TFY4215 Innføring i kvantefysikk. Institutt for fysikk, NTNU.
Løsningsforslag til øving 10.

Oppgave 1: 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 $-5.7537 \cdot 2$ eV $\simeq -11.507$ 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.

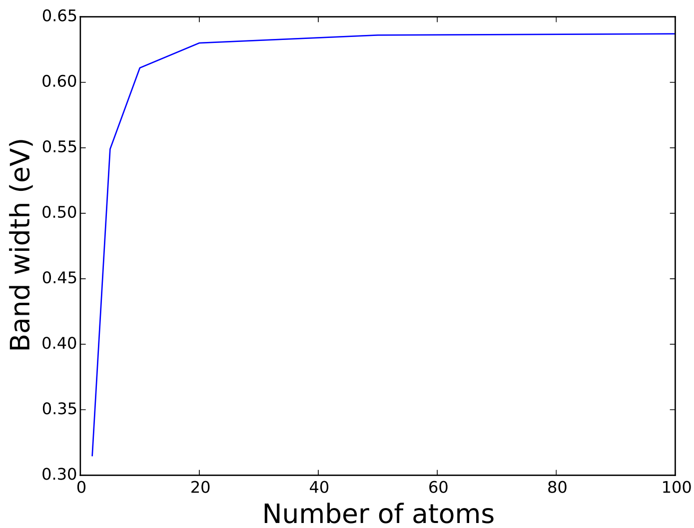
e) Molekylets totale energi i grunntilstanden er $-5.9069 \cdot 2$ eV $\simeq -11.814$ eV. Energigevinsten ved at to separate atomer danner et slik molekyl blir dermed 0.306 eV. Dette kan derfor sies å være (modell-)molekylets bindingsenergi.

Oppgave 2: 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.

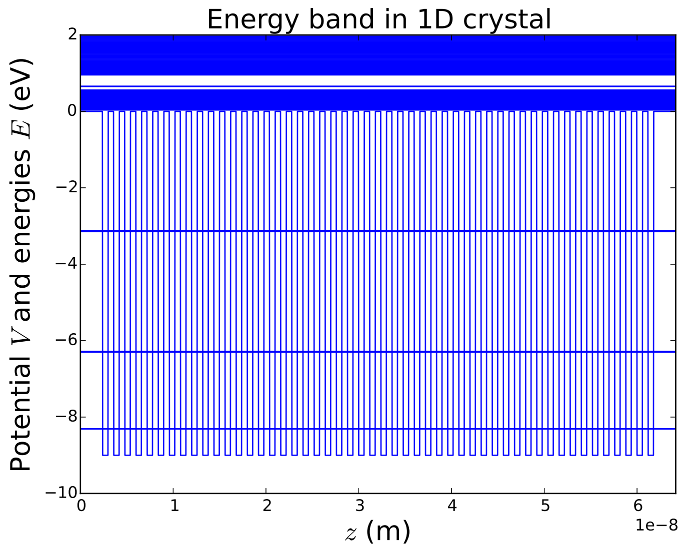
c) Båndbredden som funksjon av antall atomer:



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 topper, 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 Blochs teorem (kommer i senere kurs!) 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.