FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2017.
Øving 4. Innleveringsfrist: Søndag 2. april kl 23.59.

Oppgave 1: Bundne tilstander i potensialbrønn

En potensialbrønn med dybde $V_0 = 300$ meV og bredde $L = 100$ Å har grunntilstand med energi $E_1 = 30$ meV.

a) Bestem partikkelens masse m.
Kommentar: Elektroner i krystaller oppfører seg ofte som om de har en *effektiv masse* forskjellig fra verdien $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg. Det er vanlig å betegne slike effektive masser med m^*. Som regel er m^* mindre enn m_e.

b) Dersom partikkelen hadde hatt en større effektiv masse enn den du beregnet i punkt *a*, hadde grunntilstandsenergien da vært større eller mindre enn 30 meV?

c) Antall bundne tilstander N for en partikkel med masse m i en potensialbrønn med dybde V_0 og bredde L er

$$N = 1 + \left[\frac{\sqrt{2mV_0}L}{\pi\hbar} \right],$$

der klammeparentesene angir heltallsverdien av argumentet. Vis at $N = 3$ i det aktuelle tilfellet, og bestem energiene E_2 og E_3 til de to øvrige bundne tilstandene.

Tips: Benytt gjerne programmet `qmwell_E1E2E3.py`.

d) Bruk programmet `qmwell.py` til å løse TUSL numerisk for den aktuelle potensialbrønnen.

- Blir energiene til de tre bundne tilstandene de samme som du fant med programmet `qmwell_E1E2E3.py` i punkt *c*)?
- Det utlagte programmet plotter bølgefunksjonen til de tre bundne tilstandene, samt den "kontinuumstilstanden" som har lavest energi. (Linje 61: `psi4 = v[:,3]`.) Hva slags symmetri (dvs symmetrisk eller antisymmetrisk) har de tre bundne tilstandene, og hvor mange nullpunkter har hver av dem?
- Bruk figuren til å anslå *inntrengningsdybden* $1/\kappa$ for hver av de tre bundne tilstandene. Sammenlign med de "teoretiske" verdiene $\kappa_j^{-1} = \hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_j)}$ $(j = 1, 2, 3)$. (Tips: Fra høyre vegg, ved $z = 40$ nm, vil verdien av ψ_j reduseres med ca 63% over lengden $1/\kappa_j$, siden $\psi_j \sim \exp(-\kappa_j z)$.)
- Endre på linjene 56 og 61 i programmet, slik at det skriver ut E_{10} og plotter $\psi_{10}(z)$. (NB: Husk at python nummererer lister slik at første element i lista er nr 0 osv, jf linje 58.) Bruk figuren til å anslå bølgelengden inni og utenfor brønnområdet, og sammenlign med de "teoretiske" verdiene $2\pi/k$ (inni) og $2\pi/K$ (utenfor). Her er $k = \sqrt{2mE_{10}}/\hbar$ og $K = \sqrt{2m(E_{10} - V_0)}/\hbar$, som i forelesningene.

e) Bestem bølgelengden til utsendt "lys" for de tre mulige elektronovergangene mellom kvantebrønnens bundne tilstander. (For elektromagnetiske bølger: $E = h\nu$, $c = \lambda\nu$.) I hvilken del av det elektromagnetiske spektret befinner vi oss?

Oppgave 2: Vibrasjoner i hydrogenmolekylet

Den effektive fjærkonstanten for vibrasjoner med liten amplitude i molekylet H_2 er $k \simeq 520$ N/m. Bruk dette til å finne avstanden $\Delta E = \hbar\omega$ mellom vibrasjonsenerginivåene i H_2. Omtrent hvor høy temperatur T må til for å eksitere H_2 fra laveste til nest laveste vibrasjonsnivå? (Tips: Tilgjengelig termisk energi ved temperatur T er omtrent k_BT, der $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K er Boltzmanns konstant.)

Oppgave 3: Diverse småoppgaver

a) Hva er den reduserte massen til molekylet HCl? Enn Cl_2? Atommasser finner du i hukommelsen eller med google.

b) Elektroner med kinetisk energi 0.15 eV sendes inn mot en potensialbarriere med konstant høyde $V_0 = 0.30$ eV og bredde $L = 10$ Å. Hvor stor andel av elektronene transmitteres gjennom barrieren? Hvor stor blir den transmitterte andelen dersom bredden økes til 40 Å?

c) I en endimensjonal potensialboks (med $V = 0$ inni og $V = \infty$ utenfor) har sannsynlighetstettheten $|\psi|^2$ for eksiterte tilstander et eller flere null-*punkter*. På hva slags "geometriske objekter" har $|\psi|^2$ verdien null for eksiterte tilstander i hhv en todimensjonal og en tredimensjonal potensialboks?

d) En kubisk bit (terning) av halvledermaterialet galliumarsenid (GaAs) med sidekanter 1 mm kan betraktes som en tredimensjonal potensialboks, i den forstand at noen av elektronene kan bevege seg omkring i materialet som frie partikler, med effektiv masse $m^* = 0.067m_e$ (der m_e er den "normale" elektronmassen). Hvor stor er energiforskjellen mellom grunntilstanden og 1. eksiterte nivå i en slik halvlederterning? Oppgi svaret i enheten peV. Hva må kvantetallene n_x, n_y og n_z omtrent være for at energien skal ligge 1 eV høyere enn grunntilstanden?

e) Tilstandstettheten $g(E)$, dvs antall tilstander pr energienhet, for partikler med masse m i en tredimensjonal boks med sidekanter L er gitt ved

$$g(E) = \frac{(2m)^{3/2} L^3 E^{1/2}}{4\hbar^3 \pi^2}.$$

Kontroller at uttrykket for $g(E)$ har riktig enhet. Bestem tallverdi for tilstandstettheten pr volumenhet, $g(E)/L^3$, for elektroner i GaAs med energi 0.5 eV. Oppgi svaret i SI-enheter. (Sett m lik den effektive massen m^* som er oppgitt i *d*.)

f) Den ϕ–avhengige delen av bølgefunksjonene som beskriver elektronet i hydrogenatomet, oppfyller ligningen

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l^2\Phi = 0.$$

Vis ved innsetting at løsningen er på formen $\Phi(\phi) = A\exp(im_l\phi)$ (der A er en ubestemt konstant). Dersom $\Phi(\phi)$ skal være entydig, må $\Phi(\phi+2n\pi) = \Phi(\phi)$ for alle heltall n. Bruk dette til å vise at m_l må være heltallig.

g) Hva må hovedkvantetallet n minst være for at det skal være aktuelt å snakke om g-tilstander (dvs $l = 4$) i hydrogenatomet? Hvor mange ulike $4f$–tilstander har vi i hydrogenatomet? (Dvs ulike *romlige* tilstander; vi ser bort fra elektronets *spinn* her.)

Oppgave 4: Harmonisk oscillator med python

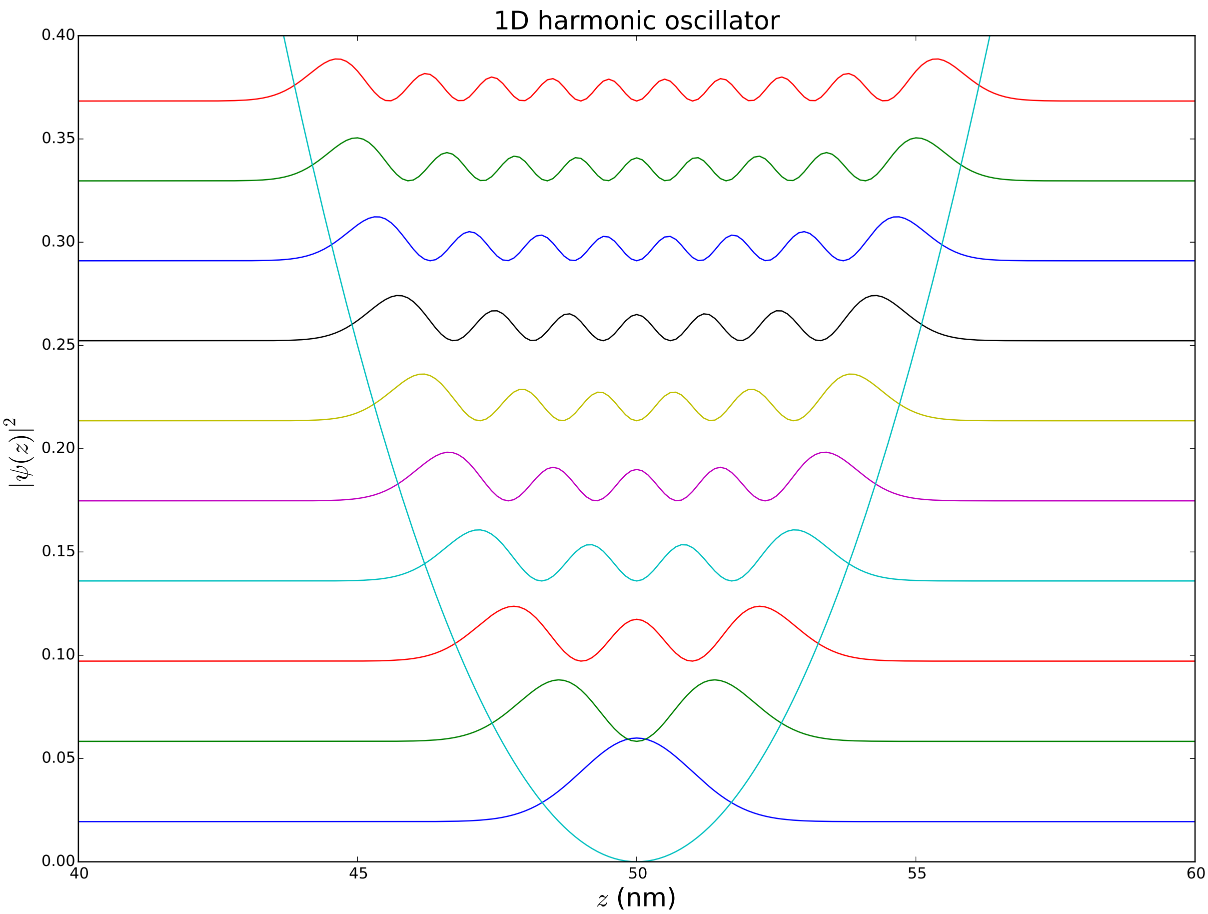
Et elektron (masse m_e) befinner seg i et endimensjonalt harmonisk–oscillator–potensial

$$V(z) = \frac{1}{2}kz^2$$

med fjærkonstant (krumning) $k = 3.2$ mN/m.

a) Bestem grunntilstandsenergien $E_0 = \hbar\omega/2$, og dermed samtlige energinivåer $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$. Oppgi E_0 i et helt antall meV.

b) En utfordring: Benytt samme numeriske metode som i programmet `qmwell.py` til å bestemme de 10 laveste energinivåene $E_0, E_1, \ldots, E_9$, og tilhørende bølgefunksjoner $\psi_0, \psi_1, \ldots, \psi_9$. Resultatene skal illustreres i en figur som bør ligne på dette:



Figuren viser potensialet $V(z)$ i enheten eV, med nullpunkt i posisjon $z = 50$ nm. Videre plottes sannsynlighetstettheten $|\psi_n(z)|^2$ forskjøvet med verdien E_n målt i enheten eV. Dermed vil "nullnivået" for hver tilstand krysse $V(z)$ nøyaktig i overgangen mellom det klassisk tillatte $(E > V)$ og det klassisk forbudte $(E < V)$ området, slik at figuren gir en fin illustrasjon av hvordan de ulike bølgefunksjonene skifter fra oscillerende til eksponentielt avtagende oppførsel nettopp ved denne overgangen. Det er dessuten enkelt å telle antall nullpunkter for de ulike tilstandene, samt kontrollere at energinivåene er *ekvidistante*, dvs med konstant $\Delta E = E_n - E_{n-1}$. Du får noen tips på neste side.

Tips til oppgave $4b$:

- Start med å ta en kopi av `qmwell.py`. Kall fila for eksempel `harmonisk.py`.
- Endre massen til elektronets normale masse.
- Legg inn områder med bredde 40 nm og konstant potensial $V_0 = 1$ eV på hver side av det harmoniske potensialet. Programlinjer som gjør jobben er

  ```
  N = 100
  V0 = 1.6E-19
  V = [V0]*4*N + [V0*((n-N)/(N*1.0))**2 + [V0]*4*N
  ```

  (I siste linje `N*1.0` for at python skal oppfatte `(n-N)/N` som et reelt tall. Tar du bort `*1.0`, tar python heltallsverdien av `(n-N)/N` dersom n og N er heltall.)
- Linjene over gir `V` enheten J. Ny liste med enheten eV oppnås med linjen

  ```
  VineV = [x/1.6E-19 for x in V]
  ```
- Python tillater å addere en liste og et enkelt tall. Resultatet blir at det ene tallet adderes til hvert element i listen. Eksempel:

  ```
  rho5 = np.abs(psi5)**2 + evalues[5]
  ```

  Her blir `rho5` en liste med like mange elementer som listen `psi5`, og hvert element i `rho5` blir lik absoluttkvadratet av tilsvarende element i `psi5` pluss tallet `evalues[5]`.
- Plotting av flere grafer i samme figur gjøres ved å gjenta listen for horisontal akse for hver liste som skal visualiseres. For eksempel:

  ```
  plt.plot(z,rho0,z,rho1,z,rho2,z,rho3,z,VineV)
  ```

  plotter de 5 listene `rho0, rho1, rho2, rho3` og `VineV` som funksjon av `z` i samme figur. Her må antall elementer i alle lister være like.
- Aksegrenser innføres med `xlim` og `ylim`. For eksempel:

  ```
  plt.xlim(40,60)
  ```

  gir en figur med horisontal akse som starter på 40 og slutter på 60.

Oppgave 5: Radien til K-skallet i hydrogen

Grunntilstanden i hydrogenatomet beskrives med bølgefunksjonen

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\, e^{-r/a_0},$$

der $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2$ er Bohr–radien (ca 0.529 Å). Forventningsverdien av r,

$$\langle r \rangle = \int r|\psi_{1s}(r)|^2\, dV = \int_0^\infty r|\psi_{1s}(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr$$

beregnes til $3a_0/2$ ved hjelp av delvis integrasjon (tre ganger). En alternativ måte å anslå radien til K-skallet på er å regne ut den inverse av forventningsverdien av $1/r$:

$$\langle \frac{1}{r} \rangle^{-1} = \left(\int \frac{1}{r} |\psi_{1s}(r)|^2\, dV \right)^{-1}.$$

Dette blir litt enklere enn å regne ut $\langle r \rangle$, da det kun krever en gangs bruk av delvis integrasjon. Regn ut $\langle 1/r \rangle^{-1}$ og sammenlign med $\langle r \rangle$. Ingen av svarene kan vel sies å være "bedre" enn det andre. Skisser $\psi_{1s}(r)$ (for hånd, med python eller med geogebra) og merk av de to verdiene $\langle r \rangle$ og $\langle 1/r \rangle^{-1}$.