

FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2015.
Løsningsforslag til Hjemmeeksamen.

Oppgave 1

I følge en artikkel i Teknisk Ukeblad satser Norge stort på kjernemagnetisk resonans, og et instrument som med protoner gir resonans for elektromagnetiske bølger med frekvens 800 MHz vil etter planen komme på plass ved Universitetet i Oslo i løpet av september 2015. Regn ut styrken på det tilhørende magnetfeltet.

Fotonene må ha energi $h\nu$ som tilsvarer forskjellen i potensiell energi til protoner med spinn opp og spinn ned i det ytre magnetfeltet, $2\mu_z B$, med $\mu_z = 2.7928\mu_N$ for protonet, der $\mu_N = e\hbar/2m_p = 5.0508 \cdot 10^{-27}$ J/T er et kjernemagneton. Innsetting av tallverdier gir

$$B = \frac{h\nu}{2\mu_z} = \frac{2\pi \cdot 1.0546 \cdot 10^{-34} \cdot 800 \cdot 10^6}{2 \cdot 2.7928 \cdot 5.0508 \cdot 10^{-27}} \simeq 18.8 \text{ T}.$$

Oppgave 2

Bruk væskedråpemodellen til å vise at den mest stabile atomkjernen med gitt nukleontall A har atomnummer Z lik en heltallsverdi i nærheten av

$$\frac{A}{2} \cdot \frac{1 + \frac{C_3}{4C_4 A^{1/3}}}{1 + \frac{C_3 A^{2/3}}{4C_4}}.$$

Her er C_3 og C_4 to av koeffisientene i væskedråpemodellen (YF side 1447). (Tips: Maksimer E_B med hensyn på Z , med fast verdi for A .) Vis at modellen gir uran som den mest stabile atomkjernen med 238 nukleoner. Hva er her begrunnelsen for å konkludere med uran framfor neptunium?

Vi deriverer uttrykket for $E_B(Z; A)$ (ligning (43.11) i YF) mhp Z , med A holdt konstant, og setter lik null:

$$\frac{\partial E_B}{\partial Z} = -C_3 A^{-1/3} (2Z - 1) - 2C_4 A^{-1} (A - 2Z)(-2) = 0.$$

Løsning mhp Z og litt "rydding" gir

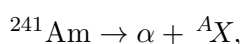
$$Z = \frac{A}{2} \cdot \frac{1 + \frac{C_3}{4C_4 A^{1/3}}}{1 + \frac{C_3 A^{2/3}}{4C_4}}.$$

Da Z må være heltallig, må vi lete etter et heltall i nærheten av det vi får når vi setter inn for A . Med $A = 238$ finner vi $Z \simeq 92.5$. Da ligger det an for at enten uran, med $Z = 92$, eller neptunium, med $Z = 93$, er den mest stabile kjernen med $A = 238$. Det 5. leddet i ligning (43.11) vil nå favorisere uran, siden optimal pardannelse av protoner og nøytroner er mulig med $Z = 92$ og $N = 238 - 92 = 146$, men ikke med $Z = 93$ og $N = 145$. Eksperimenter viser da også at ^{238}U er mer stabil enn ^{238}Np .

Oppgave 3

Americiumisotopen ^{241}Am gjennomgår α -decay med en halveringstid på 432.2 år. Stoffet anvendes i ioniske røykvarslere, der α -partiklene ioniserer molekyler i lufta mellom to elektroder og på den måten sørger for at det går en elektrisk strøm i kretsen i røykvarsleren. Ankomst av røykpartikler mellom elektrodene reduserer graden av ionisering, strømmen blir mindre, og alarmen går.

a) Hvilken datterkerne $^A X$ dannes i prosessen



og hva er halveringstiden til denne datterkjernen?

Americium har atomnummer $Z = 95$. Etter utsending av en α -partikkel sitter vi igjen med en datterkjerne med $Z = 95 - 2 = 93$ og $A = 241 - 4 = 237$, altså ^{237}Np . Ifølge wikipedia har denne isotopen en halveringstid på 2.14 millioner år.

b) Atommassen til ^{241}Am er ca 241 u. Med utgangspunkt i den oppgitte halveringstiden, vis at aktiviteten til ^{241}Am er omlag 127 milliarder Bq pr gram. (Dvs: Antall kjerner $|dN|$ som gjennomgår α -decay pr sekund i ett gram americium-241.)

Med atommasse 241u er antall Am-atomer i 1 g

$$N \simeq \frac{0.001}{241 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27}} = 2.5 \cdot 10^{21}.$$

Antall kjerner $|dN|$ som desintegrerer i løpet av tiden dt er

$$|dN| = N\lambda dt.$$

Her er $\lambda = (\ln 2)/T_{1/2} = (\ln 2)/(432.2 \cdot 365 \cdot 24 \cdot 3600) \simeq 5.1 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$, dvs sannsynligheten pr tidsenhet for at en gitt kerne spaltes. Innsetting for N samt $dt = 1 \text{ s}$ gir

$$|dN| = 2.5 \cdot 10^{21} \cdot 5.1 \cdot 10^{-11} \cdot 1 \simeq 127 \cdot 10^9.$$

Dette er antall Am-kjerner som spaltes pr sekund i 1 g americium, dvs antall Bq/g.

c) En røykvarsler trenger en aktivitet på 37 kBq for å fungere tilfredsstillende. Hvor mange gram americium-241-dioksyd ($^{241}\text{AmO}_2$) må du da kjøpe pr år hvis du skal drive en bedrift som produserer ti millioner røykvarslere pr år?

Massen til en enhet $^{241}\text{AmO}_2$ er $(241 + 2 \cdot 16)u = 273u$, så vi trenger en faktor $273/241 \simeq 1.133$ flere gram med americiumdioksyd enn om vi kunne brukt rent americium. Ti millioner røykvarslere krever i alt en aktivitet på 370 milliarder Bq. Med en aktivitet på ca 127 milliarder Bq pr gram trengs følgelig $370/127 \simeq 2.91$ g Am, dvs $2.91 \cdot 1.133 \simeq 3.3$ g $^{241}\text{AmO}_2$ pr år.

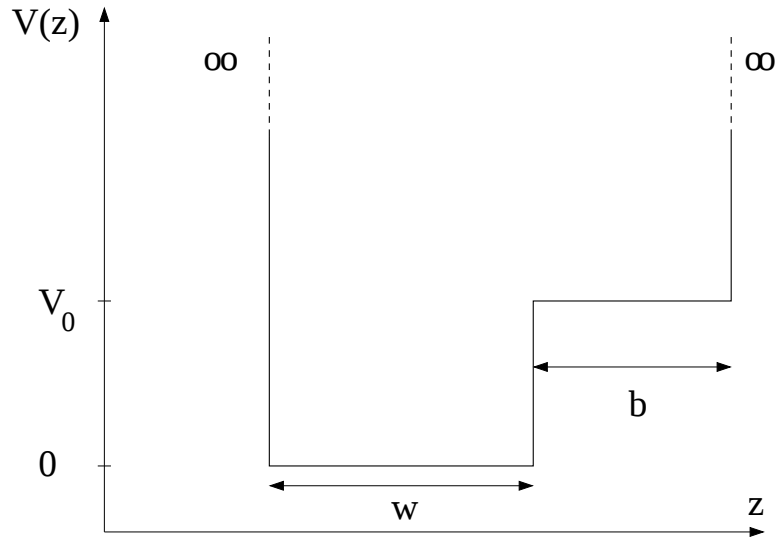
d) Prosessen beskrevet ovenfor er egentlig en kombinert α - og γ -decay, der fotoner med energi 60 keV sendes ut i tillegg til α -partiklene. Bestem bølgelengden til et slik foton.

Vi har $E = h\nu = 2\pi\hbar c/\lambda$, slik at

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{E} \simeq 0.2 \text{ Å}.$$

Oppgave 4

Et endimensjonalt potensial $V(z)$ er gitt i figuren nedenfor:



Dvs: $V(z) = \infty$ for $z < 0$ og $z > w + b$, $V(z) = 0$ for $0 < z < w$ og $V(z) = V_0$ for $w < z < w + b$. Vi skal her diskutere løsninger av den tidsuavhengige Schrödingerligningen (TUSL) i dette potensialet, for en partikkel med masse m .

a) Vi betrakter først en tilstand med energi $0 < E < V_0$. Vis at TUSL gir bølgefunksjoner på formen

$$\psi_w(z) = Ae^{ikz} + Be^{-ikz}$$

i området til venstre, $0 < z < w$, og bølgefunksjoner på formen

$$\psi_b(z) = Ce^{\kappa z} + De^{-\kappa z}$$

i området til høyre, $w < z < w + b$. Finn k og κ uttrykt ved oppgitte størrelser (samt $\hbar$, selvsagt).

Til venstre, $0 < z < w$, er $V = 0$, og TUSL blir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_w}{dz^2} = E\psi_w,$$

som kan skrives på formen

$$\frac{d^2\psi_w}{dz^2} + k^2\psi_w = 0,$$

med $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Generell løsning av denne diffiligningen er

$$\psi_w(z) = Ae^{ikz} + Be^{-ikz},$$

som skulle vises.

Til høyre, $w < z < w + b$, er $V = V_0$, og TUSL blir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_b}{dz^2} + V_0\psi_b = E\psi_b,$$

som kan skrives på formen

$$\frac{d^2\psi_b}{dz^2} - \kappa^2\psi_b = 0,$$

med $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Generell løsning av denne diffiligningen er

$$\psi_b(z) = Ce^{\kappa z} + De^{-\kappa z},$$

som skulle vises.

b) Bruk kravet om kontinuitet av $\psi(z)$ og den deriverte, $d\psi(z)/dz$ (der det er aktuelt), samt normeringsbetingelsen til å skrive ned de i alt 5 ligningene som fastlegger de 4 ubestemte koeffisientene A, B, C, D , samt de kvantiserte energi-egenverdiene E . (Fremdeles med $0 < E < V_0$.) Vis at en da umiddelbart har

$$B = -A \quad \text{og} \quad D = -Ce^{2\kappa(w+b)}.$$

- Kontinuerlig ψ i $z = 0$ gir $0 = A + B$.
- Kontinuerlig ψ i $z = w + b$ gir $0 = C \exp(\kappa(w + b)) + D \exp(-\kappa(w + b))$.
- Kontinuerlig ψ i $z = w$ gir $A \exp(ikw) + B \exp(-ikw) = C \exp(\kappa w) + D \exp(-\kappa w)$.
- Kontinuerlig $d\psi/dz$ i $z = w$ gir $ik(A \exp(ikw) - B \exp(-ikw)) = \kappa(C \exp(\kappa w) - D \exp(-\kappa w))$.
- Normeringsbetingelsen gir $1 = \int_0^{w+b} |\psi(z)|^2 dz$.

Den første av disse gir umiddelbart $B = -A$ og den andre gir umiddelbart $D = -C \exp(2\kappa(w + b))$.

c) Vi betrakter i neste omgang en tilstand med energi $E > V_0$. Bølgefunksjonen i området til høyre er da på formen

$$\psi_b(z) = Fe^{iqz} + Ge^{-iqz}.$$

Hva blir q uttrykt ved oppgitte størrelser (samt $\hbar$)?

Til høyre, $w < z < w + b$, blir TUSL

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_b}{dz^2} + V_0\psi_b = E\psi_b,$$

som nå kan skrives på formen

$$\frac{d^2\psi_b}{dz^2} + q^2\psi_b = 0,$$

med $q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Generell løsning av denne diffiligningen er

$$\psi_b(z) = Fe^{iqz} + Ge^{-iqz},$$

som oppgitt.

d) Anta at w og b har verdier slik at det fins en tilstand med energi $E = 2V_0$. Hva blir da forholdet λ_w/λ_b mellom bølgelengdene til bølgefunksjonen i de to områdene?

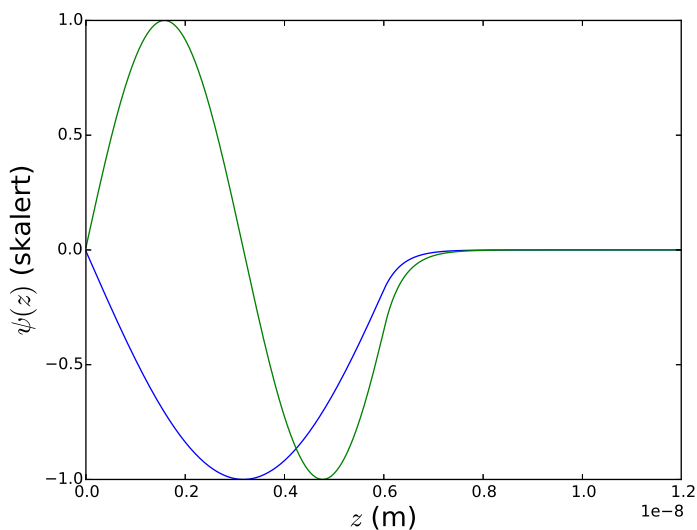
Vi har nå $k = \sqrt{2mE}/\hbar = \sqrt{4mV_0}/\hbar$ og $q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar = \sqrt{2mV_0}/\hbar$, slik at $\lambda_w/\lambda_b = (2\pi/k)/(2\pi/q) = q/k = 1/\sqrt{2} \simeq 0.7$.

e) Med tallverdiene $w = b = 6$ nm og $V_0 = 300$ meV blir det, for elektroner med masse $m = m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}$ kg, 5 tilstander med energi $E_j < V_0$ ($j = 0, 1, 2, 3, 4$). Grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand har energier hhv $E_0 = 9$ meV og $E_1 = 37$ meV. Bruk disse opplysningene til å skissere de tilhørende bølgefunksjonene $\psi_0(z)$ og $\psi_1(z)$ i området $0 < z < w + b$.

Begge bølgefunksjoner må ha verdi null i $z = 0$ og i $z = w + b$. Grunntilstanden har ingen nullpunkter utenom disse to; 1. eksiterte tilstand har ett nullpunkt. Vi kan, med gitte tallverdier, regne ut "decay-lengden" $1/\kappa$ for hver av tilstandene:

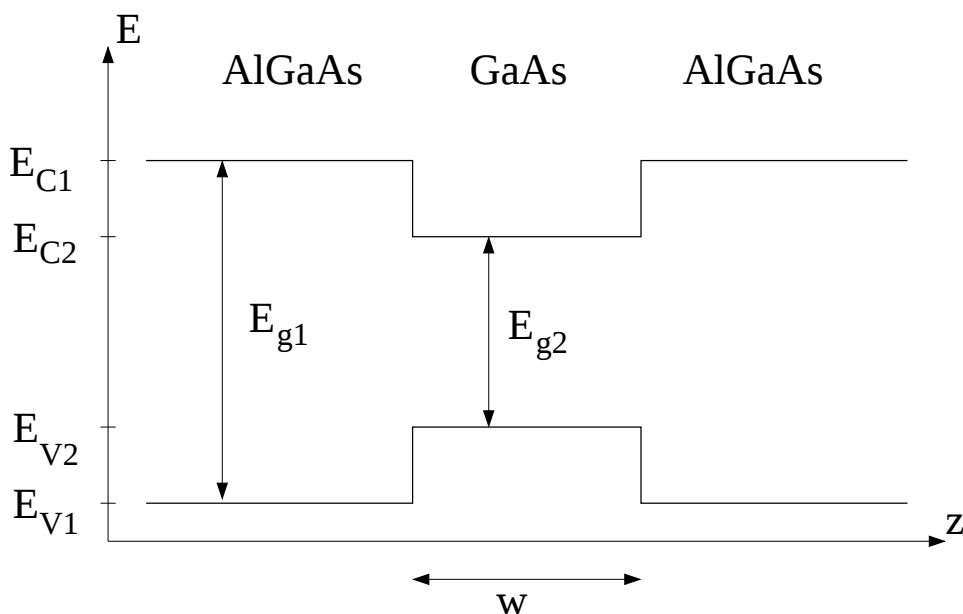
$$1/\kappa_0 = \hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_0)} \simeq 0.36 \text{ nm} \quad , \quad 1/\kappa_1 = \hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_1)} \simeq 0.38 \text{ nm}.$$

Dette skulle være nok til å skissere $\psi_0(z)$ (blå kurve) og $\psi_1(z)$ (grønn kurve):



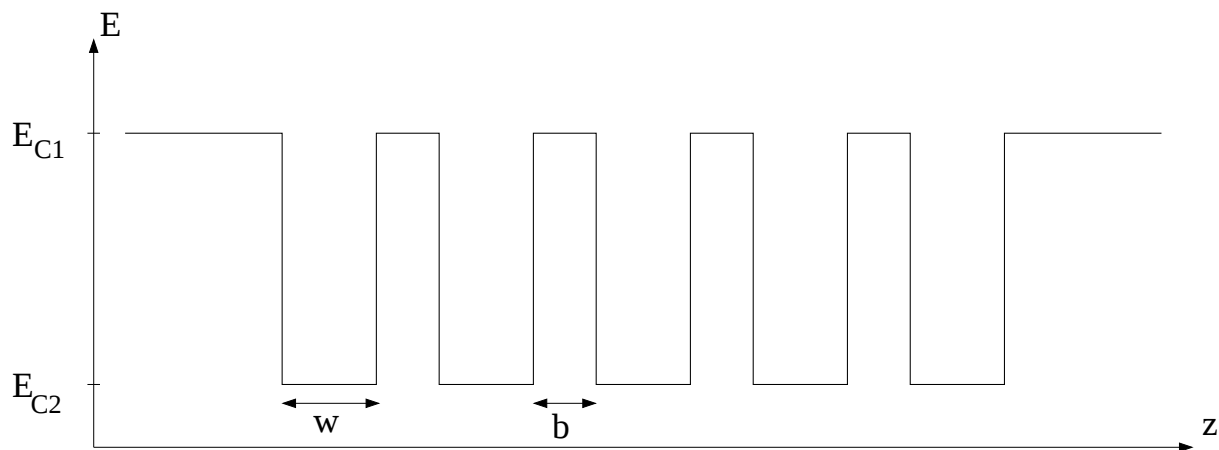
Oppgave 5

Med avansert molekylstråleteknologi er det mulig å produsere lagdelte halvlederstrukturer der ulike halvledermaterialer bygges oppå hverandre, atomlag for atomlag. Et eksempel er vist i figuren nedenfor:



Her kan vi tenke oss at systemet er bygget opp lag for lag i positiv z -retning, først et lag med AlGaAs (aluminium–gallium–arsenid), deretter et lag med GaAs (gallium–arsenid) med tykkelse w , og til slutt et nytt lag med AlGaAs. I AlGaAs er en viss andel av Ga–atomene byttet ut med Al–atomer, noe som først og fremst påvirker båndgapet E_g , slik at toppen av valensbåndet (E_V) har høyere energi i GaAs enn i AlGaAs mens bunnen av ledningsbåndet (E_C) har lavere energi i GaAs enn i AlGaAs. Det geniale med dette er

at vi her har realisert en endimensjonal potensialbrønn i laget med GaAs, med bredde w og med dybde $E_{C1} - E_{C2}$, siden elektroner som eksiteres fra valensbåndet til ledningsbåndet vil "se" et potensial $V(z)$ som tilsvarer bunnen av ledningsbåndet; med andre ord $V(z) = E_{C1}$ i AlGaAs og $V(z) = E_{C2}$ i GaAs. Og har vi først klart å lage en enkelt potensialbrønn på denne måten, er det selvsagt ingenting i veien for å lage 2, 3, eller et stort antall N endimensjonale potensialbrønner, ved å bygge vekselvis lag med GaAs og AlGaAs. Et eksempel med $N = 5$ er vist i figuren nedenfor:



Her har vi kun skissert hvordan bunnen av ledningsbåndet E_C varierer med posisjonen z , ettersom det er denne størrelsen som definerer det resulterende potensialet $V(z)$, og som dermed avgjør hvilke energieigenverdier E_j og tilhørende bølgefunksjoner $\psi_j(z)$ eksiterte elektroner hhv kan ha og beskrives av i en slik struktur.

I oppgavene 3 og 4 i øving 5 viste vi at vi kunne bruke et slik potensial til å beskrive energinivåer i alt fra enkeltatomer ($N = 1$) og toatomige molekyler ($N = 2$) til en krystall ($N \gg 1$). I en krystall "ser" elektronene et periodisk potensial fordi atomkjernene er plassert i et ordnet gitter. Vi fant ut at diskrete energinivåer i et enkeltatom var opphav til *energibånd* i en krystall.

Her har vi en tilsvarende situasjon, ikke med enkeltatomer for hver potensialbrønn og -barriere, men med et lag av en gitt halvleder som brønn og et lag av en annen halvleder som barriere. Med et stort antall brønner og barrierer kalles strukturen et *supergitter*, siden det er snakk om et periodisk potensial med "gitterkonstant" lik $w + b$, dvs summen av bredden til en brønn og en barriere.

Når enkeltatomer slår seg sammen og danner krystaller, blir gitterkonstanter og energibånd som de blir, uten at vi kan påvirke tallverdiene. Med et supergitter av halvlederlag er situasjonen annerledes: Både brønnbredde, barrierebredde og brønndybde har vi nærmest full kontroll på, og dermed kan energinivåer skreddersys, alt ettersom hva supergitterstrukturen skal anvendes til.

(Og anvendelsesområdene er mange; eksempler er lysdioder, fotodetektorer og lasere. Gå gjerne inn på scholar.google.no og legg inn søkeordkombinasjoner som superlattice og photodetector, for å få et inntrykk av omfanget av forskning på dette fagfeltet.)

Nå til selve *oppgaven*!

Python-programmet `supergitter.py` kan lastes ned fra [its learning](http://itslearning.com). Programmet ligner på `krystall.py` som ble brukt i øving 5, og det løser TUSL som beskrevet i `fy6019_n1_n2.pdf`. I `supergitter.py` settes brønndybden $V_0 = E_{C1} - E_{C2}$ til 0.3 eV, noe som tilsvarer at barrierematerialet AlGaAs inneholder ca 35% Al og 65% Ga. Nullnivået for $V(z)$ velges lik bunnen av ledningsbåndet i GaAs, med andre ord, $E_{C2} = 0$ og $E_{C1} = V_0$, med referanse til figuren ovenfor. På hver side av supergitterstrukturen legger programmet inn

et AlGaAs-lag med bredde $10b$. Elektronenes effektive masse settes lik $m = 0.1m_e$, med $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}$ kg.

a) Vi ser innledningsvis på et system med *en* GaAs-brønn med bredde $w = 50$ Å mellom AlGaAs-lag med bredde $10b = 500$ Å (dvs `supergitter.py` som lagt ut). Bruk formelen

$$B = 1 + \left\lceil \frac{\sqrt{2mV_0w}}{\pi\hbar} \right\rceil$$

(der klammeparentesene angir heltallsverdien av argumentet) til å vise at det er $B = 2$ bundne tilstander med energi $E_j < V_0$ i dette systemet. Kjør programmet. Hva er energiene E_0 og E_1 til hhv grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand? Bruk enheten meV (millielektronvolt), med en desimals nøyaktighet. Hvor mange nullpunkter og hva slags symmetri (med hensyn på brønnens midtpunkt) har de tilhørende bølgefunksjonene $\psi_0(z)$ og $\psi_1(z)$? (Tips: Dette kan sjekkes med programmet ved å endre verdien av `Nj` i linje 77.)

Antall bundne tilstander i dette systemet:

$$B = 1 + [1.41] = 1 + 1 = 2.$$

Energi til grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand:

$$E_0 = 69.6 \text{ meV} \quad , \quad E_1 = 246.0 \text{ meV}.$$

(Programmet skriver ut $E_2 = 301.5$ meV, som er større enn V_0 .)

$\psi_0(z)$ har ingen nullpunkter og er symmetrisk mhp midten.

$\psi_1(z)$ har ett nullpunkt og er antisymmetrisk mhp midten.

b) Vi ser deretter på et system med `Nunit = 20` GaAs-brønner, alle med bredde $w = 50$ Å, med AlGaAs-barrierer i mellom, alle med bredde $b = 50$ Å, og også her AlGaAs-lag med bredde 500 Å på hver side. Endre `Nunit` til 20 og kjør programmet. De resulterende energibåndene (ett bånd for hver bundet tilstand og med `Nunit` energinivåer pr bånd) i et slik supergitter kalles gjerne *minibånd*, både fordi antall tilstander pr minibånd er forholdsvis lite (sammenlignet med antall tilstander i "ordinære" energibånd) og fordi hvert minibånd er forholdsvis smalt (sammenlignet med båndbredden på ordinære energibånd). Hva er bredden på minibåndene, hhv $\Delta E_0 = E_{19} - E_0$ og $\Delta E_1 = E_{39} - E_{20}$, i dette supergitteret? Hva er største og minste energi til fotoner som absorberes eller emitteres av elektroner ved overganger mellom disse to minibåndene? Bestem det tilhørende bølgelengdeområdet ($\lambda_{\min}, \lambda_{\max}$) for slike fotoner. Bruk enheten meV for energier og μm for bølgelengder, begge med en desimal.

Minibåndenes bredde:

$$\Delta E_0 = E_{19} - E_0 = 2.9 \text{ meV} \quad , \quad \Delta E_1 = E_{39} - E_{20} = 30.6 \text{ meV}.$$

Største fotonenergi for overgang mellom minibånd 0 og 1:

$$E_{\max} = E_{39} - E_0 = 197.0 \text{ meV}.$$

Minste fotonenergi for overgang mellom minibånd 0 og 1:

$$E_{\min} = E_{20} - E_{19} = 163.4 \text{ meV}.$$

Minste bølgelengde:

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi\hbar c}{E_{\max}} = 6.3 \mu\text{m}.$$

Største bølgelengde:

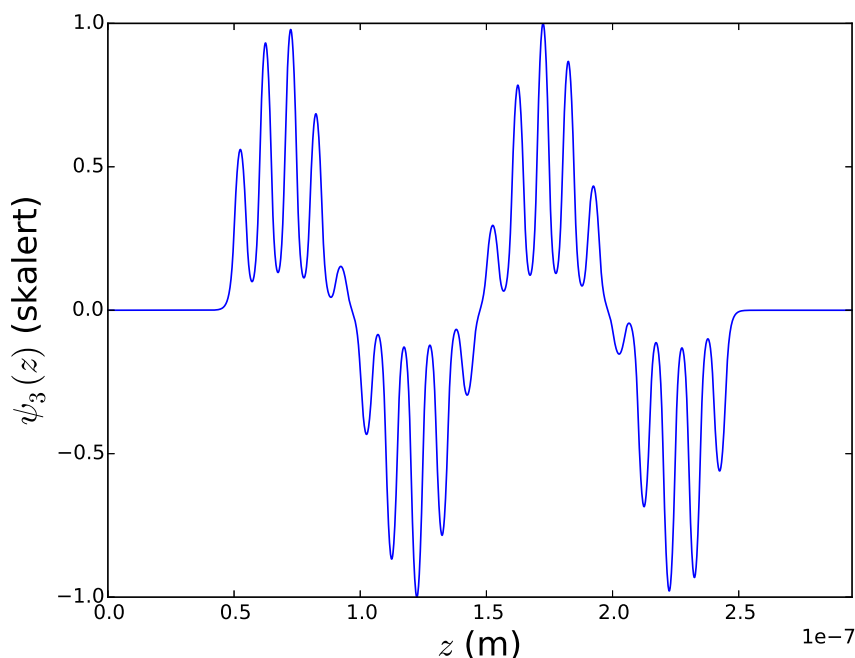
$$\lambda_{\max} = \frac{2\pi\hbar c}{E_{\min}} = 7.6 \mu\text{m}.$$

c) Ifølge Blochs teorem kan bølgefunksjoner som beskriver elektroner i et (endimensjonalt) periodisk potensial skrives på formen

$$\psi(z) = u(z) e^{ikz},$$

der $u(z)$ har samme periodisitet som potensialet, dvs $u(z) = u(z + w + b)$ i vårt tilfelle. "Fri-partikkel-faktoren" $\exp(ikz)$ må, med et endelig antall brønner `Nunit`, erstattes av "partikkel-i-boks-faktoren" $\sin(k_j z)$, med (tilnærmet) kvantiserte bølgetallsverdier $k_j = \pi(j + 1)/L$ ($j = 0, 1, 2, 3, \dots$; boksbredde L). I vårt system tilsvarer "boksen" `Nunit` brønner, hver med bredde w , og `Nunit - 1` barrierer, hver med bredde b . Siste kjøring av programmet genererte et plott av 3. eksiterte tilstand $\psi_3(z)$ i laveste minibånd. (Linje 77, `Nj = 3`.) Diskuter funksjonen $\psi_3(z)$ med hensyn til følgende punkter:

- Er antall nullpunkter som forventet?
- Har "partikkel-i-boks-faktoren" bølgelengde som forventet?
- Inneholder $\psi_3(z)$ en periodisk faktor $u(z)$ med periodisitet som forventet?



- For 3. eksiterte tilstand forventer vi 3 nullpunkter. Det er også hva vi observerer: Nullpunkter ca ved 96, 147 og 198 nm.
- For 3. eksiterte tilstand forventer vi en sinus-funksjon med to hele bølgelengder over "boksens" lengde. Vi ser at dette stemmer.
- Bølgefunksjonen har i alt 20 topper, som viser at $\psi_3(z)$ er proporsjonal med en faktor $u(z)$ som har samme periodisitet som supergitteret.

d) Anta at det er ønskelig med et smalere bølgelengdeområde enn det du fant i punkt b) ovenfor, uten at materialvalg eller antall brønner og barrierer i supergitteret endres. Finn ut hvordan bølgelengdeområdet ($\lambda_{\min}, \lambda_{\max}$) for overganger mellom laveste og nest laveste minibånd varierer med barrierebredden b og brønnbredden w , og rapporter resultatene i det du anser som velegnede figurer, produsert for hånd eller med

digitale hjelpemidler (python eller et annet dataverktøy).

I punkt *b*) fant vi at overganger mellom minibånd 0 og 1 kunne inntreffe via emisjon eller absorpsjon av fotoner med bølglengde mellom 6.3 og 7.6 μm . Dette bølglengdeområdet kan gjøres smalere ved å gjøre minibåndene smalere, og da fortrinnsvis det med høyest energi, siden dette er mye bredere enn det laveste, hhv 30.6 og 2.9 meV.

Vi vet at med isolerte brønner så får vi to energinivåer, dvs ingen båndbredde i det hele tatt. Dermed må vi forvente at bredere barrierer mellom brønner med uendret bredde vil gi smalere minibånd.

Vi vet dessuten at økt brønnbredde vil senke energien til samtlige minibånd, og etter hvert gi flere og flere minibånd som tilsvarer bundne tilstander (jf punkt *a*) ovenfor). Redusert energi med uendret barrierebredde vil gi redusert ”kobling” mellom brønnene for den aktuelle tilstanden, som igjen gir oss en forventning om en redusert minibåndbredde.

Konkrete beregninger for b og w mellom 4 og 10 nm gir følgende resultater:

