FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2017.
Løsningsforslag til øving 4.

Oppgave 1: Bundne tilstander i potensialbrønn

a) Fra forelesningene (s 60) har vi følgende ligning for bestemmelse av energien E_1 til grunntilstanden:

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mE_1}L}{2\hbar}\right) = \sqrt{\frac{V_0 - E_1}{E_1}}.$$

I denne oppgaven kjenner vi alle størrelser unntatt massen m, så vi må løse ligningen mhp m:

$$m = \frac{1}{2E_1}\left[\frac{2\hbar}{L}\arctan\left(\sqrt{\frac{V_0 - E_1}{E_1}}\right)\right]^2 = 7.17 \cdot 10^{-32}\ \text{kg} = 0.079 m_e.$$

b) Både for partikkel i boks og for partikkel i endelig potensialbrønn vil grunntilstandsenergien (og energien for andre bundne tilstander) avta med økende energi.

c) I det aktuelle tilfellet har vi

$$\frac{\sqrt{2mV_0}L}{\pi\hbar} \simeq 2.5,$$

som har heltallsverdien 2. Dette gir $N = 1 + 2 = 3$. Ved å kjøre programmet `qmwell_E1E2E3.py` bestemmes energien til 1. og 2. eksiterte tilstand:

$$E_2 = 117\ \text{meV} \quad , \quad E_3 = 246\ \text{meV}.$$

(Programmet øker verdien av energien i små skritt og lokaliserer krysningspunkter mellom de ulike kurvene i figuren på side 60 i notatene.)

d)

- I linje 56 i programmet skrives de 4 laveste energiegenverdiene ut, i enheten meV. Programmet beregner $E_1 = 30$ meV, $E_2 = 117$ meV og $E_3 = 246$ meV, det samme som vi fant med `qmwell_E1E2E3.py` (dvs analytisk). Tilstand nr 4 har energien $E_4 = 304$ meV, som er større enn $V_0 = 300$ meV. Dette er som ventet: Vi skal ha 3 bundne tilstander, dvs 3 tilstander med energi mindre enn potensialdybden V_0. (Med uendelig bredde på intervallene på venstre og høyre side av brønnen blir det et kontinuerlig spektrum fra 300 meV og oppover. Her har vi *endelig* bredde på hver side ($3L$), slik at det blir diskrete energiverdier også over 300 meV.)

- Grunntilstanden: Blå kurve, symmetrisk, ingen nullpunkter.
  1. eksiterte tilstand: Grønn kurve, antisymmetrisk, ett nullpunkt.
  2. eksiterte tilstand: Rød kurve, symmetrisk, to nullpunkter.

- Forstørring av området fra $z = 40$ nm og oppover gir grunnlag for å anslå følgende inntrengningsdybder:
  Grunntilstanden: Verdi -0.03833 ved $z = 40$ nm. Reduksjon med $1/e$ gir verdien -0.01410, som vi har ved $z = 41.33$ nm. Gir anslått $1/\kappa = 1.33$ nm. Teoretisk verdi: $\hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_1)} = 1.33$ nm.
  1. eksiterte tilstand: Verdi 0.07382 ved $z = 40$ nm. Reduksjon med $1/e$ gir verdien 0.02716, som vi har ved $z = 41.63$ nm. Gir anslått $1/\kappa = 1.63$ nm. Teoretisk verdi: $\hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_2)} = 1.62$ nm.
  2. eksiterte tilstand: Verdi -0.09989 ved $z = 40$ nm. Reduksjon med $1/e$ gir verdien -0.03675, som vi har ved $z = 43.00$ nm. Gir anslått $1/\kappa = 3.00$ nm. Teoretisk verdi: $\hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_3)} = 2.98$ nm.
  Meget godt samsvar! (Kommentar: Slik potensialet tilordnes i programmet blir $V = 0$ fra og med $z = 30.0$ nm og til og med $z = 39.9$ nm, mens $V = -V_0 = -300$ meV i $z = 40.0$ nm. Dermed vil avleste tallverdier for ψ bli litt forskjellig fra mine verdier dersom $\psi(30\ \text{nm})$ brukes som utgangspunkt. Men inntrengningsdybdene blir fortsatt som angitt her, med tre gjeldende siffer.)

- Utenfor er bølgelengden ut fra figuren 16.23 nm. I brønnområdet er bølgelengden ut fra figuren 7.12 nm. Programmet skriver ut at $E_{10} = 372$ meV, som betyr at

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{2mE_{10}}/\hbar = 8.80 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}, \\ K &= \sqrt{2m(E_{10} - V_0)}/\hbar = 3.87 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}, \end{aligned}$$

  som gir bølgelengder hhv $2\pi/k = 7.14$ nm og $2\pi/K = 16.23$ nm. Meget godt samsvar!

e) Bølgelengden blir da $\lambda = c/\nu = ch/E = 2\pi c\hbar/E$, der E er energiforskjellen mellom to bundne tilstander. De tre mulige energiforskjellene er her 87 meV, 129 meV og 216 meV, som gir bølgelengder hhv 14.2, 9.6 og 5.7 μm. Dette er i det såkalt infrarøde området. ("Varmestråling" – termisk energi k_BT for et legeme med temperatur 310 K er til sammenligning ca 27 meV.

Oppgave 2: Vibrasjoner i hydrogenmolekylet

For en enkel harmonisk oscillator er $\omega = \sqrt{k/m}$. For et slik toatomig molekyl må vi passe på å sette m lik den reduserte massen, gitt ved $1/m = 1/m_1 + 1/m_2$. Her er $m_1 = m_2 = m_{\text{H}}$, slik at $m = m_{\text{H}}/2$. Dermed blir

$$\Delta E = \hbar\omega = \hbar\sqrt{2k/m_{\text{H}}} = 1.05 \cdot 10^{-34} \cdot \sqrt{2 \cdot 520/1.67 \cdot 10^{-27}} = 8.29 \cdot 10^{-20} \text{ J},$$

evt 0.528 eV. Setter vi dette lik termisk energi k_BT, tilsvarer det en absolutt temperatur $T = 8.29 \cdot 10^{-20}/1.38 \cdot 10^{-23} \simeq 6000$ K.

Kommentar: Dette er en svært høy temperatur, og for eksempel mye høyere enn såkalt romtemperatur, som vi typisk kan sette lik 300 K. Det betyr at i en hydrogengass, dvs en gass med H_2-molekyler, vil praktisk talt alle molekylene befinne seg i grunntilstanden med hensyn på vibrasjonsbevegelsen. Og det vil typisk ikke "hjelpe" å øke temperaturen; mer presist: Om vi øker temperaturen fra T til $T + \Delta T$, vil molekylene *fortsatt* befinne seg i vibrasjonsgrunntilstanden, med energien $\hbar\omega/2$ pr molekyl. Med andre ord, til tross for en liten temperaturøkning har gassens indre energi U ikke økt, når vi kun betrakter denne vibrasjonsbevegelsen: $\Delta U_{\text{vib}} = 0$. Men det må igjen bety at vibrasjonsbevegelsen ("vibrasjonsfrihetsgraden") ikke bidrar til *varmekapasiteten* ved normale temperaturer! (Husk, fra termodynamikken: $C_V = (\Delta Q/\Delta T)_V = \Delta U/\Delta T$ når vi holder volumet V konstant; her er ΔQ varmen som tas opp av systemet, dvs hydrogengassen.)) Dette er da også hva som observeres eksperimentelt, og det er en ren kvantemekanisk effekt. Se YF kapittel 18.4.

Oppgave 3: Diverse småoppgaver

a)

$$\begin{aligned} \tilde{m}_{\text{HCl}} &= \frac{m_{\text{H}}m_{\text{Cl}}}{m_{\text{H}} + m_{\text{Cl}}} = \frac{1.0 \cdot 35.5}{1.0 + 35.5} \text{ amu} = 0.97 \text{ amu} \\ \tilde{m}_{\text{Cl}_2} &= \frac{m_{\text{Cl}}m_{\text{Cl}}}{m_{\text{Cl}} + m_{\text{Cl}}} = \frac{35.5}{2} \text{ amu} = 17.3 \text{ amu} \end{aligned}$$

Her er 1 amu = 1 atomic mass unit = $1.67 \cdot 10^{-27}$ kg.

b) Uttrykket for transmisjonssannsynligheten T er gitt på side 65 i notatene:

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \kappa L} = \frac{1}{1 + (V_0^2/(4E(V_0 - E))) \sinh^2 \kappa L}.$$

Her er $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Her er

$$\kappa = \sqrt{2 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot (0.30 - 0.15) \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}/1.05 \cdot 10^{-34} = 1.99 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} = 0.199 \text{ Å}^{-1},$$

slik at den dimensjonsløse faktoren κL blir 1.99 og 7.97 når L er hhv 10 Å og 40 Å. Faktoren $V_0^2/4E(V_0 - E)$ får her verdien 1, slik at

$$\begin{aligned} T(10 \text{ Å}) &= \frac{1}{1 + \sinh^2 1.99} \simeq 0.072 \\ T(40 \text{ Å}) &= \frac{1}{1 + \sinh^2 7.97} \simeq 4.8 \cdot 10^{-7} \end{aligned}$$

Vi ser at T avtar raskt (eksponentielt) med økende barrierebredde. (Hvis en ikke har funksjoner som $\sinh(x)$ og $\cosh(x)$ på kalkulatoren, kan en med god tilnærmelse sette $\sinh(x) \simeq \cosh(x) \simeq \exp(x)/2$ når x er en del større enn 1. Dette vil her gi $T = 0.070$ for den tynne barrieren, allerede en god tilnærmelse med $x = 1.99$, med andre ord.)

c) I 2D: "Null-linjer", evt "nullkurver". I 3D: "Nullflater".

d) Energinivåene i en kubisk boks med sidekanter L er (se s 69 i notatene)

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right),$$

med positive heltall for alle de tre kvantetallene. Energiforskjellen mellom grunntilstanden og 1. eksiterte nivå i *denne* kubiske boksen er dermed

$$\Delta E = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} = 2.67 \cdot 10^{-30} \text{ J} = 16.7 \text{ peV}.$$

For å oppnå en energi på 1 eV må vi omtrent ha

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{2 \cdot 0.067 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot 0.001^2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{(1.05 \cdot 10^{-34})^2 \cdot \pi^2} \simeq 1.8 \cdot 10^{11},$$

dvs $n \simeq 4.2 \cdot 10^5$. (Dette er tilsynelatende et stort tall, men dersom systemet inneholder mange elektroner, og vi tar hensyn til Pauli–prinsippet (maksimalt ett elektron i en gitt kvantetilstand), må vi nok regne med å finne elektroner i tilstander som tilsvarer energier på "noen elektronvolt".)

e) En tilstandstetthet, angitt som antall tilstander pr energienhet, må ha enheten 1/J. La oss sjekke:

$$[g] = \frac{\text{kg}^{3/2}\text{m}^3\text{J}^{1/2}}{\text{J}^3\text{s}^3} = \frac{\text{J}^{3/2}}{\text{J}^{5/2}} = \frac{1}{\text{J}},$$

ettersom J = kg m^2/s^2. OK! Tilstandstetthet for elektroner pr volumenhet for elektroner med effektiv masse $0.067 m_e$ i GaAs og med energi 0.5 eV:

$$g/L^3 = \frac{(2 \cdot 0.067 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31})^{3/2} \cdot (0.5 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19})^{1/2}}{4 \cdot (1.05 \cdot 10^{-34})^3 \cdot \pi^2} = 2.64 \cdot 10^{44} \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-3}.$$

Et stort tall, men så er da også både 1 J et stort energiintervall og 1 m^3 et stort volum for slike systemer som det her er snakk om.

f) To gangers derivasjon av den oppgitte løsningen og innsetting i ligningen gir

$$-m_l^2 \Phi + m_l^2 \Phi = 0,$$

som viser at dette *er* en løsning.
Fysisk er det ingen forskjell på vinklene ϕ, $\phi + 2\pi$, $\phi + 4\pi$ osv. Dermed må funksjonen Φ ha en og samme verdi for alle disse vinklene:

$$\exp(im_l\phi) = \exp(im_l(\phi + 2n\pi)) = \exp(im_l\phi)\exp(i \cdot m_l \cdot 2n\pi).$$

Følgelig må verdien av den siste eksponentialfunksjonen være lik 1 (for alle mulige heltallige n), og det er bare mulig dersom m_l er et helt tall.

g) Siden l ikke kan være større enn $n - 1$, må n minst være lik 5 for at vi skal kunne ha $l = 4$. $4f$-tilstander har $n = 4$ og $l = 3$. Da kan m_l ha verdiene $-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$. Følgelig er det 7 ulike $4f$-tilstander i hydrogenatomet. (Tar vi hensyn til at elektronet i tillegg har spinn, med de to mulige verdiene $1/2$ og $-1/2$, blir det alt i alt 14 ulike $4f$-tilstander.)

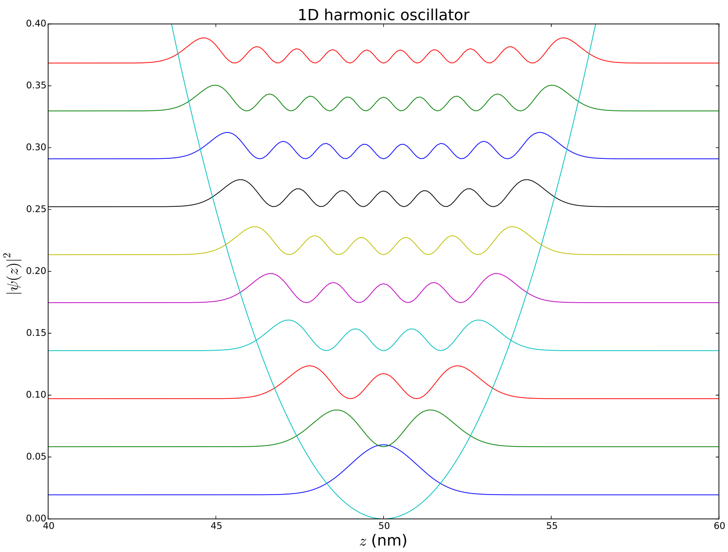
Oppgave 4: Harmonisk oscillator med python

a)

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar\sqrt{k/m_e}}{2} \simeq 19 \text{ meV}.$$

Avstanden mellom energinivåene blir ca 39 meV.

b)



Et program som besvarer oppgaven, `harmosc.py`, er lagt ut på itslearning.

Oppgave 5: Radien til K-skallet i hydrogen

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

$$
\begin{aligned}
&= \left(\int_0^\infty \frac{1}{r}\frac{1}{\pi a_0^3}\, e^{-2r/a_0} 4\pi r^2 dr\right)^{-1} \\
&= \frac{\pi a_0^3}{4\pi}\left(\int_0^\infty r\, e^{-2r/a_0} dr\right)^{-1}
\end{aligned}
$$

Delvis integrasjon, med $u = r$ og $v' = \exp(-2r/a_0)$, gir verdien $a_0^2/4$ for dette integralet. Dermed er

$$
\langle\frac{1}{r}\rangle^{-1} = a_0,
$$

noe mindre enn $\langle r\rangle$, som er $3a_0/2$. Figuren viser $\psi_{1s}(r)$, med de to forventningsverdiene $\langle r\rangle = 3a_0/2$ og $\langle 1/r\rangle^{-1} = a_0$ avmerket: