

CAP. III. APLICAȚII ALE ECUAȚIEI SCHRÖDINGER ATEMPORALE

III. 1. Particula cuantică în groapa de potențial unidimensională cu pereți impenetrabili (infiniți)

Pentru o particulă cuantică (de exemplu, un electron) aflată într-o groapă de potențial unidimensională cu pereți impenetrabili energia potențială are forma: $U(x) = 0$ pt. $x \in [0, a]$ și $U(x) = \infty$ în restul axei Ox (Fig. III.1).

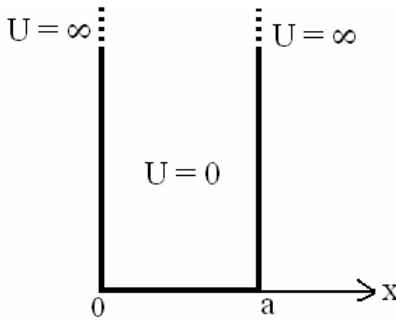


Fig. III. 1. Forma energiei potențiale a gropii de potențial unidimensionale cu pereți infiniți.

În interiorul gropii, adică pentru $x \in [0, a]$ ecuația Schrödinger atemporală (II.36) are forma:

$$\frac{d^2 \Psi_{\text{int}}}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_{\text{int}} = 0 \quad (\text{III.1})$$

iar în exteriorul gropii, deoarece particula nu poate părăsi groapa, $\Psi_{\text{ext}} = 0$.

Notăm:
$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \quad (\text{III.2})$$

Soluția ecuației (III.1) poate avea forma:

$$\Psi_{\text{int}}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (\text{III.3})$$

Condiția de continuitate în $x = 0$ și anume $\Psi_{\text{int}}(0) = 0$ conduce la $B = 0$. Din condiția de continuitate în $x = a$ (a este lățimea gropii) și anume:

$$\Psi_{\text{int}}(a) = 0; \quad A \sin(ka) = 0 \quad (\text{III.4})$$

rezultă:
$$ka = n\pi, \text{ cu } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{III.5})$$

Din relațiile (III.2) și (III.5) obținem expresia energiei particulei cuantice în groapa de potențial unidimensională cu pereți infiniți:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} = \frac{n^2 h^2}{8 m a^2}. \quad (\text{III.6})$$

Constatăm că **energia particulei cuantice în groapa de potențial unidimensională cu pereți infiniți este cuantificată**, adică are valori care formează un șir discret, valori determinate de numărul natural n . Energia minimă este energia din starea $n = 1$:

$$E_{\min} = E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} = \frac{h^2}{8 m a^2} \quad (\text{III.6'})$$

Starea de energie minimă se numește stare fundamentală.

Este evidentă relația: $E_n = n^2 E_1$. (III.6'')

Funcțiile proprii ale operatorului Hamilton sunt:

$$\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n \pi x}{a}\right) \quad (\text{III.7})$$

Constanta A se află din condiția de normare:

$$\int_0^a \Psi_{\text{int}}^* \Psi_{\text{int}} dx = 1 \quad (\text{III.8})$$

Obținem: $A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n \pi x}{a}\right) dx = 1$ și apoi: $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Înlocuim în relația (III.7):

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n \pi x}{a}\right) \quad (\text{III.9})$$

Pentru primele două stări (starea fundamentală $n = 1$ și prima stare excitată $n = 2$) funcțiile de undă sunt: $\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$, respectiv $\Psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2 \pi x}{a}\right)$, iar densitățile de probabilitate de localizare sunt:

$$\varphi_1 = \Psi_1^* \Psi_1 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right), \text{ respectiv } \varphi_2 = \Psi_2^* \Psi_2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \quad (\text{III.10})$$

În Fig. III. 2a sunt prezentate nivelele de energie și funcțiile de undă (având expresia (III.9)) pentru primele cinci stări staționare, iar în Fig. III. 2b, pentru primele șase stări staționare, graficele funcțiilor de undă sunt însoțite de cele ale densităților de probabilitate (date de formule de tipul (III.10)).

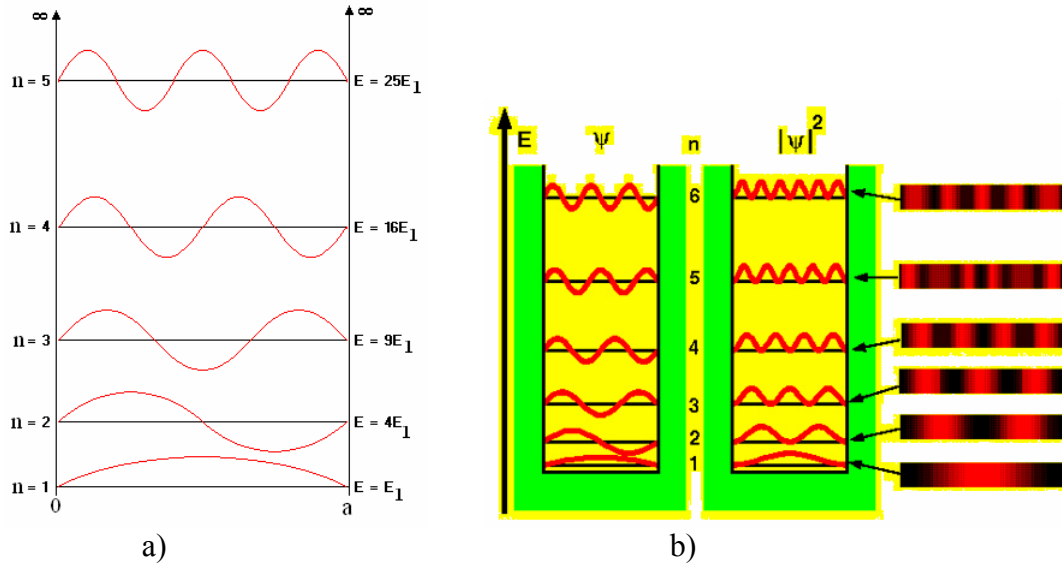


Fig. III. 2. a) Nivelele de energie și funcțiile de undă pentru primele cinci stări staționare ale particulei cuantice în groapa de potențial unidimensională cu pereți infiniți; b) Funcțiile de undă și densitățile de probabilitate $|\Psi|^2$ pentru primele șase stări staționare.

Observație: Groapa de potențial unidimensională cu pereți impenetrabili (infiniți) este un model teoretic simplificat. În cazurile practice forma gropilor de potențial este mult mai complicată. Un alt model, folosit în studiul heterojoncțiunilor semiconductoare, este groapa de potențial cu bariere finite. De exemplu, groapa de potențial a benzii de conducție din structura AlGaAs/GaAs/AlGaAs, prezentată în Fig. III.3. Notății: CB = banda de conducție (cuprinde nivelele energetice ale electronilor, cum ar fi e_1, e_2 ; VB = banda de valență (cuprinde nivelele energetice ale golurilor, cum ar fi hh_1 ; E_g = lărgimea benzii interzise – vezi lucrarea de laborator “determinarea lărgimii benzii interzise a unui semiconductor. Termistorul”; QW energy gap = intervalul energetic dintre primul nivel de gol și primul nivel electronic).

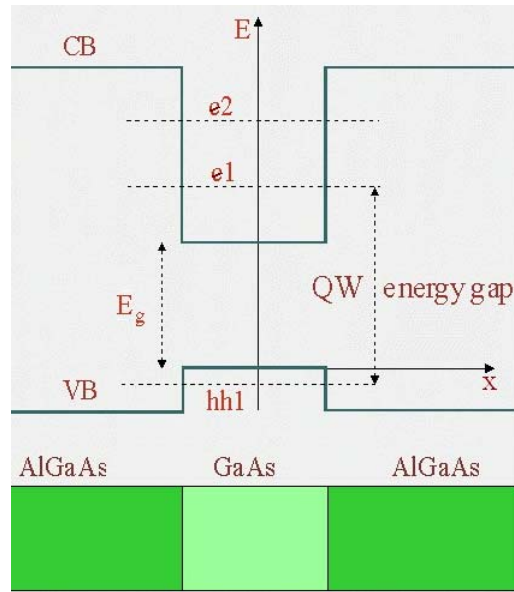


Fig. III. 3. Profilul potențialului pentru banda de conducție (CB) și banda de valență (VB) în heterojuncțiunea semiconductoare AlGaAs/GaAs/AlGaAs.

III. 2. Particula cuantică la bariera de potențial. Efectul - tunel

Fie o particulă cuantică de masă m și energie E aflată în fața unei bariere de potențial unidimensionale, de forma rectangulară, având "înălțimea" U_0 și lățimea a .

Energia potențială are forma din Fig. III.4: $U(x)=0$ pt. $x < 0$, $U(x)=U_0$ pt. $x \in [0, a]$ și $U(x)=0$ pt. $x > a$.

Ne interesează cazul $E < U_0$. Rezolvăm ecuația Schrödinger atemporală (II.36) în cele trei regiuni.

$$\text{În regiunea I: } \frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1 = 0 \quad (\text{III.11})$$

$$\text{Notăm: } \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \quad (\text{III.12})$$

Soluția ecuației (III.11) poate avea forma:

$$\Psi_1(x) = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx) \quad (\text{III.13})$$

în care primul termen reprezintă unda incidentă, $\Psi_{1i}(x)$, iar al doilea unda reflectată pe bariera de potențial, $\Psi_{1r}(x)$.

$$\text{În regiunea II: } \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\Psi_2 = 0 \quad (\text{III.14})$$

Notăm:
$$\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} = k_2^2 \quad (\text{III.15})$$

Soluția ecuației (III.14) are forma:

$$\Psi_2(x) = C_3 \exp(-k_2 x) + C_4 \exp(k_2 x) \quad (\text{III.16})$$

În regiunea III ecuația este tot de forma (III.11) soluția fiind:

$$\Psi_3(x) = C_5 \exp(ikx) + C_6 \exp(-ikx) \quad (\text{III.17})$$

în care primul termen reprezintă unda progresivă ($x > 0$), iar al doilea unda regresivă ($x < 0$). Aceasta din urmă nu ne interesează, nefiind pe "drumul" particulei studiate. Așadar, unda transmisă este:

$$\Psi_3(x) = \Psi_t(x) = C_5 \exp(ikx) \quad (\text{III.17'})$$

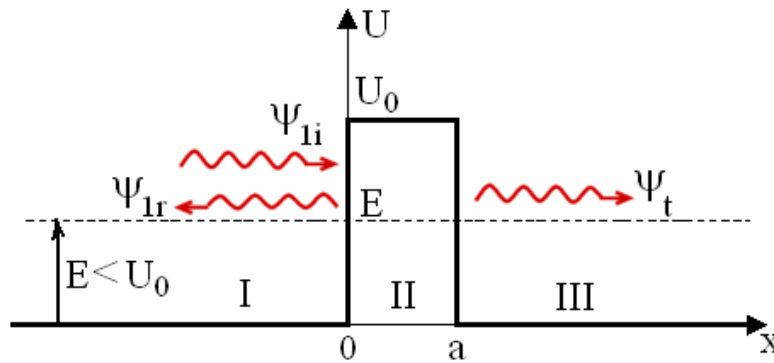


Fig. III. 4. Forma potențialului și schema funcțiilor de undă pentru particula cuantică la bariera de potențial rectangulară.

Pentru calcularea constantelor C_1, C_2, \dots, C_5 folosim condițiile de continuitate:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \Rightarrow C_1 + C_2 = C_3 + C_4 \quad (\text{III.18})$$

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \Rightarrow ik_1(C_1 - C_2) = k_2(C_4 - C_3) \quad (\text{III.19})$$

$$\Psi_2(a) = \Psi_3(a) \Rightarrow C_3 \exp(-k_2 a) + C_4 \exp(k_2 a) = C_5 \exp(ika) \quad (\text{III.20})$$

$$\Psi_2'(a) = \Psi_3'(a) \Rightarrow k_2[C_4 \exp(k_2 a) - C_3 \exp(-k_2 a)] = ik C_5 \exp(ika) \quad (\text{III.21})$$

Adăugăm și condiția de normare:

$$\int_{-\infty}^0 \Psi_1^* \Psi_1 dx + \int_0^a \Psi_2^* \Psi_2 dx + \int_a^{\infty} \Psi_3^* \Psi_3 dx = 1 \quad (\text{III.22})$$

După calcularea constantelor C_1, C_2, \dots, C_5 din rezolvarea sistemului de ecuații (III.18 - III.22) funcțiile de undă Ψ_1, Ψ_2 și Ψ_3 sunt complet determinate (Fig. III.5).

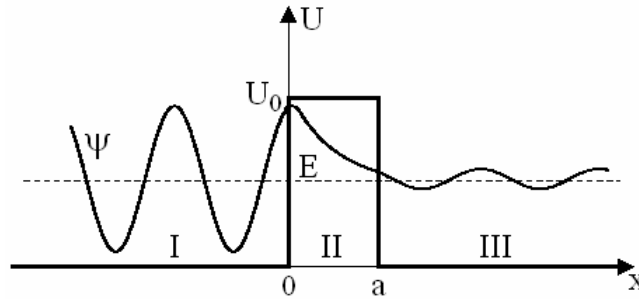


Fig. III. 5. Funcția de undă pentru particula cuantică la bariera de potențial rectangulară.

Mărimile fizice de interes sunt:

a) *transparența* (transmitanța) barierei:

$$\mathcal{T} = \left(\frac{C_5}{C_1} \right)^* \left(\frac{C_5}{C_1} \right) \quad (\text{III.23})$$

e) *densitatea de probabilitate de localizare în regiunea III* (dincolo de barieră):

$$\rho_3 = \Psi_3^* \Psi_3 \quad (\text{III.24})$$

Pentru a obține expresia transparenței \mathcal{T} calculăm C_1 în funcție de C_5 din relațiile (III.18 - III.21). Rezultă:

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_0 \exp(-2k_2 a) \quad (\text{III.25})$$

Înlocuind k_2 din relația (III.15) obținem:

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_0 \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right) \quad (\text{III.26})$$

Interpretarea fizică a relației (III.26):

- a) Deoarece $T \neq 0$ înseamnă că particula cuantică studiată, deși are $E < U_0$, străbate bariera de potențial. Fenomenul se numește **efect-tunel** și nu poate fi explicat de legile fizicii clasice, deci este un *efect specific cuantic*. Consecințele sale se verifică experimental (vezi lucrarea de laborator “Dioda-tunel”).
- b) Transparența barierei de potențial, T , depinde atât de caracteristicile particulei (m, E), cât și de cele ale barierei (a, U_0).
- c) Formula (III.26) se poate generaliza și pentru o barieră de potențial de o formă oarecare.
- d) Efectul-tunel explică următoarele fenomene: emisia particulelor α de către anumite nuclee radioactive, emisia autoelectronică (sau emisia la rece - sub acțiunea unui câmp electric intens un metal poate emite electroni), unele reacții chimice, dioda-tunel, efectul Josephson (printr-o joncțiune formată din două materiale supraconductoare, separate printr-un strat subțire de oxid, trece un curent continuu, în absența oricărui câmp electric sau magnetic).

III. 3. Oscilatorul liniar armonic cuantic

este o particulă de masă m aflată într-un câmp de forma:

$$U(x) = \frac{k_e x^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (\text{III.37})$$

unde ω este pulsația, iar k_e este constanta elastică. Ecuația Schrödinger atemporală (II.36) are forma:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0 \quad (\text{III.38})$$

Folosim o schimbare de variabilă:

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \sqrt{\alpha} \cdot x \quad (\text{III.39})$$

Rezultă: $\frac{d\Psi}{dx} = \frac{d\Psi}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot \frac{d\Psi}{d\xi}$ și $\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \cdot \frac{d^2\Psi}{d\xi^2}$. Ecuația (III.38) devine:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \Psi = 0 \quad (\text{III.40})$$

Din rezolvarea acestei ecuații se obțin următoarele **rezultate**:

a) $\frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1$, din care:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{III.41})$$

Interpretarea relației (III.41): **Energia oscilatorului liniar armonic cuantic este cuantificată**, adică are valori care formează un șir discret, valori determinate de numărul $n = 0, 1, 2, \dots$. Energia minimă este energia din starea $n = 0$, numită *energie de zero*:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0 \quad (\text{III.41}')$$

În fizica clasică energia minimă este zero.

b) Funcțiile de undă sunt:

$$\Psi_n(\xi) = C_n \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) \cdot \frac{d^n}{d\xi^n} \left[\exp(-\xi^2) \right] \quad (\text{III.42})$$

Constantele C_n se determină din condiția de normare.

În Fig. III.6 sunt prezentate nivelele energetice E_n (date de formula (III.41)) pentru $n = 0, 1, 2$ și 3 precum și densitățile de probabilitate corespunzătoare.

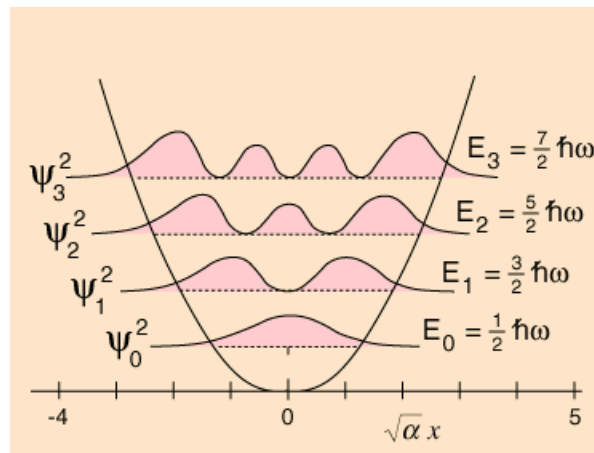


Fig. III. 6. Nivelele energetice E_n cu $n = 0, 1, 2$ și 3 precum și densitățile de probabilitate corespunzătoare pentru oscilatorul liniar armonic cuantic.