + \frac{\hat{H}_z \phi_{n_z}}{\phi_{n_z}}$$

Her må da hvert ledd på høyre side være konstant:

$$\frac{\hat{H}_x \phi_{n_x}}{\phi_{n_x}} = E_x \Rightarrow \hat{H}_x \phi_{n_x} = E_x \phi_{n_x} \Rightarrow E_x = (n_x + \frac{1}{2}) \hbar \omega_x$$

og tilsvarende for y og z . Total energi:

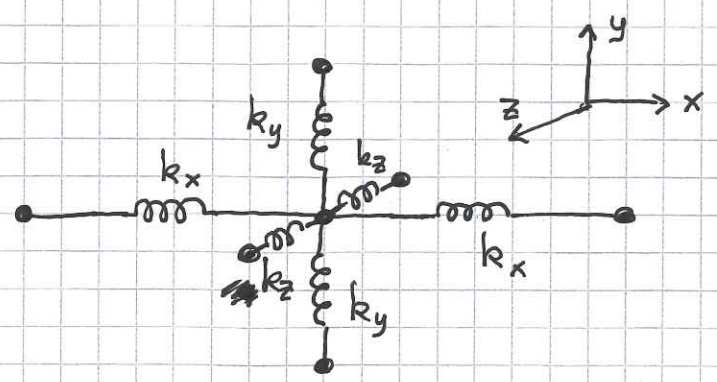
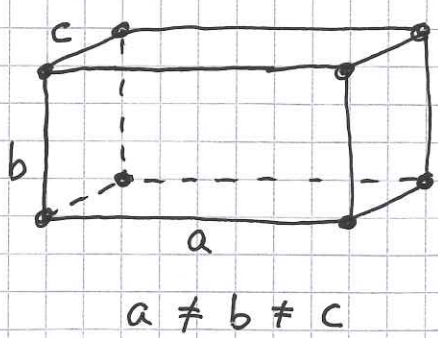
$$E = E_x + E_y + E_z$$

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

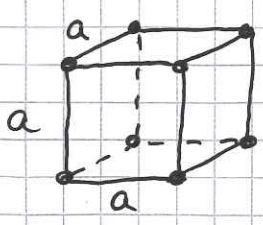
$$n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

Bølgefunksjoner som på side 59.

Eks: Atomenes vibrationsbevægelse i en primitiv ortorombisk krystall



Med $a=b=c$ er krystallen primitiv kubisk, med $k_x = k_y = k_z = k$ og $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$:



Har da en 3D isotrop oscillator (Eks: Polonium, Po. Se Phys Rev Lett 99, 016402 (2007))

Isotrop harmonisk oscillator:

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

dvs kulesymmetrisk (retningsuafhængig) potensial.

Tilhørende kraft er radieft rettet:

$$\vec{F} = -\nabla V = -\hat{r} \frac{\partial V}{\partial r} = -m\omega^2 r \hat{r} \quad (\text{en sentralkraft})$$

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

Degenerasjon:

1D: kun en egenfunksjon $\Psi_n(x)$ pr egenverdi E_n

2D og 3D med symmetrisk potensial: to eller flere tilstander for en og samme energi

Degenerasjonsgrad: $g_N =$ antall tilstander med energi E_N

For 3D isotrop oscillator:

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega ; \quad \Psi_{000} = \phi_0(x)\phi_0(y)\phi_0(z) \sim e^{-m\omega r^2/2\hbar}$$

$$g_0 = 1$$

$$E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega ; \quad \Psi_{100} = \phi_1(x)\phi_0(y)\phi_0(z) \sim x e^{-m\omega r^2/2\hbar}$$

$$\Psi_{010} \sim y \exp(-m\omega r^2/2\hbar)$$

$$\Psi_{001} \sim z \exp(-m\omega r^2/2\hbar)$$

$$g_1 = 3$$

$$E_N = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega ; \quad \Psi_{N00}, \Psi_{N-110}, \Psi_{N-101}, \dots$$

For gitt $n_x = 0, 1, \dots, N$ kan vi ha $n_y = 0, \dots, N - n_x$, som er $N - n_x + 1$ mulige n_y for gitt n_x ; for gitt n_x og n_y er også $n_z = N - n_x - n_y$ gitt (kun 1 mulig n_z).

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

$$= N+1 + N + N-1 + \dots + 3 + 2 + 1$$

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

Isotrop $V(r) \Rightarrow$ ingen foretrukne retninger

Generell normert energieigenstand for 1. eksiterte nivå:

$$\Psi(\vec{r}) = c_x \Psi_{100} + c_y \Psi_{010} + c_z \Psi_{001}$$

$$\text{med } |c_x|^2 + |c_y|^2 + |c_z|^2 = 1$$

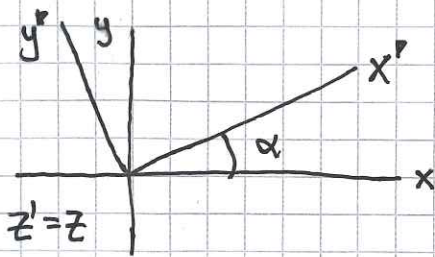
Skifte av basis:

Siden $\Psi_{100} \sim x \cdot \exp(-m\omega r^2/2\hbar)$ osv, må basisfunksjonene

Ψ_{100} , Ψ_{010} og Ψ_{001} for 1. eksiterte nivå transformere som

koordinatene x, y og z ved f.eks. en rotasjon av

koordinatsystemet om z -aksen:



Fra figuren:

$$z' = z$$

$$x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha$$

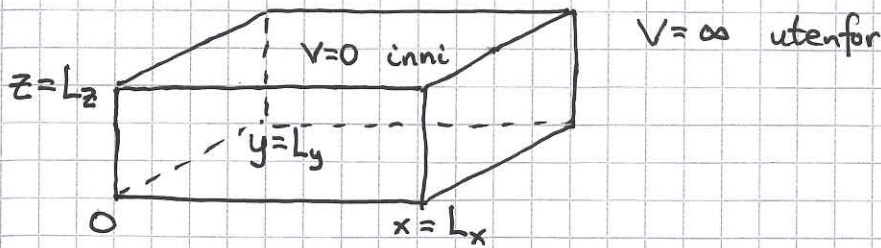
$$y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \begin{pmatrix} \Psi_{100}' \\ \Psi_{010}' \\ \Psi_{001}' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \Psi_{100} \\ \Psi_{010} \\ \Psi_{001} \end{pmatrix}$$

med

$$A = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Partikkel i boks. Tilstandstetthet [PCH 5.2]



TUSL separerer og gir produktløsninger:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \frac{2^{3/2}}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

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

Kubisk boks, $L_x = L_y = L_z = L$, fører til degenerasjon:

$$E_1 = E_{111} = 3\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2; \quad g_1 = 1 \quad (\text{grunntilstanden})$$

$$E_2 = E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2; \quad g_2 = 3 \quad \text{osv.}$$

Anvendelse: Enkleste modell for elektroner i faste stoffer.

I en krystall er potensialet periodisk, [PCH 10]

$$V(\vec{r} + \vec{R}_j) = V(\vec{r}),$$

med gittervektorer \vec{R}_j som angir krystallens regulære sammensetning av atomer. Da må også sanns. tettheten

være periodisk, $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{R}_j)$, dvs

$$|\psi(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r} + \vec{R}_j)|^2$$

Må da ha bølgefunksjoner på formen

$$\psi(\vec{r}) = e^{i \alpha(\vec{r})} \cdot u(\vec{r})$$

med reell $\alpha(\vec{r})$ og $u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R}_j)$.

Her må $\alpha(\vec{r})$ dessuten være en dimensjonsløs skalar, og (det kan vises at) α må være en lineær funksjon av \vec{r} , dvs på formen

$$\alpha(\vec{r}) = \vec{k} \cdot \vec{r}$$

Dvs, bølgefunksjoner på formen

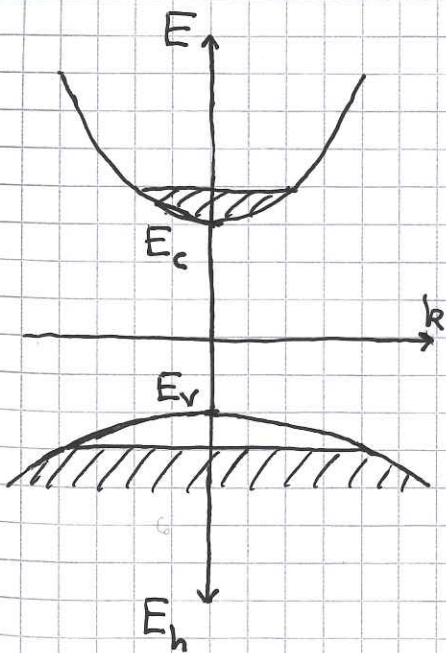
$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad ; \quad u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_j)$$

Dette er Blochs teorem, et sentralt resultat i faste stoffers fysikk.

Har altså "nesten" plane bølger og "en slags" frie elektroner, med impuls $\hbar\vec{k}$, men med en effektiv masse $m_e^* \neq m_e$, fordi potensialet er periodisk, og ikke konstant.

Løsning av TUSL for gitt \vec{k} gir energieigenverdier E_1, E_2, \dots , som blir til energibånd $E_1(\vec{k}), E_2(\vec{k}), \dots$ når \vec{k} varieres.

Eks: Halvlederen GaAs nær $k=0$ ved 300 K



Elektroner eksitert fra valens- til ledningsbåndet:

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

$$m_e^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \approx 0.067 m_e$$

Hull, dvs ledige tilstander øverst i valensbåndet, oppfører seg som partikler med positiv ladning $+e$:

$$E_h(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad (\text{økende nedover})$$

$$m_h^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E_h}{dk^2} \right)^{-1} \approx 0.45 m_e$$

[PCH 10.2 : Kronig-Penney-modellen; $V(x) = -\frac{\hbar^2 \alpha}{ma} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na)$; eksakt løst; ikke pensum!]

Tilstandstetthet [PCH 5.2.2]

(Density of states; DOS)

Makroskopiske krystaller : $L \gg \lambda$; kontinuerlig energispektrumTetthet av tilstander : $g(E) = dN/dE$ $dN =$ antall tilstander på intervallet $(E, E+dE)$ 1D : Boks med lengde L ("Quantum wire")

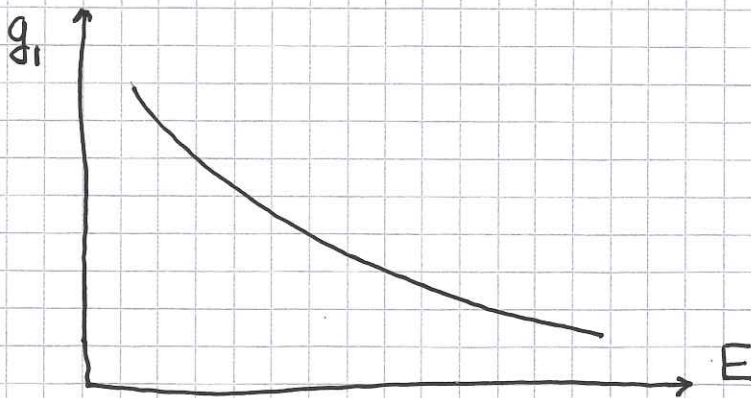
$$E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \Rightarrow N_1(E) = \sqrt{2mL^2 E / \pi^2 \hbar^2} = \text{antall orbitaler med energi mindre enn } E$$

Tetthet av orbitaler :

$$\frac{dN_1}{dE} = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/2} \cdot L \cdot E^{-1/2}$$

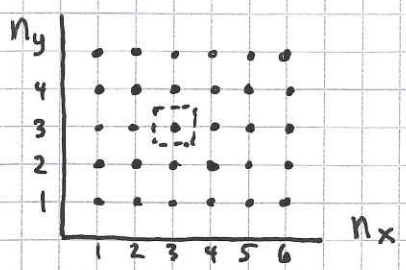
La oss anta at partiklene her er elektroner, slik at det er 2 spinmuligheter pr orbital. Total tilstandstetthet er da

$$g_1(E) = 2 \cdot dN_1/dE = \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/2} L E^{-1/2}$$

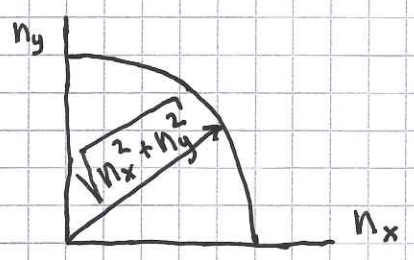


2D : Plan med areal $A = L^2$
(Todimensjonal elektrongass ; 2DEG)

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



1 orbital pr areal 1 i positiv kvadrant i (n_x, n_y) -planet
(Jf. modetetthet i utledning av Plancks strålingslov)



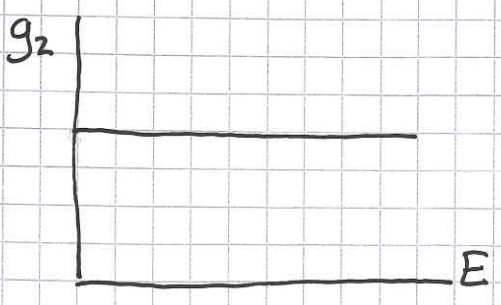
Arealet $\frac{1}{4} \pi (n_x^2 + n_y^2)$ tilsvarer antall orbitaler $N_2(E)$ med energi mindre enn E

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

$$\Rightarrow \frac{dN_2}{dE} = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \cdot A$$

Inkl. spinndegenerasjon $g_s = 2$:

$$g_2(E) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^2} \cdot A$$

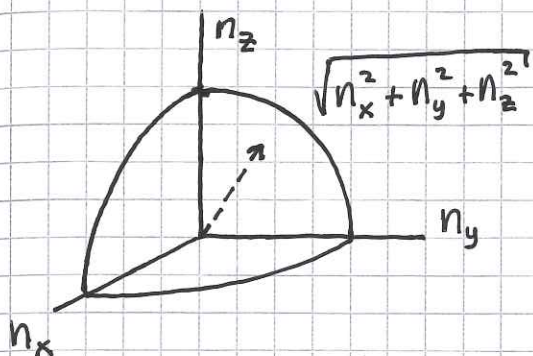


DOS er uavhengig av E i 2D

3D : Boks med volum $V = L^3$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \Rightarrow 1 \text{ orbital pr volum } 1$$

i positiv oktant i (n_x, n_y, n_z) -rommet



$$\text{Volumet } \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2}$$

tilsvareer antall orbitaler

$N_3(E)$ med energi mindre enn E

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

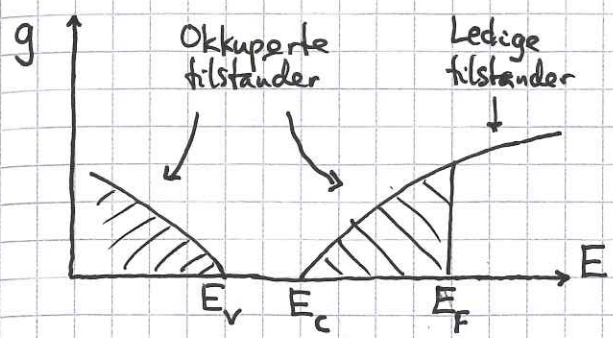
$$\Rightarrow \frac{dN_3}{dE} = \frac{\pi}{4} \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot L^3 \cdot E^{1/2}$$

som inkl. spindeg. $g_s = 2$ gir

$$g_3(E) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot V \cdot E^{1/2}$$

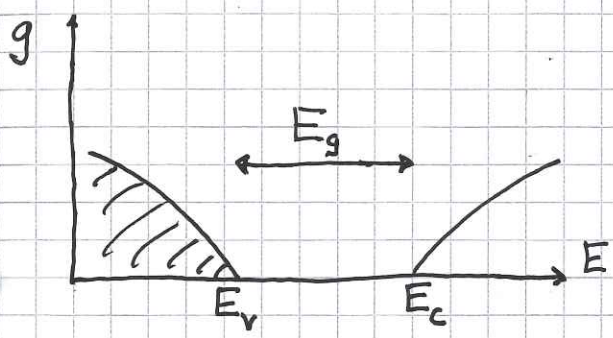


Metaller :



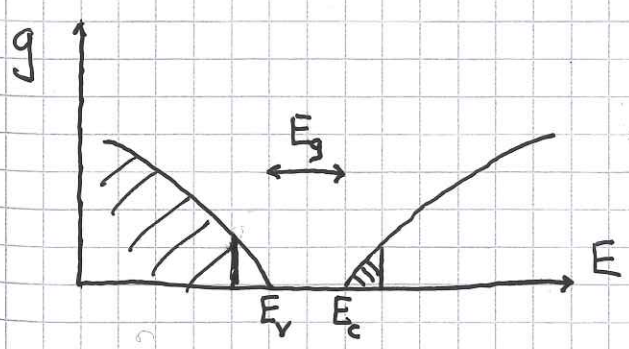
Mange elektroner med energi E nær den maksimale energien $E_F =$ Fermienergien.
 En påtrykt spenning U , og dermed et elektrisk felt \vec{E} , kan akselerere disse elektronene, dvs øke deres energi, fordi det er ledige tilstander like over E_F .
 \Rightarrow Stor strøm I ; høy ledningsevne σ

Isolator :



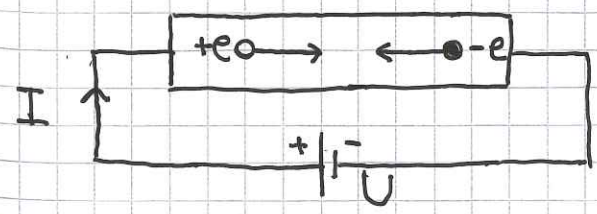
Ingen ledige tilstander, for noen elektroner, med litt høyere energi.
 Stort båndgap, $E_g = E_C - E_V$, sammenlignet med termisk energi $k_B T$.
 Påtrykt spenning U og el. felt \vec{E} gir ingen strøm, $I = 0$.

Halvleder :



Ved $T=0$: Isolator
 Ved $T=300K$: Endel elektroner er termisk eksitert fra toppen av valensbåndet ($E \approx E_V$) til bunnen av ledningsbåndet ($E \approx E_C$) dersom båndgapet E_g ikke er større enn ca 3-4 eV.

Materialet blir "svakt metallisk" : Påtrykt spenning U og el. felt \vec{E} vil akselerere elektroner i ledningsbåndet og hull i valensbåndet.



Total strøm : $I = I_e + I_h$