MECANICA ONDULATORIE

① Funcția de undă și ecuația Schrödinger

Plecând de la premisa că particulele au caracter ondulatoriu prin prisma dualismului undă-corpuscul putem folosi formalismul ondulatoriu specific undelor în descrierea acestora.

Undele mecanice au fost descrise printr-o funcție de undă $\psi(x,t)$ care descrie deplasarea particulei față de poziția de echilibru în momentul t la poziția x. Această funcție de undă $\psi(x,t)$ satisfacea o ecuație generală de propagare:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial t^2} \qquad v = \text{viteza undei}$$

$$\psi(x,t) = A\cos(kx-\omega t)$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad v = \lambda\nu$$

Ne propunem să deducem o "versiune cuantică" a ecuației undelor, valabilă pentru undele asociate particulelor cuantice.

Considerând $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$

$$\frac{d\psi}{dx} = ikAe^{i(kx-\omega t)} = ik\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (ik)^2Ae^{i(kx-\omega t)} = -k^2\psi$$

$$\left.\begin{aligned} \text{dar } k &= \frac{2\pi}{\lambda} \\ \lambda &= \frac{h}{p} \end{aligned}\right\} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{h}p = \frac{p}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \iff \boxed{-\hbar^2\frac{d^2\psi}{dx^2} = p^2\psi} \qquad (1)$$

Dacă scriem acum energia mecanică totală a particulei

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + U = \frac{p^2}{2m} + U \Rightarrow$$

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + U\psi \qquad (2)$$

Din (1) și (2) $\Rightarrow$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+U\Psi=E\Psi}$$

ecuația lui Schrödinger independentă de timp.

Dependența de timp

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

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-i\omega\Psi \qquad \text{dar} \qquad E=h\nu=\hbar\omega$$

$$\Rightarrow \omega\Psi=-\frac{1}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$E\Psi=\hbar\omega\Psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad ; \quad i^2=-1$$

$$\Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+U\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

ecuația lui Schrödinger dependentă de timp

Interpretarea funcției de undă (Max. Born)

$\Psi(x,t)$ este o ~~u~~funcție complexă astfel încât

$$|\Psi(x,t)|^2=\Psi(x,t)\,\Psi^*(x,t)$$

$|\Psi(x,t)|^2$ – reprezintă o densitate de probabilitate de a găsi particula în poziția x la momentul t

$\Rightarrow$ $|\Psi(x,t)|^2dx$ – reprezintă probabilitatea de a găsi particula la momentul t în intervalul spațial dx

$$\Rightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1}$$

ne spune că particula se află cu certitudine undeva în intervalul $(+\infty, -\infty)$

condiția de normare a funcției de undă (Max-Born)

Operatorul Hamilton

În mecanica clasică analitică cantitatea egală cu suma dintre energia cinetică și potențială a unui sistem se numește Hamiltonian al sistemului (notat H)

Din $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi = E\psi \Leftrightarrow$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U\right)\psi = E\psi$$

putem crea un operator matematic

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

astfel încât ec. lui Schrödinger se scrie operatorial:

$$\boxed{\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}}$$

unde operatorul $\hat{H}$ acționează asupra funcției de undă $\psi(x)$.

Obs: Întrucât $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ reprezintă operatorul de energie cinetică

însă $E_c = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \boxed{\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}$ reprezintă operatorul impuls

Obs: Oricărei mărimi fizice clasice în mecanica cuantică i se asociază un operator.

În trei dimensiuni, putem scrie ec. Schrödinger sub forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi + U\Psi = E\Psi$$

$\Psi = \Psi(x,y,z)$

$U = U(x,y,z)$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$ operatorul Laplace

$$\Rightarrow \boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Psi = E\Psi}$$ ec. Schrödinger staționară

respectiv:

$$\boxed{\hat{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}}$$

ec. Schrödinger dependentă de timp.

Se poate demonstra că dacă cunoaștem soluția ec. Schrödinger independente de timp $\Phi(x,y,z)$, soluția dependentă de timp este:

$$\boxed{\Psi(\vec{r},t) = \Phi(\vec{r})\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}} \qquad (*)$$

$\hat{H}\Phi = E\Phi$

deci este suficient să rezolvăm ecuația Schrödinger staționară pt. a calcula stările și energiile proprii ale sistemului pentru ca apoi să putem scrie direct evoluția temporară pe baza ec (*)

Valori medii

Intrucât mecanica ondulatorie implică un caracter probabilistic va trebui să descriem mărimile fizice nu în mod determinist ca și în mecanica clasică ci în mod statistic:

Astfel, valoarea medie a unei mărimi în funcție de densitatea de probabilitate

$$\langle A \rangle = \int \underbrace{P(\vec{r})}_{\text{probabilitate statistică}} A(\vec{r})\, d^3r$$

În mecanica cuantică:

$$P(\vec{r}) = |\psi(r,t)|^2 = \psi^*(\vec{r})\,\psi$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle A \rangle = \int \psi^*(r,t)\, A(\vec{r})\, \psi(\vec{r},t)\, d^3r}$$

Flux de particule. Ecuație de continuitate

O particulă nu poate fi descrisă printr-o funcție de undă discontinuă ce ar implica o densitate de probabilitate de prezență în spațiu discontinuă pentru particulă! Astfel, funcția de undă trebuie să fie continuă în spațiu.

De asemenea, nu doar funcția de undă trebuie să fie continuă ci și derivata acesteia $\frac{d\psi}{dr}$.

În mecanica clasică (dinamica fluidelor) se definește o densitate de curent a particulelor:

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \underbrace{\rho(\vec{r},t)}_{\text{densitate}}\ \underbrace{\vec{v}(\vec{r},t)}_{\text{viteza}}$$

care satisface o ecuație de continuitate de tipul:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0}$$

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\bar{i} + \frac{\partial}{\partial y}\bar{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$$

divergența curentului

În mod absolut analog se poate scrie o ecuație identică în mecanica cuantică pentru "fluidul de probabilitate".

Dacă definim:

$$\rho(\bar{r},t) = |\psi(\bar{r},t)|^2$$

densitatea de probabilitate

Se poate arăta că dacă densitatea de curent de probabilitate are forma:

$$\boxed{\bar{j}(\bar{r},t) = \frac{i\hbar}{m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right)}$$

se ajunge la o ecuație de continuitate analogă:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0}$$

Într-o dimensiune: $\bar{j}(x,t) = \frac{i\hbar}{m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$

Continuitatea densității de curent de probabilitate implică continuitatea derivatei funcției de undă.

$\Rightarrow$ La frontiera a două zone din spațiu în care $(U_I \neq U_{II})$ energia potențială simțită de particula este diferită ψ și $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ trebuie să fie continue.

APLICAȚII ALE MECANICII CUANTICE

Ecuația lui Schrödinger este o ecuație diferențială de ordin II a cărei rezolvare conduce la determinarea

- funcției de undă $\Psi(\vec{r})$ respectiv a
- energiei pe care particula cuantică o poate avea într-o stare $\Psi(\vec{r})$

Ca și pentru orice ecuație diferențială condițiile la limită sunt extrem de importante pentru a putea determina constantele de integrare. Aceste condiții se adaugă condițiilor de continuitate pentru funcția de undă și derivata acesteia la frontiera între două zone din spațiu cu energie potențială diferită.

zona I	zona II	... etc.
U_I	U_{II}	

$$\underline{\hat{H}\Psi = E\Psi} \quad \Longleftrightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi = (E-U_i)\Psi$$

Strategie de rezolvare a unei probleme de MQ

(1) se proiectează ec. Schrödinger în fiecare zonă caracterizată de U_i diferit și se rezolvă în parte ecuațiile respective $\Rightarrow \Psi_i(\vec{r})$

(2) Se pun condițiile de continuitate la frontiera dintre zone atât pt funcția de undă cât și derivata acesteia:

ex
$$\Psi_I(x)\Big|_{\text{frontieră}} = \Psi_{II}(x)\Big|_{\text{frontieră}}$$

$$\frac{\partial \Psi_I(x)}{\partial x}\Big|_{\text{frontieră}} = \frac{\partial \Psi_{II}(x)}{\partial x}\Big|_{\text{frontieră}}$$

(3) Se scrie condiția de normare a funcției de undă, adică integrala pe tot spațiul funcției de undă trebuie să fie egală cu unu.

Folosind acest formalism și algoritm putem rezolva o serie de probleme de mecanică cuantică dintre care am ales un număr finit:

→ particula într-o groapă de potențial
→ bariera de potențial și efectul tunel
→ particula într-o cutie 3D de potențial
→ oscilatorul armonic cuantic
→ Atomul de hidrogen
→ Molecula biatomică
→ Electroni într-un potențial cristalin periodic.

Vom putea astfel explica originea benzilor de energie în solide, proprietățile metalelor, izolatorilor, semiconductorilor, și pune bazele electronicii stării solide: joncțiuni, tranzistori, etc

APLICAȚII ALE MECANICII CUANTICE

Ne propunem să rezolvăm ecuația lui Schrödinger independentă de timp pentru câteva cazuri simple

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

pentru a determina: – nivelele de energie posibile
– funcțiile de undă $\psi(\vec{r})$

Problema fundamentală se pune în felul următor: pentru o energie potențială $U(x)$ dată (în cazul 1D de exemplu) care sunt stările staționare posibile $\psi(x)$ ale sistemului și energiile corespunzătoare acestora?

1 Particula liberă

$U(x) = 0$

particula se poate mișca liber pe o direcție (Ox)

$\xrightarrow{\quad\quad} x$

Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0}$$

$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ vectorul de undă $\in \mathbb{R}$

$$\left(E = \frac{p^2}{2m} \qquad p = \hbar k\right)$$

$\Rightarrow$ ec. dif. de ordinul 2: $\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0}$

Soluțiile acestei ecuații sunt:

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

unda propagativă de-a lungul direcției $+x$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x) = Ae^{ikx}}$$

particula liberă este descrisă de o <u>UNDĂ PLANĂ</u>

Energia particulei libere:

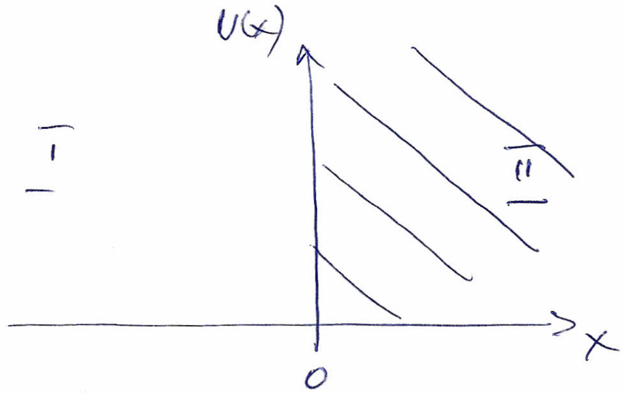
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$ poate lua orice valoare între $(0, +\infty)$

Localizare:

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\,\psi(x) = A^* e^{-ikx} A e^{ikx} = |A|^2 = \text{const.}$$

$\Rightarrow$ particula poate fi găsită cu egală probabilitate oriunde în intervalul $x = (-\infty, +\infty)$ $\Rightarrow$ delocalizare

② Treapta infinită $\Leftrightarrow$ undelor staționare într-o coardă



$$U(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \quad (i) \\ \infty & x\geq 0 \quad (ii) \end{cases}$$

Particula se propagă de-a lungul direcției $+x$ și este complet reflectată de către bariera de potențial infinită în $x=0$.

Ecuația lui Schrödinger se scrie pentru cele 2 regiuni (I) și (II):

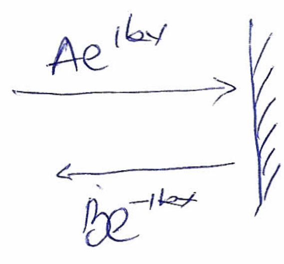
(I) $U(x) = 0$ $\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$ $\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$\Rightarrow$ soluția generală: $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

Ae^{ikx}: unda incidentă (propagare de-a lungul $+x$)

Be^{-ikx}: unda reflectată (propagare de-a lungul $-x$)



$\psi(x)$ = suprapunerea dintre o undă incidentă și una reflectată

$\Rightarrow$ UNDĂ STAȚIONARĂ

În regiunea II $\quad U(x) = \infty$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)\psi = E\psi$$ este posibilă doar dacă $\psi(x) = 0$

$\Rightarrow |\psi(x)|^2 = 0$ pt. $x > 0$

aceasta ne spune că particula este <u>total reflectată</u> în $x = 0$ și nu pătrunde în $x > 0$.

Constantele A și B se calculează din condiția de continuitate în $x = 0$

$$\Rightarrow \psi(x)\Big|_{x=0} = 0 \qquad \Rightarrow A + B = 0\ ; \ A = -B$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right)}$$ unda staționară

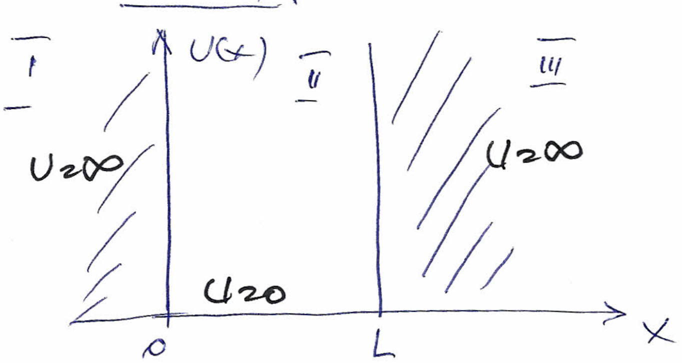
energia: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

3) <u>Particula într-o groapă de potențial infinită 1D</u>

$\Leftrightarrow$ echivalentul modurilor într-o coardă vibrantă fixată la ambele capete.

Ce se întâmplă dacă o particulă cuantică este confinată într-o zonă din spațiu $x \in (0, L)$

<u>Model</u>:



$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & x < 0 \ \& \\ & x > L \end{cases}$$

În acest caz ecuația Schrödinger se scrie pt. 3 zone: 1 zonă interioară $U(x) = 0$

2 zone exterioare $U(x) = \infty$

exterior: $U(x)=\infty$ $\Rightarrow \psi(x)=0$

interior: $U(x)=0$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi=E\psi$ $\Leftrightarrow$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0 \qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

care are soluţia generală:

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

$\longrightarrow$ $\longleftarrow$

suprapunere a două unde care se propagă de-a lungul direcţiilor $+x$ şi $-x$

$\Rightarrow$ undă staţionară

Condiţiile la limită:

$x=0$ $\psi(x)=0 \Rightarrow A=-B$

$x=L$ $\psi(x)=0 \Rightarrow A\left(e^{ikL}-e^{-ikL}\right)=0$

folosind rel. Euler: $\frac{e^{iy}-e^{-iy}}{2i}=\sin y$

$\Rightarrow 2iA\sin kL=0$ $\Leftrightarrow \sin kL=0 \Rightarrow$

$kL=n\pi$ $n=1,2,\dots$

$$\Rightarrow \boxed{k_n=\frac{n\pi}{L}}$$

$\Rightarrow$ vectorul de undă nu poate avea decât valori discrete corespunzând lui $n=1,2,\dots$ $\Rightarrow$ CUANTIFICARE

$$\Rightarrow \boxed{E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2} \qquad n=1,2,3,\dots$$

$\Rightarrow$ energia particulei în groapa de potenţial este cuantificată

Obs: Cuantificarea apare ca şi efect direct al condiţiilor la limită ($\Leftrightarrow$ restrângerii particulei (localizării) într-o zonă finită din spaţiu.

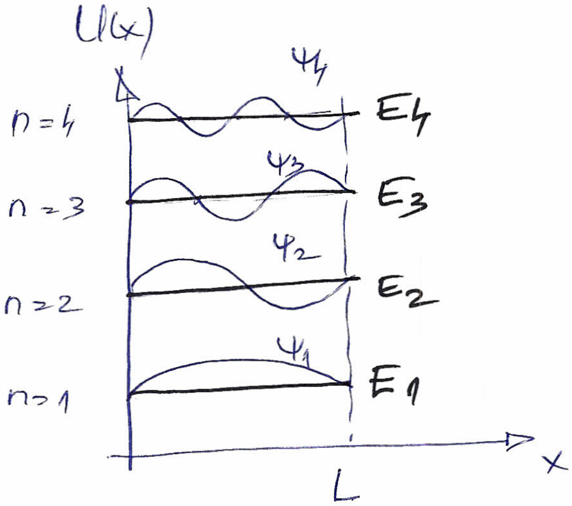
Funcția de undă:

$$\psi_n(x) = \underbrace{2iA}_{C} \sin k_n x = C \sin k_n x$$

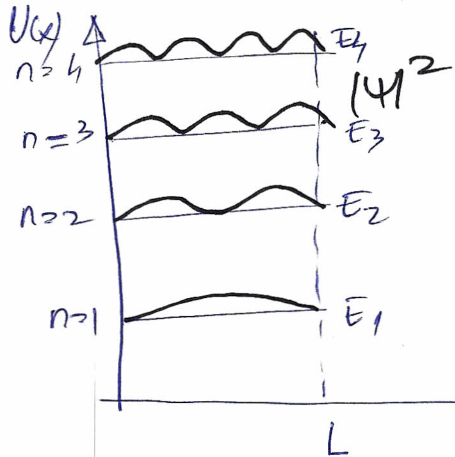
$$\Rightarrow \boxed{\psi_n(x) = C \sin \frac{n\pi x}{L}}$$

undă staționară sinusoidală:

$n = 1, 2, \dots \Leftrightarrow$ MODURI ale corzii vibrante



funcția de undă.



probabilitate $|\psi(x)|^2$

Probabilitate și normalizare

$$|\psi(x)|^2 dx = C^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx$$

Particula trebuie să fie obligatoriu undeva între $(0, L)$ pt că $\psi(x) = 0$ pt $x < 0$ and $x > L$.

$$\Rightarrow \int_0^L C^2 \sin^2 \frac{\pi n x}{L} dx = 1$$

calculând integrala folosind $\sin^2\theta = \frac{1 - \cos 2\theta}{2}$

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

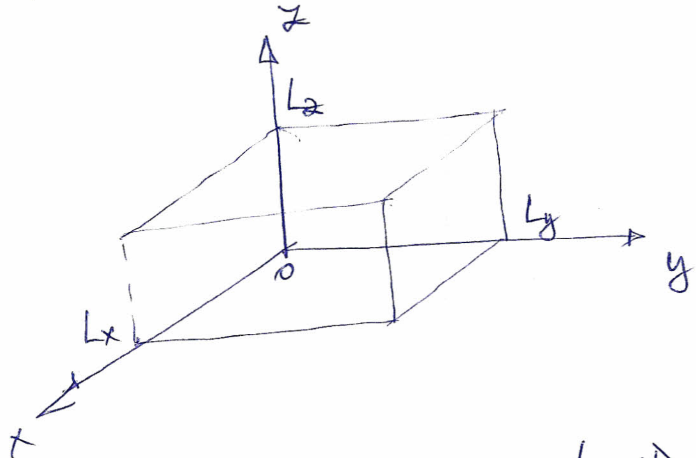
$$\Rightarrow \boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}}$$

$n = 1, 2, \dots$

echivalentul modurilor dintr-o coardă vibrantă

(4) Cutia de potențial. Ec. Schrödinger în 3 dimensiuni

Ce se întâmplă dacă o particulă este restricționată spațial într-o regiune paralelipipedică $x \in (0, L_x)$, $y \in (0, L_y)$, $z \in (0, L_z)$



Aceasta poate fi situația unui electron în interiorul unui metal solid care nu poate părăsi metalul.

Exact ca și în cazul 1D, energia potențială este 0 în interiorul cutiei și ∞ în exterior

Ecuația lui Schrödinger în 3D este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right)+U(x,y,z)\,\psi(x,y,z)$$

$$=E\,\psi(x,y,z)$$

Întrucât în exteriorul cutiei $U(x,y,z)=\infty \Rightarrow$

$\psi(x,y,z)=0 \Rightarrow$

densitatea de probabilitate $|\psi(x,y,z)|^2=0$ în exteriorul cutiei

În interiorul cutiei vom rezolva ecuația lui Schrödinger prin metoda separării variabilelor:

$$\Rightarrow \psi(x,y,z)=X(x)\,Y(y)\,Z(z) \quad \text{și} \quad U(x,y,z)=0$$

care substituită în ec. Schrödinger conduce la:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[Y(y)Z(z)\frac{d^2X(x)}{dx^2}+X(x)Z(z)\frac{d^2Y(y)}{dy^2}+X(x)Y(y)\frac{d^2Z(z)}{dz^2}\right]$$

$$=E\,X(x)\,Y(y)\,Z(z) \quad \Big| \cdot \frac{1}{X(x)\,Y(y)\,Z(z)}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2}\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}\right)+$$
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z(z)}{dz^2}\right)=E$$

Descompunem $E = E_x + E_y + E_z$

descriind contribuția la energia totală a mișcărilor de-a lungul axelor x, y, z, valabilă întrucât în interiorul cutiei $U(x,y,z) = 0$ și Energia E este pur cinetică

$$\Rightarrow \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = E_x X(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y(y)}{dz^2} = E_y Y(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z(z)}{dz^2} = E_z Z(z) \end{cases}$$

set de 3 ec. dif. de tipul gropii de potențial 1D fiecare

Rezolvând în mod analog problemei 1D a gropii de potențial infinite și punând condițiile la limită obținem: soluțiile $X_{n_x}(x)$, $Y_{n_y}(y)$, $Z_{n_z}(z)$ și implicit: $\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z)$

$$\boxed{\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = C \sin\frac{n_x \pi x}{L_x} \sin\frac{n_y \pi y}{L_y} \sin\frac{n_z \pi z}{L_z}}$$

analogul unei unde electromagnetice staționare între cavitate.

OBS:
Întrucât restrângerea spațială se face pe 3 dimensiuni rezultă 3 NUMERE CUANTICE $n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots$

Normare: $\int_0^{L_x}\int_0^{L_y}\int_0^{L_z} |\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z)|^2 = 1 \Longrightarrow \boxed{C = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}}$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin n_x \frac{\pi x}{L_x} \sin n_y \frac{\pi y}{L_y} \sin n_z \frac{\pi z}{L_z}}$$

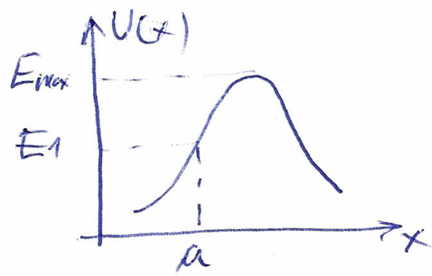
Nivele de energie

$$\boxed{E_{n_x n_y n_z} = \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}}$$

$n_x = 1, 2, \ldots$
$n_y = 1, 2, \ldots$
$n_z = 1, 2, \ldots$

5 Bariera de potențial și efectul tunnel

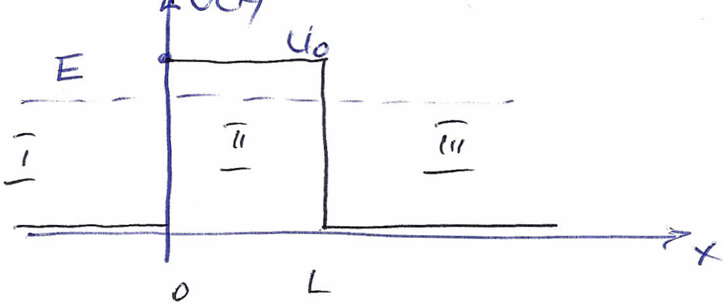
Bariera de potențial este opusul gropii de potențial, energia sa potențială are un maximum.



In conformitate cu mecanica Newtoniană o particulă cu energia $E_1 < E_{max}$, inițial în stânga barierei, nu poate trece mai în dreapta decât $x = a$.

In mecanica cuantică, particula care întâlnește bariera cu $E_1 < E_{max}$ poate să "apară" în partea cealaltă a barierei. Fenomenul se numește efect tunel.

Bariera dreptunghiulară



$$U(x) = \begin{cases} 0 & x<0,\ x>L \\ U_0 & x \in (0, L) \end{cases}$$

Se va proiecta și rezolva ec. Schrödinger pentru cele 3 regiuni. Apoi, se pun condițiile de continuitate ale funcției de undă și a derivatelor sale în $x=0$ și $x=L$.

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi & (\underline{I}, \underline{III}) \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi = E\psi & (\underline{II}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 & (\underline{I}, \underline{III}) \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\psi = 0 & (\underline{II}) \end{cases}$$

Notam: $k_1 = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

$k_2 = \sqrt{\dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} \in \mathbb{C} \Rightarrow k_2 = iK$

$(E < U_0)$

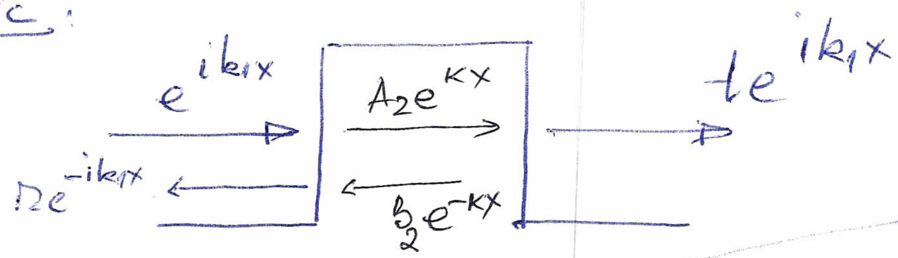
$\Rightarrow$ Schrödinger:
$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0 & (\underline{I}, \underline{III}) \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2} - K^2\psi = 0 & (\underline{II}) \end{cases}$$

Solutiile acestor ec. dif. de ordin $\underline{II}$ sunt:

$$\begin{cases} \psi_{\underline{I}}(x) = \underbrace{A_1 e^{ik_1x}}_{\text{unda incidenta}} + \underbrace{B_1 e^{-ik_1x}}_{\text{unda reflectata}} & x < 0 \\ \psi_{\underline{II}}(x) = \underbrace{A_2 e^{Kx}}_{\text{unda evanescenta propagativa de-a lungul } +x} + \underbrace{B_2 e^{-Kx}}_{\text{unda evanescenta propagativa de-a lungul } -x} & x \in (0, L) \\ \psi_{\underline{III}}(x) = \underbrace{A_3 e^{ik_1x}}_{\text{unda transmisa}} + \underbrace{\cancel{B_3 e^{-ik_1x}}}_{\text{unda reflectata in } +\infty} & \end{cases}$$

fixam $B_3 = 0$ (nu ~~exista~~ exista reflexie in $+\infty$)

Fizic:



Notam:
$A_1 = 1$
$B_1 = R$
$A_3 = t$

normalizarea undei incidente

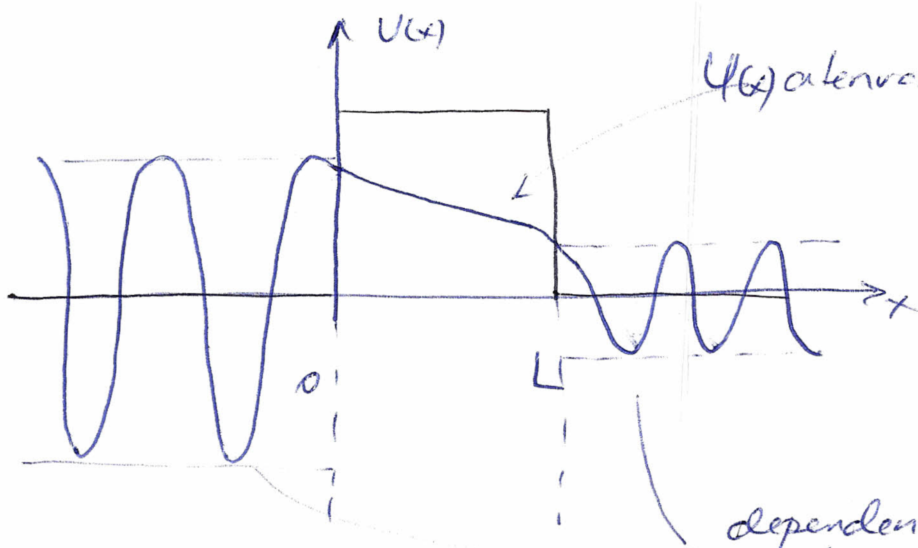
$|B_2|^2 = R^2 = R$ = coeficient de reflexie

$|A_3|^2 = t^2 = T$ = coeficient de transmisie

$$R = \frac{J_{reflectat}}{J_{incident}} \qquad J = \text{densitate de curent de probabilitate.}$$

$$T = \frac{J_{transmis}}{J_{incident}}$$

Coeficientii se calculeaza din conditiile de continuitate pentru functia $\psi(x)$ si a derivatelor sale in $x=0$, si $x=L$. Se obtine astfel o functie de unda de tipul celei din fig. de mai jos:



$\psi(x)$ atenuare exponentiala in barieră

dependenta sinusoidala in exterior (unda plana)

Obs: Functia de unda este diferita de zero $\Rightarrow |\psi(x)|^2 \neq 0$ in interiorul barierei (regiune interzisa de mecanica clasica dacă $E < V_0$).

Mai mult, o particulă inițial în regiunea I cu $E < U_0$ are o probabilitate non-nulă de a se regăsi în regiunea II, în partea cealaltă a barierei, ca și cum ar fi traversat bariera prin efect tunel cuantic.

Această probabilitate de transmisie prin efect tunel T depinde de lărgimea L a barierei și de energia E a particulei față de înălțimea barierei de potențial.

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = t^2$$

După calcule, se arată că în cazul barierei groase (caz limită)

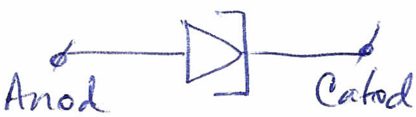
$$\boxed{T = G e^{-2Kd}} \quad \text{unde} \quad K = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$G = 16 \frac{E}{U_0}\left(1 - \frac{E}{U_0}\right) = 16 \frac{K^2 k_1^2}{(k_1^2 + K^2)^2}$$

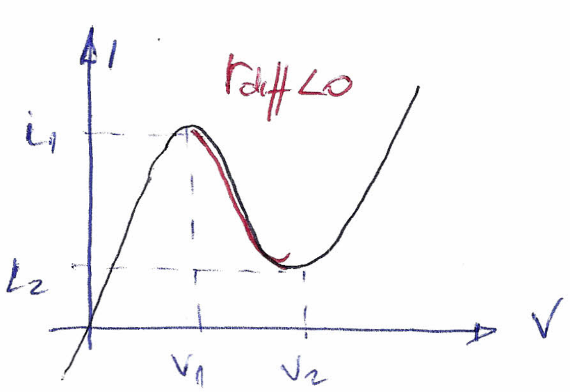
Aceasta arată o probabilitate exponențială descrescătoare a transmisiei prin efect tunel în funcție de grosimea L a barierei și de funcție de $K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$

Aplicații directe

1 → **dioda tunel**: (Esaki) = joncțiune metal-izolator-metal



→ curentul poate fi comutat (on/off) foarte rapid (pico secunde) prin varierea tensiunii care modulează înălțimea barierei de potențial

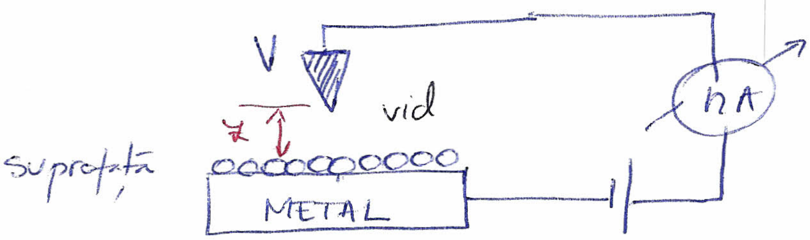


→ într-o anumită zonă prezintă rezist. diferențială negativă ($r_{dif} = \frac{dU}{dI} < 0$) poate fi folosită pt compensarea rezist. de pierderi în circuite oscilante.

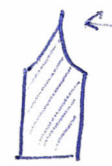
(2) Microscopul tunel (Scanning Tunneling Microscope - STM)

1981. G. Binnig, H. Rohrer, Premiu Nobel 1986 IBM Zurich

→ folosit pentru a vizualiza suprafeți metalice cu rezoluție atomică

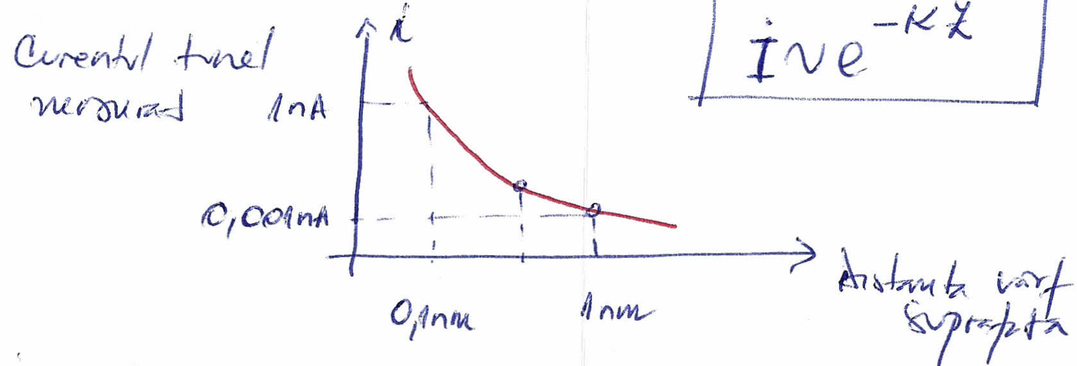


V = vârf metalic foarte ascuțit

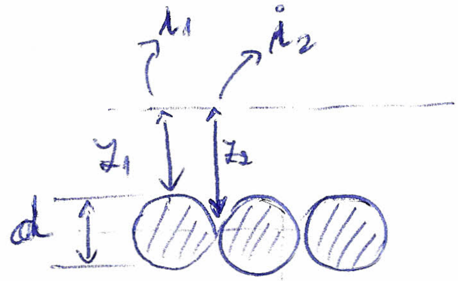


apex de dimensiuni atomice

Curentul traversează distanța dintre vârf și suprafață prin efect tunnel. Transmisia electronilor și deci implicit curentul măsurat depind exponențial de distanța vârf - suprafață. Dacă măsurăm curentul, vom putea astfel măsura topologia suprafeței cu rezoluție atomică.



$$\boxed{i \sim e^{-kz}}$$



$$\Delta z = d/2 \Rightarrow i_2 - i_1 \approx e^{-kz_2} - e^{-kz_1}$$

Contrast exponențial

d = diametrul atomului

⇒ REZOLUȚIE ATOMICĂ

Dezvoltarea microscopului tunel a revoluționat fizica suprafețelor și a permis dezvoltarea unor materiale și tehnologii inovative prin accesul la proprietățile suprafețelor la scala atomică.