Institutt for fysikk, NTNU
FY1013 Elektrisitet og magnetisme II
Høst 2005

Øving 2

Veiledning: Mandag 5. og onsdag 7. september
Innleveringsfrist: Fredag 9. september

Oppgave 1

Som nevnt i forelesningene, er det bare for noen enkle systemer at Schrödingerligningen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + U(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}),$$

lar seg løse eksakt. I denne oppgaven skal vi se på det enkleste systemet vi kan tenke oss, nemlig et *fritt elektron* (med masse m) som beveger seg i en bestemt retning. At elektronet er fritt betyr rett og slett at det ikke påvirkes av noe som helst, dvs $U = 0$. Videre velger vi koordinater slik at bevegelsen er i positiv x-retning.

a) Skriv ned Schrödingerligningen for det frie elektronet, og vis ved direkte innsetting at *plane bølger*

$$\psi(x) = e^{ikx}$$

er løsning av ligningen. Hva blir elektronets energi $E(k)$ for en slik plan bølge med *bølgetall* k (og dermed bølgelengde $\lambda = 2\pi/k$)?

b) Når en bølgefunksjon $\psi(\boldsymbol{r})$ er løsning av Schrödingerligningen, sier vi gjerne at $\psi(\boldsymbol{r})$ er en *egenfunksjon* til "energioperatoren"

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{r})$$

med tilhørende *egenverdi* E. ($\hat{H}$ fordi energioperatoren ofte kalles Hamiltonoperatoren).
I oppgave *a* har du altså vist at for frie elektroner er plane bølger egenfunksjoner for energioperatoren, med egenverdier $E(k)$. Vis at plane bølger også er egenfunksjoner for impulsoperatoren $\hat{p}$, som i en dimensjon reduserer seg til $-i\hbar d/dx$. Bestem tilhørende egenverdi for impulsen. Kontroller at sammenhengen mellom E og p er den samme som du kjenner fra klassisk mekanikk.

c) Problemet "fri partikkel" (dvs $U = 0$ overalt) er kanskje litt i enkleste laget: Vi fikk for eksempel ikke kvantiserte energinivåer, ettersom bølgetallet k kunne ha hvilken som helst verdi. La oss derfor se på den enkleste modellen som gir diskrete energinivåer, nemlig *partikkel i boks*. Vi ser fortsatt kun på bevegelse i en dimensjon (så vi bør kanskje heller kalle det "partikkel på linje"), men antar nå at partikkelen ikke kan bevege seg utenfor intervallet mellom $x = 0$ og $x = L$. Med andre ord, $U(x) = 0$ når $0 < x < L$, og $U(x) = \infty$ ellers.

Bølgefunksjonen $\psi(x)$ er, på intervallet $0 < x < L$, på formen

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

med (inntil videre) ubestemte konstanter A og B.
Vis dette ved å sette $\psi(x)$ inn i Schrödingerligningen.
I kvantemekanikken forlanger vi at bølgefunksjonen skal være kontinuerlig overalt, slik at "sannsynlighetstettheten" $|\psi|^2$ er en kontinuerlig størrelse. Følgelig må vi her ha $\psi(x = 0) = \psi(x = L) = 0$. Bruk disse to betingelsene til å fastlegge verdien av konstanten B, samt å bestemme de mulige verdiene for bølgetallet k, og dermed energien E. [Konstanten A kan bestemmes ved å forlange at sannsynligheten er lik 1 for at partikkelen befinner seg på intervallet $(0, L)$, dvs $\int_0^L |\psi(x)|^2 \, dx = 1$. Det gjør du bare hvis du har veldig lyst!]
Bestem tallverdier for E i enheten eV når partikkelen er et elektron, og $L = 5$ Å. Skisser bølgefunksjonene for de tre tilstandene som har lavest energi.

Oppgitt: $m = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg, $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Js

Oppgave 2

I en perfekt krystall av halvledermaterialet silisium vil, ved romtemperatur, bare en liten andel av valenselektronene være *mobile* og bidra til den elektriske ledningsevnen. Tettheten av mobile elektroner vil være $n_i = 1.45 \cdot 10^{10}$ pr cm^3 (der indeks i står for *intrinsikk*, som er en vanlig betegnelse på en ren, perfekt halvleder). Til sammenligning er tettheten av Si-atomer ca $5 \cdot 10^{22}$ pr cm^3. Tettheten av mobile ladninger kan økes betraktelig ved såkalt *doping*, dvs ved å erstatte en andel av Si-atomene med andre atomer. En kan f.eks. benytte fosfor (P), og ved romtemperatur vil praktisk talt hvert eneste P-atom bidra med ett mobilt elektron og derved øke den elektriske ledningsevnen.

a) Den elektriske ledningsevnen (konduktiviteten) til ren silisium er $\sigma_i = 4 \cdot 10^{-4}$ Ω^{-1}m^{-1} (ved "normale" forhold, dvs romtemperatur og atmosfærisk trykk). Under forutsetning av at konduktiviteten σ er proporsjonal med tettheten av mobile ladningsbærere n, hvor mange fosforatomer må vi tilføre (pr cm^3) for å øke konduktiviteten med 7 størrelsesordener, dvs til en verdi $\sigma = 4 \cdot 10^3$ Ω^{-1}m^{-1}?

[Kommentar: I virkeligheten vil ikke σ øke lineært med tettheten av mobile ladningsbærere når disse tilføres ved hjelp av doping, som her. Grunnen er at jo flere fosforatomer vi introduserer i silisiumkrystallen, desto oftere vil de mobile elektronene kollidere på sin vei gjennom materialet, noe som igjen resulterer i en redusert driftshastighet og tilsvarende redusert strømstyrke. I denne oppgaven ser du bort fra denne effekten og antar lineær sammenheng mellom σ og n.]

b) Dopingen i punkt *a*) tilsvarer at en viss brøkdel av silisiumatomene er erstattet med fosfor. Hvor stor er denne brøkdelen?