

FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2017.
Løsningsforslag til øving 5.

Oppgave 1: Rotasjon av og vibrasjon i et toatomig molekyl

a) Et N-atom har masse ca $14u$, der u er 1 atomær masseenh. Bindingslengden i N_2 er ca $1.098 \text{ \AA}$. Trehetsmomentet til N_2 blir dermed

$$I = 2 \cdot 14u \cdot (1.098/2)^2 \text{ \AA}^2 = 8.44 u\text{\AA}^2 = 1.40 \cdot 10^{-46} \text{ kg m}^2.$$

b) Rotasjonsenergien er kvantisert, siden dreieimpulsen er kvantisert:

$$E_l = \frac{L^2}{2I} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Her er $\hbar^2/2I = 0.246 \text{ meV}$, slik at $E_0 = 0$, $E_1 = 0.492 \text{ meV}$, $E_2 = 1.48 \text{ meV}$, $E_3 = 2.95 \text{ meV}$ og $E_4 = 4.92 \text{ meV}$.

c)

$$\Delta E_{\text{vib}} = \hbar\omega = 292 \text{ meV}.$$

Vi ser at avstanden mellom vibrasjonsnivåene er mye, mye større enn avstanden mellom rotasjonsnivåene. 292 meV er eksempelvis en stor energi sammenlignet med termisk energi $k_B T$ ved romtemperatur, ca 26 meV . Det betyr at toatomige molekyler befinner seg i grunntilstanden mhp vibrasjon ved normale temperaturer, og en liten økning i temperaturen gir ingen endring i gassens indre vibrasjonsenergi, slik at vibrasjonsfrihetsgradene ikke bidrar til varmekapasiteten ved normale temperaturer. Rotasjon er en helt annen sak: Avstanden mellom rotasjonsnivåene er liten sammenlignet med termisk energi. Dermed er mange molekyler i eksiterte tilstander mhp rotasjon, og en liten temperaturøkning fører til at gassens indre rotasjonsenergi øker, og de to vibrasjonsfrihetsgradene bidrar til varmekapasiteten C_V .

d) La oss f.eks betrakte emisjon av et foton, fra en tilstand $n = 1$ til en tilstand $n = 0$, med $\Delta l = \pm 1$. Da innser vi at det er i alt 8 mulige overganger, fra (nl) 14 til 03, fra 13 til 04 eller 02, fra 12 til 03 eller 01, fra 11 til 02 eller 00 og fra 10 til 01. De 8 energiene det da blir snakk om er $\hbar\omega \pm \hbar^2/I$, $\hbar\omega \pm 2\hbar^2/I$, $\hbar\omega \pm 3\hbar^2/I$ og $\hbar\omega \pm 4\hbar^2/I$. La oss for enkelhets skyld sette $\hbar^2/I \simeq 0.5 \text{ meV}$. Da er de 8 mulige fotonenergiene 290, 290.5, 291, 291.5, 292.5, 293, 293.5 og 294 meV. Tilsvarende bølgelengder er gitt ved $h\nu = hc/\lambda = E$, dvs $\lambda = hc/E$, som her vil ligge i området fra ca 4.21 til ca $4.27 \text{ \mu m}$. (Litt andre tallverdier kan det kanskje bli med mer nøyaktige verdier for $\hbar$, e osv.) Dette er i det infrarøde området, som dekker bølgelengder mellom ca 0.75 og $1000 \text{ \mu m}$.

Oppgave 2: Madelungkonstanten

a) Avstanden fra ion $i = 0$ til ion j er $|ja|$. La oss f.eks. anta at det er en positiv ladning i posisjon $i = 0$, dvs $q_0 = e$. Da er $q_1 = q_{-1} = -e$, $q_2 = q_{-2} = e$ osv. Dermed er

$$\begin{aligned} V_0 &= -2 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} + 2 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot 2a} - 2 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot 3a} + \dots \\ &= 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j e^2}{4\pi\epsilon_0 j a} \\ &= \sum_{j=-\infty; j \neq 0}^{\infty} \frac{(-1)^j e^2}{4|j|\pi\epsilon_0 a}. \end{aligned}$$

Som betyr at det manglet absoluttverditegn omkring j i nevneren i oppgaveteksten, beklager dette.

b) Vi har her

$$\begin{aligned} V_0 &= 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j e^2}{4\pi\epsilon_0 j a} \\ &= \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j} \\ &= \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \cdot (-\ln 2) \\ &= -2 \ln 2 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a}. \end{aligned}$$

Dette er på den oppgitte formen, som betyr at Madelungkonstanten for en slik endimensjonal modellkrystall er $M = 2 \ln 2$.

c)

- Fra figur 42.13 i YF ser vi at natriumionet i midten har 12 nest-nærmeste naboer av typen natrium, alle i avstand $\sqrt{2}a$.
- Fra figur 42.13 i YF ser vi at natriumionet i midten har 8 tredje-nærmeste naboer av typen klor, alle i avstand $\sqrt{3}a$.

d) Bidrag fra de 6 nærmeste naboene:

$$V_1 = -6 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} = -M_1 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \Rightarrow M_1 = 6.$$

Bidrag fra de 12 nest-nærmeste naboene:

$$V_2 = +12 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{2}a} = -M_2 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \Rightarrow M_2 = -12/\sqrt{2}.$$

Bidrag fra de 8 tredje-nærmeste naboene:

$$V_3 = -8 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{3}a} = -M_3 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \Rightarrow M_3 = 8/\sqrt{3}.$$

Her har vi antatt at ionene kan betraktes som punktladninger $\pm e$. (I litteraturen kan man treffe på litt ulike definisjoner av M . Den kan f.eks. referere til avstanden a mellom nærmeste naboer, slik vi har gjort her, eller den kan referere til avstanden $2a$ mellom "gjentakende enheter" NaCl. En kan også operere med motsatt fortegn, men samme absoluttverdi, for de to ionetypene.)

Oppgave 3: Endimensjonal modell for atom og toatomig molekyl

a) Programmet `singlewell.py` gir at atomet har en grunntilstand med energien -5.754 eV.

b) Programmet `doublewell.py` gir at molekylet har en grunntilstand med energien -5.907 eV, mens 1. eksiterte tilstand (som også er en bundet tilstand) har energien -5.591 eV.

c) Energien til to separate atomer er $-5.7537 \cdot 2 \text{ eV} \simeq -11.507 \text{ eV}$.

d) Det er "plass til" to elektroner i hver av molekylets romlige tilstander, siden en gitt romlig tilstand kan kombineres med spinntilstander med "spinn opp" eller "spinn ned". I grunntilstanden er begge molekylets elektroner i den romlige grunntilstanden, et med spinn opp og et med spinn ned. Molekylets totale spinn i grunntilstanden er dermed null.

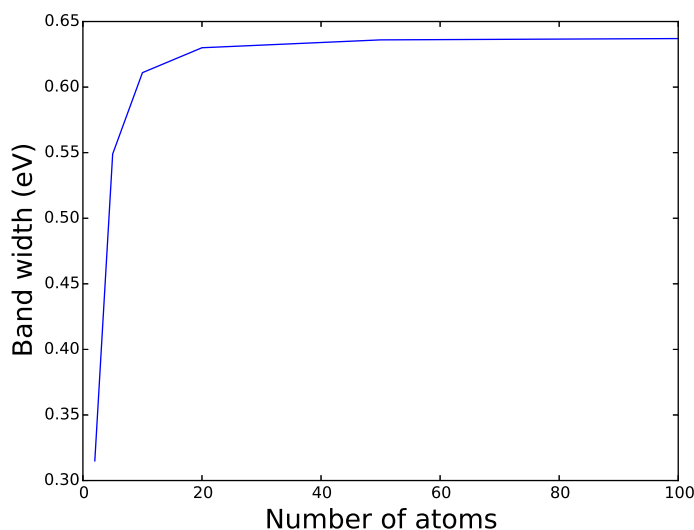
e) Molekylets totale energi i grunntilstanden er $-5.9069 \cdot 2 \text{ eV} \simeq -11.814 \text{ eV}$. Energigevinsten ved at to separate atomer danner et slik molekyl blir dermed 0.306 eV . Dette kan derfor sies å være (modell-)molekylets bindingsenergi.

Oppgave 4: Endimensjonal modell for krystall

a) Ikke uventet finner vi 5 energinivåer med 5 atomer, og 10 nivåer med 10 atomer. Med andre ord, N energinivåer omkring grunntilstanden for enkeltatomet med N atomer i krystallen.

b) Med 10 atomer ligger de 10 energinivåene mellom -6.041 eV og -5.431 eV . Med 100 atomer ligger de 100 energinivåene mellom -6.052 eV og -5.415 eV . Vi ser at båndbredden $E_N - E_1$ ikke endres nevneverdig.

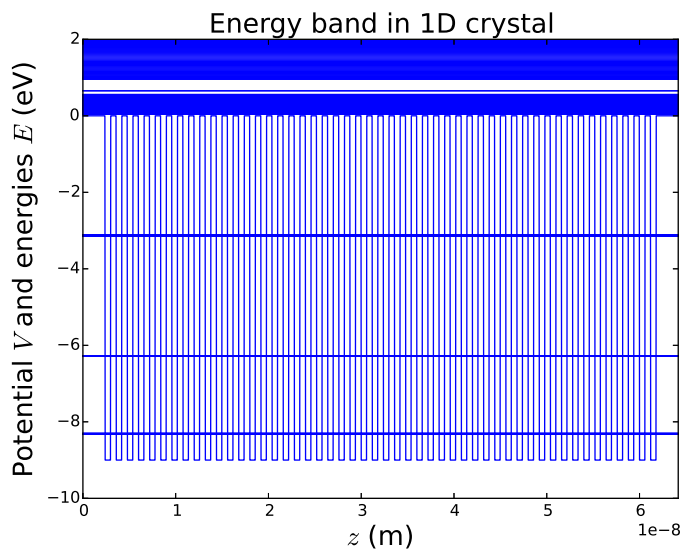
c) Båndbredden som funksjon av antall atomer:



d) Vi forventer at $g(E)$ skal avta som $1/\sqrt{E}$, der nullpunkt for energien E er ved bunnen av energibåndet. Programmet gir en tilstandstetthet, dvs avstand mellom nabonivåer, som er i samsvar med dette.

e) Figuren viser at $|\psi|^2$ er en funksjon med periodisiteten til gitteret (man kan telle nøyaktig 50 toppar, en for hvert atom) som er modulert med en langsomt varierende funksjon, der hele krystallens bredde ser ut til å tilsvare omtrent en halv bølgelengde for funksjonen $|\psi|^2$, dvs omtrent en kvart bølgelengde for bølgefunksjonen $\psi(x)$. Elektronet er for det meste nær atomkjernene, ettersom $|\psi|^2$ er relativt stor i brønnene og betydelig mindre i barriereområdene mellom brønnene. Fra side 103 i notatene har vi at ψ skal kunne skrives som produktet av en funksjon som er periodisk i gitteret, $u_k(x)$, og en plan bølge $\exp(ikx)$. Den raske variasjonen i figuren skyldes $|u_k(x)|^2$. Den langsomme "modulasjonen" skyldes $\exp(ikx)$, mer presist en stående bølge $\cos(kx)$ satt sammen av en plan bølge som vandrer i positiv x -retning og en som vandrer i negativ x -retning.

f) Vi vet at med en enkelt potensialbrønn så vil vi få flere bundne tilstander dersom vi f.eks øker brønnbredden. Da må vi også forvente flere energibånd med negative energiverdier ved å øke brønnbredden her. Eksempel: Med 50 atomer gir en økning fra 2 Å til 6 Å for både brønn- og barrierebredde 3 bånd, lokalisert ved ca -8.3 eV, -6.3 eV og -3.1 eV:



g) Siden Coulomb-potensialet går som $1/r$ (i tre dimensjoner), bør vi nok bruke et "glattere" potensial $V(x)$, som blir temmelig "dypt" i nærheten av hver atomkjerne.

h) Det er N romlige orbitaler i det laveste båndet, og disse vil alle være okkupert, av i alt $2N$ elektroner. Deretter vil nederste halvdel i bånd nr 2 være okkupert av N elektroner. De to elektronene med høyest energi vil ligge midt i bånd nr 2, med energi $(E_2^{\max} - E_2^{\min})/2$. Med stor N vil det være ledige tilstander *like over* dette nivået. Stoffet er dermed et metall.

i) Nå er laveste bånd helt fullt og neste bånd helt tomt. Høyeste okkuperte nivå (HOMO) har energien $E_1^{\max}$. Laveste ledige nivå (LUMO) har energien $E_2^{\min}$. Dette er dermed en isolator.

j) Jeg fikk et båndgap på ca 2 eV. Min krystall er da en halvleder.