

Podstawy Fizyki IV Optyka z elementami fizyki współczesnej

wykład 26, 28.05.2012

wykład:Czesław Radzewiczpokazy:Radosław Chrapkiewicz, Filip Ozimekćwiczenia:Ernest Grodner

Wykład 25 - przypomnienie

promienienie katodowe i anodowe

➢ promienie Roentgena, dyfrakcja na kryształach

≻ fale materii – hipoteza de Broglie'a

➤ r-nie Schrodingera

interpretacja funkcji falowej

studnie potencjału, 1-D, 3-D

nieskończona

skończona



Każdy układ kwantowy możemy opisać funkcją falową $\Psi(x, y, z, t)$

Funkcja Ψ spełnia nierelatywistyczne r-nie Schrodingera to $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(z,t)\Psi = i\hbar\frac{d\Psi}{dt}$ gdzie V(z,t) opisuje potencjał

Interpretacja funkcji falowej:

- gęstość prawdopodobieństwa $P(z,t) = |\Psi(z,t)|^2$
- interferencja

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2, |\Psi|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2\operatorname{Re}(\Psi_1 {\Psi_2}^*)$$

• normalizacja f.f. $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(z,t)|^2 dz = 1$

• prąd prawdopodobieństwa
$$\frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dz} - \frac{d\Psi^*}{dz} \Psi \right)$$

nieskończona studnia 1-D, 1

Cząstka o masie m zamknięta w jednowymiarowym pudełku. Długość pudełka: a

$$V(z) = \begin{cases} 0 \text{ dla } -\frac{a}{2} < z < \frac{a}{2} \\ \infty \text{ dla } |z| \ge \frac{a}{2} \end{cases}$$

Dla $|z| \ge \frac{a}{2}$ mamy $\psi(z) = 0$ W obszarze $-\frac{a}{2} < z < \frac{a}{2}$ trzeba znaleźć rozwiązanie r-nia Schrodingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dz^2} = E\psi$$

czyli

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + k^2\psi = 0$$

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

Rozwiązania to

$$\psi(z) = A\cos(kz) + B\sin(kz)$$

Funkcja falowa musi być ciągła: $A \cos(ka/2) + B \sin(ka/2) = 0$ $A \cos(-ka/2) + B \sin(-ka/2) = 0$

Uwaga: w tym zagadnieniu nie żądamy ciągłości pochodnych f.f. bo mamy nieskończony skok potencjału



Nieskończona studnia 1-D, 2

 $\psi(z) = A\cos(kz) + B\sin(kz)$ + równania ciągłości dają dyskretny zbiór funkcji falowych i energii cząstki

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}\cos\frac{n\pi z}{a}} \, dla \, n = 1,3,5, ...$$

 $\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}\sin\frac{n\pi z}{a}} \, dla \, n = 2,4,6, ...$

funkcje falowe są orto-normalne

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_m\psi_m^{*}dz=\delta_{nm}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2$$

$$E_n = n^2 E_1$$



nieskończona liczba dyskretnych poziomów energetycznych

cząstka w jamie (o skończonej głębokości)

Cząstka o masie *m* umieszczona w jednowymiarowej jamie (studni) potencjału. Szerokość studni: *a*

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & \text{dla } z \le -\frac{a}{2} \\ 0 & \text{dla } -\frac{a}{2} < z < \frac{a}{2} \\ V_0 & \text{dla } z \ge \frac{a}{2} \end{cases}$$



Rozważamy ruch cząstki oddzielnie w każdym z obszarów I - III

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}\psi}{dz^{2}} = (E - V_{0})\psi \qquad z \leq -\frac{a}{2} \qquad (1)$$

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}\psi}{dz^{2}} = E\psi \qquad -\frac{a}{2} < z < \frac{a}{2} \qquad (2)$$

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}\psi}{dz^{2}} = (E - V_{0})\psi \qquad z \geq \frac{a}{2} \qquad (3)$$

W obszarze *II* korzystamy z gotowych rozwiązań dla nieskończenie głębokiej studni

$$\psi_{II}(z) = A\cos(kz) + B\sin(kz)$$
$$z \ k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

W obszarach / i III mamy dwie możliwości

1. $E > V_0$ cząstka swobodna2. $E < V_0$ cząstka uwięziona w jamieZajmiemy się przypadkiem 2.

W obszarze *I* r-nie Schrodingera:

$$\frac{d^2 \psi_I}{dz^2} - \alpha^2 \psi_I = 0$$
gdzie $\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$
ma rozwiązania wykładnicze
 $\psi_I(z) = Ce^{-\alpha z} + De^{\alpha z}$

Analogicznie,

$$\psi_{III}(z) = Ee^{-\alpha z} + Fe^{\alpha z}$$

V(z) studnia 1-D o skończonej głębokości V₀ I II III - $\frac{a}{2}$ $\frac{a}{2}$ z

> Wybieramy rozwiązania zanikające: $\psi_I(z) = De^{\alpha z}$ $\psi_{III}(z) = Ee^{-\alpha z}$

Żądamy ciągłości funkcji falowej i jej pochodnej na granicach obszarów

$$\begin{split} \psi_{I}(-a/2) &= \psi_{II}(-a/2) \\ \frac{d\psi_{I}}{dz} \bigg|_{-a/2} &= \frac{d\psi_{II}}{dz} \bigg|_{-a/2} \end{split}$$
 To same dla granicy w $a/2$.

Dzielimy rozwiązania na parzyste i nieparzyste. Zajmiemy się pierwszymi. Ciągłość funkcji falowej i jej pochodnej w -a/2 daje

$$A\cos(-ka/2) = De^{-\alpha a/2}$$
$$-kA\sin(-ka/2) = \alpha De^{-\alpha a/2}$$

Dzieląc powyższe r-nia stronami dostajemy

$$k\tan(ka/2) = \alpha$$

i przekształcamy do

 $(ka/2)\tan(ka/2) = \alpha a/2$

Dla modów niesymetrycznych analogiczne rachunki dają $-(ka/2) \cot(ka/2) = \alpha a/2$ V(z) studnia 1-D o skończonej głębokości



Nowe, bezwymiarowe, zmienne: $u = \alpha a/2$ v = ka/2pozwalają zapisać r-nia wyżej w postaci $u = v \tan v$ rozw. symetryczne $u = -v \cot v$ rozw. niesymetryczne Jednocześnie, z poprzedniej transparencji, wyliczamy $u^2 + v^2 = \frac{mV_0a}{\hbar^2}$

 $u^{2} + v^{2} = \frac{mV_{0}a}{\hbar^{2}}$ $u = v \tan v \qquad \text{rozw. symetryczne}$ $u = -v \cot v \qquad \text{rozw. niesymetryczne}$ Taki zestaw równań już raz rozwiązywaliśmy przy okazji analizy dielektrycznego płaskiego falowodu symetrycznego (wykład 6). Wystarczy zrobić podstawienie $v \rightarrow h_{2}d$, $u \rightarrow h_{1}d \text{ oraz } \frac{mV_{0}a}{\hbar^{2}} \rightarrow V$ aby skorzystać z gotowych rozwiązań...

Wnioski:

- 1. Liczba rozwiązań n_{max} jest zawsze skończona i zależy od wartości parametru $\frac{mV_0a}{\hbar^2}$. W szczególności dla $\frac{mV_0a}{\hbar^2} < \frac{\pi}{2}$ istnieje tylko jedno rozwiązanie – pojedynczy stan związany w studni.
- 2. Rozwiązania możemy ponumerować poczynając od 1 do n_{max}
- 3. Energie kolejnych stanów rosną numerem indeksu



Wnioski:

- Funkcja falowa cząstki "wypełnia" jamę potencjału – cząstka jest równocześnie w całej jamie choć prawdopodobieństwo znalezienia jej w poszczególnych obszarach nie jest takie samo.
- 2. Funkcje falowe mają niezerową amplitudę także w obszarach gdzie $E < V_0$. W obrazie klasycznym nie ma takiej możliwości.
- Głębokość "wnikania" funkcji falowej w obszar klasycznie zabroniony jest różna dla różnych rozwiązań – generalna zasada: im bliżej V₀ jest energia cząstki tym głębiej penetruje ona obszary poza studnią



Półprzewodnikowe studnie kwantowe

Przykład: laser na studniach kwantowych

ZnSe cap layer ZnCdMgSe cladding ZnCdMgSe guiding ZnCdSe QW ZnCdMgSe guiding ZnCdMgSe cladding III-V buffer layer InP substrate





L. Zeng, et al. APL 72 3136-3138 (1998)

Nieskończona studnia 3-D, 1

Cząstka o masie m zamknięta w prostopadłościennym pudełku o wymiarach $a \times b \times c$

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 \text{ dla } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}, -\frac{b}{2} < y < \frac{b}{2}, -\frac{c}{2} < z < \frac{c}{2} \\ \infty \text{ wszędzie indziej} \end{cases}$$

Funkcja falowa zeruje się poza pudełkiem. Wewnątrz pudełka szukamy rozwiązań iloczynowych $\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$

Wstawiamy do r-nia Schrodingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$$

i przekształcamy do

$$\frac{1}{\frac{\psi_x}{\psi_x}} \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} + \frac{1}{\frac{\psi_x}{\psi_x}} \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} + \frac{1}{\frac{\psi_x}{\psi_x}} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} + k^2 = 0$$

gdzie, ponownie, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

Ostatnia równość jest równoważna 3 r-niom

$$\frac{d^2\psi_i}{dx^2} + k_i^2\psi_i = 0, \qquad i = x, y, z, \qquad \sum_i k_i^2 = k^2$$

Nieskończona studnia 3-D, 2

Dla każdego wymiaru stosujemy znane rozwiązania studni 1-D:

$$\psi_{xl}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}\cos\frac{l\pi x}{a}} \, dla \, l = 1,3,5, \dots$$
$$\psi_{xl}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}\sin\frac{l\pi x}{a}} \, dla \, l = 2,4,6, \dots$$

$$\psi_{ym}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \cos \frac{m\pi y}{b} \, dla \, m = 1,3,5, \dots$$
$$\psi_{ym}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{m\pi y}{b} \, dla \, m = 2,4,6, \dots$$
$$\psi_{zn}(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \cos \frac{n\pi z}{c} \, dla \, n = 1,3,5, \dots$$
$$\psi_{zn}(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin \frac{n\pi z}{c} \, dla \, n = 2,4,6, \dots$$



$$\psi_{lmn}(x, y, z) = \psi_{xl}(x)\psi_{ym}(y)\psi_{zn}(z)$$
$$E_{lmn} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{m^2}{b} + \frac{n^2}{c^2}\right)$$
układ jest opisany przez 3 liczby kwantowe $l, m, n = 1, 2, 3 \dots$

kropki kwantowe, 1

Studnia 3-D o skończonej głębokości



Im mniejsze kropki kwantowe tym bardziej niebieskie świecenie





kropki kwantowe, 2



Schodek potencjału



głębokość wnikania $\cong 1/k_2$

analogia z całkowitym wewn. odbiciem (wykład 5)



Słabe tunelowanie
$$k_2 a \gg 1$$

$$T \cong 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_2 a}$$

Scanning Tunelling Microscope (STM)



1. generacja









Czerwone - atomy Cs na GaAs (110) - niebieskie





oscylator harmoniczny, kwantowy, 1

Równanie Schrodingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{K}{2}z^2\psi = E$$

$$-\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{\omega^2}{\hbar^2}z^2\psi = E$$

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} = (\zeta^2 - \lambda)\psi$$

$$\zeta^2 = \frac{m\omega}{\hbar}, \qquad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Potencjał i siła $V(z) = \frac{K}{2}z^2$



Normalizacja

$$\int \psi_m(z)\psi_n dz = \delta_{mn}$$





M. Fukushima, S. Mayama, and K. Obi, J.Chem. Phys. 96, 44-52 (1992)

poziomy oscylacyjne cząsteczek, 2

Visible band system of I₂



Doświadczenie Rutherforda, 1

1911





Ernest Rutherford



Doświadczenie Rutherforda, 2



Doświadczenie Rutherforda, 3



$$b = \frac{\kappa}{mv_0^2} \cot(\Theta/2)$$
$$db = \frac{\kappa}{mv_0^2} \frac{1}{\sin^2(\Theta/2)} d\Theta$$

Różniczkowy przekrój czynny na rozpraszanie: $d\sigma = 2\pi b db$

Efektywna powierzchnia atomów w folii o grubości D, polu A oraz gęstości N to $dA = 2\pi bNDAdb$

> Procent rozproszonych cząstek α spośród n cząstek padających: $dn = n \cdot 2\pi bNDAdb$

Promień jądra atomowego $R \cong 10^{-15} \mathrm{m}$ atom jest pusty!

Doświadczenie Franka-Hertza

1902 Lenard

1913 Franck i Hertz

 $V_{\rm h}$

4 zderzenia niesprężyste

 $4V_r V_s$

