

Wykład 22: Studnie i bariery

Dr inż. Zbigniew Szklarski

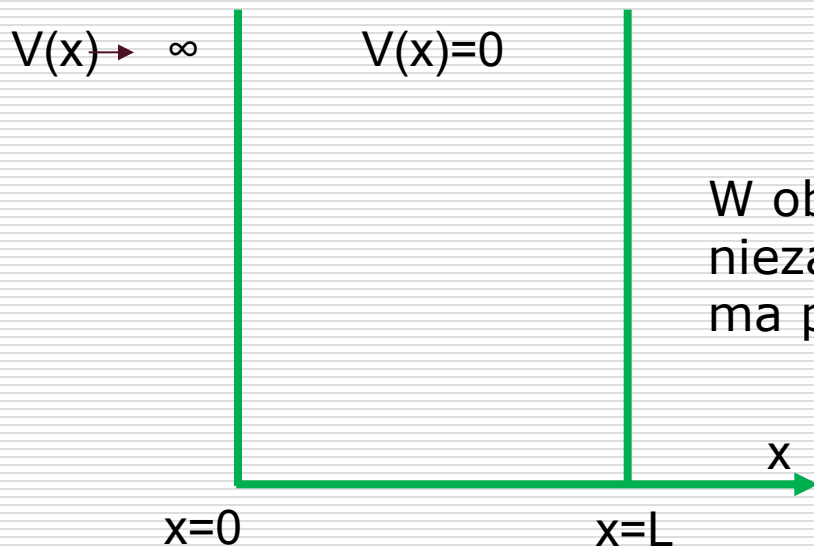
Katedra Elektroniki, paw. C-1, pok.321

szkla@agh.edu.pl

<http://layer.uci.agh.edu.pl/Z.Szklarski/>

Nieskończona studnia potencjału

Nieskończenie duży potencjał na krawędziach studni nie pozwala elektronom opuścić obszaru $0 < x < L$; w tym obszarze elektron jest swobodny, a na zewnątrz studni, gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu wynosi zero



Warunki brzegowe:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

W obszarze wewnątrz studni, tj. dla $0 < x < L$, niezależne od czasu równanie Schrödingera ma postać:

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

Proponowane rozwiązanie:

$$\psi(x) = A \sin(kx) \quad \text{gdy:}$$

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

Stosując warunki brzegowe: dla $x=L$, $\psi=0$

Stąd: $\sin(kL) = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi$

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad \text{dla } n = 1, 2, \dots$$

Energia elektronu przyjmuje tylko wartości dyskretne

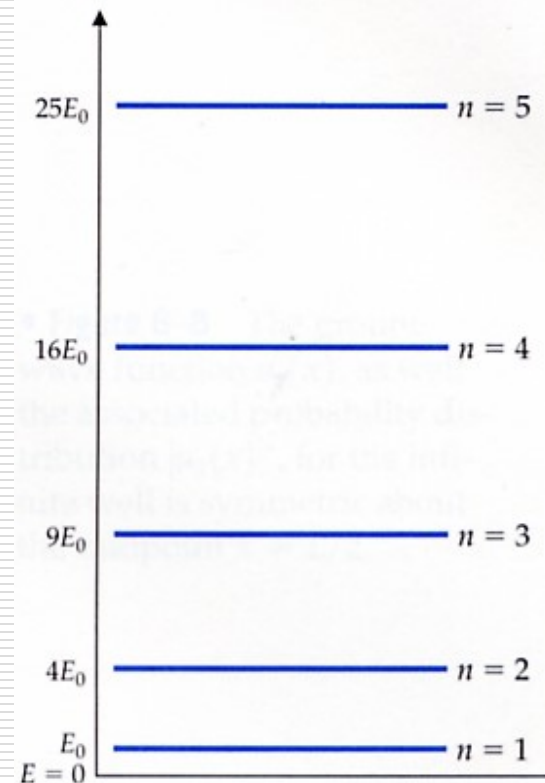
Energia jest skwantowana

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{L} \right)^2$$

Najniższa wartość energii E_1 (stan podstawowy dla $n=1$), energia drgań zerowych

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

dyskretne poziomy energetyczne

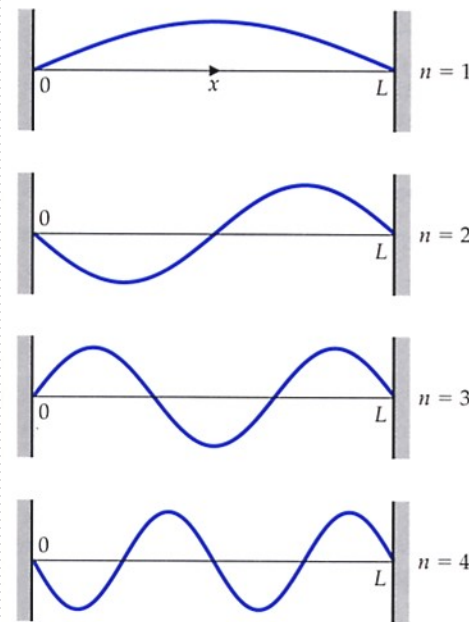


Nieskończona studnia potencjału c.d.

Rozwiązania równania Schrödingera $\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

odpowiadają falom stojącym z różną liczbą n węzłów wewnątrz studni

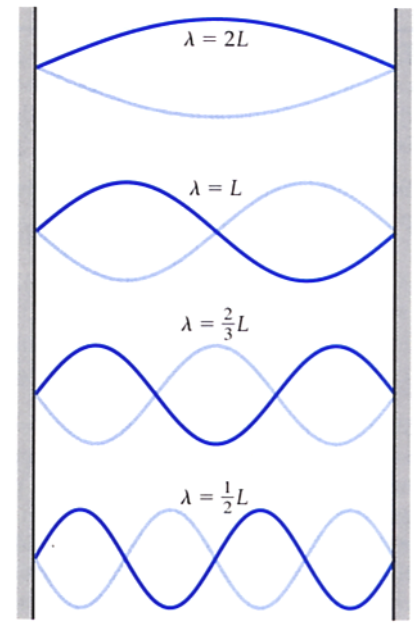
Funkcje własne $\psi_n(x)$ dla nieskończonej studni



Amplituda A jest obliczana z normalizacji funkcji falowej

$$|A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Dozwolone mody $\rightarrow$ drgań dla klasycznej struny z węzłami na końcach



Zastosowanie równania Schrödingera dla bariery potencjału

- Cząsteczka o masie m i energii E porusza się w kierunku dodatnim osi X , napotykając w $x = 0$ potencjał schodkowy o wysokości V_0 – jak na rysunku. Przyjąć $E < V_0$.

Z równań klasycznych wynika że:

energia cząsteczki

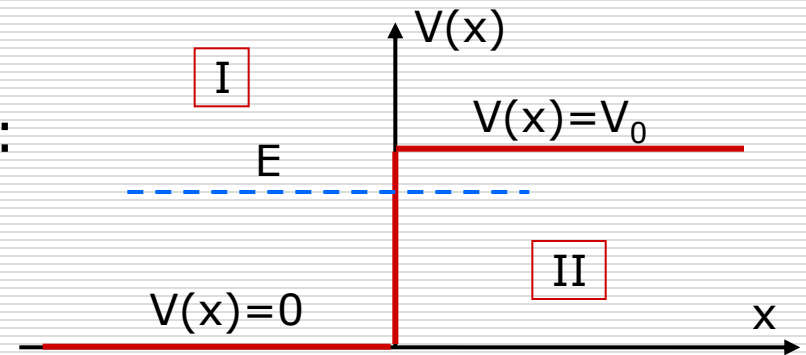
$$E = E_k + E_p \quad E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

dla $x < 0$

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

$$\text{dla } x > 0 \quad E = \frac{p^2}{2m} + V(x) < V(x) = V_0 \quad \Rightarrow \quad \frac{p^2}{2m} < 0$$

cząsteczka nie może wejść w obszar $x > 0$!!



równanie Schrödingera dla obszaru I:

$$x \leq 0 \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \quad \text{jak dla cząsteczki swobodnej}$$

Rozwiązaniem ogólnym jest funkcja własna – fala bieżąca:

$$\psi_I(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

fala bieżąca w kierunku „+” osi X fala odbita w kierunku „-” osi X

gdzie k_1 obliczamy podstawiając rozwiązanie do równania dla obszaru I:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Funkcja falowa odpowiadająca funkcji własnej:

$$\Psi(x, t) = A e^{ik_1 x} e^{-i \frac{Et}{\hbar}} + B e^{-ik_1 x} e^{-i \frac{Et}{\hbar}} = A e^{i \left(k_1 x - \frac{Et}{\hbar} \right)} + B e^{i \left(-k_1 x - \frac{Et}{\hbar} \right)}$$

równanie Schrödingera dla obszaru II:

$$x > 0 \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

Rozwiązaniem jest podobna funkcja własna – fala bieżąca:

$$\psi_{II}(x) = \cancel{C}e^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad \text{gdzie} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

ale: gdy $x \rightarrow +\infty$ rozbieżne więc $C = 0$

$$\psi_{II}(x) = De^{-k_2x}$$

Funkcja własna i jej pierwsza pochodna dla całego obszaru osi X musi być wszędzie skończona, ciągła i jednoznaczna, zatem:

dla $x = 0$ „zszycie” tzn.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = D \quad \text{oraz}$$

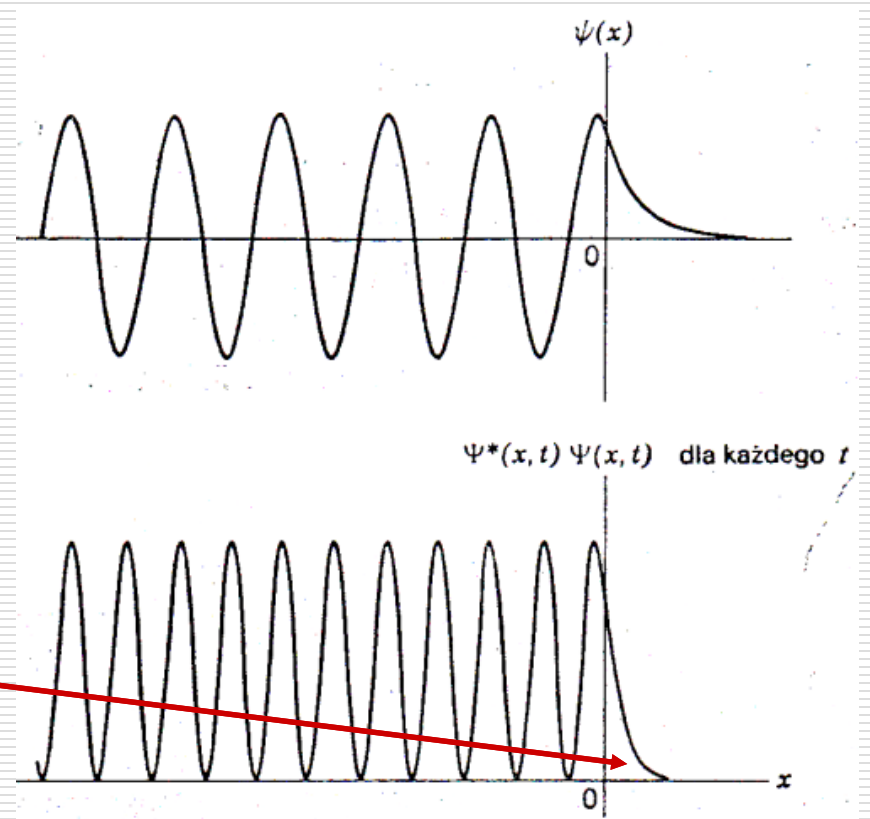
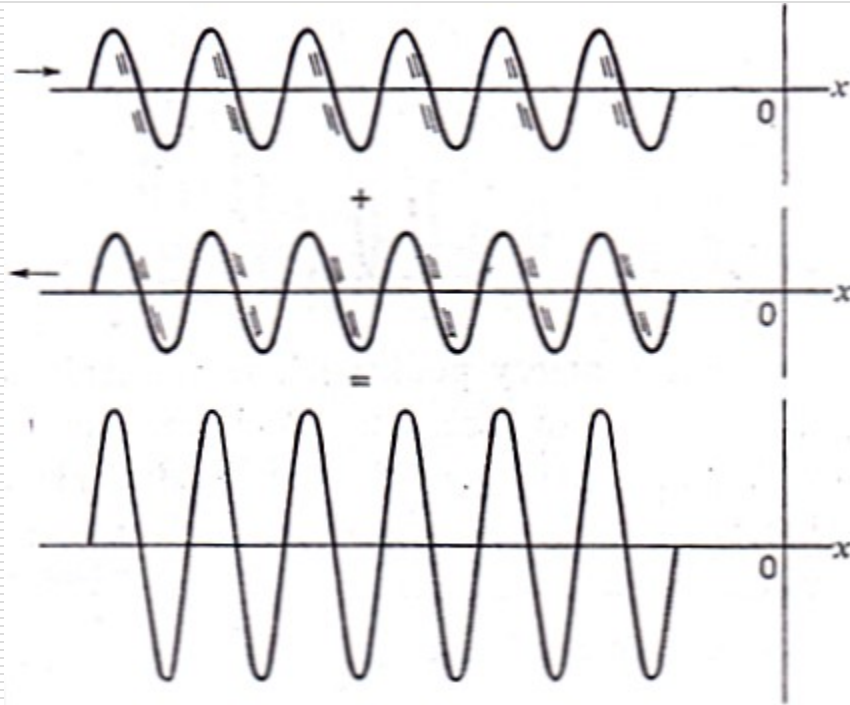
$$\frac{d\psi_I(0)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(0)}{dx} \Rightarrow A - B = i \frac{k_2}{k_1} D$$

$$A = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) \qquad B = \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} & \text{dla } x \leq 0 \\ = D e^{-k_2 x} & \text{dla } x > 0 \end{cases}$$

$$\Psi^* \Psi = D^* D e^{-2k_2 x} > 0 \quad !!$$

D można obliczyć z warunku normalizacji



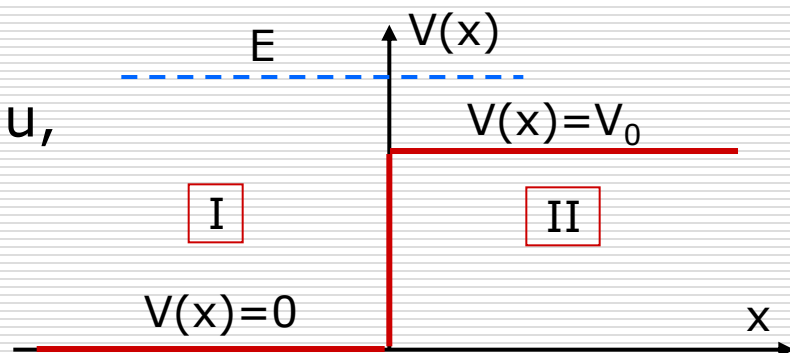
Wniosek?

- Padająca na barierę cząsteczka
ma energię $E > V_0$

klasycznie – przejdzie bez problemu,

z pędem $p_{II}/2m = E - V_0$

kwantowo – może się odbić.



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

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

Dla obszaru II: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - V_0)\psi(x)$

brak odbicia $\rightarrow \psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} \quad k_2 = \frac{p_{II}}{\hbar}$

dla $x = 0$ „zszycie” tzn.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C \quad \text{oraz}$$

$$\frac{d\psi_I(0)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(0)}{dx} \Rightarrow k_1(A - B) = k_2C$$

$$\psi(x) = \begin{cases} = A e^{ik_1 x} + A \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} & \text{dla } x \leq 0 \\ = A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} & \text{dla } x > 0 \end{cases}$$

