

Øving 6

Veiledning: Fredag 28. februar
Innleveringsfrist: Tirsdag 4. mars

Oppgave 1: Tilstandstetthet

I forelesningene viste vi at dersom vi har $N(E)$ tilstander med energi i intervallet $[0, E]$, er *tilstandstettheten* $D(E)$, dvs antall tilstander pr energienhet, gitt ved

$$D(E) = \frac{dN(E)}{dE}$$

For frie elektroner i tre dimensjoner fant vi at $N(E)$ er proporsjonal med $E^{3/2}$, slik at tilstandstettheten gikk som $D(E) \sim \sqrt{E}$.

a) Bestem på samme måte $N(E)$ for frie elektroner i to dimensjoner (dvs $E_p = 0$ i området $0 \leq x \leq L$ og $0 \leq y \leq L$; ingen bevegelse i z -retningen) og i en dimensjon (dvs $E_p = 0$ i området $0 \leq x \leq L$; ingen bevegelse i y - og z -retningen), og vis at tilstandstettheten da blir proporsjonal med henholdsvis E^0 (dvs konstant, uavhengig av E) og $E^{-1/2}$.

Kommentar: Elektroner i to- og en-dimensjonale systemer er ikke bare teoretisk tankespinn! Det er fullt mulig, med avansert halvlederteknologi, å lage strukturer der elektronenes bevegelse er så sterkt avgrenset i en eller flere retninger slik at en essensielt har en elektrongass i to, en eller sågar null dimensjoner.

b) La oss gå tilbake til tre dimensjoner. Istedetfor antall tilstander pr *energienhet*, $D(E)$, er vi noen ganger interessert i antall tilstander pr *impulsenhet*, $D(p)$. Dersom impulsen p tilsvarener energien E , må vi opplagt ha

$$N(p) = N(E)$$

for antall tilstander med impuls i intervallet $[0, p]$. Bruk dette til å bestemme tilstandstettheten $D(p)$ i impulsrommet. Hva blir tilstandstettheten $D(k)$ i "bølgetallsrommet" (k -rommet, også kalt "det resiproke rom")?

Oppgave 2: Periodiske grensebetingelser

Vi har betraktet elektronene i et fast stoff som frie partikler i en “boks” med utstrekning $[0, L]$ i de tre retningene x , y og z . I forelesningene brukte vi grensebetingelsene

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

dvs at bølgefunksjonen ψ skulle forsvinne på boksens overflate. Da fant vi at bølgefunksjonene [den *romlige* delen, vi skriver ikke spinndelen eksplisitt her] ble stående bølger,

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}$$

der n_x , n_y og n_z alle var positive heltall.

Alternativt kan vi velge å bruke såkalte *periodiske grensebetingelser*. En tenker seg da at systemet gjentas med periode L i x -, y - og z -retning. Dermed må bølgefunksjonen oppfylle

$$\begin{aligned}\psi(x + L) &= \psi(x) \\ \psi(y + L) &= \psi(y) \\ \psi(z + L) &= \psi(z)\end{aligned}$$

som altså er det vi kaller periodiske grensebetingelser. Løsningen av Schrödingerligningen (fremdeles med $E_p = 0$) er nå plane bølger

$$\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i(k_x x + k_y y + k_z z))$$

og de periodiske grensebetingelsene medfører at komponentene av bølgetallsvektoren $\vec{k}$ må ha verdiene

$$\begin{aligned}k_x &= n_x \frac{2\pi}{L} \quad ; \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \\ k_y &= n_y \frac{2\pi}{L} \quad ; \quad n_y = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \\ k_z &= n_z \frac{2\pi}{L} \quad ; \quad n_z = 0, \pm 1, \pm 2 \dots\end{aligned}$$

a) Vis ved direkte innsetting at slike plane bølger er løsninger av Schrödingerligningen og bestem tilhørende energi $E(n_x, n_y, n_z)$.

b) I “ $\vec{n}$ -rommet” ($\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$) har vi 2 tilstander (husk: 2 spinnmuligheter pr romlig tilstand, spinn opp eller spinn ned) pr volumenhet, på samme måte som vi hadde med grensebetingelsen “ $\psi = 0$ på systemets overflate”. Imidlertid kan n_x , n_y og n_z nå, med periodiske grensebetingelser, ha vilkårlige heltallsverdier, inklusive de negative samt null. Dermed er vi ikke lenger begrenset til den positive oktanten, og det totale antall tilstander inne i ei kule med radius n i $\vec{n}$ -rommet blir nå $2 \cdot 4\pi n^3/3 = 8\pi n^3/3$, altså 8 ganger så mange som vi fant med grensebetingelsene “ $\psi = 0$ på systemets overflate”. Vis at antall tilstander med energi mindre enn E likevel blir uforandret, dvs

$$N(E) = \frac{V}{3\hbar^3\pi^2} (2mE)^{3/2}$$

($V = L^3$) slik at tilstandstettheten $D(E)$ blir den samme, uavhengig av hvilke typer grensebetingelser vi bruker.