

Nezavisne čestice u vanjskom potencijalu

Listopad 2008.

Za svaki od navedenih potencijal potrebno je:

- Nacrtati potencijal (ili presjek/profil) u prikladnom koordinatnom sustavu
- Odrediti sačuvane fizikalne veličine i odgovarajuće kvantne brojeve
- Riješavanjem (nakon separacije varijabla) Schrodingerove jednadžbe izračunati analitički/numerički valne funkcije i energije čestice u zadanom potencijalu
- Definirati karakteristične veličine i bezdimenzionalne parametre u sistemu
- Nacrtati i diskutirati karakter rješenja, eventualno u ovisnosti o parametrima sistema/potencijala.
- Pokušati naći i opisati fizikalnu situaciju u kojoj bi taj potencijal bio dobar opis sistema. Odredite odgovarajuće veličine parametara.
- Izračunati i nacrtati:
 - a) lokalnu gustoću stanja
 - b) gustoću stanja
 - c) lokalnu gustoću
- Dobivene rezultate (ako je to moguće) usporediti s onima dobivenim pomoću WKB ili varijacijske metode.

Poželjno je da seminarski rad ima strukturu znanstvenog članka, dakle da ima:

1. Naslov,
2. Autori, mjesto, datum,
3. Sažetak,
4. Uvod,
5. Matematička formulacija fizikalnog problema,
6. Rezultati i diskusija,
7. Zaključak,
8. Literatura.

1. Elektroni se nalaze u metalu kojemu je u ravnini $z = 0$ odrezana površina (tzv. polubeskonači metal). U najjednostavnijoj aproksimaciji ionski dio takavog metala opisujemo pozitivnom distribucijom naboja:

$$n^+(x, y, z) = n_0 \theta(-z)$$

gdje je n_0 prosječna volumna gustoća elektrona i elektronima koji osjećaju efektivni potencijal oblika:

$$V(x, y, z) = [E_F + \phi] \theta(z - a)$$

gdje je E_F Fermijeva energija, a ϕ izlazni rad. Varirajte parametar a dok ne postignete nabojnu neutralnost sistema.

2. Metalni sloj (slično kao i u zadatku (1)) možemo modelirati kao pozitivnu gustoću naboja:

$$n^+(x, y, z) = n_0 \begin{cases} 1; & |z| < a \\ 0; & |z| \geq a \end{cases} \quad (1)$$

i elektrone koji osjećaju efektivni potencijal oblika:

$$V(x, y, z) = [E_F + \phi] \begin{cases} 1; & |z| < b \\ 0; & |z| \geq b \end{cases}$$

Varirajte parametar b kako bi postigli nabojnu neutralnost sistema.

3. Elektroni se nalaze u potencijalu $2D$ dielektrične ploče koja je nabijena površinskim nabojem σ . Potencijal ploče je oblika:

$$V(x, y, z) = \gamma |x|$$

odredite parametar γ .

4. Gibanje elektrona u cilindričnoj kvantnoj točki možemo opisati sljedećim potencijalom:

$$V(\rho, z, \phi) = \frac{\hbar\omega_0^2}{2} \rho^2 \begin{cases} 0; & 0 < z < L \\ V; & z \geq L \end{cases}$$

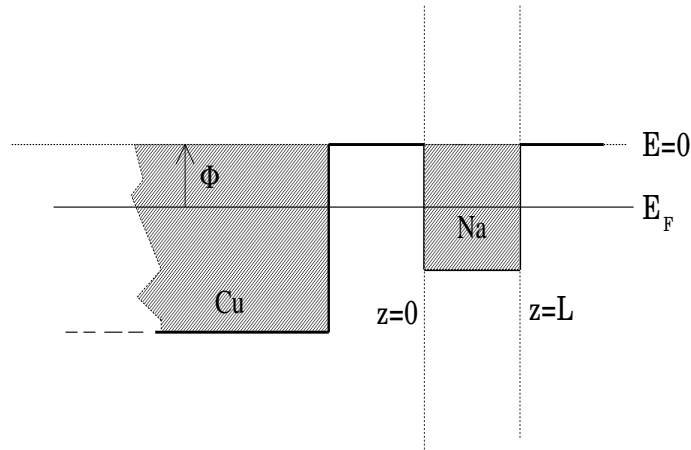
5. Gibanje elektrona u kvantnoj žici možemo opisati sljedećim potencijalom:

$$V(\rho, z, \phi) = \begin{cases} 0; & 0 < \rho < R \\ V; & \rho \geq R \end{cases}$$

6. Nekoliko monoslojeva atoma natrija tvore kvantnu jamu koju teorijski možemo modelirati potencijalom oblika:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} E_F + \phi; & z \leq 0 \\ 0; & 0 < z \leq L \\ E_F + \phi; & z > L \end{cases} \quad (2)$$

Međutim utjecaj podloge (obično (111) površina bakra na koji se u praksi nanose ultra tanki slojevi atoma natrija) na slijedeći način modificira potencijal (2) (slika (Sl.1)):



Slika 1:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & ; z \leq -a \\ V; & -a < z \leq 0 \\ 0; & 0 < z \leq L \\ E_F + \phi; & z > a + L \end{cases}$$

Odredite koliki je utjecaj podloge na pomak i raspad stanja kvantne jame.

7. Elektron koji se nalaze u blizini površine plemenitog metala (srebro, zlato) osim potencijala slike osjeća (zbog procijepa u vrpici plemenitog metala) beskonačnu barijeru za ulazak u metal. Taj potencijal možemo modelirati sljedećom funkcijom:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} \infty; & z \leq 0 \\ -e^2/4z; & z \geq 0 \end{cases} \quad (3)$$

Elektroni koji popunjavaju stanja potencijala (3) tzv. *površinska stanja* tvore 2D elektronski plin.

8. Elektron je zarobljen u potencijalu oblika:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{e}{\epsilon_0 r}; & r \leq R \\ V_0; & r \geq R \end{cases}$$

gdje je V_0 pozitivna konstanta.

9. Elektron je zarobljen u potencijalu oblika:

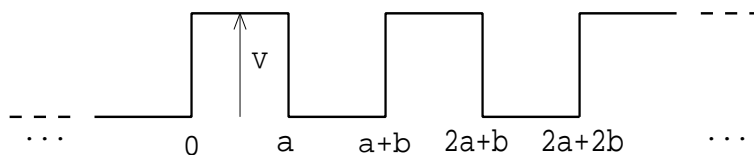
$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & ; r < R \\ -\frac{e}{\epsilon r}; & r \geq R \end{cases}$$

10. Klaster atoma jednostavnih metala (Na, K, Li, ..) ima sfernu simetriju i možemo ga predočiti potencijalom oblika:

$$V(r) = [E_F + \phi] \theta(r - R)$$

gdje su E_F i ϕ Fermijeva energija i izlazni rad alkalijskih metala. Pretpostavimo da je rub ionske pozadine na $r = R_0$. Varirajte parametar R kako bi postigli nabojnu neutralnost metalnog klastera.

11. Elektron se nalazi u 1D Kronig-Penneyevom potencijalu (Sl.2) koji simulira potencijal 1D kristalne rešetke. Odredite elektronsku disperziju i gustoću stanja. Nacrtajte $\psi_k(x)$ i $|\psi_k(x)|^2$ za karakteristične slučajeve.



Slika 2:

12. Elektron se nalazi unutar kondenzatora, tj između dviju metalnih elektroda koje za elektron predstavljaju beskonačne barijere te između koji postoji razlika potencijala V .
13. Elektron se nalazi u sfernosimetričnom potencijalu oblika

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 \left(1 - \frac{r}{a}\right); & r \leq a \\ 0; & r > a \end{cases}$$

Mjenjajte parametar a .

14. Elektron je zarobljen u šupljem cilindru duljine L , unutarnjeg polumjera R_1 i vanjskog polumjera R_2 .
15. Elektron se nalazi u metalnom cilindru, ali unutar njega nije slobodan već u ρ smjeru osjeća potencijal oblika

$$V(\rho) = \frac{1}{2}m\omega_0^2\rho^2$$

16. Dva atoma plemenitog plina interagiraju putem Lennard-Jonesovog potencijala

$$V(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right\}$$

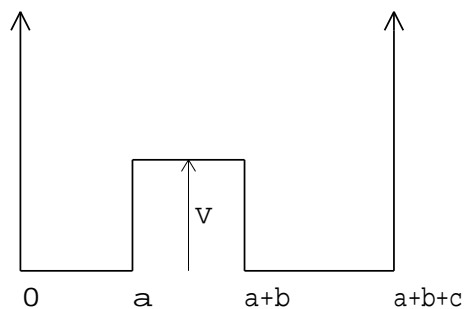
Nakon što problem analitički/numerički riješite egzaktno uradite harmoničku aproksimaciju i aproksimaciju krutog rotatora te odredite vibraciona, tj. rotaciona stanja.

17. U najgrubljoj aproksimaciji atomi vodika koji sudjeluju u vodikovoj

vezi osjećaju potencijal oblika

$$V(x) = \begin{cases} \infty; & x \leq 0 \\ 0; & 0 < x \leq a \\ V; & a < x \leq a+b \\ 0; & a+b < x \leq a+b+c \\ \infty; & x > a+b+c \end{cases}$$

gdje je $V > 0$ (Sl.3)



Slika 3:

Odredite energijske nivoe te dipolni moment u osnovnom stanju. Odredite vremensko odvijanje sistema ako je atom vodika u $t = 0$ bio opisan osnovnim stanjem lijeve jame.

18. Elektron s lijeva nalijeće na dvostruku potencijalnu barijeru:

$$V(x) = \begin{cases} 0; & x \leq 0 \\ V_1; & 0 < x \leq a \\ 0; & a < x \leq b \\ V_2; & b < x \leq c \\ 0; & x > c \end{cases}$$

gdje je $c > b > a > 0$. Izračunajte kefcijent transmisije. Nacrtajte valne funkcije za kartakteristične energije. Objasnite rezonantne efekte.

19. Pretpostavite da se negativno nabijena čestica mase $M = 200m_e$ i naboja e giba u potencijalu koji stvara homogena pozitivno nabijena kugla radijusa $R = 10^{-4}A$ i naboja $100e$. Izračunajte energijske nivoe i valne funkcije vezanih stanja te napravite usporedbu sa rezultatima koje biste dobili kad bi promatrana čestica bila elektron.
20. Elektron se giba prostorom i biva uhvaćen u potencijal makroskopske molekule (npr. fuleren C_{60}) neto naboja $Q = 1e$. Pretpostavimo da molekulu aproksimiramo homogenu nabijenom sferičnom ljuskom radijusa $r_0 = 10A$ i koja za elektron predstavlja beskonačno repulzivni potencijal. Odredite energijske nivoe te radijalnu distribuciju vjerojatnosti elektrona.
21. Izračunajte energije i valne funkcije za česticu koja se nalazi u $3D$ potencijalnoj jami oblika:

$$V(r) = -V_0 e^{-\frac{r}{a}}$$

22. Izračunajte energije i valne funkcije čestice koja se nalazi u centralno-simetričnom potencijalu oblika:

$$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2,$$

gdje su $A, B > 0$. Nacrtajte potencijal, a preko njega energije i valne funkcije.

23. Izračunajte energije i valne funkcije čestice koja se nalazi u centralno-simetričnom potencijalu oblika:

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}.$$

24. Elektron se giba u potencijalu anizotropnog harmoničkog oscilatora. Dakle, općenito vrijedi $\omega_x \neq \omega_y \neq \omega_z$. Analizirajte slučajeve:

a) $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$ te usporedite s degeneracijom energijskih nivoa u cilindričnom sustavu.

b) $\omega_x = \omega_y = \omega_z$ te usporedite s degeneracijom energijskih nivoa u sferičnom sustavu.

25. Elektron dolazi s lijeva i nailjeće na potencijal oblika:

$$V(x) = \begin{cases} 0; & x < -a \\ V_0; & -a \leq x < 0 \\ -V_1; & 0 \leq x < b \\ 0; & x > b \end{cases}$$

gdje su V_0 , V_1 , a i b pozitivni realni brojevi. Odredite koeficijent transmisije i analizirajte razne rezonantne efekte.