

# Kvantbrunnar - Kvantiserade energier och tillstånd

## Inledning

Syftet med denna laboration är att undersöka kvantiseringen av energitillstånd i kvantbrunnar. Till detta används en java-applet som hittas på adressen

[www.ee.buffalo.edu/faculty/cartwright/java\\_applets/quantum/numerov/index](http://www.ee.buffalo.edu/faculty/cartwright/java_applets/quantum/numerov/index)

(se Appendix A för en kortfattad användarhandledning). Denna numeriska lösningsmetod är ett komplement till den analytiska lösningsmetoden som presenteras i kursboken. Innan laborationen ska ni läsa s. 65 - 81 i kursboken och svara på förberedelsefrågorna i detta labbkompedium. I detta kompendium finns en kort överblick/sammanfattning av avsnitt i boken som är särskilt viktiga för denna laboration samt en liten utvidgning av kursboken.

## Partiklars de Broglie våglängd och kinetiska energi

Från de Broglie-relationen följer

$$p = h/\lambda_{dB}, \quad (1)$$

där  $p$  är rörelsemängden,  $h$  Plancks konstant och  $\lambda_{dB}$  de Broglie-våglängden för en partikel. Rörelseenergin för en partikel är

$$E_k = p^2/2m, \quad (2)$$

där  $m$  är partikelns massa.

## Allmänt om kvantbrunnar och kvantisering

En kvantbrunn är en struktur som uppstår inom kvantmekaniken då potentialen som en partikel upplever har en sänka. I figur 1a) visas potentiallandskapet för en kvantbrunn av bredd  $a$  och djup  $V_0$ . I en kvantbrunn är endast vissa särskilda energier tillåtna. Vi anger dessa med  $E_i$  där  $E_{i+1} \geq E_i$ . Till energi  $E_i$  finns motsvarande vågfunktion  $\varphi(x)$ , som vi kallar det  $i$ :te tillståndet (eller nivån) i kvantbrunnen. Figur 1b) visar en skiss av energierna för första och andra tillståndet ritade på samma axlar som potentialen. Antalet tillstånd och deras energier i brunnen beror på  $a$ ,  $V_0$  och partikelns massa  $m$ .

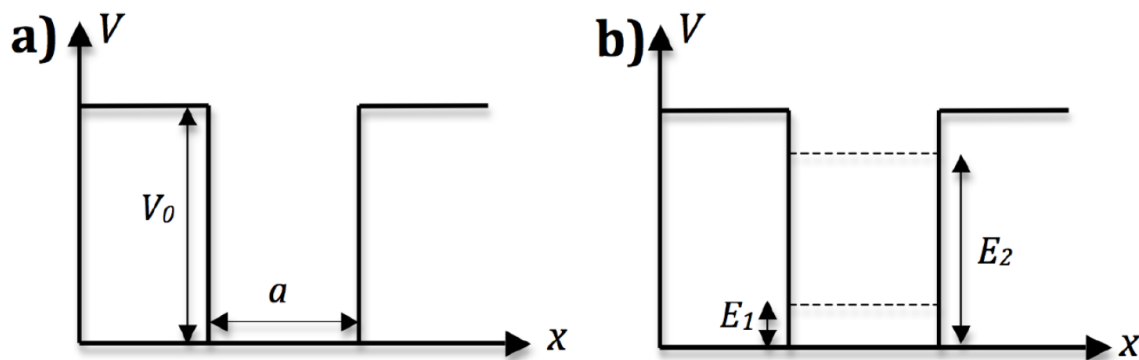


Figure 1: a) Potentialen i en ändlig kvantbrunn. Kvantbrunnens bredd är  $a$  medan djupet är  $V_0$ . b) De två lägsta energinivåerna inritade i samma figur som potentiallandskapet.

## Ljusutsändning

Då en elektron i en kvantbrunn övergår från en högre energinivå till en lägre energinivå sänds ljus ut. Energin  $E_{ph}$  för fotonen som sänds ut ges av skillnaden mellan de två nivåernas energi, se figur 2, och ges explicit av

$$E_{ph} = E_2 - E_1. \quad (3)$$

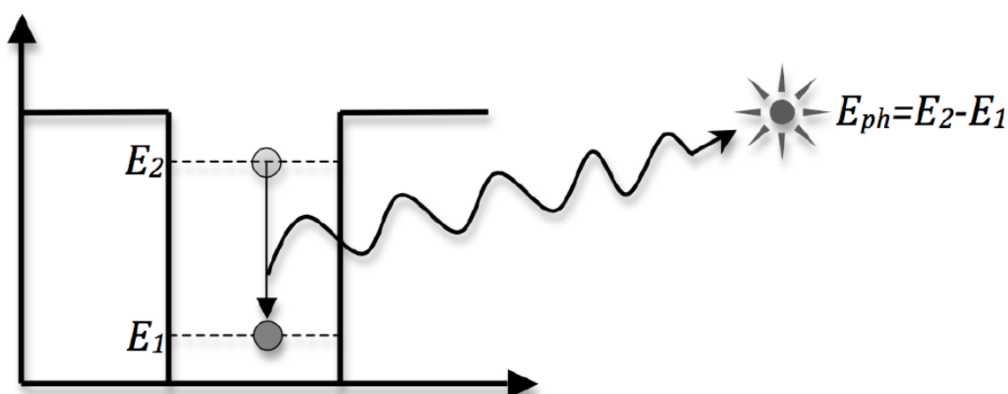


Figure 2: Övergång mellan andra och första nivån med utsändning av en foton.

## Temperaturpåverkan på kvantisering (Utvidgning från kursboken)

Omgivningens temperatur påverkar möjligheten att upptäcka kvantiseringen av tillstånd. Vid temperaturen  $T$  är en uppskattning av den termiska energin i omgivningen

$$E_T = k_b T \quad (4)$$

där  $k_b = 1.3806503 \cdot 10^{-23}$  J/K är Boltzmanns konstant. Ett approximativt krav för att kunna urskilja två kvantiserade nivåer är att energiskillnaden mellan dem är större än den termiska energin, dvs

$$E_{i+1} - E_i > E_T \quad (5)$$

ska gälla för att man ska kunna urskilja tillståndet  $i + 1$  från tillstånd  $i$ .

## Uppgifter

För denna laboration krävs inte inlämning av en skriftlig rapport. Under det schemalagda laborationstillfället ska ni redovisa uppgifterna

0 a) - 0 h), 1 c), 1 e) - f), 2 a) - c) och 3 c) (markerade med en asterisk)

till valfri handledare i datorsalen för att bli godkänd på momentet. Innan laborationen ska ni läsa s. 65 - 81 i kursboken och göra uppgift 0 a) - h).

## 0) Förberedelseuppgifter

\*a) Härled två uttryck för hur  $\lambda_{dB}$  beror av den kinetiska energin  $E_k$  för en partikel med massan  $m$ . I det första uttrycket ska man kunna ange massan i  $kg$  och energin i  $J$  och få ut våglängden i  $m$ . I det andra uttrycket ska man istället kunna använda  $m_e$  och  $eV$  och få ut våglängden i  $nm$  ( $m_e$  är elementarmassan för en elektron). Tips: baka in enhetsomvandlingarna i uttrycken och klumpa ihop alla konstanter.

\*b) Lös uppgift 1.4 i kursboken. Lös även för värdet  $E_k = 0.1 eV$ .

\*c) Vad är förhållandet mellan en fotonens energi och dess våglängd? Ta fram två uttryck med motsvarande enheter som i 0 a) ovan.

\*d) Synligt ljus har våglängder i området  $380 nm < \lambda < 750 nm$ . Vilka fotonenergier motsvarar detta?

\*e) Vilket  $\lambda_{dB}$  motsvarar energierna i uppgift 0 d), för en elektron ( $m = m_e$ )? För en proton ( $m \simeq 1836 \times m_e$ )?

\*f) Vad är den termiska energin  $E_T$  vid rumstemperatur ( $T=300 K$ ) uttryckt i joule? Uttryckt i elektronvolt?

\*g) Den termiska energin består av fotoner. Hur beror fotoners våglängd på  $E_T$ ? Ge ekvationen och räkna våglängden för typiska temperaturer: Rumstemperatur:  $300 K$ , Flytande helium:  $4 K$ , Cryocooler:  $100 mK$ , och Sol:  $5800 K$ ? Vilka färger motsvarar detta?

\*h) Gör uppgift 4.1 i kursboken.

## 1) Uppvärmning

Vi börjar bekanta oss med java-appleten genom att studera en fri elektron ( $m = m_e$ ) i en kvantbrunn. Tanken med samtliga övningar är att ni INTE ska räkna ut svaren med hjälp av ekvationer utan att ni ska använda appleten och på så sätt undvika att lösa ekvationer. Tanken är att med hjälp av appleten kan ni då visualisera och förstå samband mellan olika koncept. Ni behöver alltså inte leta efter exakta värdesiffror utan hellre se kopplingar mellan t.ex en kvantbrunns höjd och bredd och antalet tillåtna tillstånd i brunnen.

a) Vilket värde har  $\lambda_{dB}$  för en elektron som har  $E_k = 0.1 \text{ eV}$ ?

b) Använd java-appleten till att räkna fram de första 5 tillstånden för brunnsbredden  $a = \lambda_{dB}$  och  $V_0 = 2 \text{ eV}$ . *Prata gärna med handledaren för tolkningen av resultaten från java—appleten innan ni fortsätter med c)-e).*

\*c) Hur påverkas  $E_1$ ,  $E_2$  och  $E_3$  av  $V_0$ ? (Tips: Använd Matlab för att plotta  $E_1$ ,  $E_2$  och  $E_3$  för varierande  $V_0$ . Börja till exempel med  $V_0 = 0.2 \text{ eV}$  och öka  $V_0$ .)

d) Studera  $\varphi_1(x)$  för varierande  $V_0$ . Vad är största skillnaden i  $\varphi_1(x)$  mellan  $V_0 = 2E_1$  och  $V_0 = 10E_1$ ? Vad förväntar ni er ska hända då  $V_0 \rightarrow \infty$ ?

\*e) Studera  $\varphi_1(x)$ ,  $\varphi_2(x)$  och  $\varphi_3(x)$  för en djup brunn. Går det ur detta säga om något av tillstånden borde ha energin som användes i 1 a)? Går det att säga något om energin för de andra tillstånden?

\*f) Hur ser  $E_1$  och  $E_2$  ut som funktion av  $a$  för fixt  $V_0$ ? (Tips: Plotta i Matlab.)

## 2) Antalet tillstånd i brunnen

\*a) För  $a = 3 \text{ nm}$  och  $V_0 = 1 \text{ eV}$ , vilka  $m$  ger endast ett tillstånd i brunnen?

\*b) För  $m = m_e$  och  $V_0 = 1 \text{ eV}$ , vilka  $a$  ger endast ett tillstånd i brunnen?

\*c) För  $m = m_e$  och  $a = 3 \text{ nm}$ , vilka  $V_0$  ger endast ett tillstånd i brunnen?

## 3) Partiklar av olika massa

a) Använd samma brunn som i 1 b). Hur förändras energierna av de tre lägsta nivåerna om partikeln istället är en proton?

b) Vad är  $\lambda_{db}$  för protonen om i)  $E_k = E_1$ , ii)  $E_k = E_2$ , iii)  $E_k = E_3$ ?

\*c) Sätt  $V_0 = 2 \text{ eV}$ . Vilken brunnsbredd krävs för en fri elektron för att man ska kunna urskilja första och andra nivån vid rumstemperatur? För en proton?

## Fördjupande uppgifter som rekommenderas i mån av tid

### 4) Kvantbrunn i högre dimensioner

Man kan även utöka kvantbrunnen till två- och tre dimensioner (se t.ex. s. 85-89 i kursboken). För en kvantbrunn i två dimensioner beror energin och vågfunktionen på två kvanttal  $n_x$  och  $n_y$ . Ett nytt fenomen är att två olika vågfunktioner (olika kombinationer av  $n_x$  och  $n_y$ ) kan ha samma energi. Detta kallas degenereration och är relaterat till symmetrier hos potentialen.

a) Använd java-appleten

[www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/simulations\\_html5/sims/infwell2d/infwell2d](http://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/simulations_html5/sims/infwell2d/infwell2d)

för att studera energi och vågfunktion för en oändlig kvantbrunn i två dimensioner. Studera hur degenerationen skiljer sig mellan en kvadratisk brunn och en rektangulär brunn.

b) Testa sedan dina kunskaper genom att svara på frågor under fliken Challenges i java-appleten.

### 5) Störningsteori och ljusutsändning

Vi kan lägga till en liten förändring till den oändliga kvantbrunnen så att brunnen inte längre har en helt rak botten. En sådan liten förändring kallas ofta för en "störning" ("perturbation" på engelska) av den ursprungliga kvantbrunnen. Gå in och studera appleten på:

[www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/simulations\\_html5/sims/perturbationGame/perturbationGame](http://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/simulations_html5/sims/perturbationGame/perturbationGame)

a) Välj den andra störningen (en upphöjning symmetrisk kring brunnens mitt). Vad händer med brunnens energier när störningspotentialens styrka ökas? Hur påverkas udda respektive jämna tillstånd?

b) Välj den fjärde störningspotentialen. Vad händer med brunnens energier när störningspotentialens styrka ökas? Hur påverkas udda respektive jämna tillstånd? Kan ni ge någon förklaring till detta?

c) Välj fliken "Perturbation game" högst upp och spela spelet som handlar om fotonabsorption! Vilken våglängd har fotonen som absorberas i brunnen om  $E_1 = 0.78 \text{ meV}$ ? Vilken färg har detta ljus?

## A) Appendix - Användning av java-appleten

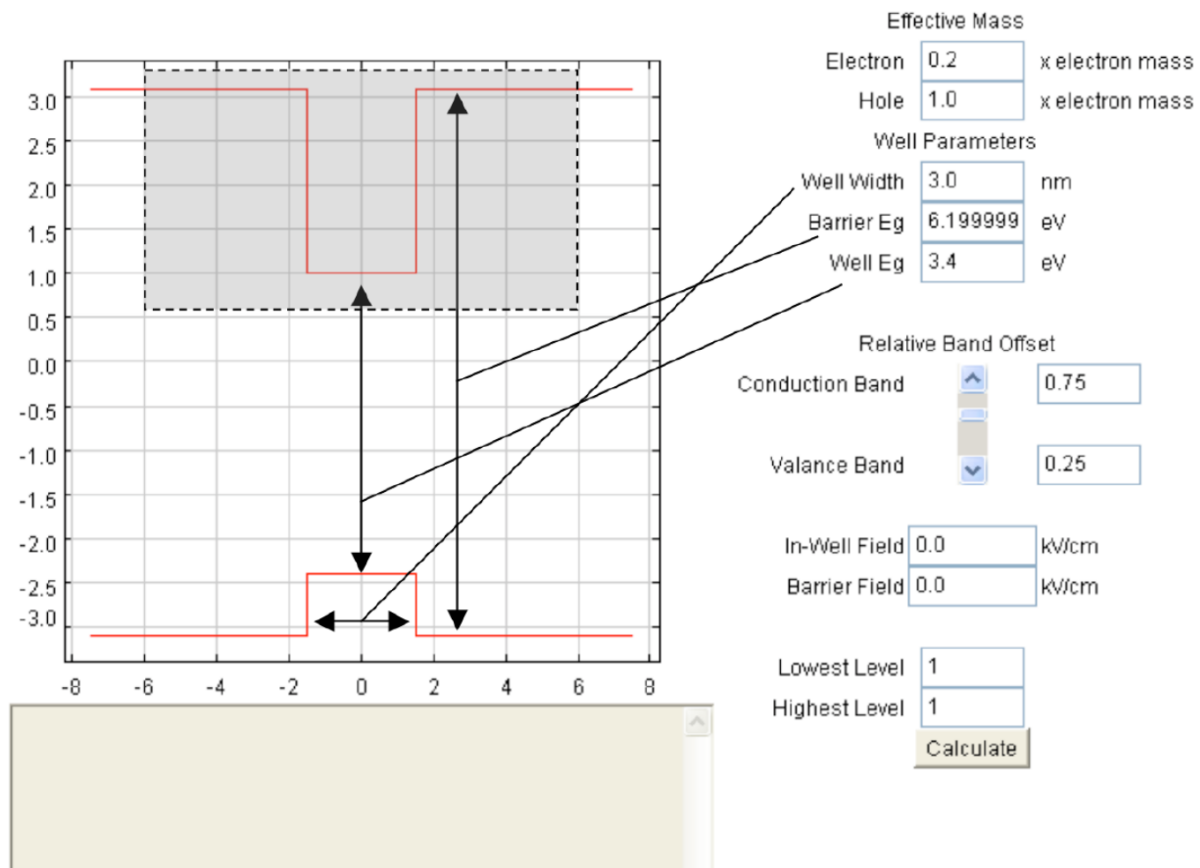


Figure 3: Java-appletens användargränssnitt med skuggade området inritat som markerar området som är relevant för denna laboration. Pilarna är inritade för att markera vad de olika brunnparametrarna anger.

Java-appleten som används i den här laborationen räknar fram både elektron- och håltillstånd i en heterostruktur. En sådan heterostruktur kan skapas genom att lägga in en halvledare med lägre bandgap mellan halvledare som har högre bandgap (se t.ex. fig. 4.2, s. 66 i kursboken). Om bandgapens storlek och position är sådana att hela det lägre bandgapet ryms innanför det högre bandgapet skapas en brunn för både elektronerna och hålen.

Användaren av appleten har möjlighet att ange både elektronernas och hålens massa. Vidare får användaren bestämma de olika bandgapen, deras relativa position, och brunnens bredd. Möjlighet finns att lägga på ett elektriskt fält i brunnen också. Genom att tryck på “Calculate” räknas elektronernas och hålens tillstånd fram och dessa ritas i samma figur som strukturen visas i. Tillståndens energi anges i textrutan nedanför figuren. Antalet tillstånd som beräknas och ritas justeras med “Lowest Level” och “Highest Level”.

Vi är intresserade av kvantiseringen och tillstånden i en kvantbrunn. Denna applet kan då användas för den här laborationen om vi koncentrerar oss på det skuggade området i Figur 3. De relevanta framräknade energierna och tillstånden i appleten är i detta fall elektrontillstånden och visas i fönstret under graferna.