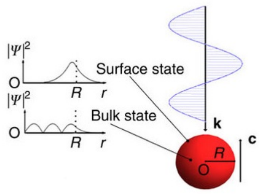
Ηλεκτρόνιο σε σφαιρικό νανοσωματίδιο

Νικάνδρα Παπακώστα
AM 1077

1 Μαΐου 2017

Στόχος



Προκειμένου να μπορέσουμε να υπολογίσουμε διάφορες φυσικές (πχ ηλεκτρικές) ιδιότητες των ναναυλικών θα πρέπει να μελετήσουμε την συμπεροφορά ενός ηλεκτρονίου σε ένα νανοσωματίδιο. Το απλούστερο μοντέλο που θε μπορούσαμε να κάνουμε είναι να προσομοιώσουμε το ηλεκτρόνιο στο νανασωματίδιο με ένα ηλεκτρόνιο εντός ενός ελκτικού σφαιρικού πηγαδιού με χαρακτηριστικά που δίνονται από αυτά του νανοσωματιδίου, διαστάσεις της σφαίρας αυτές του νανοσωματιδιού και βάθος του πηγαδιού που καθορί΄ζεται από κάποια 'μέση τιμή των ενεργωιών που προε΄χρχοναται από το ελκτικό φορτίο του νανοσωματιδίου και ιόντα αλλά και απωστική από γειτονικά ηλεκτρόνια και ιόντα'. Συνεπώς θα μελετήσουμε τις δέσμιες καταστάσεις σωματιδίου σε απείρου βάθους σφαιρκό πηγάδι αλλά και σε ένα πεπερασμένου βάθυς πηγάδι. Οι καταστάσεις αυτές περιγράφουν ένα ηλεκτρόνιο που παραμέμενει πάντα σε ένα ' άτομο' ή ένα ηλεκτρόνιο που μπορεί να παραμένει κοντά σε ένα ατόμο με τη δυνατότητα να μεταπηδήσει σε ένα γειτονικό, δίχως όμως να διαφεύγει σε γειτονικά άτομα καθιστάμενο τελικά ελεύθερο.

Μαθηματική διατύπωση

Το πρόβλημα εκφράζεται με την αναζήτηση λύσεων της εξίσωσης Schr΄odinger σε σφαρικές συντεταγμένες με την ακόλουθη μορφή για την κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου Ψ και εισάγουμε τις ποσότητες με διαστάσεις μήκους

$$\lambda_0^2 = \frac{\hbar^2}{2mE}, \qquad \lambda_1^2 = \frac{\hbar^2}{2m(V_0)}\lambda^2 = \frac{\hbar^2}{2m|E|}$$

Η δε σφαιρική συμμετρία μας επιτρέπει να θεωρήσουμε ότι η κυματοσυνάρτηση γράφεται στη μορφή

$$\Psi(\underline{x}) = \Psi_\ell(r)\Upsilon_{\ell,m}(\theta)e^{im\phi}$$

- ηλεκτρόνιο σε απειρόβαθο πηγάδι

$$R_{\ell,rr} + \frac{2}{r}R_{\ell,r} + \left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{1}{\lambda_0^2}\right)R_\ell = 0$$

  με συνοριακές συνθήκες

$$R_\ell(0) < \infty, \qquad R_\ell(\rho) = 0$$

- Για το πεπερασμένου βάθους πηγάδι η εξίσωση είναι στο εσωτερικό του ελκτικού πηγαδιού:

$$R^0_{\ell,rr} + \frac{2}{r}R^0_{\ell,r} + \left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda^2}\right) R^0_\ell = 0$$

  και στο εξωτερικό:

$$R^\infty_{\ell,rr} + \frac{2}{r}R^\infty_{\ell,r} + \left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{1}{\lambda^2}\right) R^\infty_\ell = 0$$

  Οι συνοριακές συνθήκες

$$R^0_\ell(0) < \infty, \qquad \lim_{r\to+\infty} R^\infty_\ell(r) = 0$$

  και φυσικά συνθήκη συνε΄χειας της συνάρτησης και της παραγώγου στο $r = \rho$:

$$R^0_\ell(\rho) = R^\infty_\ell(\rho), \qquad R^0_{\ell,r}(\rho) = R^\infty_{\ell,r}(\rho)$$

Υπολο΄γιζουμε έτσι το φάσμα για την περίπτωση

- του ηλεκτρονίου σε απειρόβαθο πηγάδι και βρίσκουμε:

$$E_{n,\ell} = \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} z^2_{n,\ell}$$

  όπου $z_{n,l}$ είναι η ρίζα τάξεως n της σφαιρικής συνάρτησης Bessel, j_ℓ.

- για το το ηλεκτρόνιο σε πεπερασμένου βάθους πηγάδι και με μηδενική στροφορμή, εισάγουμε την αδιάστατη παράμετρο

$$\sigma = \frac{\rho}{\lambda_1}$$

  που μετρά το λόγο ελκτικής δυναμικής ενέργειας που μετρά την ισχύ του εγκλωβισμού προς την κινητική ενέργεια σε απειρόβαθο πηγάδι ακτίνας ρ, που τείνει να απεγκλωβίσει το ηλεκτρόνιο. Έχουμε τότε

  - $\sigma < \frac{\pi}{2}$ δεν υπάρχει δέσμια κατάσταση ενώ
  - για $\mathbf{Z} \ni k > 0$ $k\pi + \frac{\pi}{2} < \sigma < (k+1)\pi + \frac{\pi}{2}$ τότε υπάρχουν k δέσμιες καταστάσεις. Όσο μεγαλύτερος είναι ο λογος σ τόσες περισσότερες καταστάσεις μπορούν να φιλοξενηθούν.

Αναφορές

[1] Siroki Lee Haynes Giannini *Single electron induced surface plasmons on a topological nanaparticle* Nature Comm, 7 (2016)

[2] Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics (2005), Pearson Education 2nd Edition