Proszę o uwagę

29. Równanie Schrödingera

Przykłady rozwiązania równania Schrödingera:

- cząstka swobodna,
- cząstka w studni potencjału,
- cząstka przechodząca przez bariera potencjału,
- efekt tunelowy.

Równanie Schrödingera dla cząstki swobodnej

Na poprzednim wykładzie pokazaliśmy, że w przypadku cząstki swobodnej, gdy nie działają na nią żadne siły, tzn. potencjał $U(x) = 0$ to równanie Schrödingera przyjmuje postać:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\Psi \quad \Longrightarrow \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = -k^2\Psi \qquad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

jego rozwiązaniem jest $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

przyjmując że cząstka porusza się w kierunku dodatnich x (B=0), równanie zależne od czasu

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)e^{-i\omega t} = Ae^{i(kx-\omega t)} \qquad |\Psi|^2 = \Psi^*\Psi = \left(Ae^{-i(kx-\omega t)}\right)\left(Ae^{i(kx-\omega t)}\right) = A^2$$

przedstawia falę rozchodzącą się w kierunku x o wektorze falowym k i długości λ

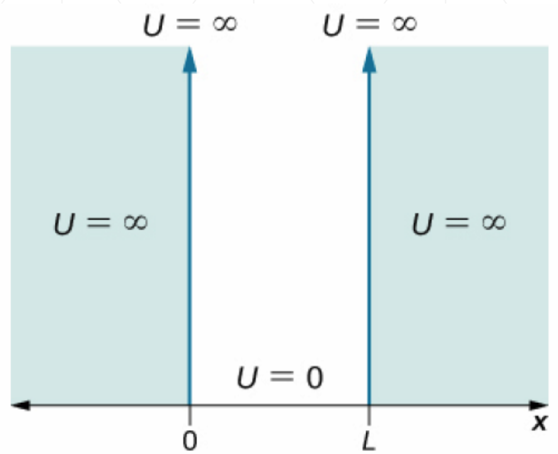
$$k = \frac{p}{\hbar} \qquad \lambda = \frac{h}{p}$$

Czyli funkcją falową cząstki swobodnej jest fala płaska o długości λ określonej zależnością de Broglie'a.

Co będzie gdy cząstka nie będzie swobodna.

Cząstka w studni potencjału

Wykorzystamy równanie Schrödingera do opisu cząstki zamkniętej w jednowymiarowym pudełku (tzw. studni potencjału). Ten szczególny przypadek rozważa zachowanie się cząstek w stanach związanych, wprowadza pojęcie kwantyzacji energii cząstki i pozwala na zrozumienie budowy atomów i ciała stałego.



Załóżmy, że cząstka o masie m (np. elektron), może się poruszać wyłącznie wzdłuż osi x, zaś jej przemieszczanie się jest ograniczone do obszaru między ścianami ($x = 0$ *i* $x = L$). Pomiędzy ścianami ($x \in \langle 0, L \rangle$) *cząstka* porusza się swobodnie. Taki układ nazwiemy nieskończenie głęboką studnią kwantową (jamą potencjału).

Wartości potencjału w studni można zapisać w postaci:

$U(x) = 0$ dla $x \in \langle 0, L \rangle$

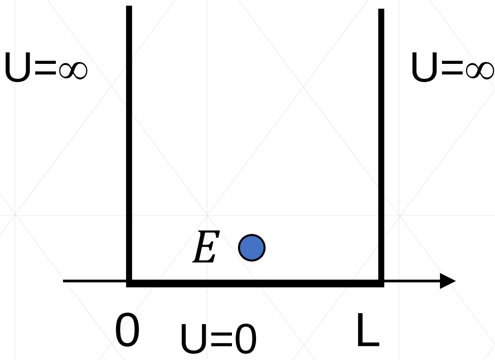
$U(x) = \infty$ dla wszystkich innych x.

Ponieważ cząstka nie może wydostać się na zewnątrz studni potencjału jej funkcja falowa $\Psi(x)$, a tym samym prawdopodobieństwo pojawienia się poza studnią wynosi 0.

$\Psi(x) = 0$ dla $x \in \langle -\infty, 0 \rangle$

$\Psi(x) = 0$ dla $x \in \langle L, \infty \rangle$

Równanie Schrödingera dla nieskończonej studni potencjału



W jednowymiarowej nieskończenie wysokiej studni potencjału cząstka może znajdować się tylko w obszarze $0 < x < L$, stąd warunki brzegowe dla funkcji falowej

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0$$

Równanie Schrödingera przy uwzględnieniu $U(x) = 0$ wewnątrz studni

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\Psi$$

oznaczając

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

jest postaci:

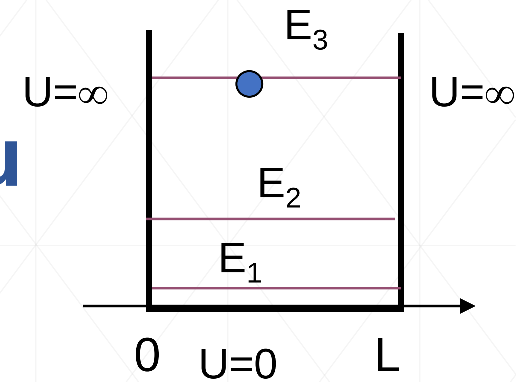
$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\Psi$$

i jego rozwiązanie

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

funkcja $\Psi(x)$ może reprezentować falę (cząstkę) biegnącą w prawo lub w lewo i znikającą w punkcie $x = 0$ oraz $x = L$

Równanie Schrödingera dla nieskończonej studni potencjału



$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

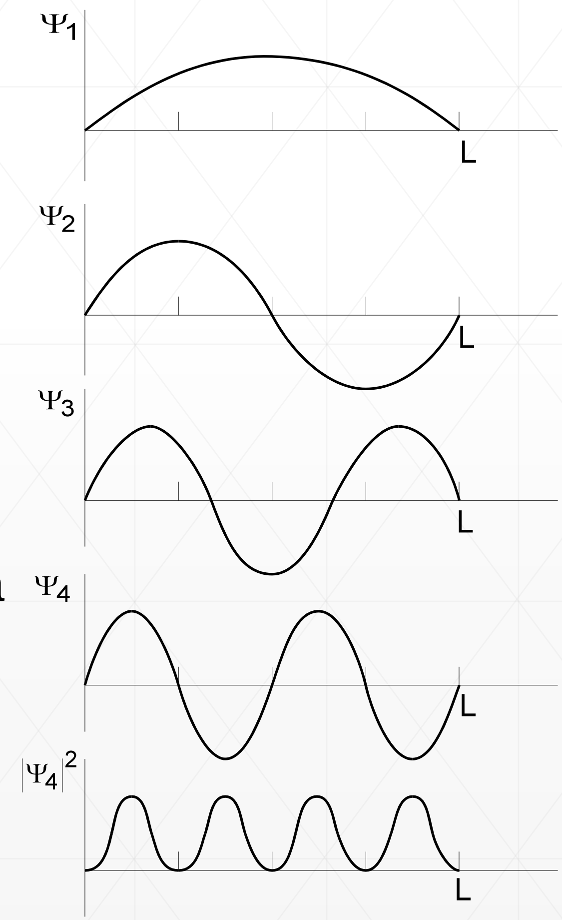
spełniając warunki brzegowe:

$$\left.\begin{array}{ll} \Psi(0) = 0 & A + B = 0 \\ \Psi(L) = 0 & Ae^{ikL} + Be^{-ikL} = 0 \end{array}\right\} \quad A\left(e^{ikL} - e^{-ikL}\right) = 0$$

$$\sin(kL) = 0 \qquad kL = n\pi \quad \Longrightarrow \quad E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

gdzie $n = 1, 2, 3\ \ldots.$

Energia jest skwantowana



$$\Psi(x) = Ae^{ikx} - Ae^{-ikx} = 2Ai\sin(kx)$$

$$C = 2Ai$$

$$\Psi_n(x) = C\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

indeks n oznacza, że funkcja falowa przypisana jest do n-tego poziomu energetycznego

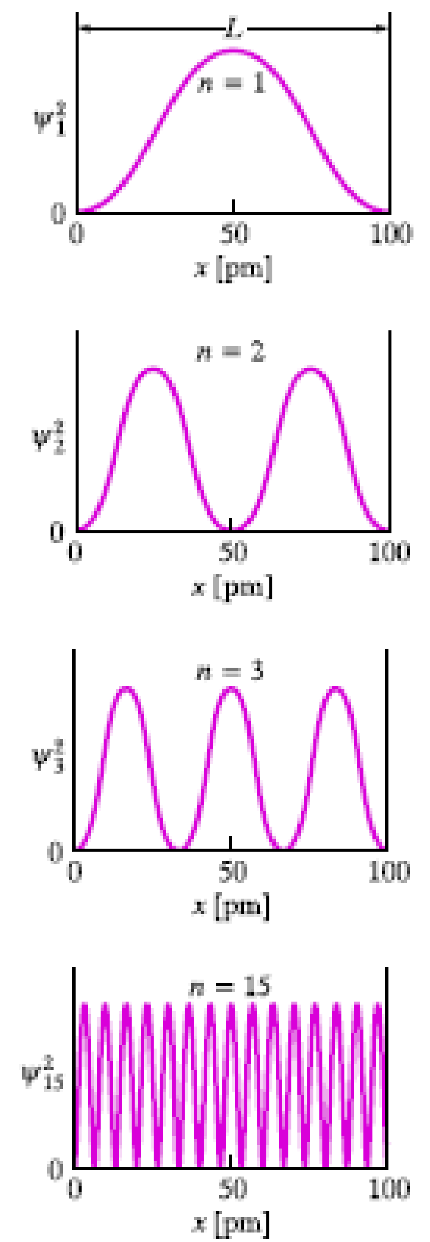
Równanie Schrödingera dla nieskończonej studni potencjału

Pełna postać funkcji falowej: $\Psi(x,t) = \Psi(x)e^{-i\omega t}$

$$\Psi_n(x,t) = C\sin(k_n x)\cdot e^{-i\omega_n t} \qquad \text{gdzie} \quad \begin{cases} k_n = \dfrac{n\pi}{L} \\[2mm] \omega_n = \dfrac{E_n}{\hbar} \end{cases}$$

$$E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

- wartości energii E_n nazywamy wartościami własnymi
- odpowiadające im funkcje falowe Ψ_n – funkcjami własnymi
- kwadrat modułu funkcji falowej określa prawdopodobieństwo położenia elektronu wewnątrz studni potencjału
- dla stanu 1 największe prawdopodobieństwo położenia elektronu jest w środku studni
- dla dużych wartości n rozkład prawdopodobieństwa staje się równomierny i zgodny z przewidywaniami fizyki klasycznej



Wnioski

- energia jest skwantowana, cząstki mogą zajmować pewne poziomy energetyczne (n – liczba kwantowa)
- kwantyzacji podlega również pęd elektronu $p_n = \hbar k_n = n\dfrac{\pi\hbar}{L}$
- cząstka nie może posiadać energii zerowej – wynika z zasady nieoznaczoności

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar \qquad \Delta x = L \qquad \Delta p \geq \hbar / L \qquad E = \frac{p^2}{2m} > 0$$

- stałą C wyznaczamy z warunku unormowania

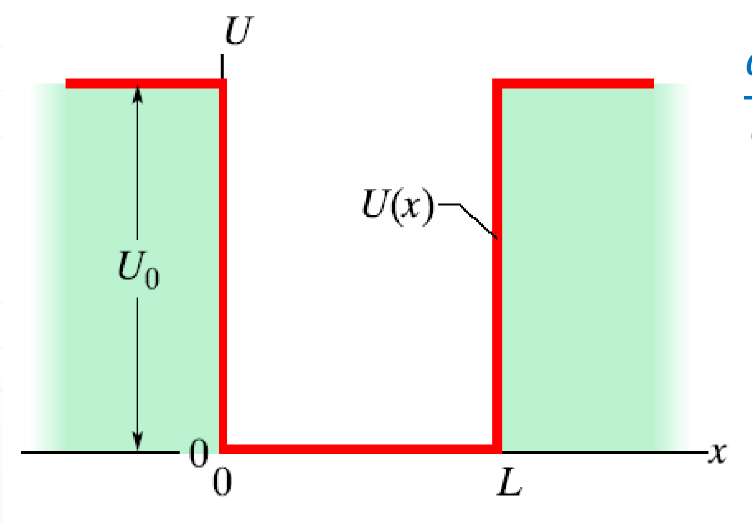
$$\int_0^L \Psi \cdot \Psi^* dx = |C|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \qquad \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = \frac{L}{2}$$

$$C^2 \frac{L}{2} = 1 \qquad C = \sqrt{2/L} \qquad \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

- dla obiektów klasycznych poszczególne poziomy są tak bliskie, że prawie nierozróżnialne

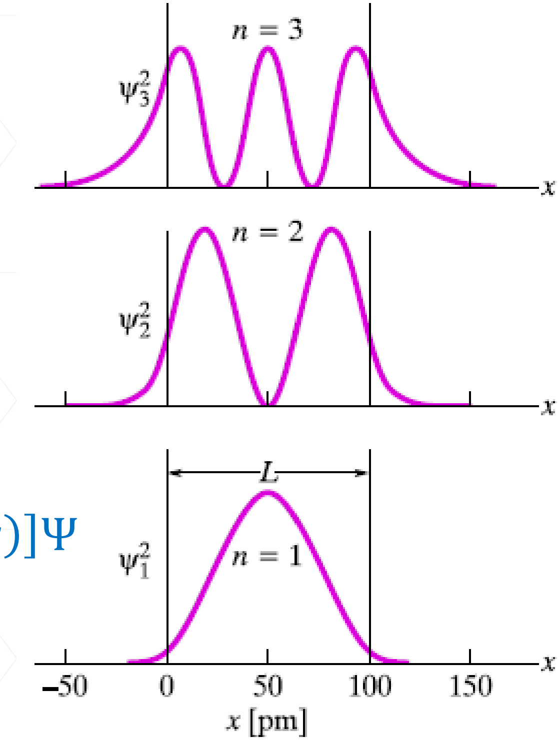
Elektron w skończonej studni potencjału

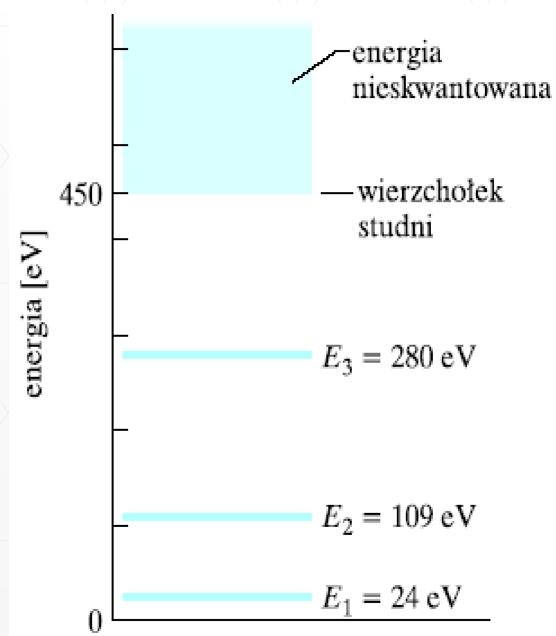
studnia potencjału o głębokości U_o



$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\Psi$$

równanie Schrodingera rozwiązujemy dla trzech obszarów





wyniki zbliżone jak dla nieskończonej studni, lecz:

- fale materii wnikają w ściany studni
- energie dla każdego stanu są mniejsze niż w ∞
- elektron o energii większej od U_0 nie jest zlokalizowany, jego energia nie jest skwantowana

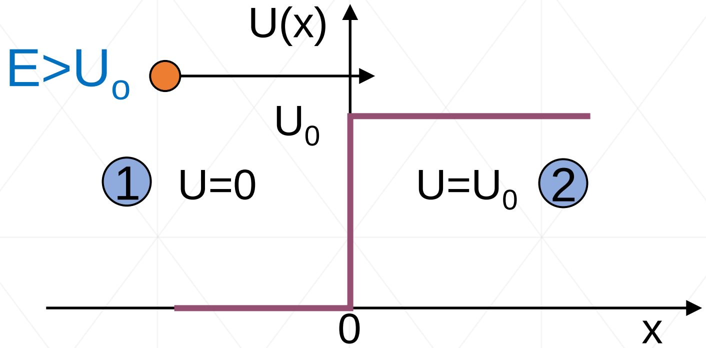
Bariera potencjału

Przykład klasyczny: W celu zobrazowania zjawiska tunelowania rozważmy przypadek kulki toczącej się po powierzchni z energią kinetyczną 100 J. W pewnym momencie kulka napotyka wzniesienie. Energia potencjalna kulki na szczycie wzniesienia wynosi 10 J. A zatem kulka o energii kinetycznej równej 100 J z łatwością wtoczy się na szczyt wzniesienia i będzie kontynuowała swój ruch. W mechanice klasycznej prawdopodobieństwo pokonania wzniesienia przez kulkę wynosi dokładnie 1, co oznacza, że kulka mija wzniesienie i na pewno nie zawróci.

Jeżeli jednak napotkałaby przeszkodę o większej wysokości, taką, że do jej pokonania niezbędna byłaby energia 200 J, wówczas kulka podtoczyłaby się jedynie do pewnej wysokości, a następnie zatrzymała i stoczyła z powrotem. Energia bariery znacznie przewyższa jej energię całkowitą. Prawdopodobieństwo pokonania przeszkody wynosiłoby w tym przypadku 0.

A jak to wygląda z punktu widzenia mechaniki kwantowej?

Bariera potencjału (cząstka nad barierą)



ruch cząstek w obszarze w którym bariera potencjału zmienia się skokowo

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla x<0} \\ U_o & \text{dla x>0} \end{cases}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_o)}$$

1

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_1 = 0$$

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

2

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_o)\Psi_2 = 0$$

$$\frac{d^2\Psi_i}{dx^2} + k_i^2\Psi_i = 0$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} = A_2 e^{ik_2 x}$$

$B_2 = 0$, bo nie ma fali odbitej

z warunków brzegowych dla $x = 0$

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \qquad A_1 + B_1 = A_2 \qquad B_1 = A_1\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

$$\left(\frac{d\Psi_1}{dx}\right)_{|x=0} = \left(\frac{d\Psi_2}{dx}\right)_{|x=0} \qquad k_1(A_1 - B_1) = k_2 A_2 \qquad A_2 = A_1\frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Współczynnik transmisji T i odbicia R

$$\Psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + A_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x}$$

$$\Psi_2 = A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x}$$

współczynnik transmisji **T** to stosunek gęstość strumienia cząstek przechodzących do padających,

współczynnik odbicia **R** to stosunek odbitych do padających

$$T = -\frac{v_2 |A_2|^2}{v_1 |A_1|^2}$$

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

$$R = -\frac{v_1 |B_1|^2}{v_1 |A_1|^2}$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}\left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

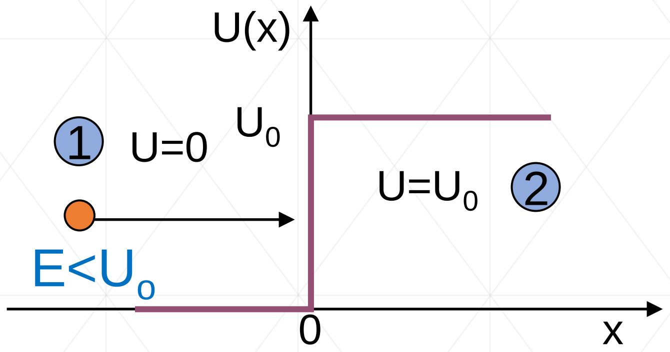
$$R + T = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 + \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2) + 4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1$$

$$R + T = 1$$

podejście falowe – fala świetlna odbija się od granicy dwóch ośrodków

klasycznie – niemożliwe, cząstka nie odbije się lecąc nad siatką

Bariera potencjału (cząstka poniżej bariery)



$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_o)\Psi_2 = 0$$

W obszarze 1 rozwiązanie się nie zmienia, $\Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$ natomiast w obszarze 2 E < U_o i rozwiązanie opisane jest funkcją wykładniczą.

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_o - E)\,\Psi_2 = 0 \qquad \chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_o - E)} \qquad \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} - \chi^2\Psi_2 = 0$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{\chi x} + B_2 e^{-\chi x}$$

Z warunku ograniczoności Ψ_2 wynika $A_2 = 0$

$$\Psi_2(x) = B_2 e^{-\chi x}$$

z warunków brzegowych dla $x = 0$

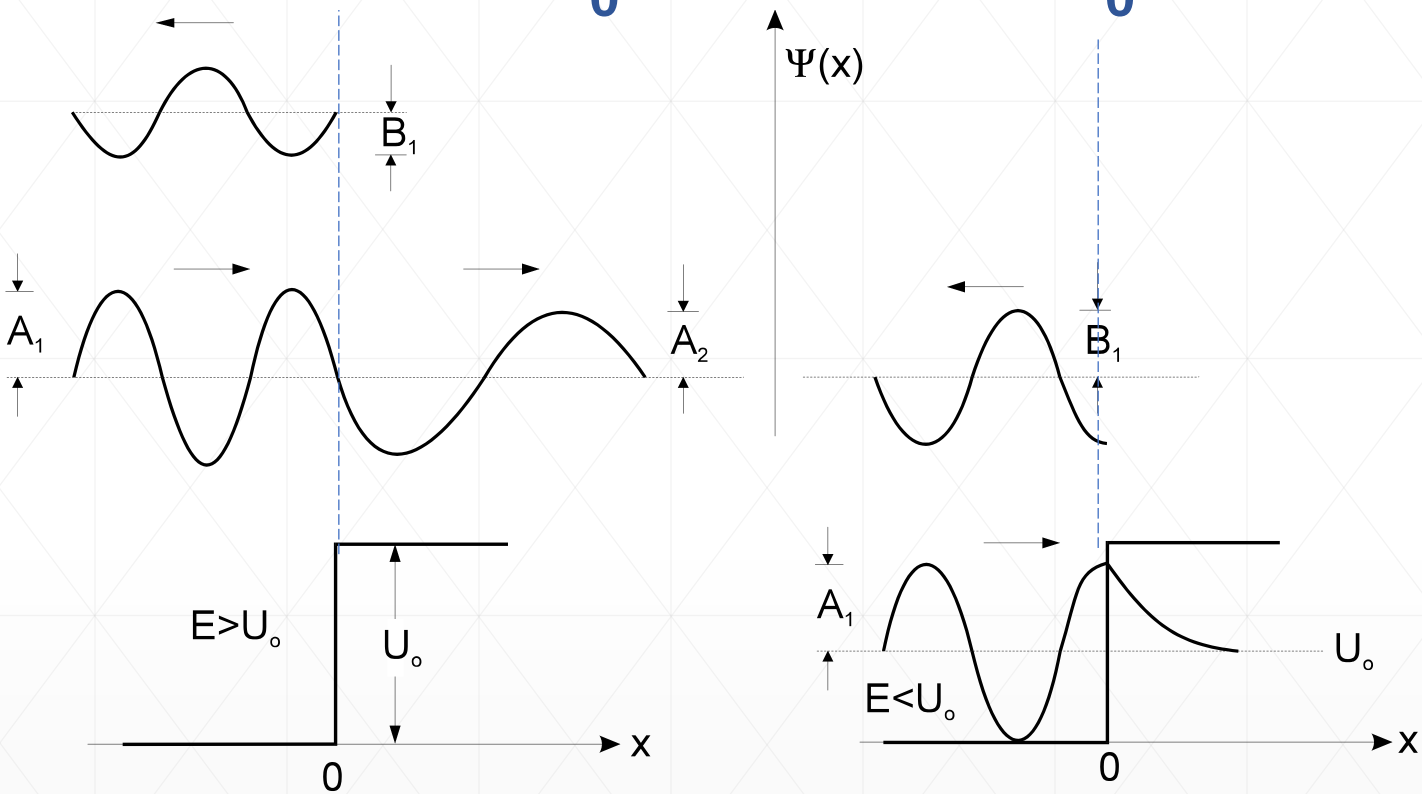
$$A_1 + B_1 = B_2 \qquad B_1 = -\frac{k_1 - i\chi}{k_1 + i\chi}A_1 \qquad R = \frac{B_1 B_1^*}{A_1 A_1^*} = 1$$

$$ik_1(A_1 - B_1) = -\chi B_2 \qquad B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + i\chi}A_1$$

całkowite odbicie

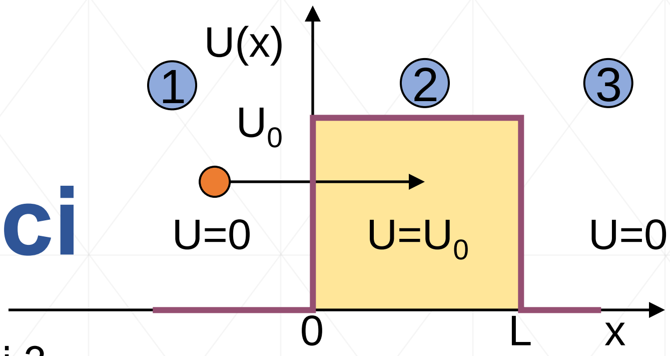
fala wchodząca do obszaru drugiego jest wykładniczo tłumiona i gęstość prawdopodobieństwa jest proporcjonalna do $exp(-2\chi\, x)$

Bariera potencjału
$E > U_0$ $E < U_0$



Cząstka odbija się od bariery niezależnie jaką posiada energię
W przypadku gdy $E < U_0$ cząstka częściowo wnika w obszar bariery ale następnie powraca (następuje całkowite odbicie cząstki $R = 1$)

Bariera potencjału o skończonej szerokości



$$U(x) = \begin{cases} 0 \quad \text{dla} \quad x<0 \\ U_o \quad \text{dla} \quad 0 \leq x \leq L \\ 0 \quad \text{dla} \quad x>L \end{cases}$$

Dla obszarów 1 i 3

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0 \qquad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

$$\Psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

Dla obszaru 2

$$\Psi_2 = A_2 e^{\chi x} + B_2 e^{-\chi x}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_o - E)\Psi = 0 \qquad \chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_o - E)}$$

$$\Psi_3 = A_3 e^{ikx}$$

$B_3 = 0$ bo brak fali odbitej

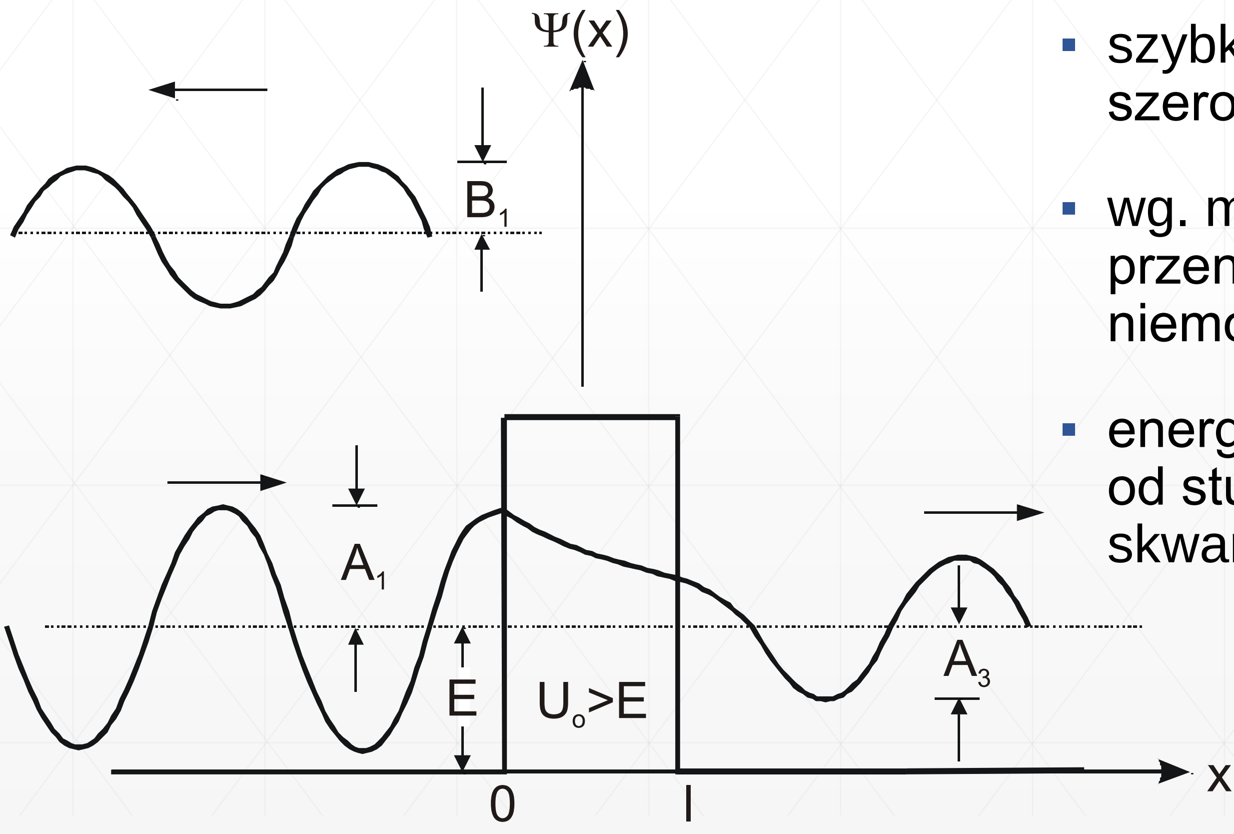
Współczynnik transmisji bariery jest równy w przybliżeniu

$$T = \frac{v_3}{v_1}\frac{A_3 A_3^*}{A_1 A_1^*} = \frac{A_3 A_3^*}{A_1 A_1^*} \qquad T \approx e^{-2\chi L} \quad \text{czyli} \quad T \approx e^{-\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - E)}}$$

Ze względu na wykładniczą postać wartość T jest bardzo czuła na trzy zmienne: masę cząstki m, szerokość bariery L i różnicę energii U_o-E

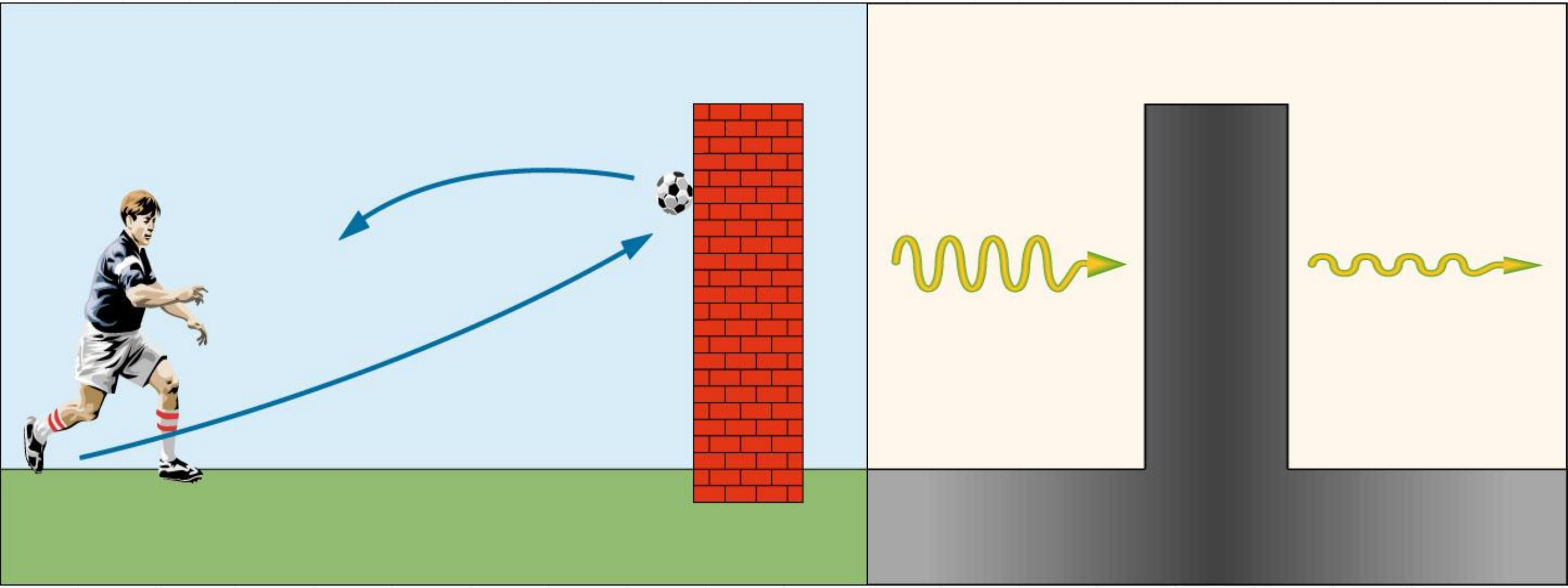
Efekt tunelowy - przenikanie cząstki przez barierę potencjału

$$T \approx e^{-\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - E)}}$$



- prawdopodobieństwo przejścia przez barierę potencjału zależy od L i U_o
- szybko maleje ze wzrostem jej szerokości i wysokości
- wg. mechaniki klasycznej przenikanie przez barierę jest niemożliwe
- energia cząstki, w odróżnieniu od studni potencjału nie jest skwantowana

Bariera potencjału o skończonej szerokości



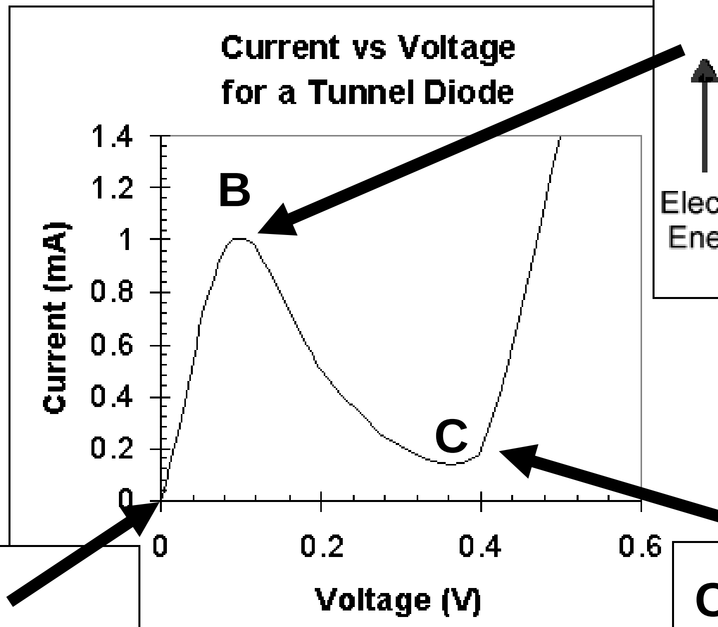
klasyczna kwantowa

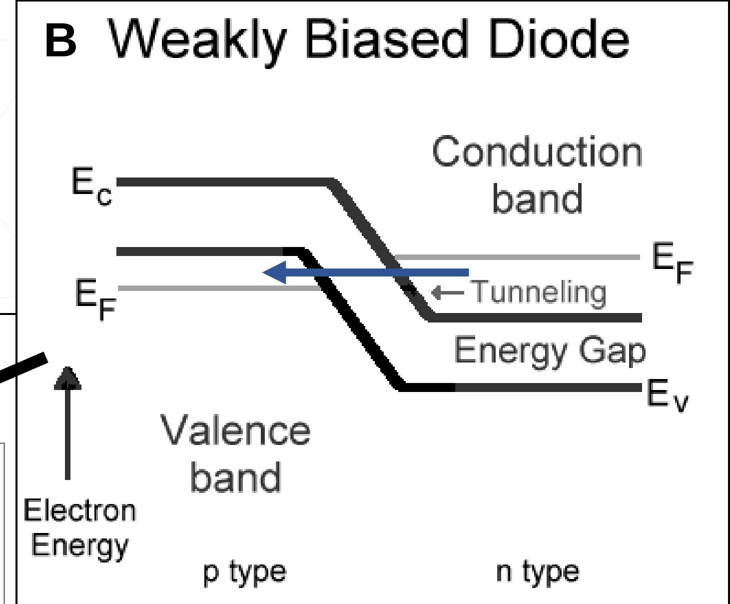
Przykłady efektu tunelowego

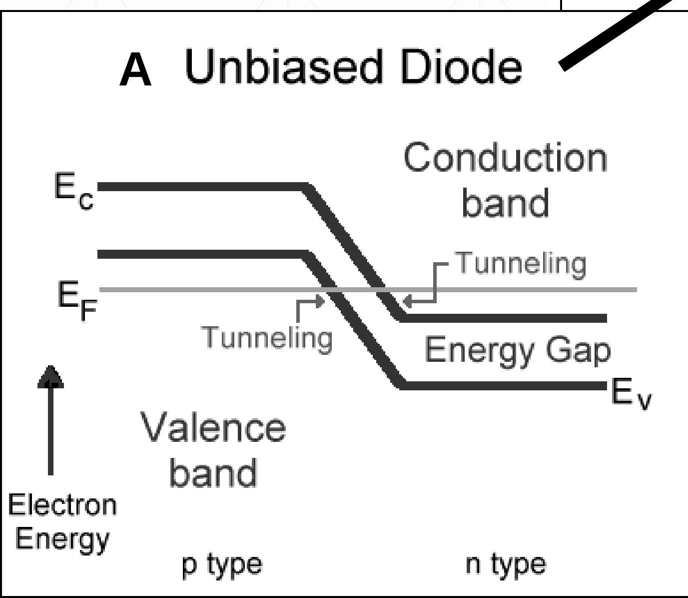
- Dioda tunelowa (efekt tunelowy w złączu p-n) Nagroda Nobla 1973r
  - Esaki - tunelowanie w półprzewodnikach np. diody tunelowe
  - Giaever - tunelowanie w nadprzewodnikach
  - Josephson – złącze Josephsona, szybki przełącznik kwantowy
- Skaningowy Mikroskop Tunelowy
  - Binning i Rohrer Nagroda Nobla 1986r

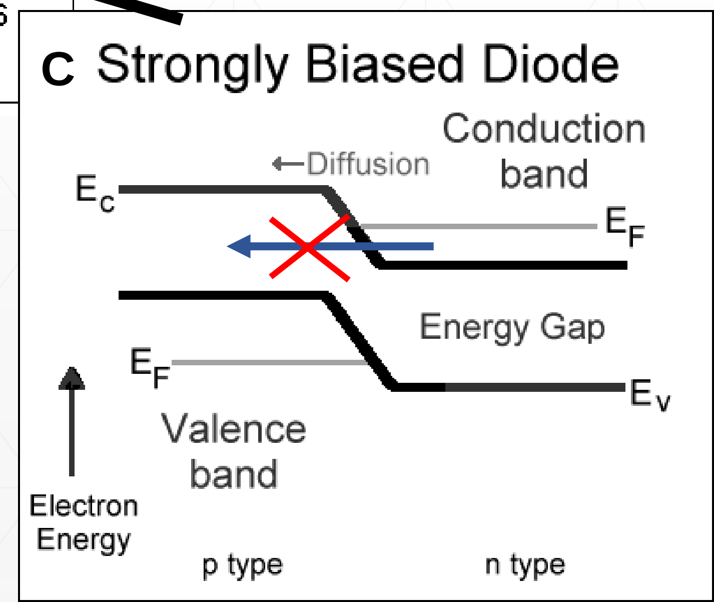
Dioda tunelowa

Charakterystyka prądowo-napięciowa diody tunelowej, w punkcie B silny wzrost tunelowania, w punkcie C płynie jedynie prąd dyfuzyjny



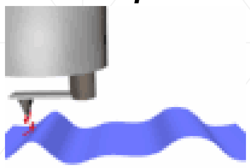






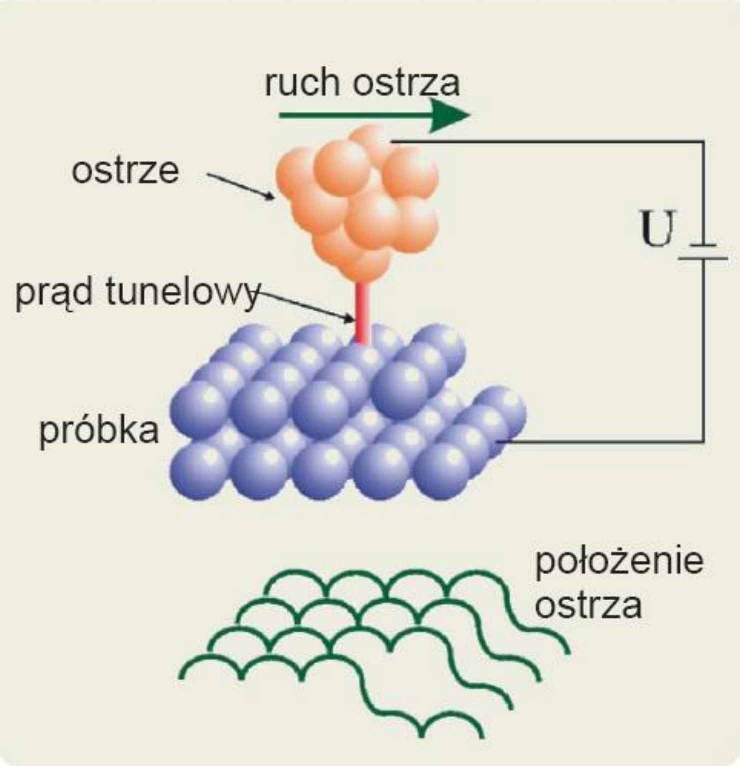
Skaningowy Mikroskop Tunelowy (STM)

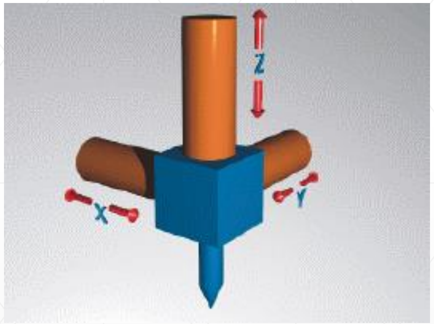
Tunelowanie elektronów przy powierzchni metali jest podstawą fizyczną działania skaningowego mikroskopu tunelowego (ang. *scanning tunneling microscope*, STM), wynalezionego w 1981 roku przez Binniga i Rohrera.

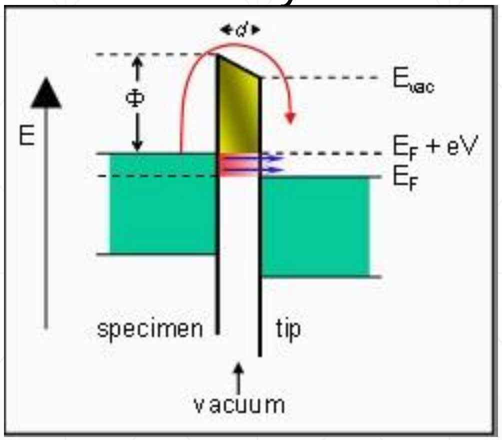


STM składa się z:

- sondy skanującej (np. igła wykonana z wolframu, platyny z irydem lub złota),
- stolika piezoelektrycznego, odpowiedzialnego za pozycjonowanie sondy
- komputera, na którym można oglądać otrzymany obraz.



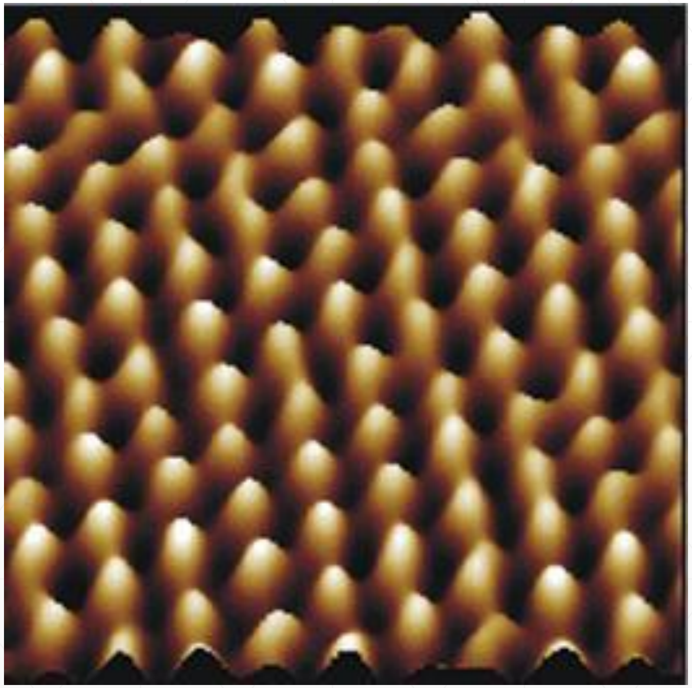


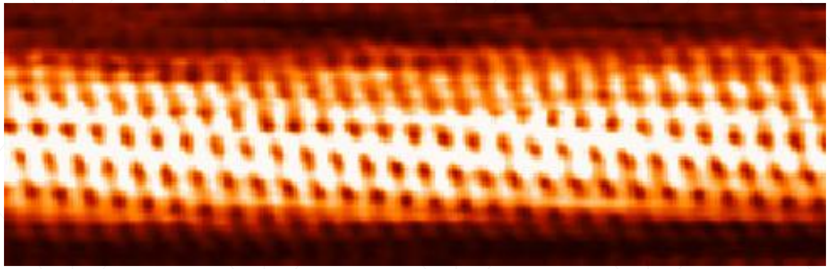


Do badanej próbki przyłożone jest stałe napięcie, a podczas ruchu sondy nad powierzchnią próbki rejestrowany jest prąd tunelowy dla kolejnych położeń igły względem próbki. Natężenie prądu zależy od prawdopodobieństwa tunelowania elektronów z powierzchni próbki do igły, co z kolei jest uwarunkowane wysokością sondy nad próbką.

Skaningowy Mikroskop Tunelowy (STM)

Natężenie prądu w konkretnym punkcie (*x, y) dostarcza informacji na temat chwilowej wysokości* sondy nad próbką. W ten sposób może powstać niezwykle dokładna mapa powierzchni próbki. Obrazy otrzymane za pomocą STM są przetwarzane i wyświetlane na ekranie komputera. Obraz STM pozwala wyznaczyć topografię powierzchni próbek rożnych materiałów i wskazać, na ile jest płaska, a na ile pagórkowata.





Obraz nanorurki węglowej otrzymany za pomocą STM. Obrazy otrzymane za pomocą STM są w skali odcieni szarości, kolor dodaje się podczas obróbki.

Badania prowadzone przy użyciu mikroskopu tunelowego mają bardzo dużą rozdzielczość: 0,001nm, co stanowi 1% średniego promienia atomu. W ten sposób możemy obserwować pojedyncze atomy na powierzchni próbki.

Podsumowanie

- **Cząstka swobodna** – energia dowolna, fala płaska
- **Cząstka w studni potencjału** – kwantowanie energii
- **Efekt tunelowy** – przejście cząstki przez barierę potencjału
- **Przykłady** – dioda tunelowa, skaningowy mikroskop tunelowy

Dziękuję za uwagę