



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:

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

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

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

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

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

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

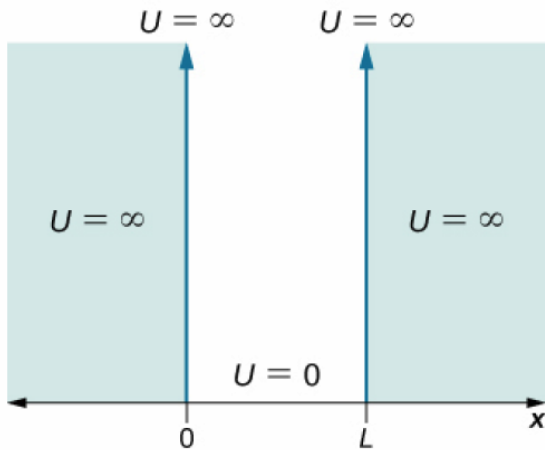
$$\lambda = \frac{h}{p}$$

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.



Założmy, 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 $x = L$). Pomiedzy 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:

$$U(x) = 0 \quad \text{dla } x \in \langle 0, L \rangle$$

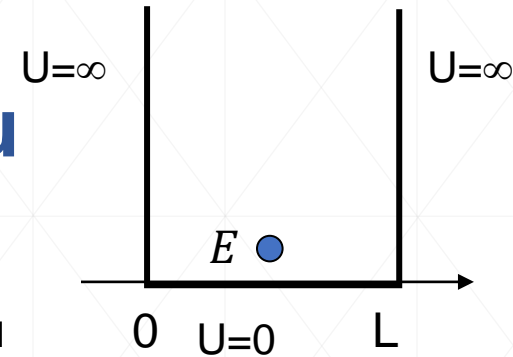
$$U(x) = \infty \quad \text{dla wszystkich innych } x.$$

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.

$$\Psi(x) = 0 \quad \text{dla } x \in \langle -\infty, 0 \rangle$$

$$\Psi(x) = 0 \quad \text{dla } x \in \langle L, \infty \rangle$$

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:

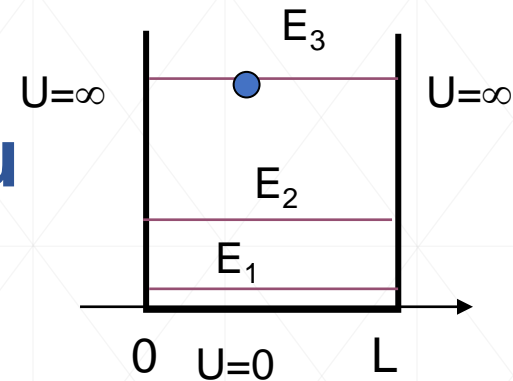
$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\Psi$$

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



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

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

spełniając warunki brzegowe:

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

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

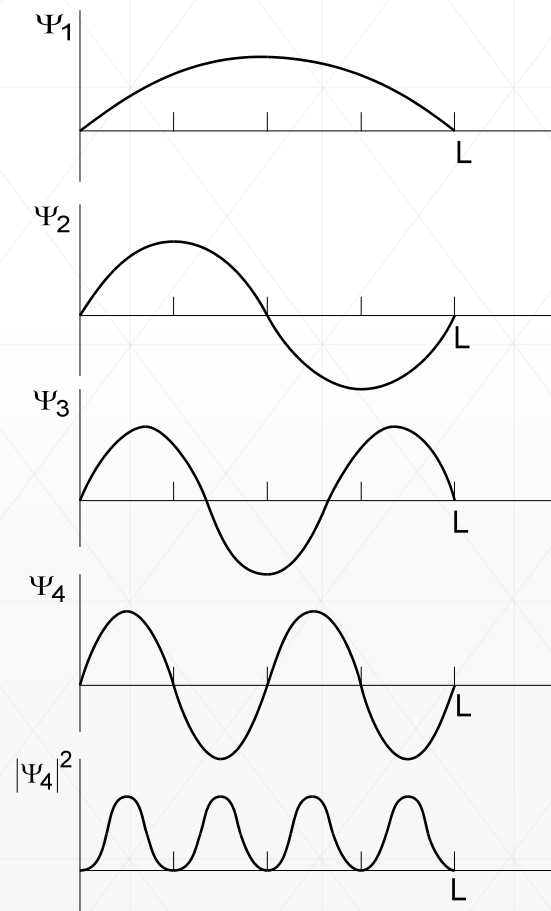
gdzie $n = 1, 2, 3 \dots$

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

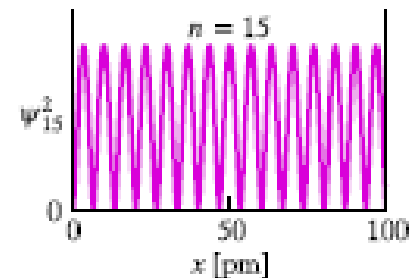
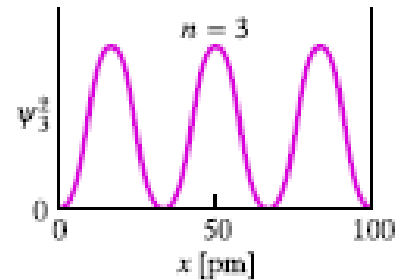
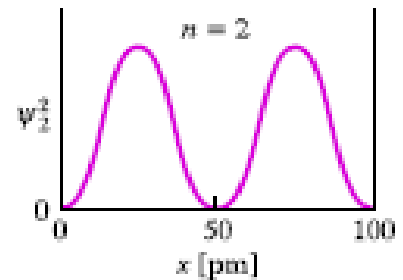
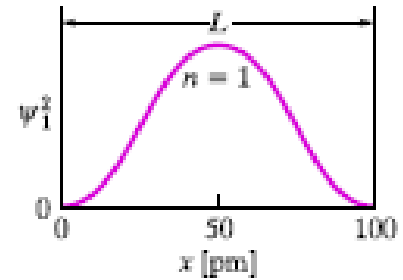
Pełna postać funkcji falowej:

$$\Psi(x, t) = \Psi(x)e^{-i\omega t}$$

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

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

- 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
- cząstka nie może posiadać energii zerowej – wynika z zasady nieoznaczoności

$$p_n = \hbar k_n = n \frac{\pi \hbar}{L}$$

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar \quad \Delta x = L \quad \Delta p \geq \hbar/L$$

$$E = \frac{p^2}{2m} > 0$$

- stałą C wyznaczamy z warunku unormowania

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

$$\int_0^L \sin^2 \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx = \frac{L}{2}$$

$$C^2 \frac{L}{2} = 1$$

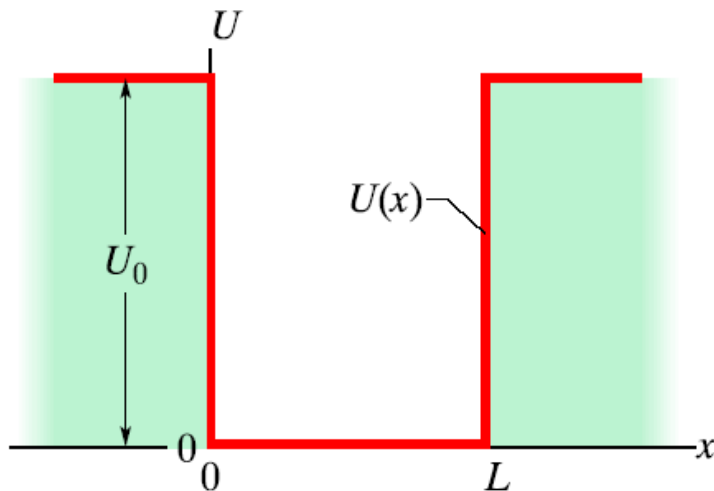
$$C = \sqrt{2/L}$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right)$$

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

Elektron w skończonej studni potencjału

studnia potencjału o głębokości U_0

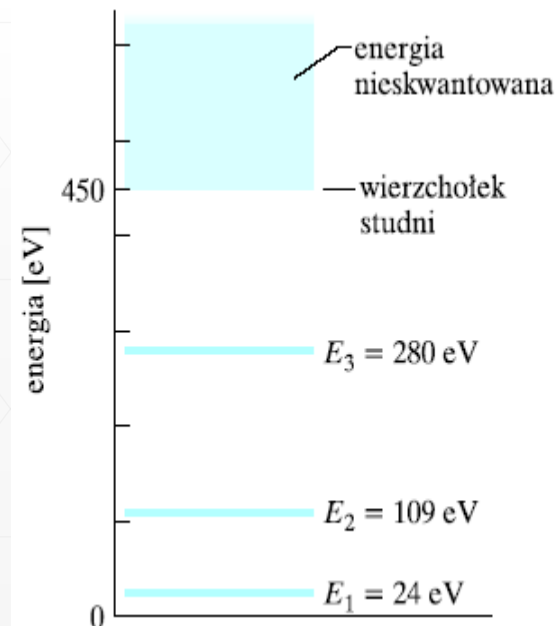
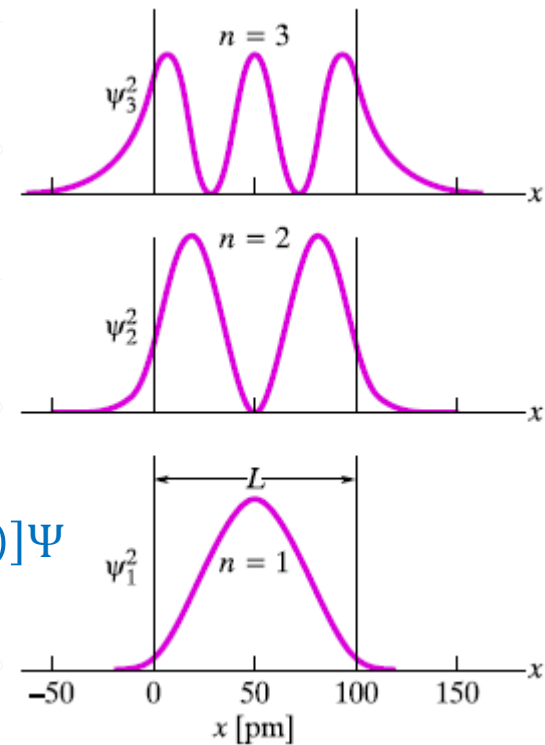


$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\Psi$$

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

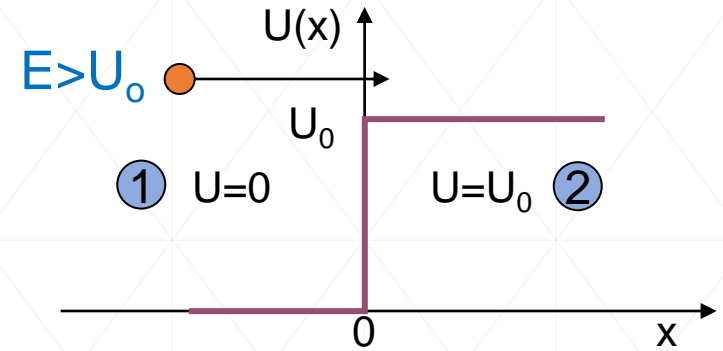
Przykład klasyczny: W celu zobrazowania zjawiska tunelowania rozważmy przypadek kulki toczącej się po powierzchni z energią kinetyczną 100 J. W pewnym momencie kulka napotyka wzniesienie. Energia potencjalna kulki na szczycie wzniesienia wynosi 10 J. A zatem kulka o energii kinetycznej równej 100 J z 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

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < 0 \\ U_0 & \text{dla } x > 0 \end{cases}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)}$$

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

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\Psi_2 = 0$$

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

$B_2 = 0$, bo nie ma fali odbitej

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

z warunków
brzegowych
dla $x = 0$

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$$

$$\left(\frac{d\Psi_1}{dx}\right)_{|x=0} = \left(\frac{d\Psi_2}{dx}\right)_{|x=0}$$

$$A_1 + B_1 = A_2$$

$$k_1(A_1 - B_1) = k_2 A_2$$

$$B_1 = A_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

$$A_2 = A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

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

$$T = -\frac{v_2 |A_2|^2}{v_1 |A_1|^2} \quad v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

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

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

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

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

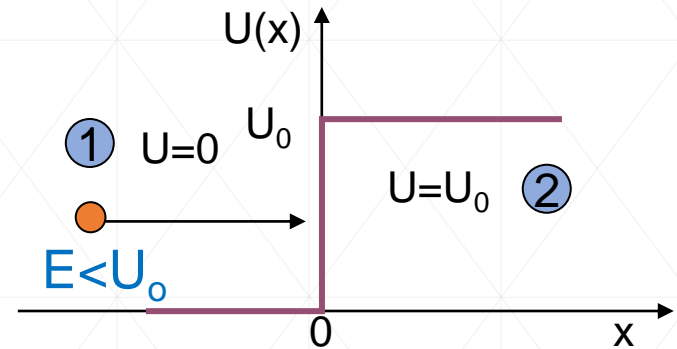
$$R + T = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 + \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2) + 4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1 \quad R + T = 1$$

podjęcie falowe – fala świetlna odbija się od granicy dwóch ośrodków

klasycznie – niemożliwe, cząstka nie odbije się lecąc nad siatką

Bariera potencjału (cząstka poniżej bariery)

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\Psi_2 = 0$$



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 $E < U_0$ i rozwiązanie opisane jest funkcją wykładniczą.

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \Psi_2 = 0$$

$$\chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}$$

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} - \chi^2 \Psi_2 = 0$$

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

Z warunku ograniczoności Ψ_2 wynika $A_2 = 0$

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

z warunków
brzegowych
dla $x = 0$

$$A_1 + B_1 = B_2$$

$$B_1 = -\frac{k_1 - i\chi}{k_1 + i\chi} A_1$$

$$R = \frac{B_1 B_1^*}{A_1 A_1^*} = 1$$

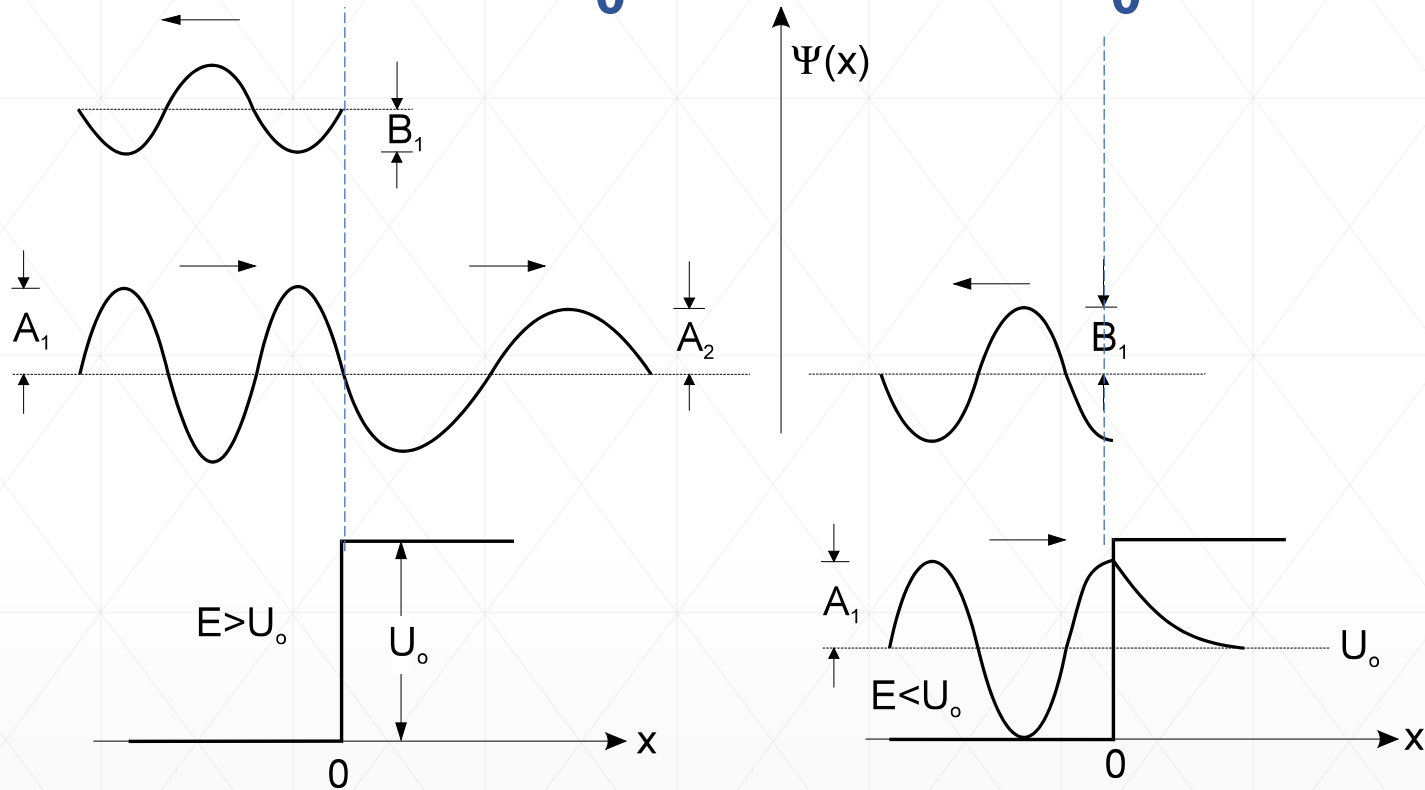
$$ik_1(A_1 - B_1) = -\chi B_2 \quad B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + i\chi} A_1$$

całkowite odbicie

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

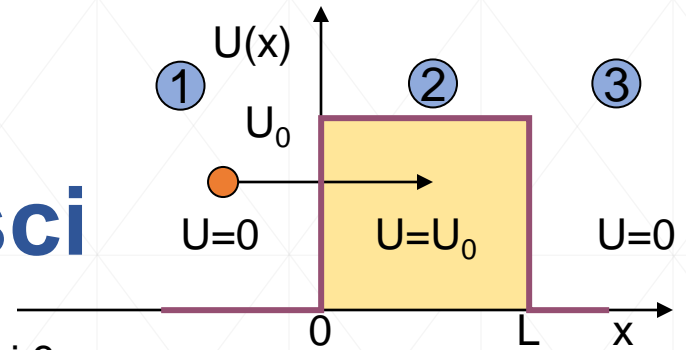
Bariera potencjału

$E > U_0$ $E < U_0$



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



Dla obszarów 1 i 3

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

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

Dla obszaru 2

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)\Psi = 0$$

$$\chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}$$

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < 0 \\ U_0 & \text{dla } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{dla } x > L \end{cases}$$

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

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

$$\Psi_3 = A_3 e^{ikx} \quad B_3 = 0 \text{ bo brak fali odbitej}$$

Współczynnik transmisji bariery jest równy w przybliżeniu

$$T = \frac{v_3 A_3 A_3^*}{v_1 A_1 A_1^*} = \frac{A_3 A_3^*}{A_1 A_1^*}$$

$$T \approx e^{-2\chi L}$$

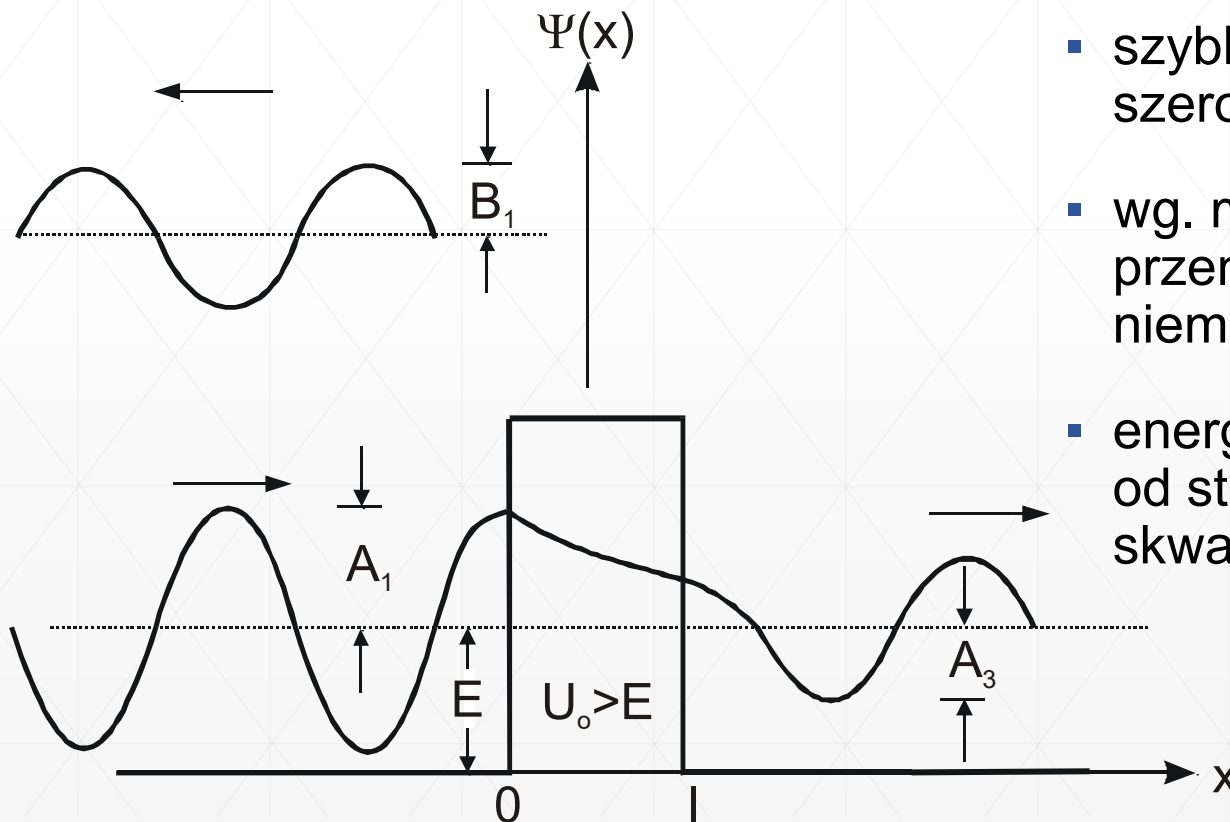
czyli

$$T \approx e^{-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

Ze względu na wykładniczą postać wartość **T** jest bardzo czuła na trzy zmienne: masę cząstki **m**, szerokość bariery **L** i różnicę energii **U₀-E**

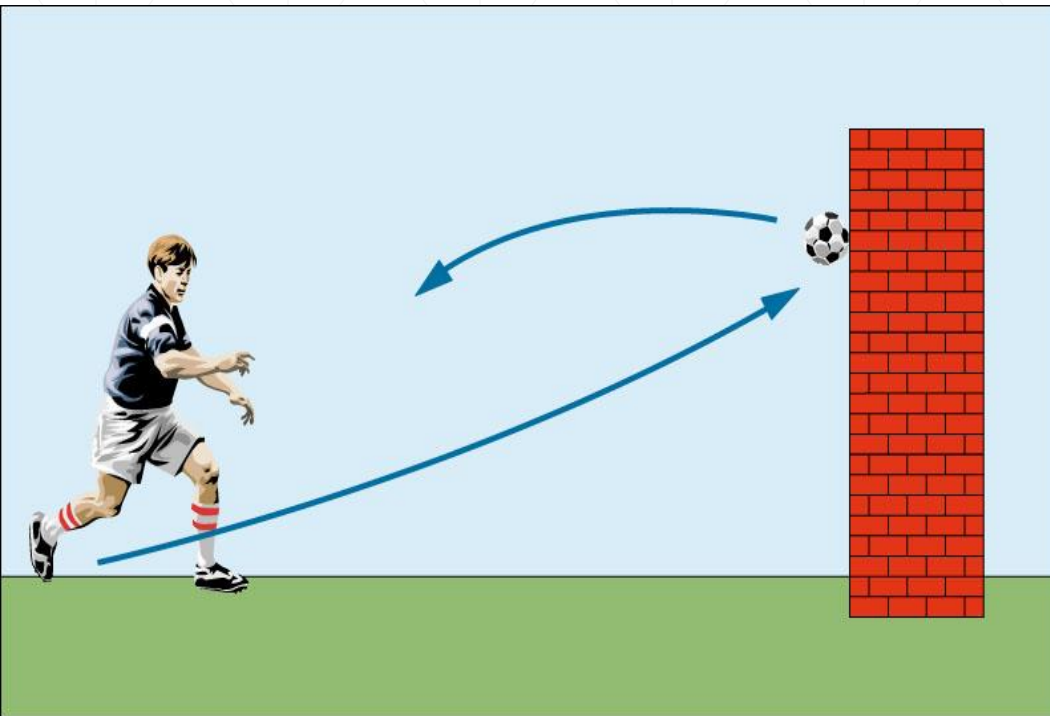
Efekt tunelowy - przenikanie cząstki przez barierę potencjału

$$T \approx e^{-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

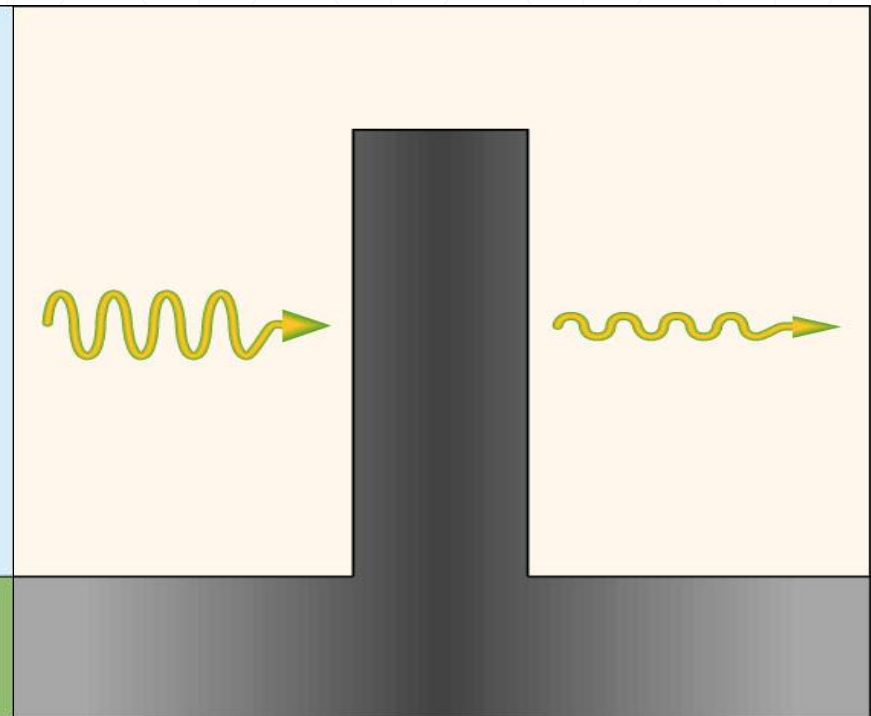


- prawdopodobieństwo przejścia przez barierę potencjału zależy od L i U_0
- szybko maleje ze wzrostem jej szerokości i wysokości
- wg. mechaniki klasycznej przenikanie przez barierę jest niemożliwe
- energia cząstki, w odróżnieniu od studni potencjału nie jest skwantowana

Bariera potencjału o skończonej szerokości



klasyczna



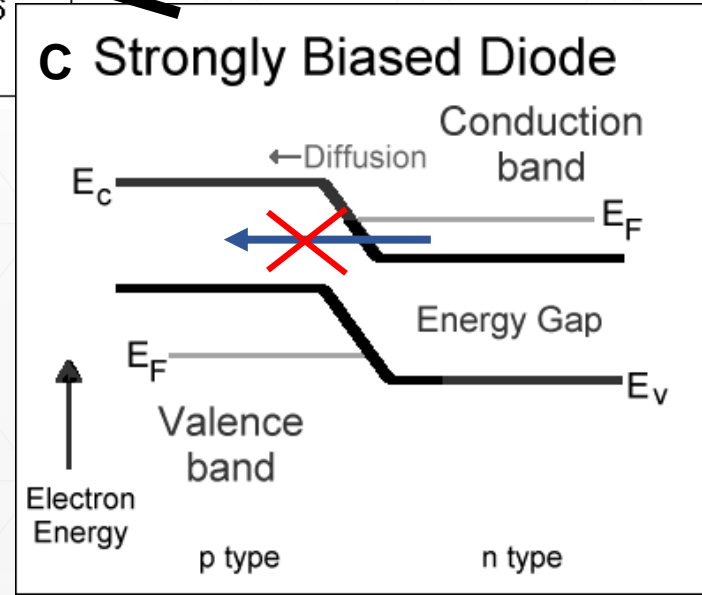
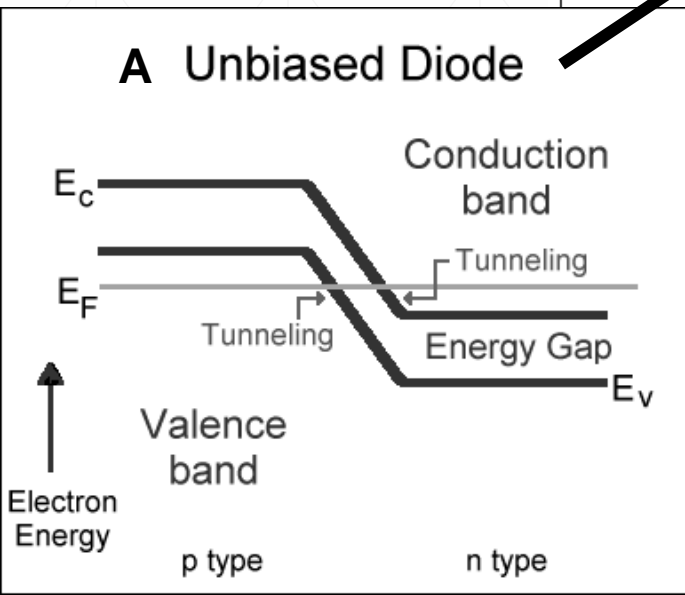
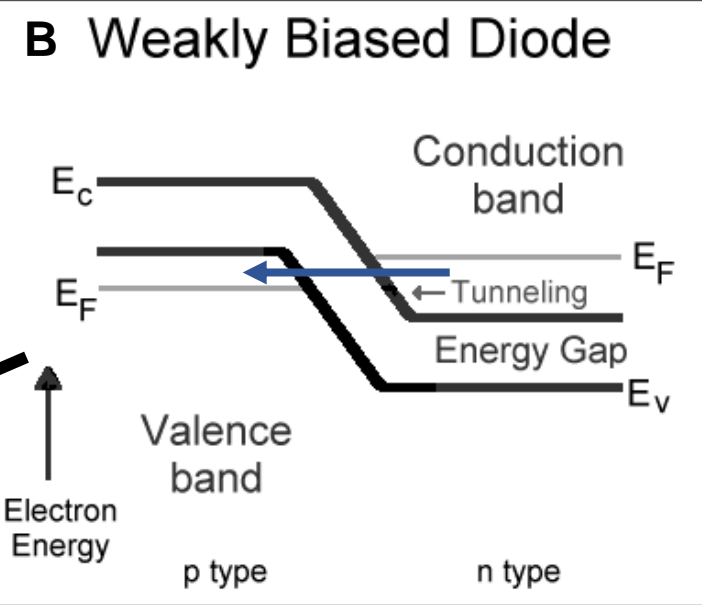
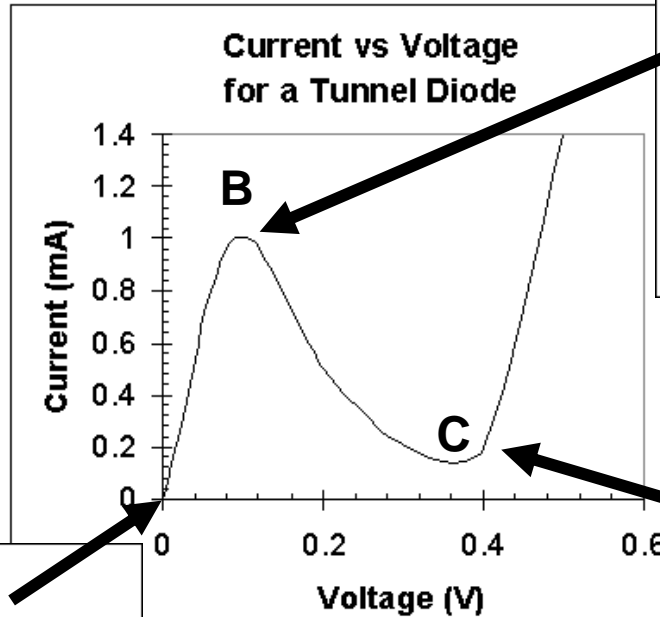
kwantowa

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

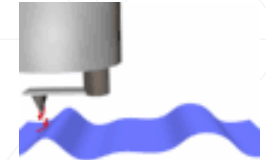
Dioda tunelowa

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



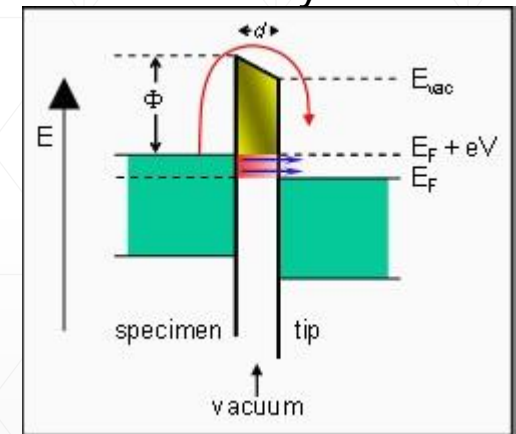
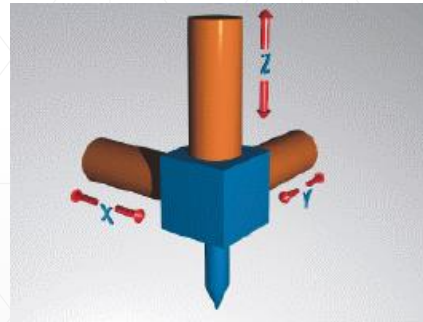
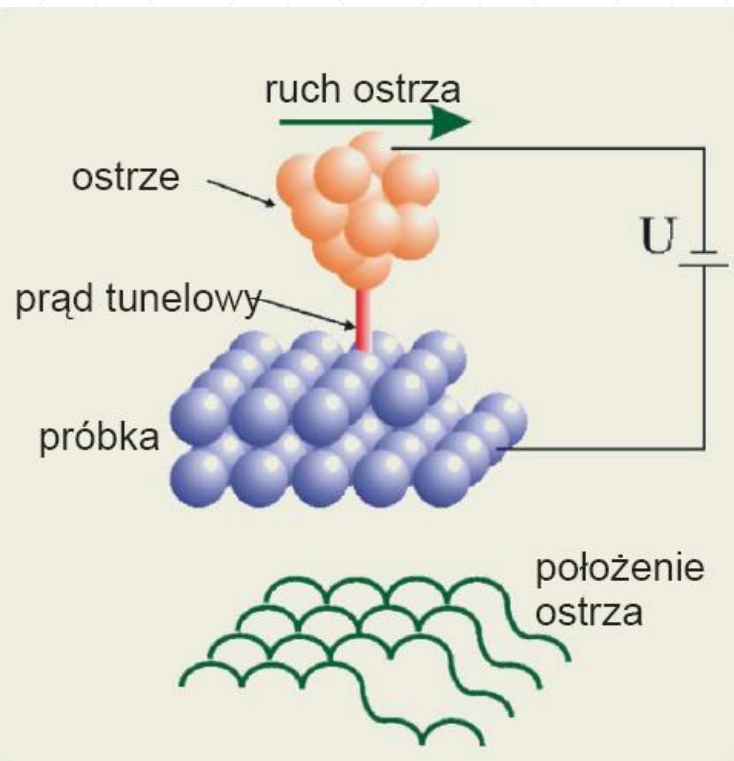
Skaningowy Mikroskop Tunelowy (STM)

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



STM składa się z:

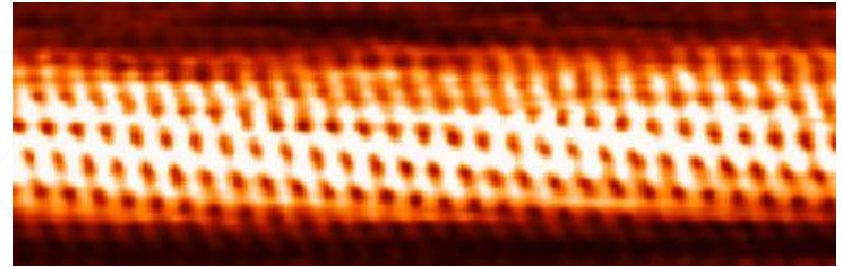
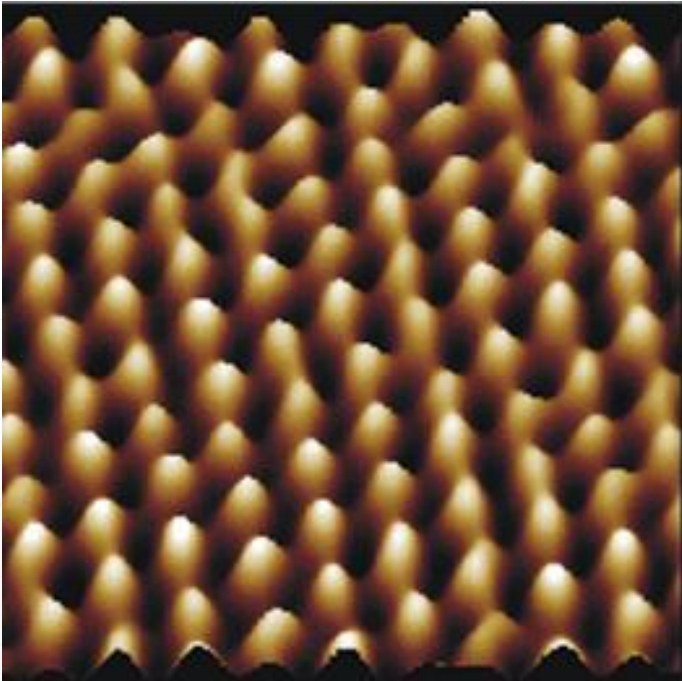
- sondy skanującej (np. igła wykonana z wolframu, platyny z irydem lub złota),
- stolika piezoelektrycznego, odpowiedzialnego za pozycjonowanie sondy
- komputera, na którym można oglądać otrzymany obraz.



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

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 różnych 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