Eksempler

box.py: $V(x) = 0$ for $0 < x < L$; $V = \infty$ ellers
$L = (N+1)\Delta x$
$m = m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg
Gir med god tilnærming $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$
som vi fant analytisk, og $\psi_n(x) \sim \sin(n\pi x/L)$

kvantebronn.py: $V(x) = V0 = 0$ på hver side av en "brønn" med $V(x) = V1 = -1$ eV, med brønnbredde
$2 \cdot N1 \cdot dx = 4.0$ nm (med $N1 = 100$ og $dx = 0.02$ nm).
$\psi(x)$ i grunntilstanden ca som for partikkel i boks, men exp. "hale" inn i det klassisk forbudte området.

Stykkevis konstante potensialer i en dimensjon er forholdsvis enkle å regne på, fordi løsninger av TUSL,

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

er på formen

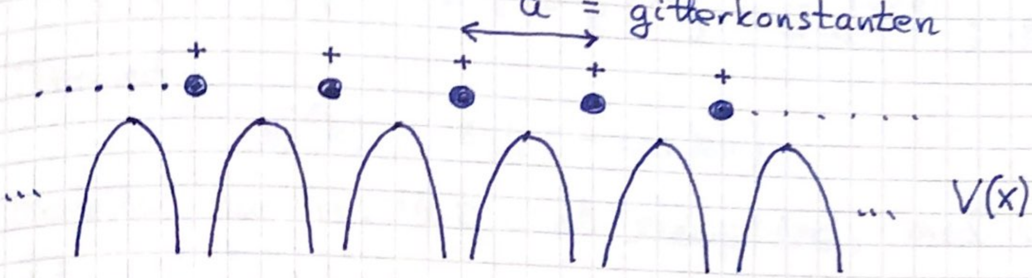
$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \; ; \quad E < V_0 \; ; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi(x) = ae^{iqx} + be^{-iqx} \; ; \quad E > V_0 \; ; \quad q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Slike potensialer er ikke kun av akademisk interesse. De kan lages i faste stoffer (krystaller), typisk ved å kombinere ulike halvledere.

Elektroner i faste stoffer

1D modell :



Perfekt krystall ⇒ Periodisk potensial for elektronene:

$$V(x+j\cdot a) = V(x) \quad ; \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Da må også $|\psi|^2$ være periodisk,

$$|\psi(x+j\cdot a)|^2 = |\psi(x)|^2$$

med ψ på formen

$$\psi(x) = e^{ikx}\cdot u(x) \quad ; \quad u(x+j\cdot a) = u(x)$$

Blochs teorem

Dvs: Elektronene beskrives "nesten" av plane bølger. Vi har "nesten" frie elektroner!

Aller enkleste modell: Et elektron befinner seg på/nær et eller annet atom, i posisjon $x_n = n\cdot a$.
Da kan vi bruke vår diskretiserte TUSL fra s. 43, med $\Delta x = a$ og $V(x_n) = V_n = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left\{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}\right\} = E\psi_n$$

Med $\psi_n = \psi(x_n)$ definert kun i $x_n = n\cdot a$ er den periodiske u_n også definert kun i $x_n = n\cdot a$. Da kan vi sette $u_n = 1$ og står igjen med $\psi_n = e^{ikx_n} = e^{ikna}$.

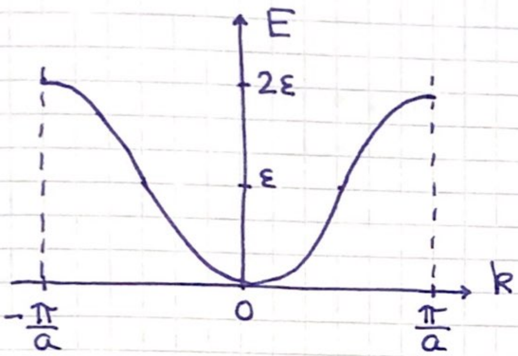
Innsetting av ψ_{n+1}, ψ_n og ψ_{n-1} i TUSL gir:

$$-\frac{\varepsilon}{2} e^{ikna}\left\{e^{ika} - 2 + e^{-ika}\right\} = E e^{ikna} \quad ; \quad \varepsilon = \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

Dermed:

$$E(k) = \varepsilon\left(1 - \cos ka\right)$$

Modellen har resultert i et <u>energibånd</u>, med båndbredde $2\varepsilon = 2\hbar^2/ma^2$:



Hvis elektronets bølgelengde er stor, $\lambda \gg a$, opplever det essensielt et konstant potensial, og da har vi et fritt elektron med $E = K = p^2/2m$.

Det ser bra ut: $\lambda \gg a$ betyr $k \cdot a \ll 1$ (da $k = 2\pi/\lambda$)

Når $|x| \ll 1$ er $\cos x \approx 1 - x^2/2$, slik at

$$E(k) \approx \varepsilon\left(1 - 1 + \tfrac{1}{2}k^2a^2\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m},$$

fri partikkel med impuls $p = \hbar k$ $(= h/\lambda)$.

<u>Reelle</u> krystaller er tredimensjonale, og gjerne med flere atomer pr <u>enhetscelle</u>, krystallens minste repeterende enhet. Resultatet blir flere energibånd, med tillatte tilstander for elektronene, adskilt av <u>båndgap</u>, energiintervaller <u>uten</u> tillatte tilstander. (Som skissert på s. 31.)

Med N enhetsceller i krystallen får vi N romlige bølgefunksjoner $\psi(\vec{r})$ i hvert energibånd. Pga at elektronet har <u>spinn</u>, som beskrives av 2 uavhengige spinn-bølgefunksjoner, χ_+ for spinn "opp" og χ_- for spinn "ned", blir elektronets <u>totale</u> bølgefunksjon

$$\phi(\vec{r}, m_s) = \underbrace{\psi(\vec{r})}_{\text{romlig del; orbital}} \cdot \underbrace{\chi_{m_s}}_{\text{spinndel}} \quad ; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Dermed: 2 tilstander ϕ pr orbital ψ

Dermed: $\boxed{\text{2N tilstander pr energibånd}}$

Paulis eksklusjonsprinsipp ("Pauliprinsippet"):

$\boxed{\text{Maksimalt } \underline{\text{ett}} \text{ elektron i en gitt (enpartikkel-) tilstand}}$

Grunntilstanden (i atomer, molekyler, krystaller):
Elektronene okkuperer tilstander, i samsvar med Pauliprinsippet, slik at systemets totale energi blir lavest mulig.

Ulike energibånd kan overlappe, eller ikke.
Anta her at energibåndene <u>ikke</u> overlapper.
Dermed, for krystallens grunntilstand:
Partall elektroner pr enhetscelle ⇒ Bare fylte og tomme energibånd.

Oddetall ——— " ——— ⇒ Fylte, ett halvfullt, resten tomme.