QM i 2D og 3D

[PCH 5 ; DJG 4 ; IØ 5]

Harmonisk oscillator

[PCH 5.1 ; DJG Problem 4.39 ; IØ 5.1]

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z z^2\right)$$

$$= \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \quad ; \quad \hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 \text{ etc.}$$

TUSL har produktløsninger og separerer i 3 helt tilsvarende ligninger:

$$\psi(x,y,z) = \phi(x)\cdot\phi(y)\cdot\phi(z)$$

Divisjon av TUSL med ψ gir

$$E = \frac{\hat{H}\psi}{\psi} = \frac{\hat{H}_x\phi(x)}{\phi(x)} + \frac{\hat{H}_y\phi(y)}{\phi(y)} + \frac{\hat{H}_z\phi(z)}{\phi(z)}$$

$$= E_x + E_y + E_z$$

da hvert ledd på høyre side må være konstant.

$\Rightarrow \hat{H}_x\phi(x) = E_x\phi(x)$ og tilsv. for y og z

$\Rightarrow E = E_x + E_y + E_z = (n_x+\frac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y+\frac{1}{2})\hbar\omega_y + (n_z+\frac{1}{2})\hbar\omega_z$

med $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \ldots$

og med bølgefunksjoner $\phi_{n_x}(x)$, $\phi_{n_y}(y)$ og $\phi_{n_z}(z)$ som for 1D oscillator (s. 62).

Isotrop harmonisk oscillator:

Hvis $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$, er

$V(x,y,z) = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2+y^2+z^2) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 = V(r)$

Tilhørende kraft er da en sentralkraft,

$\vec{F} = -\nabla V = -\hat{r}\,\partial V/\partial r = -m\omega^2 r\,\hat{r}$

Energiegenverdier:

$E_N = (n_x + \frac{1}{2} + n_y + \frac{1}{2} + n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega = (N+\frac{3}{2})\hbar\omega \;;\; N = 0,1,2,\ldots$

Bølgefunksjoner:

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \left(2^N \cdot n_x!\, n_y!\, n_z!\right)^{-1/2} e^{-m\omega r^2/2\hbar} \cdot$$
$$\cdot H_{n_x}\left(\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) \cdot H_{n_y}\left(\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}\, y\right) \cdot H_{n_z}\left(\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}\, z\right)$$

Degenerasjon:

1D: Alltid 1 egenfunksjon $\psi_n(x)$ pr energiegenverdi E_n

2D, 3D: Når potensialet $V(\vec{r})$ har en viss symmetri, kan det være flere egenfunksjoner for gitt energi. Da er energinivået <u>degenerert</u>, med <u>degenerasjonsgrad</u>

$\boxed{g_N = \text{antall tilstander med energi } E_N}$

For isotrop harm. osc. i 3D:

$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega \;:\; \psi_{000} \;\Rightarrow\; g_0 = 1$

$E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega \;:\; \psi_{100},\ \psi_{010},\ \psi_{001} \;\Rightarrow\; g_1 = 3$

$\vdots$

$E_N = (N+\frac{3}{2})\hbar\omega$: For gitt $n_x = 0,1,\ldots,N$ kan vi ha $n_y = 0,\ldots,N-n_x$ som er $N-n_x+1$ mulige n_y for gitt n_x.

$$\Rightarrow g_N = \sum_{n_x=0}^{N} (N-n_x+1) = N+1+N+N-1+\ldots+3+2+1 = \frac{(N+2)(N+1)}{2}$$

Kan nå ha stasjonær tilstand som sum av flere egenfunksjoner med lik energi, f.eks for $N=1$:

$$\Psi_1(\vec{r},t) = \{c_x \psi_{100} + c_y \psi_{010} + c_z \psi_{001}\} e^{-iE_1 t/\hbar}$$

med $|c_x|^2 + |c_y|^2 + |c_z|^2 = 1$.

Partikkel i boks

[PCH 5.2; DJG Problem 4.2; IØ 5.3.1]

$V = 0$ for $0 < x_j < L_j$ $(j = x,y,z)$; $V = \infty$ utenfor

TUSL separerer, og $\psi = 0$ på de 6 grenseflatene

$$\Rightarrow \psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{2^3/L_x L_y L_z}\, \sin\frac{n_x \pi x}{L_x}\, \sin\frac{n_y \pi y}{L_y}\, \sin\frac{n_z \pi z}{L_z}$$

$$E_{n_x n_y n_z} = (\pi^2\hbar^2/2m)\left(n_x^2/L_x^2 + n_y^2/L_y^2 + n_z^2/L_z^2\right)$$

$$n_j = 1, 2, 3, \ldots \qquad (j = x,y,z)$$

Kubisk boks, $L_x = L_y = L_z$, gir degenerasjon:

$E_1 = E_{111} = 3\pi^2\hbar^2/2mL^2 \Rightarrow g_1 = 1$ $\qquad (E_1 = 3E_0)$

$E_2 = E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\pi^2\hbar^2/2mL^2 \Rightarrow g_2 = 3$

$E_3 = E_{221} = 9E_0$; $E_4 = E_{311} = 11E_0$; $E_5 = E_{222} = 12E_0$

$g_3 = g_4 = g_5 = 3$

$E_6 = E_{321} = 14E_0$; $g_6 = 6$

Eks 1: Hva er total energi for 10 ikke-vekselvirkende elektroner i grunntilstanden i en boks med sidekanter 30 Å? (78)

Løsn 1: Pga spinndegenerasjon $g_s = 2$ har vi 2 elektroner med energi $3\pi^2\hbar^2/2mL^2$, $2\cdot 3$ med energi $6\pi^2\hbar^2/2mL^2$ og de to siste med energi $9\pi^2\hbar^2/2mL^2$.

$$\Rightarrow E_{tot} = (6 + 36 + 18)\cdot \pi^2\hbar^2/2mL^2 = 30\pi^2\hbar^2/mL^2 = \underline{2.49\ eV}$$

Eks 2: Hvor tett ligger energinivåene for elektroner i en boks med $L = 1$ mm? (Dvs en makroskopisk boks.)

Løsn 2: $\Delta E \sim \pi^2\hbar^2/2mL^2 = 3.7\cdot 10^{-13}$ eV

Dvs, praktisk talt kontinuerlig spektrum.

<u>Tilstandstetthet (Density of states; DOS)</u> [PCH 5.2.2]

$$N(E) = \int_0^E g(E)\,dE = \text{\# tilstander mellom 0 og } E$$

$$g(E) = dN/dE = \text{\# tilst. pr energienhet}$$

1D: $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$

$\Rightarrow$ 2 tilst. ($g_s = 2$) pr lengdeenhet langs n-aksen

$$\Rightarrow N_1(E) = 2\cdot\sqrt{2mL^2E/\pi^2\hbar^2} = \text{\# tilst. på } (0, E)$$

$$\Rightarrow g_1(E) = dN_1/dE = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} L\cdot E^{-1/2} = \text{DOS i 1D}$$

Pr lengdeenhet: $\frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} E^{-1/2}$

2D: $E = (n_x^2 + n_y^2)\pi^2\hbar^2/2mL^2$

$\Rightarrow$ 2 tilst. pr flateenhet i (n_x, n_y)-planet

$\Rightarrow N_2(E) = 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \pi (n_x^2 + n_y^2) = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2} \cdot E$

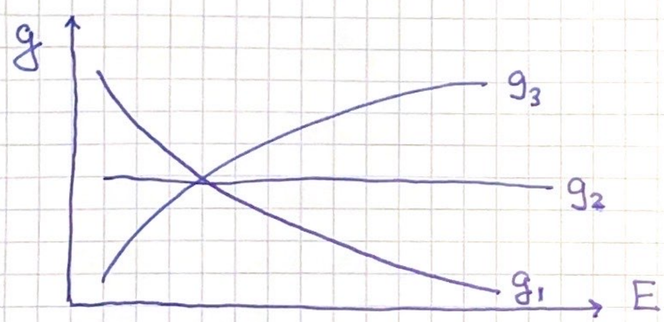
$\Rightarrow g_2(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \cdot L^2$ = DOS i 2D ; uavh. av E

3D: $E = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\pi^2\hbar^2/2mL^2$

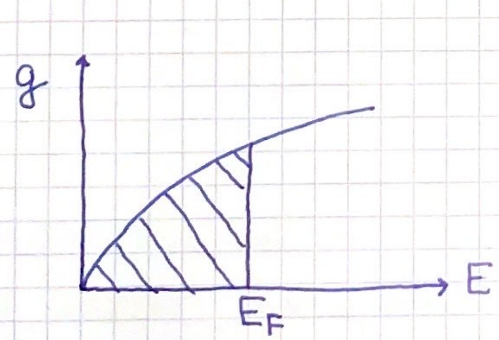
$\Rightarrow$ 2 tilst. pr volumenhet i (n_x, n_y, n_z)-rommet

$\Rightarrow N_3(E) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2} = \frac{\pi}{3}\left(\frac{2mL^2E}{\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2}$

$\Rightarrow g_3(E) = \frac{\sqrt{2}\, m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \cdot L^3 \cdot E^{1/2}$ = DOS i 3D

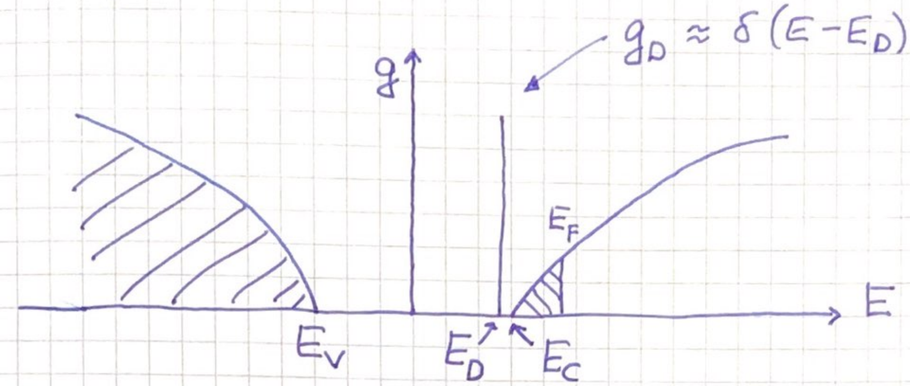


Et materiale leder strøm ($\sigma > 0$; $\vec{j} = \sigma \cdot \vec{\mathcal{E}}$) når det er ledige tilstander like over okkuperte tilstander. Metall:

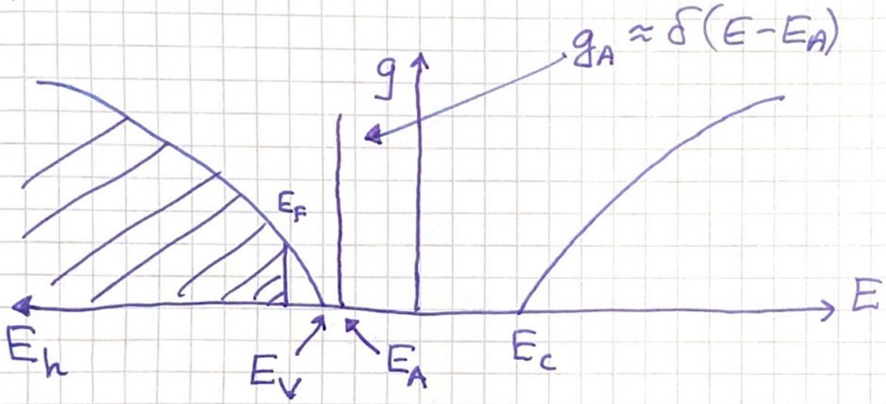


Høy tilstandstetthet ved E_F (Fermienergien) gir høy ledningsevne σ

n-type halvleder:

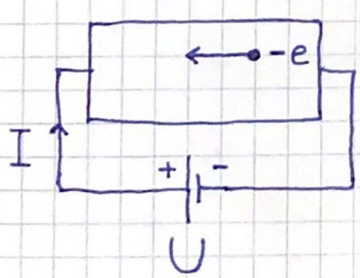


p-type halvleder:

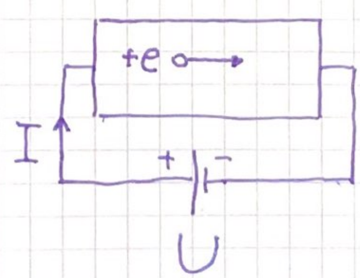


Elektroner / hull eksiteres fra E_D / E_A
til ledningsbånd / valensbånd.
Materialet blir "svakt metallisk".

n-type: $n \gg p$



p-type: $p \gg n$



$g(E_F)$ mye mindre i halvleder enn i metall
$\Rightarrow$ mindre ledningsevne i halvleder enn i metall