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)

$$\xrightarrow{\hspace{3em}} x$$

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 $\in \mathbb{R}$

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

$\Rightarrow$ 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 UNDĂ PLANĂ

Energia particulei libere:

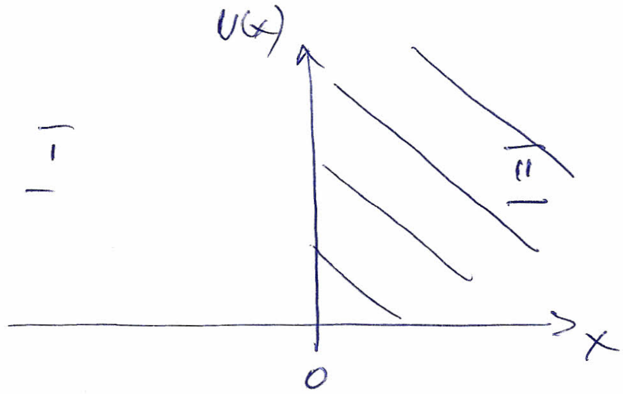
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$ poate lua orice valoare între $(0, +\infty)$

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



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

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):

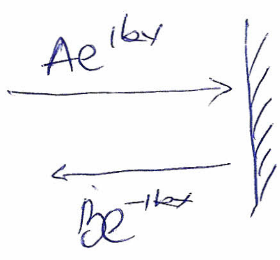
(I) $U(x) = 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$

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

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

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

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



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

$\Rightarrow$ UNDĂ STAȚIONARĂ

In regiunea II $U(x) = \infty$

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

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

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

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

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

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

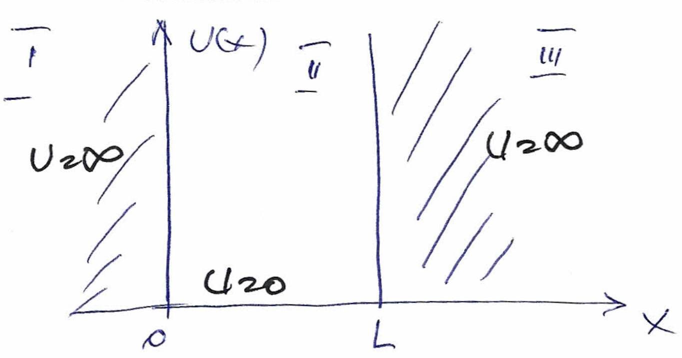
energia: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

3) Particula într-o groapă de potențial infinită 1D

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

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

Model:



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

In 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 soluția generală:

$$\boxed{\psi(x)=A\underset{\longrightarrow}{e^{ikx}}+B\underset{\longleftarrow}{e^{-ikx}}}$$

suprapunere a două unde care se propagă de-a lungul direcțiilor $+x$ și $-x$ $\Rightarrow$ undă staționară

Condițiile 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: $\frac{e^{iy}-e^{-iy}}{2i}=\sin y$

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

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

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

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

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

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

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

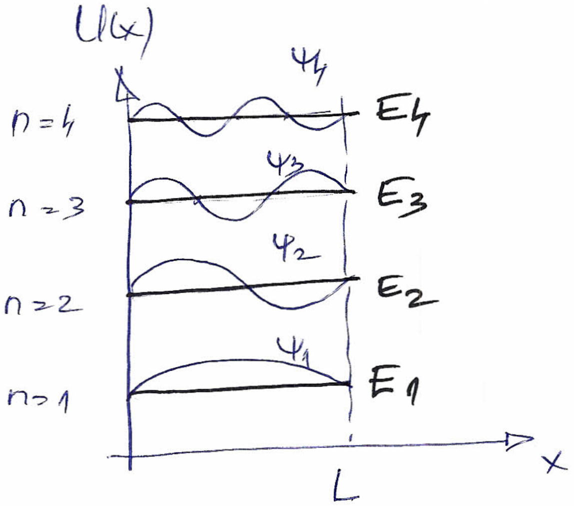
Functia de undă:

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

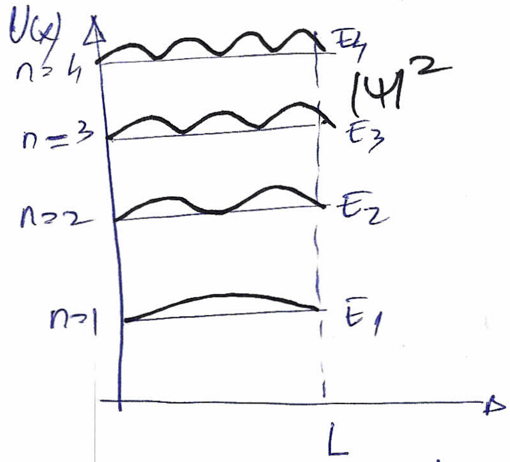
$$\Rightarrow \boxed{\psi_n(x) = C \sin \frac{n\pi x}{L}}$$

undă staționară sinusoidală.

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



functia 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 $\sin^2\theta = \frac{1-\cos 2\theta}{2}$

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

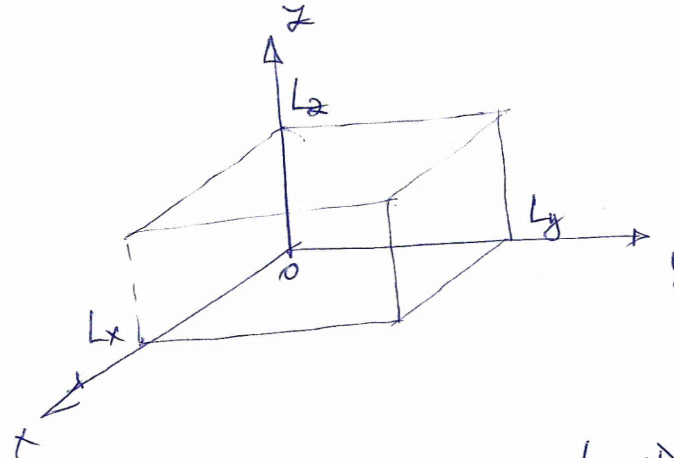
$$\Rightarrow \boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}}$$

$n = 1, 2, \dots$

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

$$\Rightarrow \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2X(x)}{dx^2}=E_xX(x) \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2Y(y)}{dz^2}=E_yY(y) \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2Z(z)}{dz^2}=E_zZ(z) \end{cases}$$

set de 3 ec. dif. de tipul groapă 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 cavități.

OBS:

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

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

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

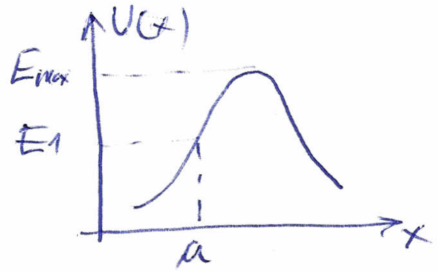
Nivele de energie

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

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

5 Bariera de potential și efectul tunnel

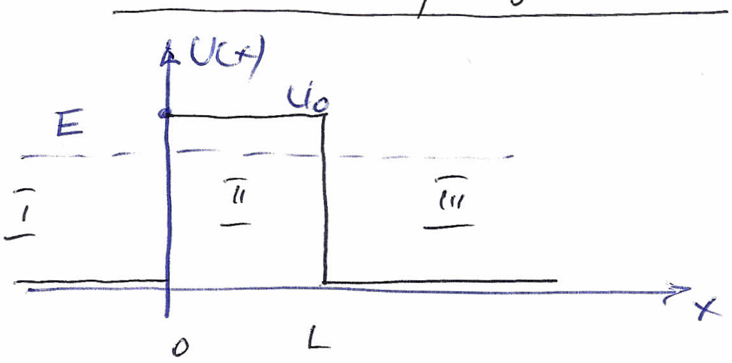
Bariera de potențial este opusul gropii de potential, energia sa potențială are un maximum.



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

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

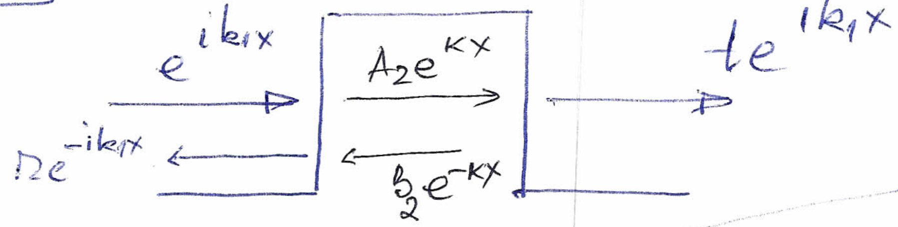
$\Rightarrow$ Schrödinger:
$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0 & (\underline{I}, \underline{III}) \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2} - K^2\psi = 0 & (\underline{II}) \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} \psi_{\underline{I}}(x) = \underbrace{A_1 e^{ik_1 x}}_{\text{undă incidentă}} + \underbrace{B_1 e^{-ik_1 x}}_{\text{undă reflectată}} & x < 0 \\ \psi_{\underline{II}}(x) = \underbrace{A_2 e^{Kx}}_{\text{undă evanescentă propagativă de-a lungul } +x} + \underbrace{B_2 e^{-Kx}}_{\text{undă evanescentă propagativă de-a lungul } -x} & x \in (0, L) \\ \psi_{\underline{III}}(x) = \underbrace{A_3 e^{ik_1 x}}_{\text{undă transmisă}} + \underbrace{\cancel{B_3 e^{-ik_1 x}}}_{\text{undă reflectată în } +\infty} \end{cases}$$

fixăm $B_3 = 0$ (nu ~~există~~ există reflexie în $+\infty$)

Fizic:



Notăm:
$A_1 = 1$
$B_1 = R$
$A_3 = t$

normalizarea undei incidente

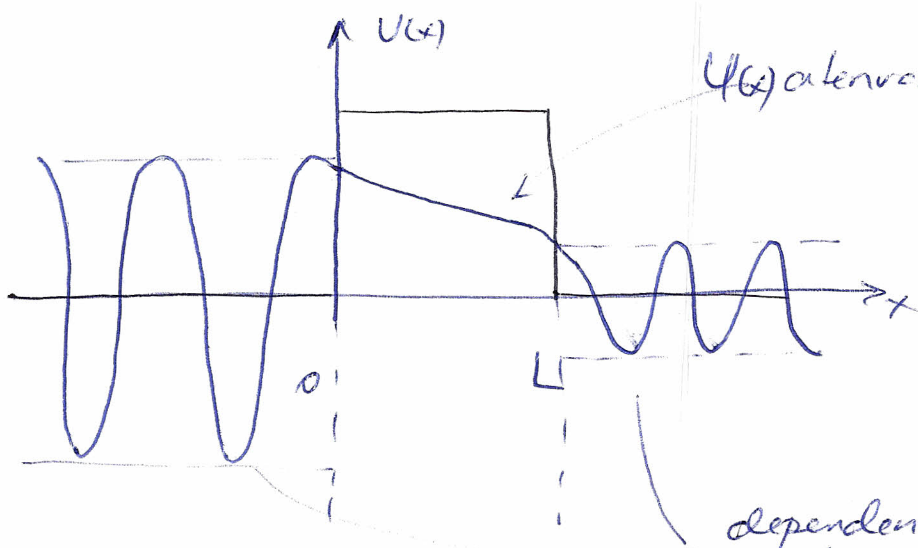
$|B_2|^2 = R^2 = R$ = coeficient de reflexie

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

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

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

Coeficienții se calculează din condițiile de continuitate pentru funcția $\psi(x)$ și a derivatelor sale în $x=0$, și $x=L$. Se obține astfel o funcție de undă de tipul celei din fig. de mai jos:



$\psi(x)$ atenuare exponențială în barieră

dependență sinusoidală în exterior (unda plană)

Obs: Funcția de undă este diferită de zero $\Rightarrow |\psi(x)|^2 \neq 0$ în interiorul barierei (regiune interzisă de mecanica clasică 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)

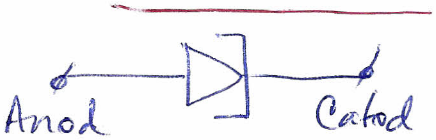
$$\boxed{T = G e^{-2Kd}} \quad \text{unde} \quad K = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

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

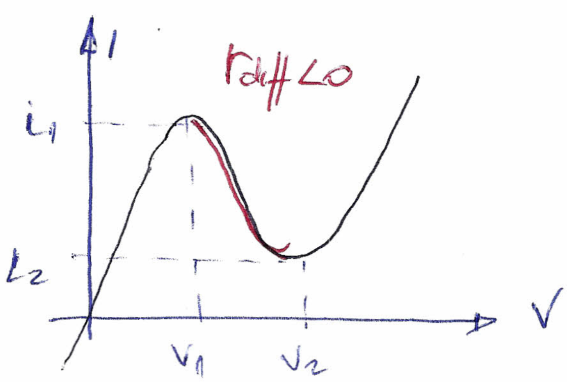
Aceasta arată o probabilitate exponențială descrescătoare a transmisiei prin efect tunel în funcție de grosimea L a barierei și în funcție de $K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$

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



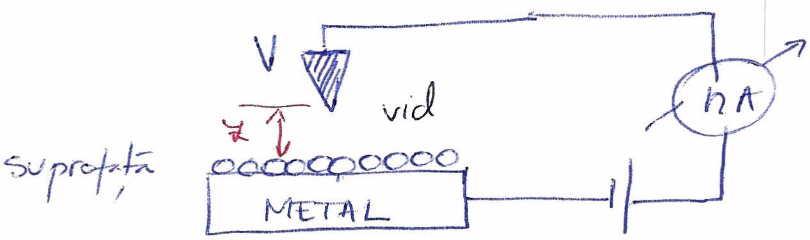
→ într-o anumită zonă prezintă rezist. diferențială negativă $\left(r_{dif} = \frac{du}{di} < 0\right)$

poate fi folosită pt compensarea rezist. de pierderi în circuite oscilante.

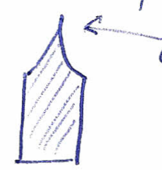
② Microscopul tunel (Scanning Tunneling Microscope – STM)

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

→ folosit pentru a vizualiza suprafeţe metalice cu rezoluţie atomică

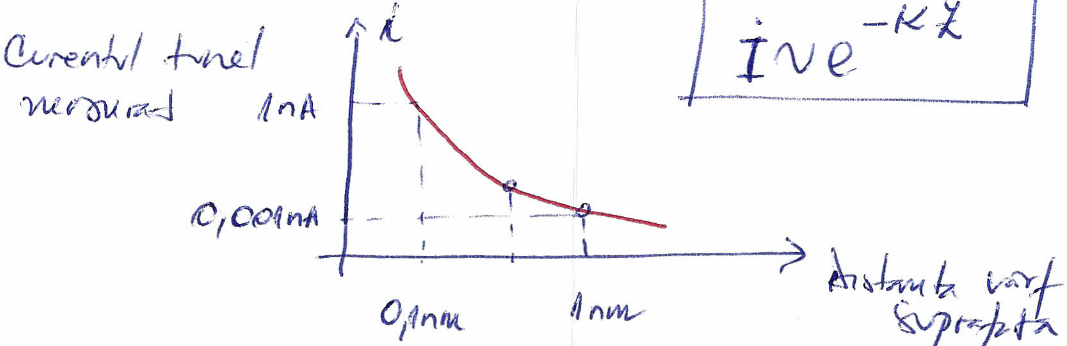


V = vârf metalic foarte ascuţit

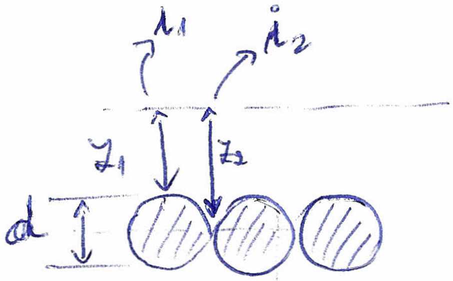


apex de dimensiuni atomice

Curentul traversează distanţa dintre vârf şi suprafaţă prin efect tunnel. Transmisia electronilor şi deci implicit curentul măsurat depind exponenţial de distanţa vârf – suprafaţă. Dacă măsurăm curentul, vom putea astfel măsura topologia suprafeţei cu rezoluţie atomică.



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



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

contrast exponenţial

d = diametrul atomului

⇒ REZOLUŢIE ATOMICĂ

Dezvoltarea microscopului tunel a revoluţionat fizica suprafeţelor şi a permis dezvoltarea unor materiale şi tehnologii inovative prin accesul la proprietăţile suprafeţelor la scala atomică.