TFY4215 Innføring i kvantefysikk. Institutt for fysikk, NTNU.
Øving 10.

Oppgave 1: Endimensjonal modell for atom og toatomig molekyl

En endimensjonal modell med en eller to potensialbrønner gir bølgefunksjoner og energinivåer som *kvalitativt* kan belyse noe av det som skjer når to atomer slår seg sammen og danner et molekyl. I pythonprogrammet `singlewell.py` løses TUSL numerisk for en potensialbrønn med dybde $V_0 = -9$ eV og bredde $L = 2$ Å. I `doublewell.py` løses TUSL for et system der to potensialbrønner med dybde $V_0 = -9$ eV og bredde $L = 2$ Å er adskilt av et område med null potensial og bredde 2 Å. I begge tilfeller er det et område med null potensial og bredde 6 Å på hver side av hhv "atomet" og "molekylet". Bruk programmene slik de er, eller oversett dem til Matlab, for å besvare denne oppgaven.

a) Hva er energien til atomets ene bundne tilstand (grunntilstanden), i enheten eV?

b) Hva er energien til molekylets to laveste tilstander?

c) Anta at atomet har ett elektron, slik at molekylet har to elektroner. Hva er total energi til to separate atomer, begge i grunntilstanden?

d) Hvor mange elektroner er det "plass til" i hver av molekylets romlige tilstander? Hva blir molekylets totale spinn i grunntilstanden?

e) Hva er molekylets totale energi i grunntilstanden? Hvor stor er "energigevinsten" ved at to atomer slår seg sammen og danner et slik molekyl?

Oppgave 2: Endimensjonal modell for krystall

En endimensjonal modell med mange slike potensialbrønner som i oppgave 1 kan kvalitativt belyse hvordan elektroner har det i en krystall. I pythonprogrammet `krystall.py` løses TUSL numerisk for `Nunit` potensialbrønner med dybde $V_0 = -9$ eV og bredde $L = 2$ Å. Det utlagte programmet bruker 5 brønner ("atomer"). På venstre og høyre side er det et område med null potensial og bredde 8 Å. Atomene er adskilt med barrierer med null potensial og bredde 2 Å. Bruk programmet slik det er, eller oversett til Matlab, for å besvare oppgaven.

a) Vi observerte i oppgave 1 at med 2 atomer fikk vi 2 energinivåer i nærheten av grunntilstanden for enkeltatomet, et nivå med litt lavere energi og et nivå med litt høyere energi. Hvor mange energinivåer blir det omkring den atomære grunntilstanden med N atomer? Prøv med f.eks $N = 5$ (programmet som lagt ut) og $N = 10$. (NB: Varier parameteren `Nunit` i programmet. Parameteren `N` i programmet angir antall diskrete posisjonsverdier i hvert atom.)

b) Øk antall atomer og legg merke til hvordan antall energinivåer øker uten at differansen $E_N - E_1$ mellom største og minste energinivå øker tilsvarende. Vi får et *energibånd*, og med et stort antall atomer i krystallen blir det en tilnærmet kontinuerlig fordeling av energinivåer i energibåndet.

c) Kjør programmet for utvalgte atomantall N mellom 2 og 100 og skisser (for hånd) båndbredden $\Delta E = E_N - E_1$ som funksjon av N.

d) Velg 50 atomer og zoom inn på nederste halvpart av energibåndet. Er avstanden mellom nabonivåer som forventet, basert på det du vet om tilstandstettheten $g(E)$ i en dimensjon? (Se forelesningsnotater. Kommentar: Siden vi her har endelig dybde på brønnene og et endelig antall brønner, blir tilstandstettheten praktisk talt en symmetrisk funksjon som øker når vi nærmer oss båndkanten, både nederst og øverst.)

e) Fjern kommentartegnet i linjene 54 – 60 slik at $|\psi|^2$ plottes for tilstanden midt i båndet. Vil du hevde at et elektron i denne tilstanden stort sett befinner seg i en bestemt del av systemet, eller vil du si at det er litt "her og der"? Er elektronet for det meste nær atomkjernene, eller er det like gjerne midt mellom atomkjernene?

f) Ved å endre på en eller flere parametre i programmet kan du lage en modell som gir mer enn ett energibånd med negative energiverdier. Gjør dette. Forklar hva du har gjort og illustrer resultatet med en eller flere relevante figurer.

g) Foreslå hvordan du ville ha endret formen på potensialet $V(z)$ slik at det bedre ville ha beskrevet potensialet som et elektron opplever i en virkelig krystall. (Vi holder oss fortsatt i kun en dimensjon.)

h) Anta nå en situasjon der vi har to energibånd, nr 1 og 2, med minimum- og maksimumenergier hhv $E_1^{\min}$, $E_1^{\max}$ og $E_2^{\min}$, $E_2^{\max}$. (Og slik at $E_1^{\max} < E_2^{\min}$.) I hvert bånd har vi N romlige tilstander ("orbitaler"), like mange som antall atomer i krystallen. Anta at hvert atom har 3 elektroner, dvs i alt $3N$ elektroner i krystallen. Disse elektronene vil (ved tilstrekkelig lav temperatur, dvs i grunntilstanden) okkupere de $3N/2$ orbitalene med lavest energi, når vi tar hensyn til at det er plass til 2 elektroner i hver orbital, et med spinn opp og et med spinn ned. Hva blir energien til de to elektronene med høyest energi? (Kjemikere kaller denne tilstanden for HOMO, en forkortelse for *highest occupied molecular orbital.*) Dersom antall atomer N er riktig stort, hvor stor er energiavstanden fra HOMO opp til nærmeste ledige tilstand? (Denne tilstanden kalles gjerne LUMO, *lowest unoccupied molecular orbital.*) Er denne krystallen nå et metall eller en isolator?

i) Anta samme situasjon som i *h*), med to energibånd, men nå med N atomer med 2 elektroner hver. Hvor mange orbitaler vil nå være okkupert av elektroner i krystallens grunntilstand? Hva er energien til HOMO nå? Enn energien til LUMO? Er denne krystallen et metall eller en isolator?

j) Energidifferansen mellom LUMO og HOMO i forrige punkt tilsvarer det såkalte *båndgapet* i krystallen. Dersom båndgapet ikke er større enn et par tre elektronvolt, kalles stoffet ikke lenger en isolator, men en *halvleder*. Hvis du fikk til oppgave *f*): Er *din* krystall i oppgave *f*) en isolator eller en halvleder, når hvert atom har 2 elektroner?