

# Kvantemekanikk i to og tre dimensjoner

[PCH 5; DFG 4; IØ5]

## Harmonisk oscillator

[PCH 5.1; DFG Problem 4.39; IØ5.1]

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

$$= \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$$

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

TUSL har da produktløsninger

$$\Psi(x, y, z) = \phi(x) \phi(y) \phi(z)$$

med samme type funksjoner av x, y og z.

Divisjon av TUSL med  $\Psi$  gir

$$E = \frac{\hat{H}\Psi}{\Psi} = \frac{\hat{H}_x \phi(x)}{\phi(x)} + \frac{\hat{H}_y \phi(y)}{\phi(y)} + \frac{\hat{H}_z \phi(z)}{\phi(z)}$$

Her er energien E en konstant, uavh. av x, y og z.

Da må hvert ledd på høyre side være en konstant:

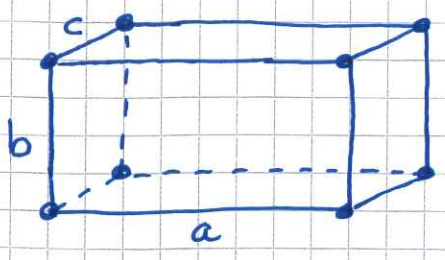
$$\hat{H}_x \phi(x) = E_x \phi(x) \quad \text{og tilsvarende for } y \text{ og } z$$

Dvs, vi har 3 ligninger for harm. osc. i 1 dimensjon hver for seg, med kjente løsninger. Dermed:

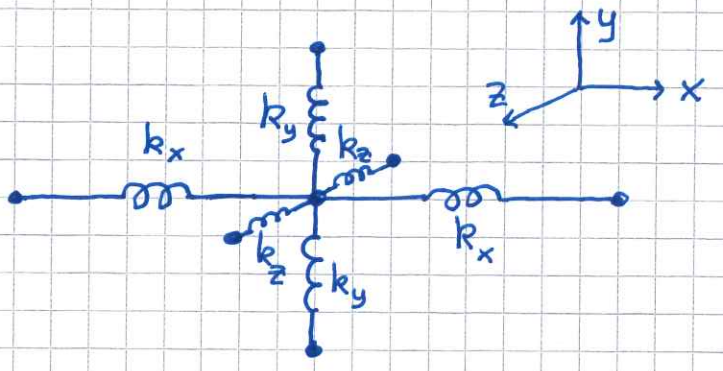
$$E = E_x + E_y + E_z = (n_x + \frac{1}{2}) \hbar \omega_x + (n_y + \frac{1}{2}) \hbar \omega_y + (n_z + \frac{1}{2}) \hbar \omega_z$$

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

# Eks: Vibrasjoner i primitiv ortorombisk krystall



$a \neq b \neq c$



## Isotrop harmonisk oscillator:

Anta  $a = b = c$  med kun en type atomer. Da er krystallen primitiv kubisk, og  $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ .

[Gjelder ikke mange materialer i virkeligheten, men f.eks. polonium (Po), se Phys Rev Lett 99, 016402 (2007)]

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

Dus, potensialet er kulesymmetrisk (ert: retningsuavhengig eller isotropt), og tilsvarer en radielt rettet kraft - en såkalt sentralkraft:

$$\vec{F} = -\nabla V = -\hat{r} \frac{\partial V}{\partial r} = -m \omega^2 r \hat{r}$$

TUSL gir nå energieigenverdiene

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

og bølgefunksjoner

$$\Psi_{n_x n_y n_z} = C_{n_x} C_{n_y} C_{n_z} \cdot e^{-m \omega r^2 / 2 \hbar} \cdot H_{n_x} \left( \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x \right) \cdot H_{n_y} \left( \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} y \right) \cdot H_{n_z} \left( \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} z \right) ; n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

## Degenerasjon:

I én dimensjon: Kun 1 egenfunksjon  $\Psi_n(x)$  for hver energieigenverdi  $E_n$

I to og tre dimensjoner, og et potensial  $V$  med en viss symmetri, kan det være flere egenfunksjoner som tilsvarer en gitt energi. Da er energinivået degenerert, med degenerasjonsgrad  $g_N =$  antall tilstander med energi  $E_N$ .

For en isotrop harmonisk oscillator i 3D:

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega : \Psi_{000} \Rightarrow g_0 = 1 \quad (\text{ikke degenerert})$$

$$E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega : \Psi_{100}, \Psi_{010}, \Psi_{001} \Rightarrow g_1 = 3$$

⋮

$E_N = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega$ : Kan ha  $n_x = 0, 1, \dots, N$ . For gitt  $n_x$  kan vi ha  $n_y = 0, \dots, N - n_x$ , dvs  $N - n_x + 1$  mulige  $n_y$  for gitt  $n_x$ . For gitt  $n_x$  og  $n_y$  er det bare en mulig verdi for  $n_z$ ;  $n_z = N - n_x - n_y$ . Dermed:

$$g_N = \sum_{n_x=0}^N (N - n_x + 1) = (N+1) + (N) + (N-1) + \dots + 3 + 2 + 1$$

$$= \underline{(N+2) \cdot \frac{N+1}{2}} \quad \left( = \sum_{j=1}^{N+1} j \quad \text{med } j = N - n_x + 1 \right)$$

Generell (normert) stasjonær energiegentilstand for f.eks.  $N=1$ :

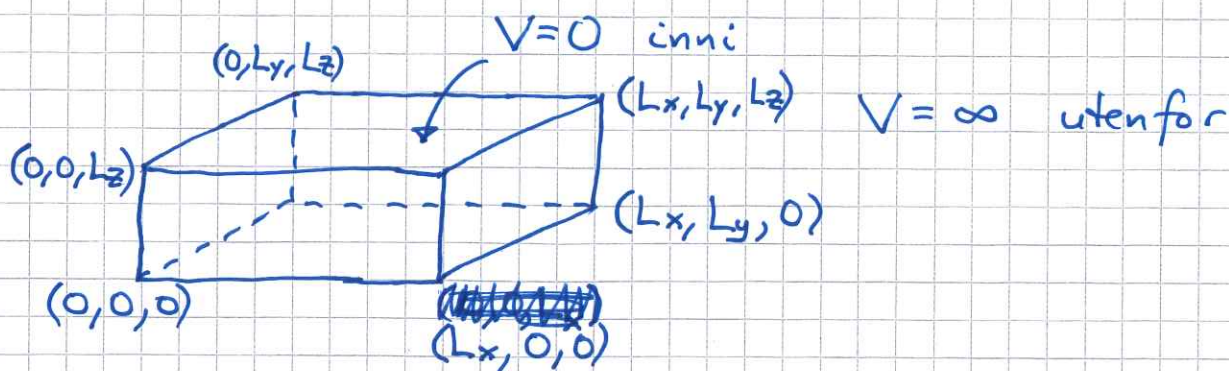
$$\Psi_1(\vec{r}, t) = (c_x \Psi_{100} + c_y \Psi_{010} + c_z \Psi_{001}) \cdot e^{-iE_1 t / \hbar}$$

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

# Partikkel i boks

[PCH 5.2]

(97)



TUSL separerer, og gir (med  $\Psi = 0$  på 6 grenseflater)

$$\Psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{2^3}{L_x L_y L_z}} \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

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

Kubisk boks,  $L_x = L_y = L_z = L$ , gir degenerasjon:

$$E_1 = E_{111} = 3\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \Rightarrow g_1 = 1 \quad (\text{Grunntilst. ikke degenerert})$$

$$E_2 = E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \Rightarrow g_2 = 3$$

$$\vdots$$
$$E_6 = E_{321} = \dots = 14\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \Rightarrow g_6 = 6$$

Relevans: Aller enkleste modell for <sup>valens-</sup>elektroner i et metall. Her har vi antatt at <sup>valens-</sup>elektronene er helt frie inne i metallet ( $V = \text{konstant} = 0$ ).

Pauliprinsippet tilsier 2 elektroner med energi  $E_1$ , i det vi husker spinndegenerasjon  $g_s = 2$ , dvs "plass til" 2 elektroner i "orbitalen"  $\Psi_{111}$ , 1 med spinn "opp" og 1 med spinn "ned". Videre: 6 elektroner med energi  $E_2$ , ... osv..., 12 el. med energi  $E_6$ , ... osv. osv.,

# Tilstandstetthet [PCH 5.2.2]

(Density of states ; DOS)

En makroskopisk krystall har svært mange valens-  
elektroner og et praktisk talt kontinuert energispektrum.  
Det blir da hensiktsmessig å betrakte tettheten av tilstander

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

Med andre ord,

$$dN = g(E) \cdot dE = \text{antall tilstander p\aa energiforvallet} \\ (E, E+dE)$$

Og hvis vi summerer/integrerer  $dN$ , fra minste mulige energi  $E_{min} \approx 0$  til en gitt energi  $E$ , m\aa resultatet bli antall tilstander med energi mindre enn  $E$ ,

$$N(E) = \int dN = \int_0^E g(E) dE$$

Vi vet at  $g_1(E)$  avtar med \o{k}kende  $E$  i 1D, siden  $E_n \sim n^2$ , uten degenerasjon.

Vi skal vise at

$$g_1(E) \sim E^{-1/2} \quad \text{i 1D}$$

$$g_2(E) \text{ uavh. av } E \quad \text{i 2D}$$

$$g_3(E) \sim E^{1/2} \quad \text{i 3D}$$

1D : Boks/Tråd med lengde  $L$

$$E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$\Rightarrow$  1 orbital pr lengdeenhet langs  $n$ -aksen

$\Rightarrow N_1$  orbitaler med energi mindre enn  $E_{N_1}$

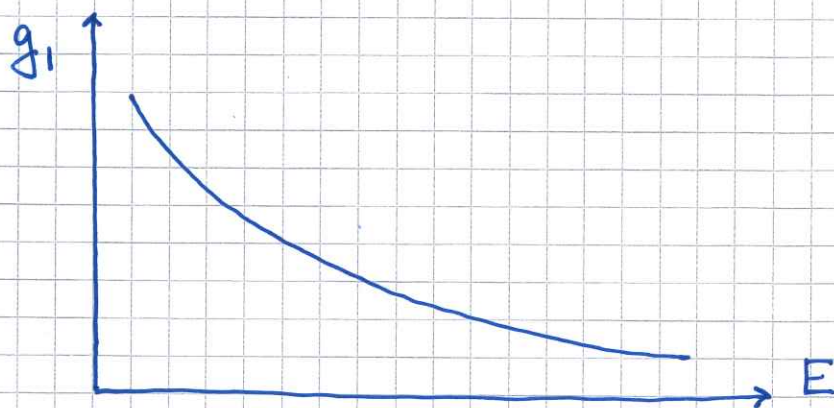
$$\Rightarrow N_1(E) = \sqrt{2mL^2 E / \pi^2 \hbar^2}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow dN_1 / dE &= \sqrt{2mL^2 / \pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{2} E^{-1/2} \\ &= \text{tetthet av orbitaler} \end{aligned}$$

Dessuten 2 spinntilstander pr orbital for elektroner

$\Rightarrow$  Total tetthet av tilstander i 1D:

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



Som ventet er  $g_1(E)$  prop. med systemets størrelse  $L$ .

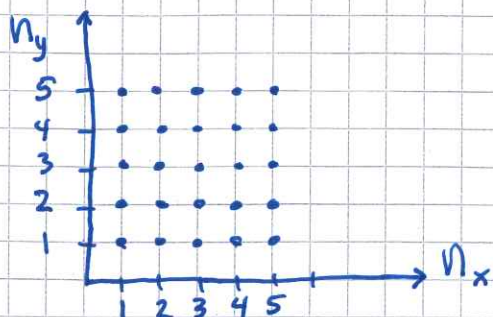
Antall tilstander pr energienhet og pr lengdeenhet:

$$\frac{\sqrt{2m/E}}{\pi \hbar}$$

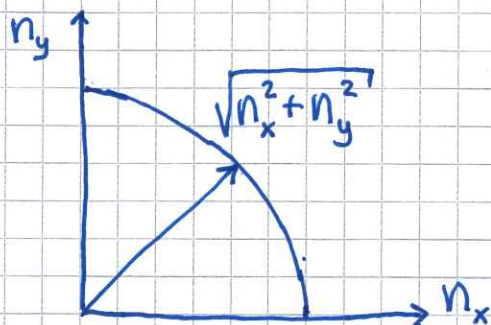
2D: Flate med areal  $A = L^2$ ; todimensjonal  
elektronngass (2DEG)

(100)

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2) \quad (n_x, n_y = 1, 2, 3, \dots)$$



1 orbital pr flateenhet i  
 $(n_x, n_y)$  - planet



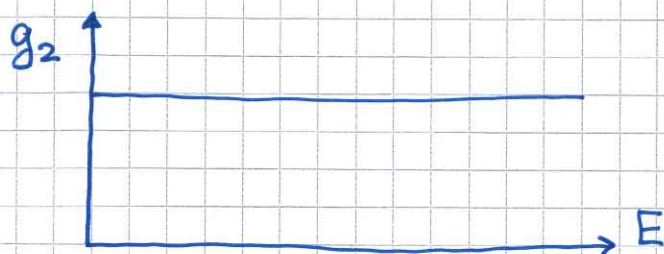
$N_2(E)$  = antall orbitaler med  
energi mindre enn  $E$  = arealet

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

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

$\Rightarrow$  Tetthet av tilstander i 2D:

$$g_2(E) = 2 \cdot \frac{dN_2}{dE} = \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot A \quad ; \text{ dus konstant}$$



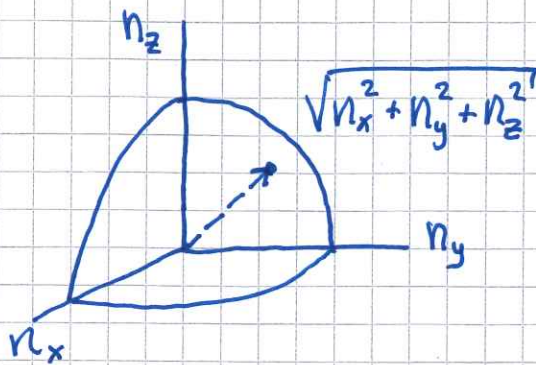
Antall tilstander pr energi- og flateenhet:

$$\frac{m}{\pi \hbar^2}$$

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

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

⇒ 1 orbital pr volumenhet i  $(n_x, n_y, n_z)$ -rommet, dvs i den "positive oktanten" der  $n_x, n_y, n_z > 0$



$N_3(E) =$  antall orbitaler med energi mindre enn  $E =$  volumet

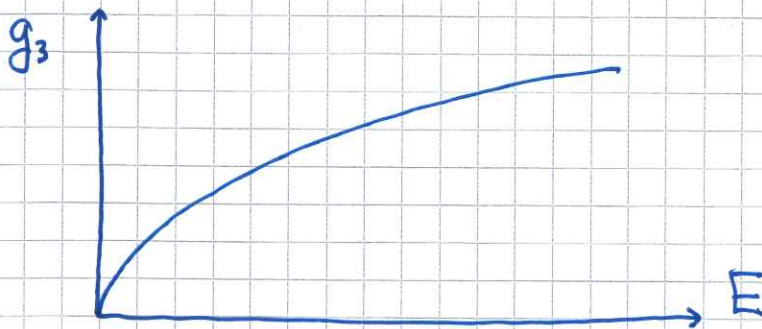
$$\frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2} =$$

$$\frac{\pi}{6} \cdot \left( \frac{2mL^2 E}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \frac{dN_3}{dE} = \frac{\pi}{6} \cdot \left( \frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot V \cdot \frac{3}{2} E^{1/2}$$

⇒ Tetthet av tilstander i 3D:

$$g_3(E) = 2 \cdot \frac{dN_3}{dE} = \frac{\pi}{2} \left( \frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot V \cdot E^{1/2}$$



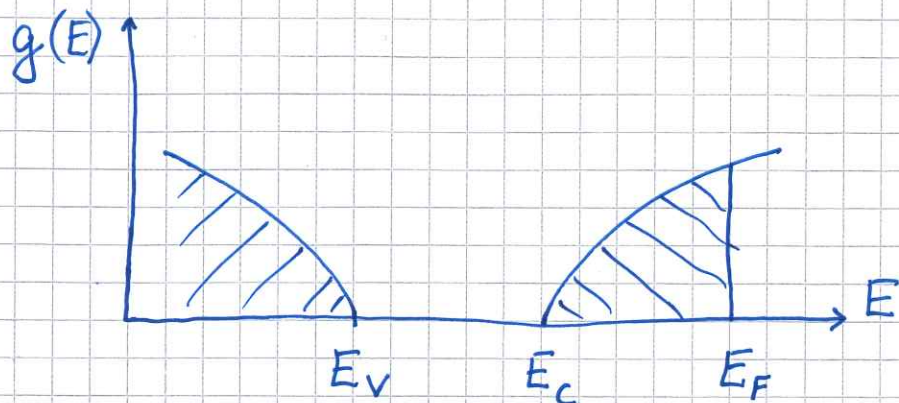
Antall tilstander pr energi- og volumenhet:

$$\frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{E}$$



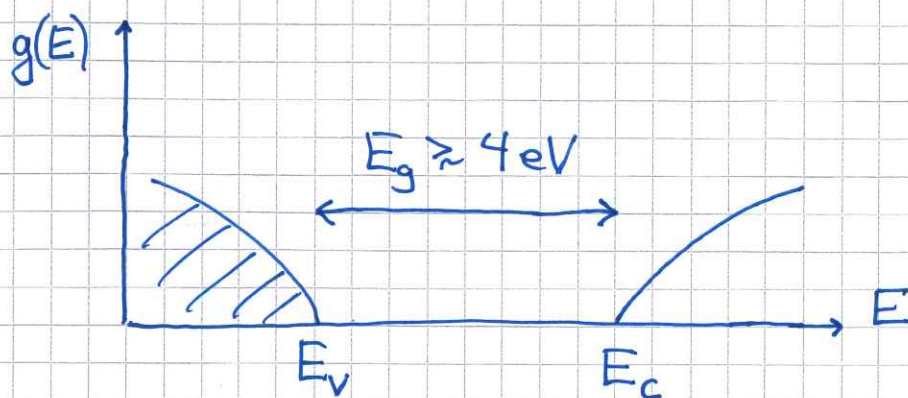
Vi kan nå bruke  $g(E)$  i valensbåndet og ledningsbåndet til å klassifisere materialtyper.

Metaller :



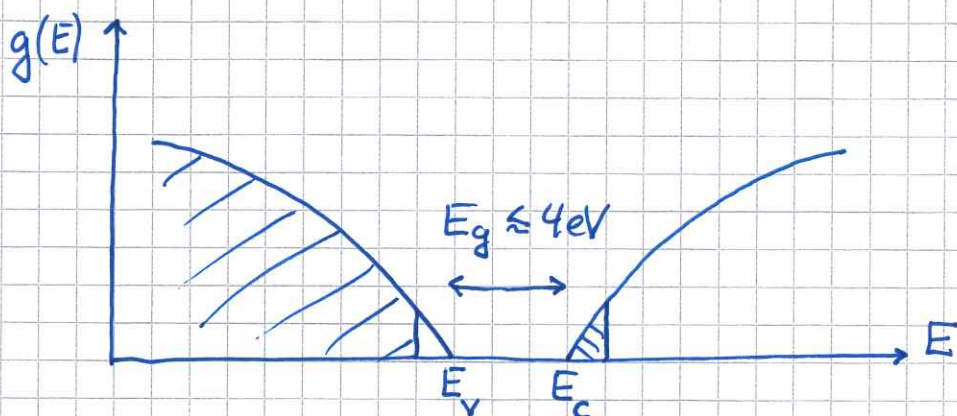
Høy tilstandstetthet og dermed mange elektroner med energi nær den maksimale  $E_F$  (= Fermienergien).  
 Påtrykt spenning  $U$ , dvs et elektrisk felt  $\vec{E} = -\nabla U$ , kan akselerere og øke energien til elektronene med  $E \approx E_F$  fordi det er ledige tilstander like over  $E_F$ . Dvs,  $E_g = 0$ .  
 Gir stor strøm  $I$ , dvs høy elektrisk ledningsevne.

Isolator :



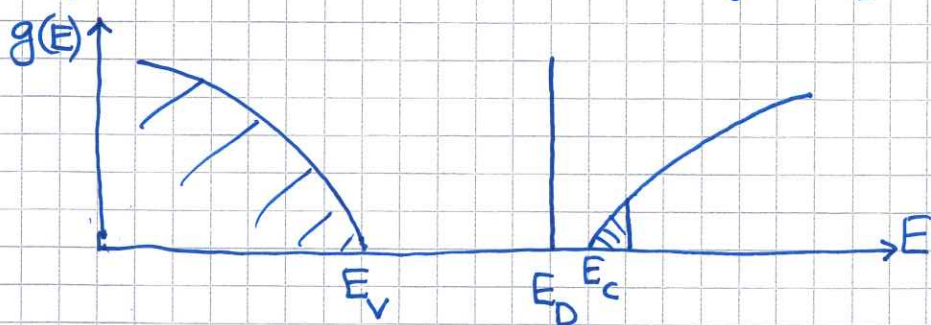
Isolatoren har ingen ledige tilstander med energi like over okkuperte tilstander. Stort båndgap  $E_g \approx 4\text{eV}$ . Påtrykt spenning  $U$  og elektrisk felt  $\vec{E}$  gir ingen elektriske strøm.

Halvleder :

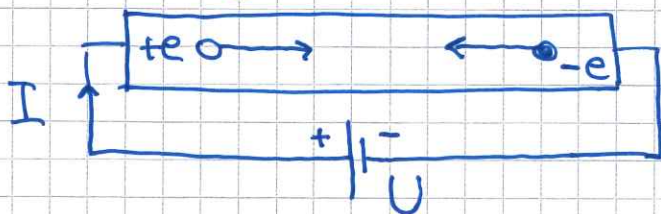


Ved  $T=0$  : isolator.

Ved  $T=300\text{K}$  : Noen elektroner eksitert termisk, fra tilstander med  $E \approx E_V$  til tilstander med  $E \approx E_C$ , evt fra donornivåer med energi  $E_D \approx E_C$  :



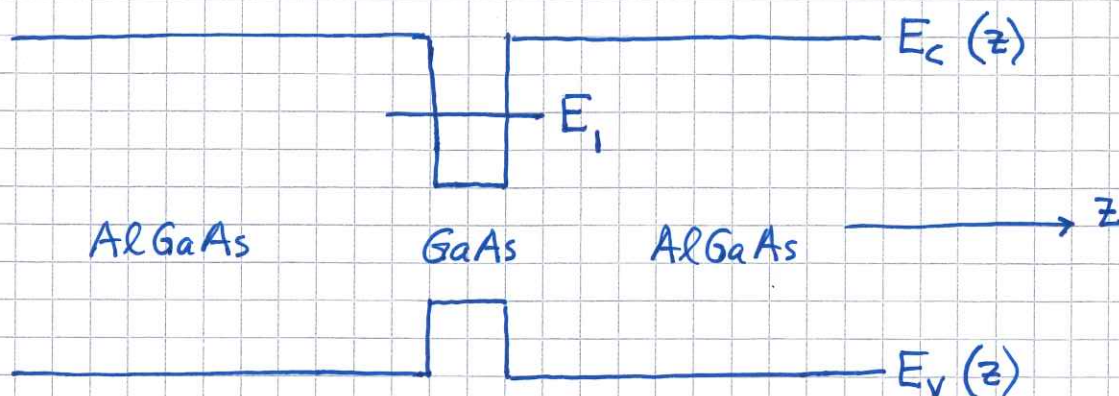
Materialet blir "svakt metallisk". Påtrykt spenning  $U$  og el. felt  $\vec{E}$  gir strøm av elektroner i ledningsbåndet og strøm av hull i valensbåndet:



$$I = I_e + I_h$$

## Isotrop potensial i 2D [PCH 5.3]

Kan realisere et 2D system for elektroner med f.eks. en smal potensialbrønn, med bare en bundet tilstand:



Dersom  $V(x,y) = V(r)$ , har vi elektroner som i nivået  $E_1$  opplever et isotropt potensial mhp bevegelsen i  $xy$ -planet. Vi har en 2D elektrongass (2DEG)!

TUSL i polarkoordinater:

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

med

$\mu$  = partikkelens masse (trenger  $m$  til et kvantetall)

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \varphi = \arctan(y/x)$$

$$x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi$$

Vi trenger  $\nabla^2$  i polarkoordinater:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Trolig enklest å regne om  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$  til polarkoordinater med kjernerregel for derivasjon (som i PGH): (105)

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} ; \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} = \frac{x}{r} = \cos \varphi ; \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin \varphi$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-y/x^2}{1+y^2/x^2} = -\frac{y}{r^2} = -\frac{\sin \varphi}{r} ;$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1/x}{1+y^2/x^2} = \frac{x}{r^2} = \frac{\cos \varphi}{r}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \nabla^2 &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} \\ &= \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &\quad + \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned}$$

Her må vi passe på å bruke produktregel for derivasjon, eventuelt at operatorene i en parentes ikke kommuterer med hverandre:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \text{diverse "krysslødd"}$$

som kansellerer, f.eks:

$$-\frac{\sin \varphi}{r} \cdot \left( -\frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \frac{\cos \varphi}{r} \cdot \left( -\frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = 0$$

når  $\frac{\partial}{\partial \varphi}$  i venstre parentes virker på hhv  $-\sin \varphi$  og  $\cos \varphi$  i høyre parentes.

TUSL har produktløsninger

$$\Psi(r, \varphi) = R(r) \cdot \Phi(\varphi)$$

Vi ganger TUSL med  $-2\mu r^2/\hbar^2 \Psi$  og får

$$\frac{r^2 d^2 R/dr^2}{R} + \frac{r dR/dr}{R} + \frac{d^2 \Phi/d\varphi^2}{\Phi} - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] = 0$$

som separerer i to ligninger,

$$r^2 R'' + r R' - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = m^2 R$$

og 
$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \Phi$$

med konstant  $m^2$ .

Hvis nå  $V(r)$  er kjent, kan radialdelen  $R(r)$  og energieigenverdiene  $E$  bestemmes.

Men vi fokuserer på vinkeldelen, som har løsning

$$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$$

og entydige løsninger, dvs

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$$

dersom

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi + 2\pi)} = e^{im\varphi} e^{im \cdot 2\pi}$$

dvs

$$e^{im \cdot 2\pi} = 1$$

dvs

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Vi skal nå vise at  $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$  er egenfunksjoner til operatoren  $\hat{L}_z$ , som for beregelse i xy-planet er operator for hele dreieimpulsen  $\vec{L}$ , siden  $L_x = L_y = 0$ :

$$\begin{aligned}\vec{L} &= \vec{r} \times \vec{p} = (x\hat{x} + y\hat{y}) \times (p_x\hat{x} + p_y\hat{y}) \\ &= (x p_y - y p_x) \hat{z} = L_z \hat{z}\end{aligned}$$

Dermed:

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

som i polarkoordinater blir (se s. 104 og 105)

$$\begin{aligned}\hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \left[ r \cos\varphi \left( \sin\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. - r \sin\varphi \left( \cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}\end{aligned}$$

Et meget enkelt uttrykk! Men kanskje ikke så overraskende: Lineær impuls i z-retning repr. i QM med operatoren  $\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ ; dreieimpuls om z-aksen representeres med  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ .

Fra før vet vi at egenfunksjoner til  $\hat{p}_z$  er plane bølger,

$$\hat{p}_z e^{ip_z z/\hbar} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} e^{ip_z z/\hbar} = p_z e^{ip_z z/\hbar}.$$

Da må  $\Phi_m(\varphi)$  være egenfunk. til  $\hat{L}_z$ , med egenverdi  $m\hbar$ :

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

Dvs:  $\hat{H}$  og  $\hat{L}_z$  har felles egenfunk.  $\Psi_m(r, \varphi) = R(r) \cdot e^{im\varphi}$