Ενότητα 2:
Κβαντική Μηχανική

Εξίσωση του Schrödinger και Εφαρμογές

ΕΝΟΤΗΤΑ 2 : Κβαντική Μηχανική

2.2 Εξίσωση του Schrödinger (1926) Nobel Prize 1933

2.2.1 Η εξίσωση του Schrödinger

Βασική σκέψη του Schrodinger: *Να βρει μια ΔΕ που να έχει μια κυματική λύση με μήκος κύματος το μ.κ. De Broglie.*

Erwin Schrödinger.

Για ένα σωματίδιο που κινείται στον άξονα-x είναι:

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

- Ομοιότητα με ΑΔΕ : K + U = E

- Προσδιορίζει τη χωρική μορφή (x) και τη χρονική εξέλιξη (t) της κυματοσυνάρτησης ενός σωματιδίου.

- Δεν αποδεικνύεται ούτε προκύπτει από άλλη (πιο βασική) εξίσωση. Έχει αξιωματική θέση στην Κβαντική Μηχανική.

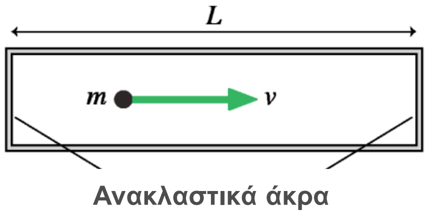
2.2.2 Οι ιδιότητες της κυματοσυνάρτησης

- Η Ψ(x) είναι συνεχής συνάρτηση
- Ψ(x) → 0 καθώς x → +∞ και x → -∞
- Η Ψ(x) είναι κανονικοποιημένη δηλαδή $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$
- Η Ψ(x) =0 όταν το x είναι σε μια ενεργειακά απαγορευμένη περιοχή με (ημι)άπειρο μήκος, δηλαδή περιοχή με U(x) > E.
- Η Ψ(x) ~ sin(kx) ή cos(kx) σε περιοχές όπου η δυναμική ενέργεια U(x) = σταθερή

2.2.3 Επίλυση της ΔΕ του Schrödinger

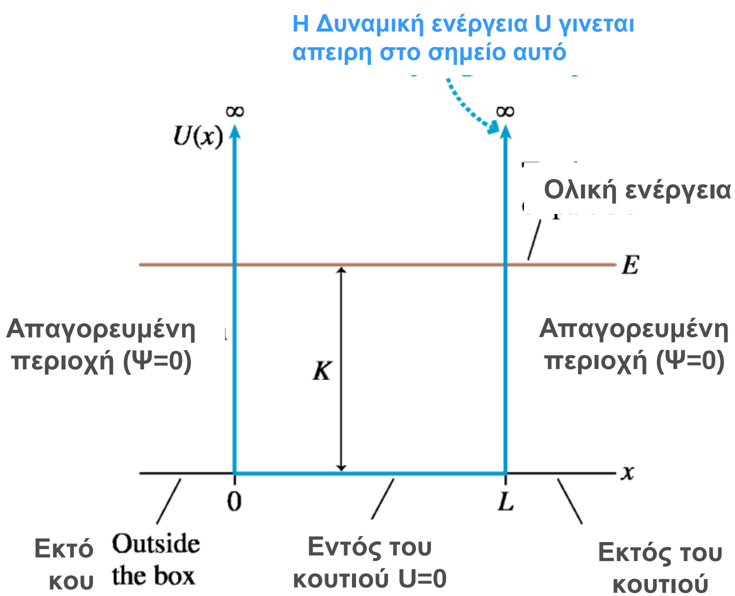
- Αρχή Επαλληλίας: Αν οι Ψ_1, Ψ_2 είναι ανεξάρτητες λύσεις τότε η γενική λύση είναι $\Psi=\alpha\Psi_1+\beta\Psi_2$.
- Βήματα για τη λύση:
    1. Όρισε τη δυναμική ενέργεια
    2. Καθόρισε τις συνοριακές συνθήκες
    3. Βρες τις Ψ_1 και Ψ_2
    4. Βρες τις επιτρεπτές τιμές της ενέργειας
    5. Κανονικοποίησε την $\Psi=\alpha\Psi_1+\beta\Psi_2$

2.3 Σωματίδο σε κουτί
- Πηγάδι Δυναμικού Απειρου Βαθους



- Ποιές είναι οι ενεργειακές στάθμες του σωματιδίου;
- Σε ποιά περιοχή του κουτιού βρίσκεται το σωματίδιο;

Ενεργειακό διάγραμμα σωματιδίου σε κουτί με άκαμπτα τοιχώματα και μήκος L



(1) Το μοντέλο της δυναμικής ενέργειας:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x \in [0, L] \\ \infty & x < 0 \text{ και } x > L \end{cases}$$

(2) Συνοριακές συνθήκες:

$$\Psi(x) = 0$$

$$\Psi(L) = 0$$

$$\Psi(x) = 0 \quad x < 0\,, x > L$$

(3) Επίλυση μέσα στο κουτι:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi \;\Rightarrow$$

$$\Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx\,; \quad \boxed{k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar}$$

(4) Εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών

$$\Psi(0) = 0 \implies B = 0$$

$$\Psi(L) = 0 \implies \sin kL = 0 \Longrightarrow k_n = \frac{n\pi}{L};\ \ n = 1,2,3,\ldots$$

Αρα: $\boxed{\Psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$; $n = 1,2,3 \ldots$

(5) Ενεργειακές Στάθμες: $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \Longrightarrow \boxed{E_n = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2}$ *Ίδιο αποτέλεσμα με τη θεωρία De Broglie !*

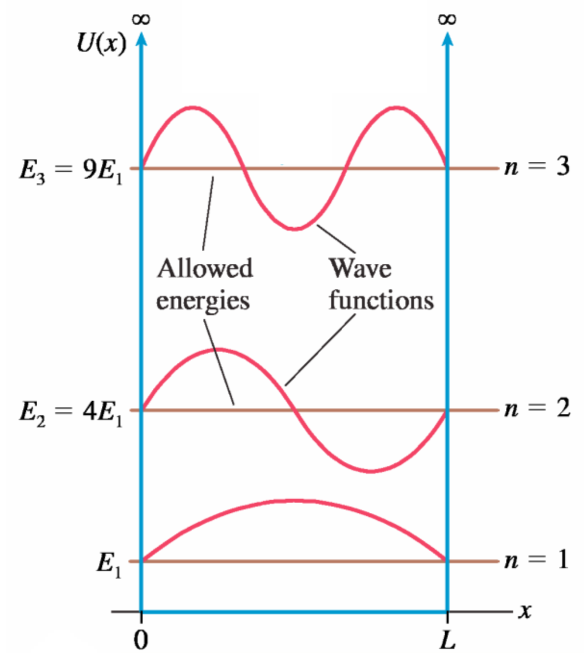
Ελάχιστη Ενέργεια: $E_{min} = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} > 0$

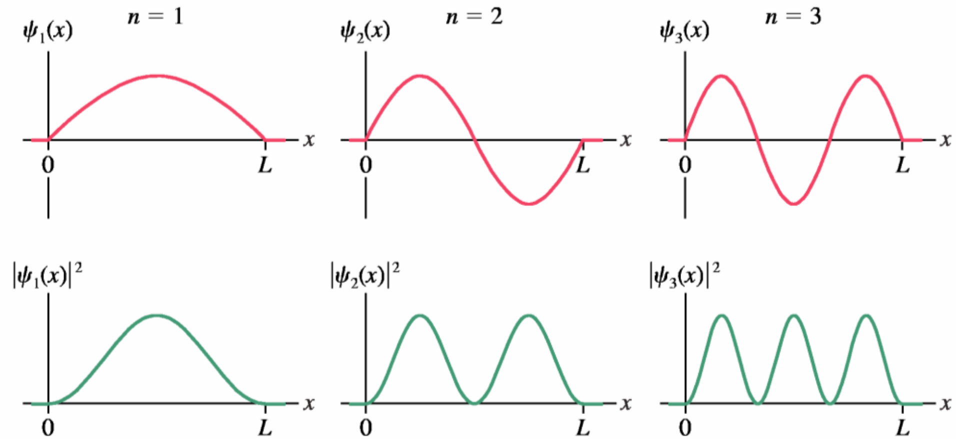
<u>Το *περιορισμένο* στο χώρο σωματίδιο *ποτέ* δεν ηρεμεί (Ε > 0) !!!!</u>

(6) Κανονικοποίηση της Ψ(x):

$$\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1 \Longrightarrow A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1 \Longrightarrow A^2 = \frac{2}{L} \Longrightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

(7) Πυκνότητα Πιθανότητας θεσης του σωματίδιου μεσα στο κουτί: $P(x) = |\Psi(x)|^2$





Οσο αυξάνεται ο κβαντικός αριθμός (n) το σωματίδιο εμφανιζει εξίσου την πιθανότητα να βρεθεί και σε αλλα σημεια περαν του μεσου του κουτιού.

Στο όριο $n \to \infty$ η πυκνοτητα πιθανότητας γινεται σχεδόν σταθερή συναρτηση, Δηλαδη, *για $n \to \infty$ το σωματιδιο βρισκεται με την ιδια πιθανοτητα σε όλα τα σημεία του κουτιού*.

Αρχή της Αντιστοιχίας:

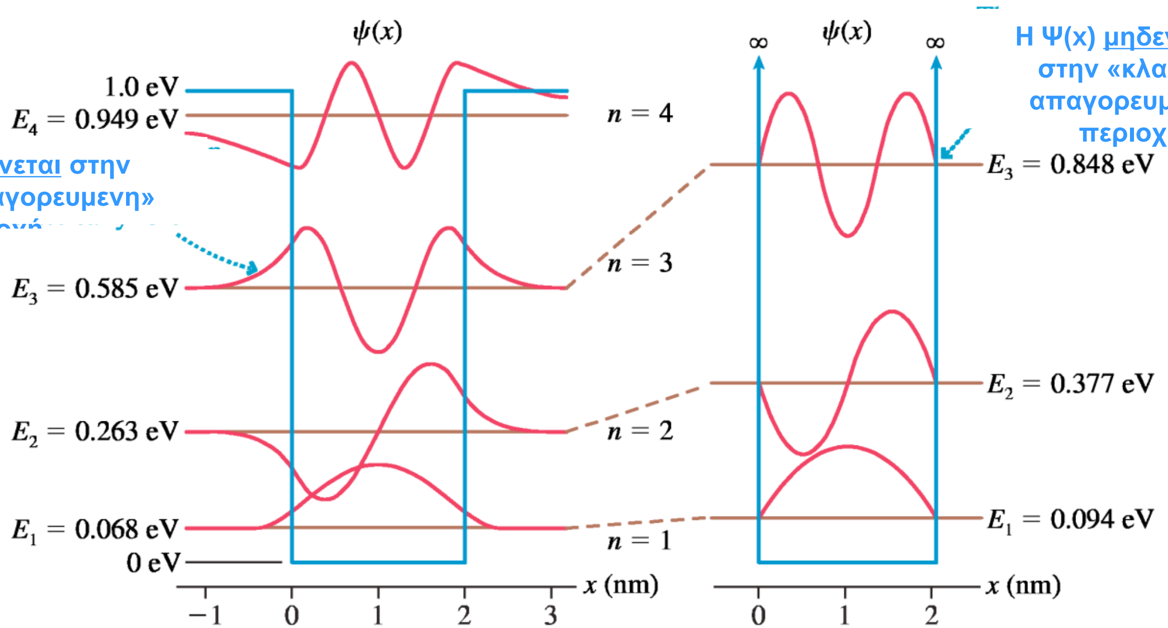
«Για $n \to \infty$ τα συμπεράσματα της Κβαντικής Μηχανικής συμπίπτουν με αυτη της Κλασικής Μηχανικής»

2.4 Σωματίδιο σε κουτί
- Πηγάδι Δυναμικού Πεπερασμένου Βαθους

Ενεργειακές στάθμες και κυματοσυναρτήσεις για πηγαδι δυναμικου πλατους L=2nm και πεπερασμενου βαθους U_o=1eV. Για συγκριση, οι σταθμες και οι συναρτησεις ενός απειρόβαθου πηγαδιού (αδιαπεραστο κουτί) σχεδιάστηκαν δεξια.

(a) Πηγάδι πεπερασμενου βαθους **(b) Πηγάδι άπειρου βάθους**

Η Ψ(x) <u>εκτείνεται</u> στην «κλασικα απαγορευμενη» περιοχή



Η Ψ(x) <u>μηδενίζεται</u> στην «κλασικα απαγορευμενη» περιοχή

$$\Psi(x) = C \cdot \exp(-x/d)$$

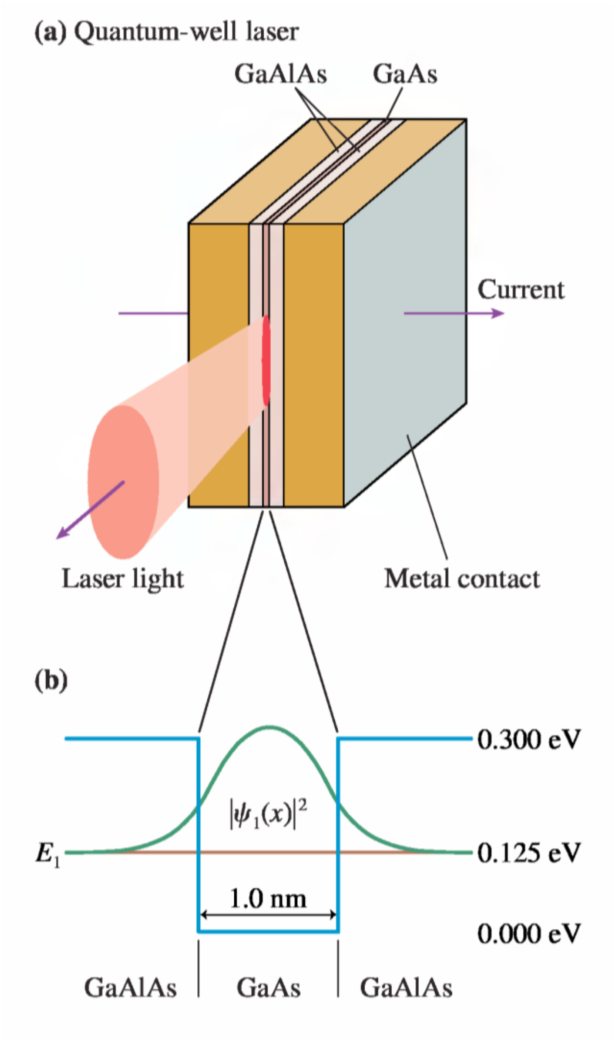
$$\Psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + B\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\Psi(x) = D \cdot \exp(-x/d)$$

Συγκριση αποτελεσματων
του πεπερασμενου και του άπειρου βαθους πηγαδιού

Πεπερασμενο Βαθος (U_0)	Απειρο Βαθος ($U_0 \to \infty$)
Κβαντισμένη Ενέργεια $E_n = n^2 E_1$	Κβαντισμένη Ενέργεια $E_n = n^2 E_1$
Πεπερασμενος αριθμός Δέσμιων Καταστάσεων $n=1,2,\ldots n_{max}$	Απειρος αριθμός Δέσμιων Καταστάσεων $n=1,2,3\ldots\ldots\infty$
Μη-μηδενικη πυκνοτητα πιθανότητας εκτος πηγαδιου	Μηδενικη πυκνοτητα πιθανότητας εκτος πηγαδιου
Βάθος Διείσδυσης: $d = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}$	Βάθος Διείσδυσης: d=0

Εφαρμογή Κβαντικου Πηγαδιου: LASER Στερεάς κατάστασης



Σε T~300K η ταχύτητα ενος ηλεκτρονίου ειναι:
$u=(3k_BT/m)^{1/2}$~10^5m/s. ⇒ λ=h/mu~6nm.

Αν το ηλεκτρονιο περιορισθει σε ενα κβαντικο πηγαδι με L~6nm θα εμφανισει εντονα κβαντικα φαινομενα, δηλαδη κβαντωση ενεργειας.
(Τα κβαντικα φαινομενα εξαφανιζοντια για L~100nm και ανω.)

Πραγματι, ένα λεπτο στρωμα GaAs αναμεσα σε στρωματα GaAlAs αποτελει το ζητουμενο «πηγαδι δυναμικου» για τα ηλεκτρονια αγωγιμοτητας του GaAs.

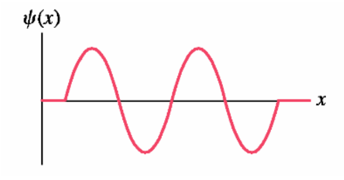
Αν το στρωμα του GaAs είναι πολυ λεπτο (~1nm), υπαρχει μονο μια δεσμια κατασταση (n=1) και συνεπως όλα τα ηλεκτρονια του στρωματος εχουν την ιδια ενεργεια (E_1). Η μεγάλη συγκεντρωση ηλεκτρονίων σε μια μικρη περιοχή του χωρου (~ μεσο του πηγαδιου) και το γεγονος οτι ολα εχουν την ιδια ενεργεια δημιουργούν ιδανικες συνθηκες για δημιουργια laser.

Ασκήσεις

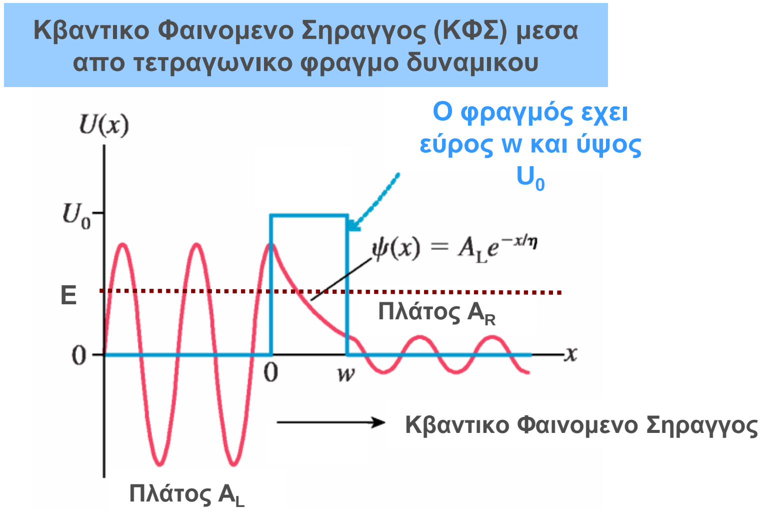
17. Ενα ηλεκτρονιο μεσα σε ενα λεπτο στρωμα ημιαγωγού απορροφα φώς. Αν το μεγαλύτερο μηκος κύματος στο φάσμα απορρόφησης ειναι 600nm, να βρειτε το πάχος του στρώματος. *Υπόδειξη:* $E_1=h^2/8mL^2$.

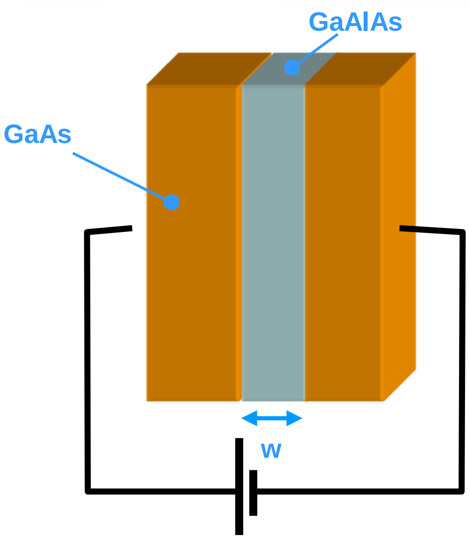
18. Το ηλεκτρόνιο σε μια δίοδο laser (A-B-A) βρισκεται περιορισμενο στο λεπτο στρώμα B παχους L_B. Αν το βαθος του πηγαδιου είναι η 0.300eV και της θεμελειώδους στάθμης E_1=0.125eV, να υπολογίσετε (α) το βαθος διείσδυσης του ηλεκτρονίου στο στρώμα A και (β) το ελάχιστο πάχος του στρώματος A ωστε το ηλεκτρονιο να μην μπορει να περασει με φαινομενο σήραγγος στο μεταλλικο ηλεκτροδιο (M). *Υπόδειξη:* $d=\hbar/[2m(U_0-E)]^{1/2}$.

19. H κυματοσυναρτηση ενος ηλεκτρονίου σε πηγαδι δυναμικου δινεται στο σχήμα, ενω η αντιστοιχη ενεργεια ειναι 6eV. Να βρειτε (α) τον κβαντικο αριθμο n, και (β) το εύρος του πηγαδιού. *Υπόδειξη:* $E_n=n^2h^2/8mL^2$.



2.5 Κβαντικό Φαινόμενο Σήραγγος





Μέσα στο φραγμο ($0 \leq x \leq w$) ισχύει:

$$\Psi(x) = A_L \cdot \exp(-x/d)$$

Οπότε στο δεξί ακρο (x=w) του φραγμου ισχύει:

$$\Psi(w) = A_L \cdot \exp(-w/d) \equiv A_R$$

Η πιθανοτητα να γινει διέλευση του φραγμου ισούται με το πηλικο των πιθανοτητων:

$$P_{tunnel} = \frac{|A_R|^2}{|A_L|^2} = \exp(-2w/d)$$

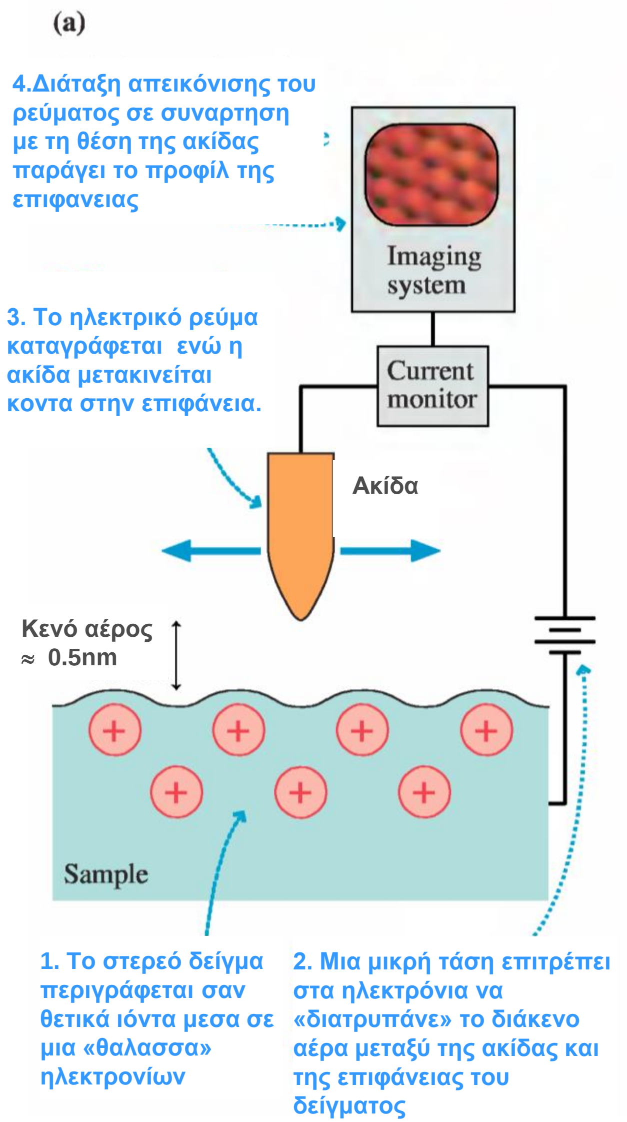
Η πιθανότητα διέλευσης <u>μειώνεται</u>, καθώς:

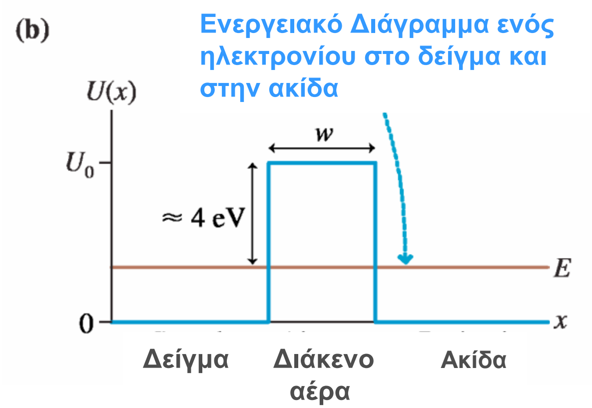
(α) <u>αυξάνεται</u> το εύρος του φραγμού (w)

(β) <u>αυξάνεται</u> η διαφορά (U_0-E)

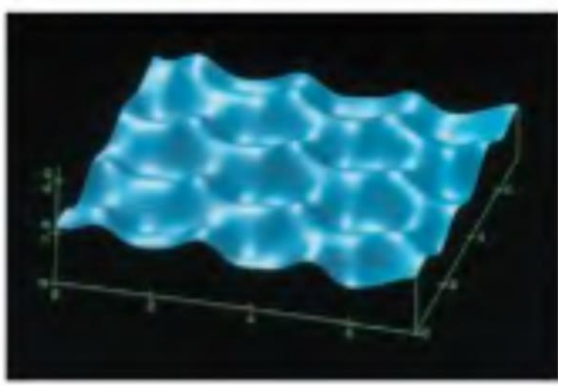
http://physics4u.wordpress.com/2012/02/24/%CF%8C-%CF%8C-%CE%AE/

Εφαρμογή Κβαντικού Φαινομένου Σήραγγος: Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο Σάρωσης (STM)





Εικόνα STM : Τα άτομα άνθρακα στην επιφάνεια του γραφιτη, όπου διακρίνονται οι εξαγωνικοί δακτύλιοι.



Μέγιστη ανάλυση:
0.001nm ≈ 1% (Διαμετρου Ατόμου)