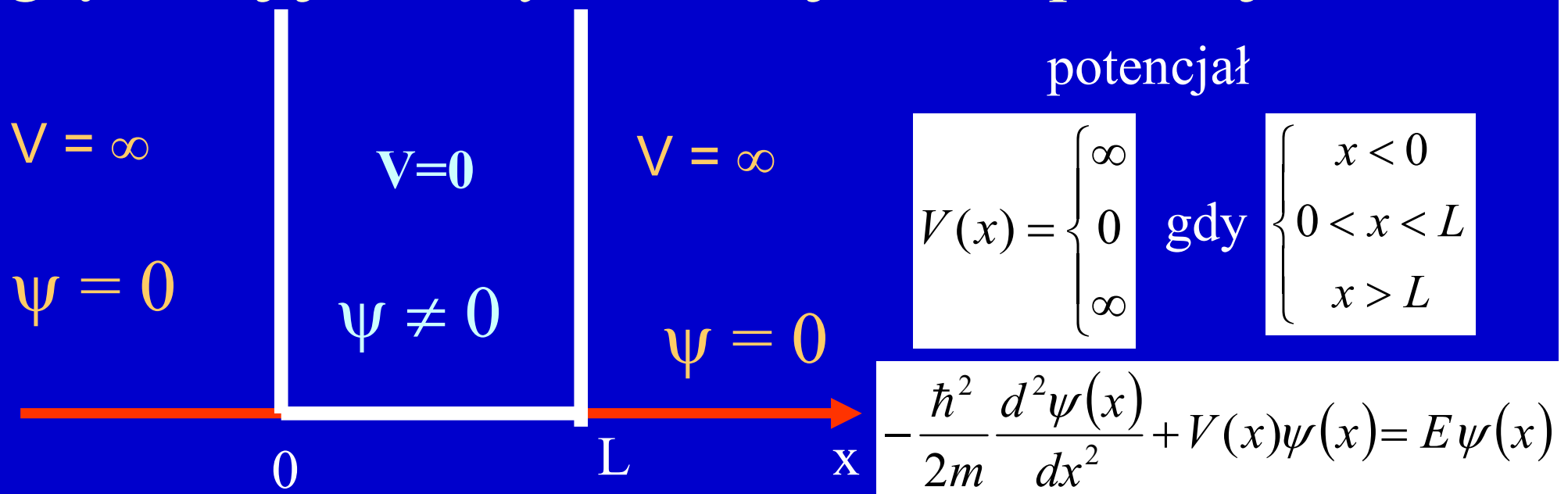


Własności cząstki znajdującej się w studni
potencjału o nieskończonej i skończonej
głębokości, praktyczne realizacje studni i ich
możliwe wykorzystanie

Cząstka kwantowa o energii $E > 0$ w nieskończenie głębokiej jednowymiarowej studni potencjału



Według klasycznej mechaniki w punktach o $x=0$ i $x=L$ na cząstkę działa impulsowa siła w kierunku wnętrza studni $F = -dV/dx$. Ruch cząstki zachodzący ze stałą wartością prędkości jest ograniczony do obszaru studni $0 < x < L$, (poza tym obszarem czyli w barierach energia kinetyczna byłaby < 0). Energia cząstki jest dowolna.

Według mechaniki kwantowej ponieważ $V = \infty$ dla $x < 0$ i dla $x > L$ to funkcja falowa opisująca cząstkę kwantową jest różna od zera również tylko w obszarze $0 < x < L$.

Ruch cząstki jest więc ograniczony do obszaru $0 < x < L$, ale jej energia przyjmuje tylko wartości dyskretne. W celu opisu zachowania się cząstki trzeba znaleźć na początku funkcję falową spełniającą równanie Schrödingera i nałożyć na nią dodatkowe warunki, które musi ona spełniać.

Gdy rozważamy cząstkę swobodną (na którą klasycznie nie działa siła) poruszającą się w obszarze stałego potencjału mniejszego od energii cząstki

$$V(x) = V_0 = \text{const} < E$$

to równanie Schrödingera niezależne od czasu:

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

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

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$$

gdzie

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \frac{|p|}{\hbar}$$

$$k^2 > 0$$

jest równaniem różniczkowym liniowym jednorodnym o stałych współczynnikach dla którego możemy zapisać równanie charakterystyczne i znaleźć jego pierwiastki

$$r^2 + k^2 = 0 \Rightarrow r = ik \quad \text{lub} \quad r = -ik$$

Ogólne rozwiązanie równania różniczkowego $\psi = C_1 \exp(r_1 x) + C_2 \exp(r_2 x)$

$$\psi = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx)$$

C_1, C_2 , -stałe dowolne

Drugi człon w powyższym rozwiązaniu jest związany z opisem cząstki poruszającej się w przeciwnym kierunku do zwrotu osi Ox

Gdy przyjmiemy iż $V_0=0$ to $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Rozwiązanie równania Schrödingera niezależnego od czasu dla przedziału $0 < x < L$ (obszar studni o potencjale $V=0 < E$) ma więc postać:

$$\psi = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx)$$

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

$$e^{-i\alpha} = \cos \alpha - i \sin \alpha$$

$$e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$$

Można je równoważnie zapisać w postaci

$$\psi = C \sin(kx) + D \cos(kx)$$

$$\text{gdzie } D = C_1 + C_2 \quad C = i(C_1 - C_2)$$

Funkcja falowa jest ograniczona, jednoznaczna i ciągła zarówno w obszarze studni jak i poza studnią gdzie $\psi=0$. Należy jednak narzucić warunek ciągłości ψ w punktach $x=0$ i $x=L$. Z uwagi na nieskończony skok potencjału w $x=0$ i $x=L$ w tych punktach nie obowiązuje warunek ciągłości dla pochodnej.

Dla $x = 0$ warunek ciągłości funkcji falowej przyjmuje postać

$$\psi(x=0) = 0 \quad \text{skąd wynika np. iż } D=0 \quad (C_2=-C_1) \Rightarrow \psi = C \sin(kx)$$

Funkcja falowa dla $0 < x < L$

$$\psi = C \sin(kx)$$

Dla $x = L$ warunek ciągłości ma postać

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

a zatem

$$\sin(kL) = 0$$

czyli

$$kL = n\pi$$

→

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

n -liczba całkowita

Ostatecznie

$$\psi = \psi_n(x) = C \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

przy czym $n = 1, 2, 3, \dots$ (liczba całkowita dodatnia)

$n \neq 0$, gdyż dla $n=0$, funkcja ψ byłaby tożsamościowo równa zeru, a zatem nie mogła by opisywać żadnej cząstki.

Zmiana znaku n prowadzi tylko do zmiany znaku funkcji falowej. Ze względu na to iż bezpośredni sens fizyczny ma tylko kwadrat modułu funkcji falowej funkcje o ujemnym n opisują te same stany cząstki co funkcje o $n > 0$ i rozwiązania o $n < 0$ odrzucamy.

Warunek $kL = n\pi$ oznacza iż na długości studni potencjału mieści się całkowita wielokrotność połowy długości fali związanej z opisywaną cząstką gdyż

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

a zatem

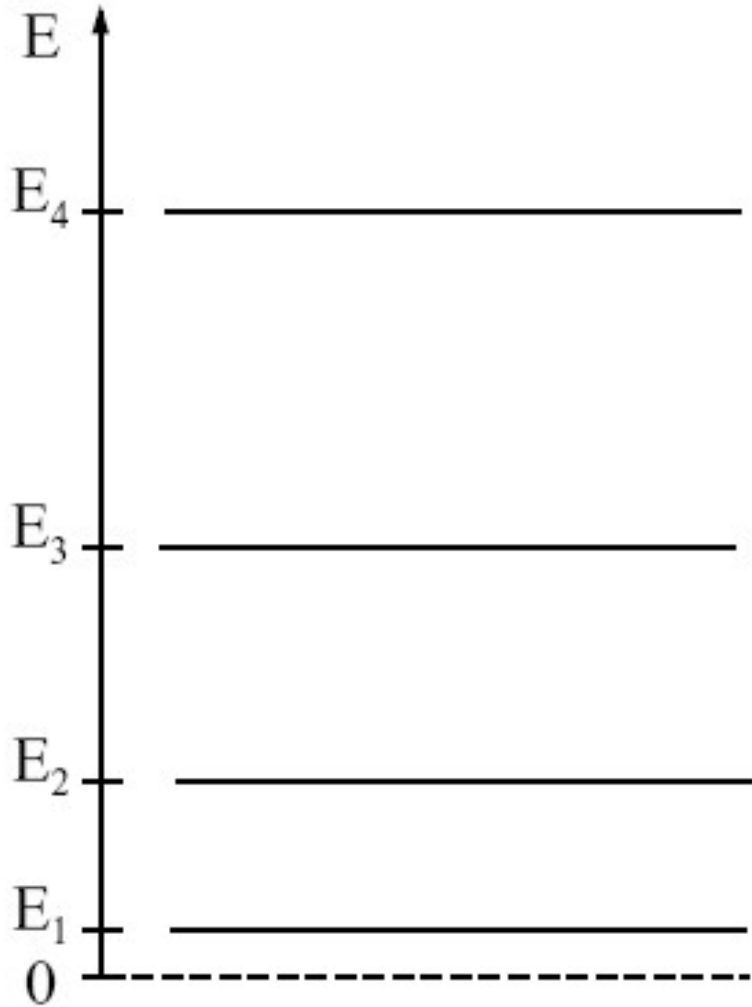
$$\frac{2\pi}{\lambda} L = n\pi$$

czyli

$$L = \frac{n\lambda}{2}$$

Warunek analogiczny jak w przypadku powstania fali stojącej na strunie o długości L umocowanej sztywno na obu jej końcach.

Kwantowanie energii



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

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

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

$$E = E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

$n=1,2,3,\dots$

Energia cząstki w studni potencjału jest skwantowana (może przyjmować tylko dyskretne wartości) określone powyższym wzorem. Z kwantowaniem energii mamy do czynienia zawsze wtedy ruch cząstki jest ograniczony w przestrzeni.

Wartość najmniejszej energii jak i odstęp między dozwolonymi wartościami energii maleją przy zwiększaniu się szerokości studni kwantowej i wzroście masy cząstki.

Odstępy między sąsiednimi poziomami energetycznymi nie są sobie równe.

Kwantowanie energii

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

$n=1,2,\dots$ liczba kwantowa

Najmniejsza wartość energii cząstki jest większa od zera

$$E \geq E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} > 0$$

elektron $m=9,11 \cdot 10^{-31} \text{kg}$; $L=10^{-10} \text{m}$, $E_1=37 \text{eV}$
neutron $m=1,67 \cdot 10^{-27} \text{kg}$; $L=10^{-15} \text{m}$, $E_1=204 \text{MeV}$
piłeczka $m=100 \text{g}$, $L=1 \text{m}$, $E_1=34 \cdot 10^{-49} \text{eV}$
 $\text{eV}=1,6 \cdot 10^{-19} \text{J}$

Cząstka nie może przyjąć energii równej zero, gdyż oznaczałoby to również że kwadrat pędu jak i sam pęd cząstki byłby równy zero. A zatem nieoznaczoność pędu cząstki Δp_x byłaby również równa zero. Na mocy zasady nieoznaczoności Heisenberga $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ nieoznaczoność położenia Δx musiała by być nieskończona a więc położenie cząstki musiałoby być całkowicie nieokreślone, co nie ma miejsca ze względu na ograniczenie możliwych położenia cząstki do obszaru skończonego.

Normowanie funkcji falowej

$$\psi = \psi_n(x) = C \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

dla $0 < x < L$

$n = 1, 2, 3, \dots$

Stałą C można wyznaczyć z dokładnością do stałej o module 1 z warunku normowania

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

$$\int \sin^2(kx) dx = \frac{1}{2} \int (1 - \cos(2kx)) dx = \frac{1}{2} \left[x - \frac{1}{2k} \sin(2kx) \right]$$

$$|C|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = 1 \quad \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = \frac{1}{2} x \Big|_0^L - \frac{L}{4n\pi} \sin\left(2 \frac{n\pi}{L} x\right) \Big|_0^L = \frac{L}{2}$$

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

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

Rozwiązanie równania Schrödingera zależnego od czasu dla cząstki znajdującej się w jednowymiarowej nieskończonej studni potencjału w stanie stacjonarnym (o ustalonej energii)

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

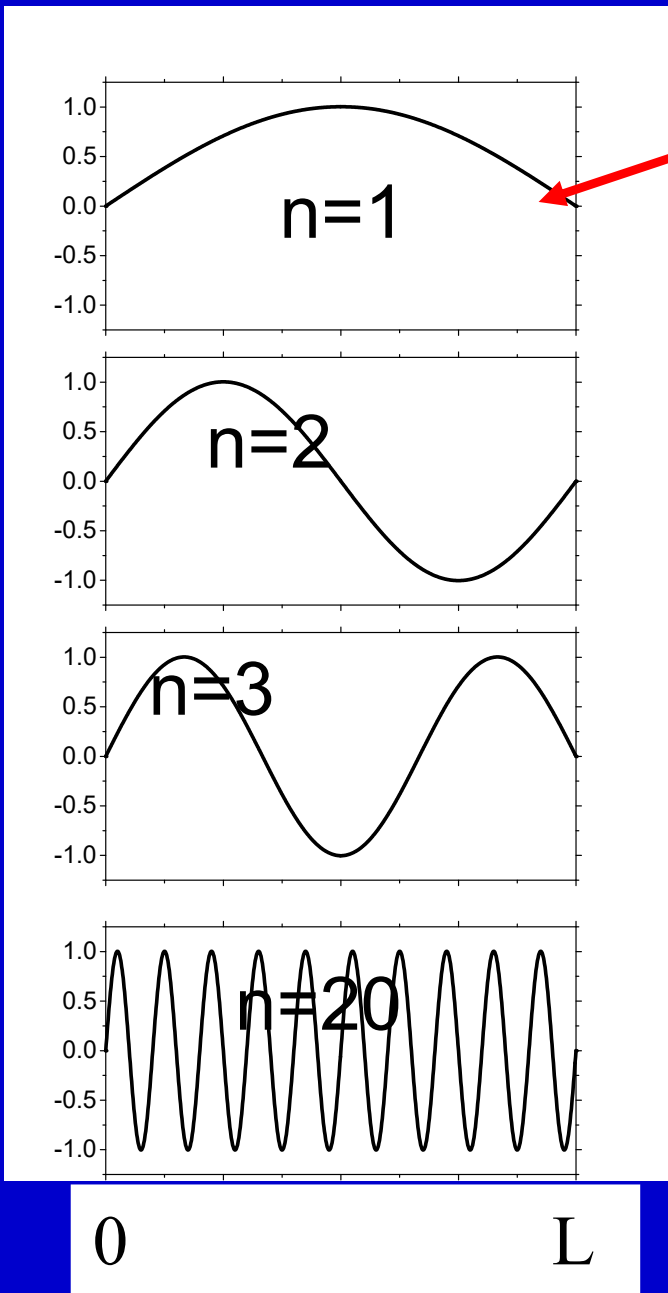
ma w obszarze studni czyli dla x z zakresu $0 < x < L$ postać

$$\begin{aligned} \Psi_n(x, t) &= \psi_n(x) f_n(t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) = \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \exp\left(-i \frac{\pi^2 \hbar n^2}{2mL^2} t\right) \end{aligned}$$

Poza obszarem studni czyli dla $x < 0$ lub $x > L$ mamy

$$\Psi_n(x, t) = 0$$

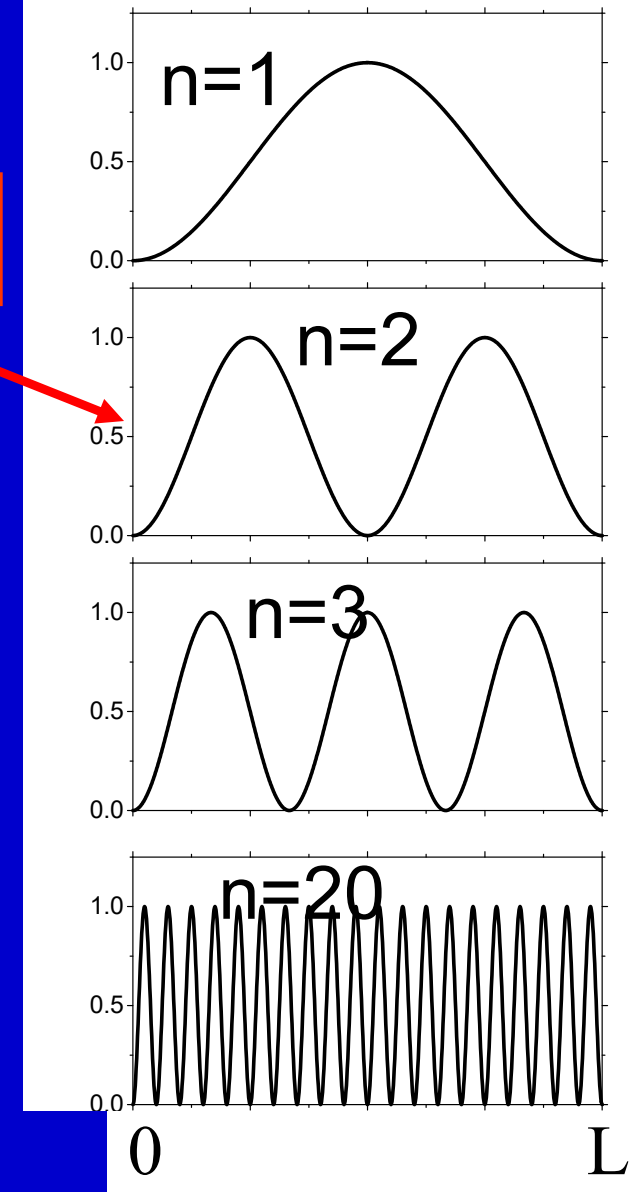
Gęstość prawdopodobieństwa $\rho(x)$ oscyluje między wartością maksymalną równą $2/L$ a zerem (według mechaniki klasycznej gęstość prawdopodobieństwa powinna być stała i równa $1/L$ w przedziale $[0, L]$).



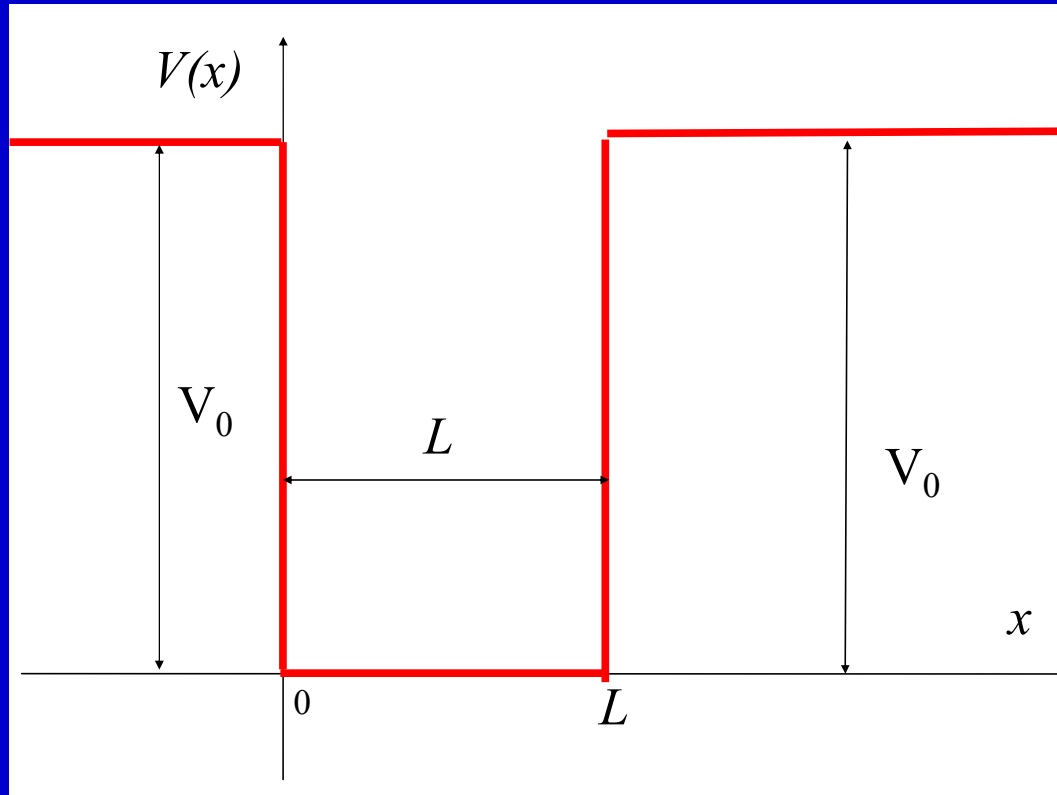
$$\sqrt{\frac{L}{2}}\psi(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$\rho(x) \cdot \frac{L}{2} = \Psi^* \Psi \frac{L}{2} = \psi^* \psi \cdot \frac{L}{2} = \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Dla dużych n odstępów między punktami dla których gęstość $\rho(x)$ osiąga maksymalne i minimalne wartości są bardzo niewielkie. Gęstość uśredniona po x jest stała i równa gęstości określonej dla cząstki klasycznej (przejaw zasady korespondencji)



Cząstka o energii $0 < E < V_0$ w skończonej jednowymiarowej symetrycznej studni potencjału



$$V(x) = \begin{cases} V_0 \\ 0 \\ V_0 \end{cases} \text{ gdy } \begin{cases} x < 0 \\ 0 < x < L \\ x > L \end{cases}$$

Według mechaniki klasycznej cząstka o energii $0 < E < V_0$ mogła by się poruszać tylko w obszarze studni $0 < x < L$ a nie wnika w obszar barier $x < 0$ i $x > L$ gdyż musiała by posiadać w barierach ujemną energię kinetyczną, co wyklucza możliwość tam jej przebywania.

Według mechaniki kwantowej istnieje skończone prawdopodobieństwo wniknięcia cząstki w obszar bariery potencjału o $x < 0$ lub $x > L$.

Równanie Schrödingera niezależne od czasu dla przedziału $x > L$ lub $x < 0$ (obszar barier potencjału $E < V_0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

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

Wprowadźmy oznaczenie

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Wówczas równanie różniczkowe przyjmuje postać

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi = 0$$

Równanie charakterystyczne i jego pierwiastki

$$r^2 - \kappa^2 = 0 \Rightarrow r = \kappa \quad \text{lub} \quad r = -\kappa$$

Ogólne rozwiązanie równania różniczkowego ma postać:

$$\psi = A \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x)$$

A, B -stałe dowolne, w ogólności różne w obszarach $x < 0$ oraz $x > L$

$$\psi = A \exp(\kappa x) + \tilde{B} \exp(-\kappa x)$$

dla $x < 0$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\psi = \tilde{A} \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x)$$

dla $x > L$

Powyżej określona funkcja falowa dążyłaby do ∞ dla $x \rightarrow \pm\infty$, co jest niedopuszczalne. Żeby zapobiec temu trzeba przyjąć iż

$$\tilde{B} = 0$$

oraz

$$\tilde{A} = 0$$

W obszarze $x < 0$ zatem

$$\psi = \psi_1 = A \exp(\kappa x)$$

W obszarze $x > L$ zatem

$$\psi = \psi_3 = B \exp(-\kappa x)$$

Funkcja falowa wnika w głąb barier, ale maleje wykładniczo ze wzrostem odległości od studni.

Gdy $V_0 \rightarrow \infty$ to $\kappa \rightarrow \infty$ czyli funkcja falowa w obszarze bariery o nieskończonej wysokości jest tożsamościowo równa zero (funkcja falowa nie wnika w obszar barier o nieskończonej wysokości)

Ostatecznie

$$\psi = \psi_1 = A \exp(\kappa x)$$

dla $x < 0$ gdzie

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\psi = \psi_2 = C \sin(kx) + D \cos(kx)$$

dla $0 < x < L$ gdzie

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

$$\psi = \psi_3 = B \exp(-\kappa x)$$

dla $x > L$

$$\frac{d\psi_1}{dx} = \kappa A \exp(\kappa x)$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = k[C \cos(kx) - D \sin(kx)]$$

$$\frac{d\psi_3}{dx} = -\kappa B \exp(-\kappa x)$$

Ponieważ w punktach nieciągłości potencjału $x=0$ i $x=L$ zmiana potencjału jest skończona to w punktach tych ciągła musi być zarówno funkcja ψ jak i jej pochodna $d\psi/dx$. Równania ciągłości w punktach $x=0$ oraz $x=L$ przyjmują postać:

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0)$$



$$A = D$$

$$\psi_2(x=L) = \psi_3(x=L)$$



$$C \sin(kL) + D \cos(kL) = B \exp(-\kappa L)$$

$$\frac{d\psi_1}{dx}(x=0) = \frac{d\psi_2}{dx}(x=0)$$



$$\kappa A = kC$$

$$\frac{d\psi_2}{dx}(x=L) = \frac{d\psi_3}{dx}(x=L)$$



$$k[C \cos(kL) - D \sin(kL)] = -\kappa B \exp(-\kappa L)$$

$$A = D \Rightarrow A - D = 0$$

$$C \sin(kL) + D \cos(kL) = B \exp(-\kappa L) \Rightarrow C \sin(kL) + D \cos(kL) - B \exp(-\kappa L) = 0$$

$$\kappa A = kC \Rightarrow \kappa A - kC = 0$$

$$k[C \cos(kL) - D \sin(kL)] = -\kappa B \exp(-\kappa L) \Rightarrow k[C \cos(kL) - D \sin(kL)] + \kappa B \exp(-\kappa L) = 0$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \sin(kL) & \cos(kL) & -\exp(-\kappa L) \\ \kappa & -k & 0 & 0 \\ 0 & k \cos(kL) & -k \sin(kL) & \kappa \exp(-\kappa L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A \\ C \\ D \\ B \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A \\ C \\ D \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}A + a_{12}C + a_{13}D + a_{14}B \\ a_{21}A + a_{22}C + a_{23}D + a_{24}B \\ a_{31}A + a_{32}C + a_{33}D + a_{34}B \\ a_{41}A + a_{42}C + a_{43}D + a_{44}B \end{bmatrix}$$

Znalezione równania stanowią jednorodny układ równań na współczynniki A, C, D, B który można zapisać w postaci macierzowej

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \sin(kL) & \cos(kL) & -\exp(-\kappa L) \\ \kappa & -k & 0 & 0 \\ 0 & k \cos(kL) & -k \sin(kL) & \kappa \exp(-\kappa L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A \\ C \\ D \\ B \end{bmatrix} = 0 \quad (*)$$

Warunkiem istnienia jego niezerowego rozwiązania jest zerowanie się wyznacznika macierzy kwadratowej złożonej ze współczynników występujących w powyższych równaniach co prowadzi do uwikłanego równania na dozwolone dyskretne wartości energii cząstki, które można rozwiązać graficznie lub numerycznie

$$\kappa^2 - k^2 + 2\kappa k \operatorname{ctg}(kL) = 0$$

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

$$\kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$kL = n\pi - 2 \operatorname{arctg}\left(\frac{k}{\kappa}\right)$$

n -liczba naturalna dodatnia

Układ równań (*) dla znalezionych uprzednio dozwolonych energii cząstki pozwala na wyrażenie wartości trzech współczynników poprzez czwarty, którego wartość z dokładnością do stałej o module 1 można określić z warunku normalizacji funkcji falowej, co pozwala na określenie unormowanej postaci funkcji falowej.

Sposób dojścia do równania

$$kL = n\pi - 2\operatorname{arctg}\left(\frac{k}{\kappa}\right)$$

$$\kappa^2 - k^2 + 2\kappa k \operatorname{ctg}(kL) = 0 \Rightarrow \operatorname{ctg}(kL) = -\frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \Rightarrow \operatorname{tg}(kL) = -\frac{2\kappa k}{\kappa^2 - k^2}$$

$$kL = \tilde{n}\pi + \operatorname{arctg}\left(-\frac{2\kappa k}{\kappa^2 - k^2}\right) = \tilde{n}\pi - \operatorname{arctg}\left(\frac{2\kappa k}{\kappa^2 - k^2}\right) = \tilde{n}\pi - \operatorname{arctg}\left(\frac{2\frac{k}{\kappa}}{1 - \left(\frac{k}{\kappa}\right)^2}\right)$$

\tilde{n} -liczba całkowita

Ponieważ

$$2\operatorname{arctg}(x) = \begin{cases} \operatorname{arctg}\left(\frac{2x}{1-x^2}\right) & \text{gdy } |x| < 1 \\ \operatorname{arctg}\left(\frac{2x}{1-x^2}\right) + \pi & \text{gdy } x > 1 \\ \operatorname{arctg}\left(\frac{2x}{1-x^2}\right) - \pi & \text{gdy } x < -1 \end{cases}$$

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

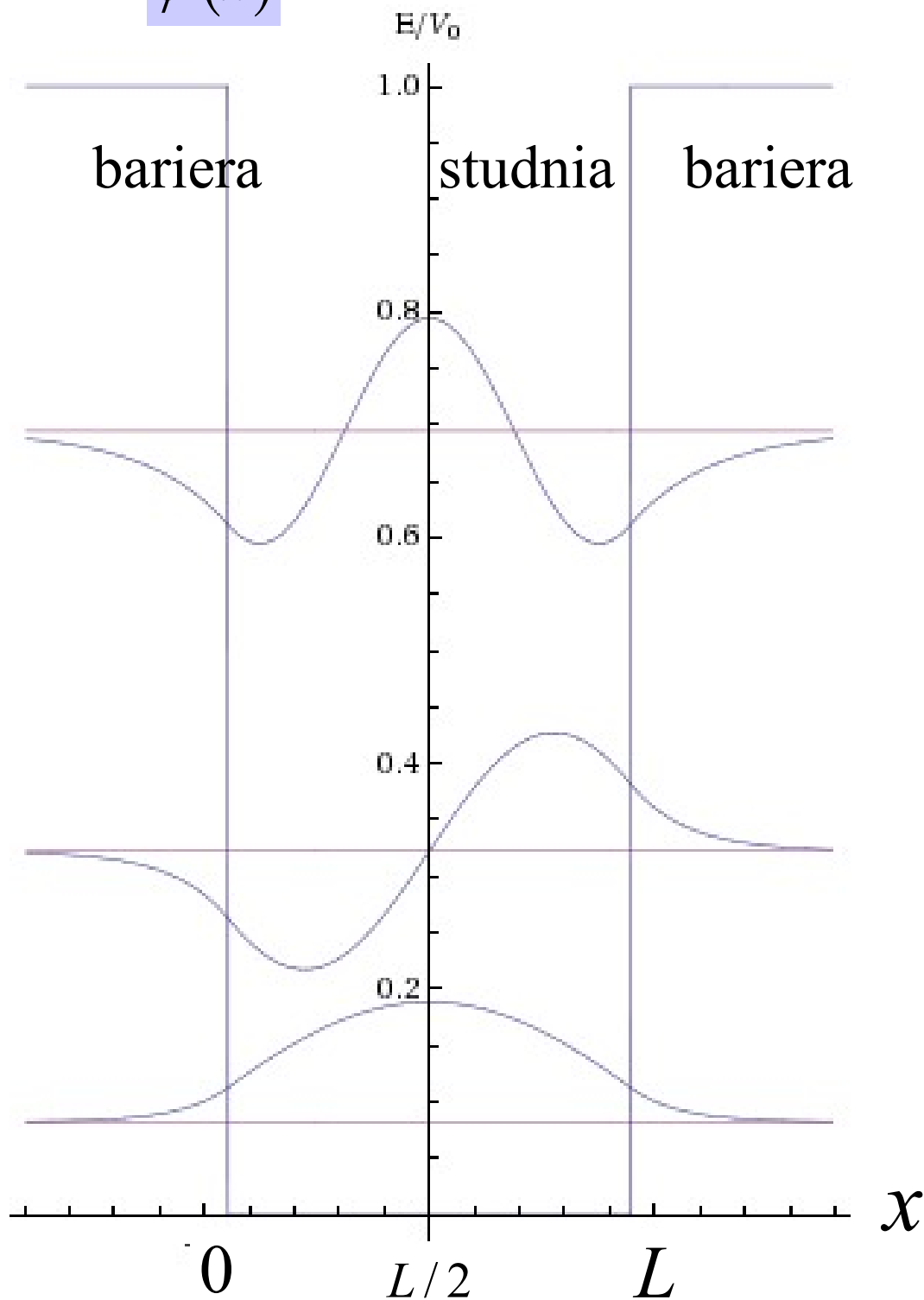
to równanie to jest równoważne równaniu

$$kL = n\pi - 2\operatorname{arctg}\left(\frac{k}{\kappa}\right)$$

n -liczba całkowita

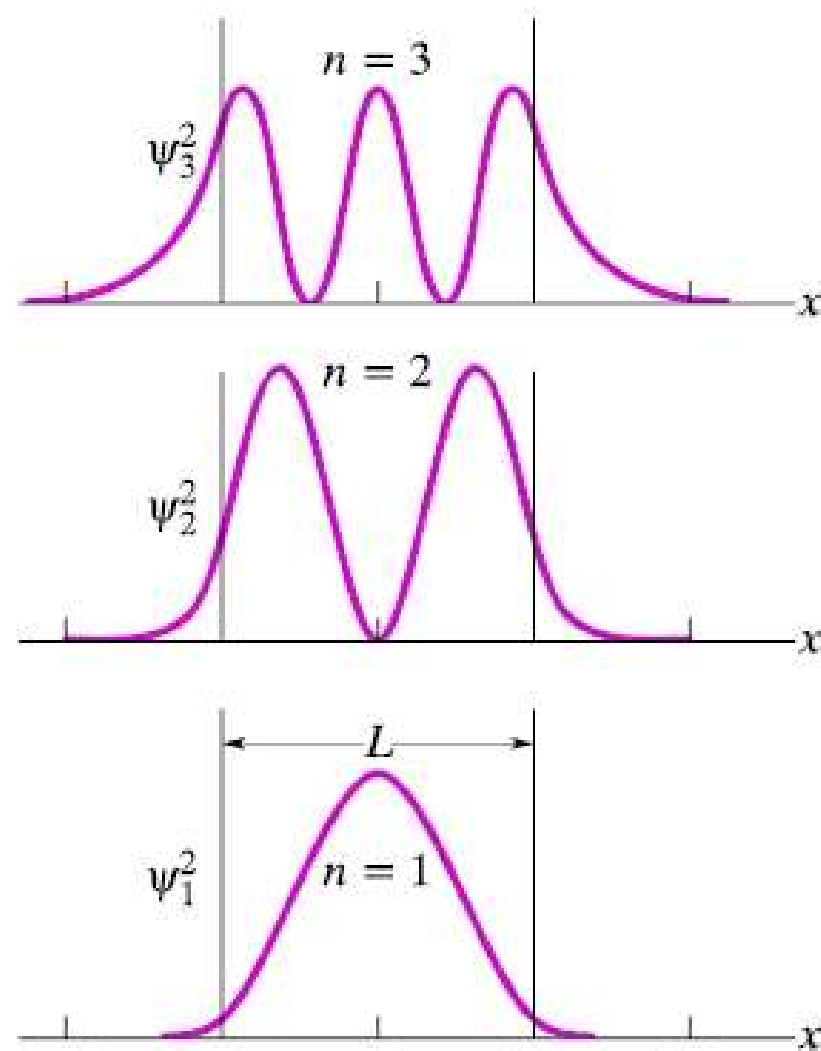
Równanie powyższe nie ma rozwiązania dla $n < 0$. Gdy $n = 0$ to $k = 0$, ale wówczas funkcja falowa jest równa tożsamościowo zeru i nie opisuje żadnej cząstki, a zatem do indeksowania stanów cząstki kwantowej można wykorzystać liczbę kwantową n będąca liczbą naturalną dodatnią

$\psi(x)$



Przykładowe funkcje falowe i odpowiadające im gęstości prawdopodobieństwa $\rho(x) = \Psi^* \Psi = \psi^* \psi$ dla cząstki w symetrycznej studni o skończonej wysokości barier

bariera studnia bariera



Własności cząstki znajdującej się w skończonej studni potencjału

- 1) Istnieje skończone prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarze poza studnią potencjału czyli w obszarze barier w którym klasycznie cząstka nie mogła by przebywać gdyż posiadała by ujemną energię kinetyczną. Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w barierze o określonej wysokości rośnie ze wzrostem energii cząstki. Gęstość prawdopodobieństwa maleje wykładniczo w miarę oddalania się od granic studni.
- 2) W obszarze studni gęstość prawdopodobieństwa nie jest opisana funkcją stałą (w przeciwieństwie do przewidywań mechaniki klasycznej) .
- 3) Energia cząstki może przyjmować tylko dyskretne wartości. Minimalna energia jest większa od zera (oba wnioski są sprzeczne z przewidywaniami mechaniki klasycznej).
- 4) W studni symetrycznej istnieje zawsze stan podstawowy o najniższej energii mniejszej od wysokości bariery opisany symetryczną funkcją falową względem punktu $x=L/2$. Jego energia rośnie ze wzrostem wysokości barier. W stanie tym gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki osiąga maksimum w środku studni.
- 5) Gdy występują w takiej studni stany o wyższych energiach to kolejne stany są opisane na zmianę funkcjami antysymetrycznymi i symetrycznymi względem punktu $x=L/2$. W takich stanach gęstość prawdopodobieństwa w obszarze studni spada do zera w pewnych punktach, których ilość wzrasta ze wzrostem energii cząstki. Ze wzrostem tej energii maleje odległość między punktami odpowiadającymi maksimum i minimum tej gęstości (gęstość po uśrednieniu w stanach w których ta odległość staje się bardzo mała można opisać funkcją stałą co jest zgodne z przewidywaniami mechaniki klasycznej)
- 6) Ze wzrostem szerokości studni a w mniejszym stopniu również ze zmniejszaniem się jej głębokości maleje najniższa dozwolona energia cząstki jak i odstęp pomiędzy dozwolonymi kolejnymi wartościami energii cząstki.

Cząstka kwantowa w nieskończonej trójwymiarowej studni potencjału

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + V \psi = E \psi$$

$$V = \left\{ \begin{array}{l} 0 \quad \text{dla } 0 < x < L_x \quad \text{oraz} \quad 0 < y < L_y \quad \text{oraz} \quad 0 < z < L_z \\ \infty \quad \text{poza obszarem studni} \end{array} \right\}$$

Poza obszarem studni

$$\psi = 0$$

W obszarze studni

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] = E \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] = E \psi$$

Rozwiązanie poszukujemy w postaci

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z)$$

Można łatwo pokazać (np. stosując metodę rozdzielania zmiennych) iż równanie rozważane jest równoważne 3 równaniom rozważanym przy opisie studni jednowymiarowej

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} = E_x \psi_x$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} = E_y \psi_y$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} = E_z \psi_z$$

Przy czym musi zachodzić relacja określająca dodatnią energię cząstki $E = E_x + E_y + E_z$

Rozwiązanie tego równania spełniające warunki ciągłości funkcji falowej na

granicy studni $\psi(x=0) = \psi(x=L_x) = \psi(y=0) = \psi(y=L_y) = \psi(z=0) = \psi(z=L_z) = 0$

można zapisać np. w postaci $\psi(x, y, z) = C \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$

przy czym $k_x = \sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}}$ $k_y = \sqrt{\frac{2mE_y}{\hbar^2}}$ $k_z = \sqrt{\frac{2mE_z}{\hbar^2}}$ oraz $k_x = \frac{\pi n_x}{L_x}$ $k_y = \frac{\pi n_y}{L_y}$ $k_z = \frac{\pi n_z}{L_z}$

A zatem dozwolone energie cząstki są równe

$$E = E_{n_x, n_y, n_z} = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{2m} [k_x^2 + k_y^2 + k_z^2] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

$$n_x = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_z = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right] = E_x + E_y + E_z$$

$$n_x = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Gdy ruch cząstki ograniczony jest we wszystkich kierunkach to mamy do czynienia z pełną kwantyzacją energii, która może przyjmować tylko dyskretne wartości.

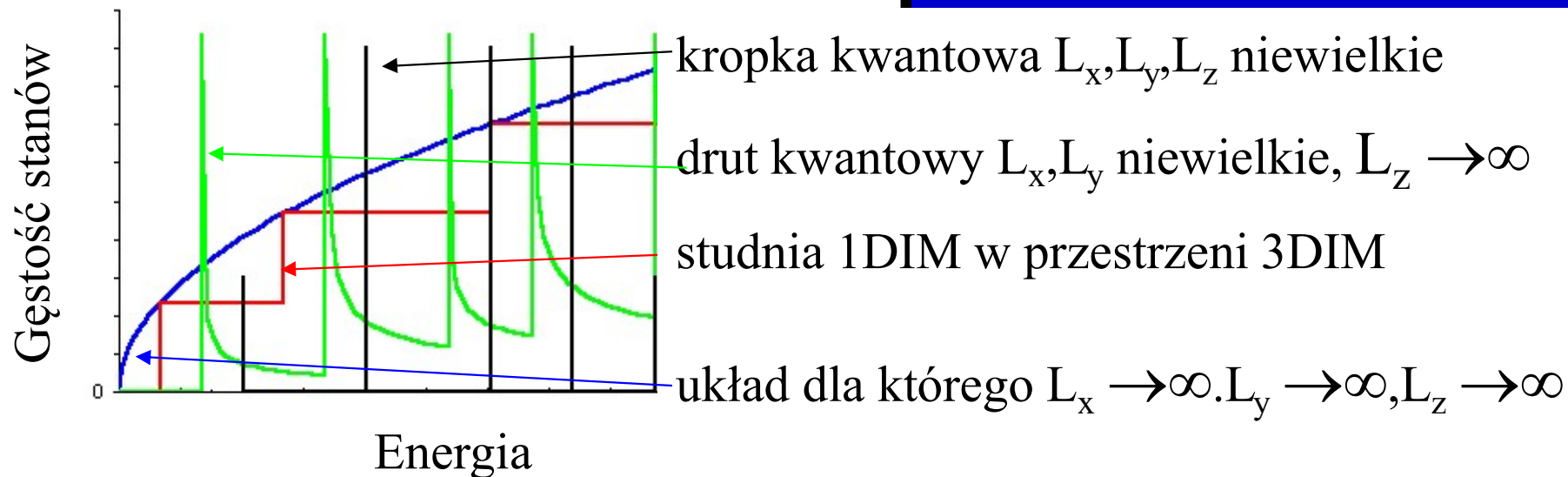
Gdy $L_y, L_z \rightarrow \infty$, to efektywnie mamy do czynienia tylko z kwantowaniem energii cząstki w ruchu wzdłuż osi Ox. Odległości pomiędzy dozwolonymi energiami związanymi z ruchem cząstki wzdłuż osi Oy i Oz stają się bardzo małe. W rozpatrywanym układzie ze względu na to iż energia $E_x > 0$ to całkowita energia cząstki nie może być równa zero. Cząstka może przyjmować za to w zasadzie wszystkie energie wyższe od stanu o najniższej energii, gdyż odległości między dozwolonymi wartościami energii stają się bardzo małe. Dla opisu takich układów o quasi-dyskretnym widmie energetycznym wprowadza się funkcje gęstości stanów.

Funkcja gęstości stanów $g(E)$ pomnożona przez nieskończenie wąski przedział energii dE określa ile jest stanów które mogą zajmować cząstki w przedziale energii $(E, E+dE)$ w jednostce objętości układu.

Jej kształt zależy od tego czy efektywnie ruch cząstki jest ograniczony w jednym kierunku, dwóch kierunkach czy też w ogóle nie jest ograniczony w przestrzeni gdy

$$L_x, L_y, L_z \rightarrow \infty$$

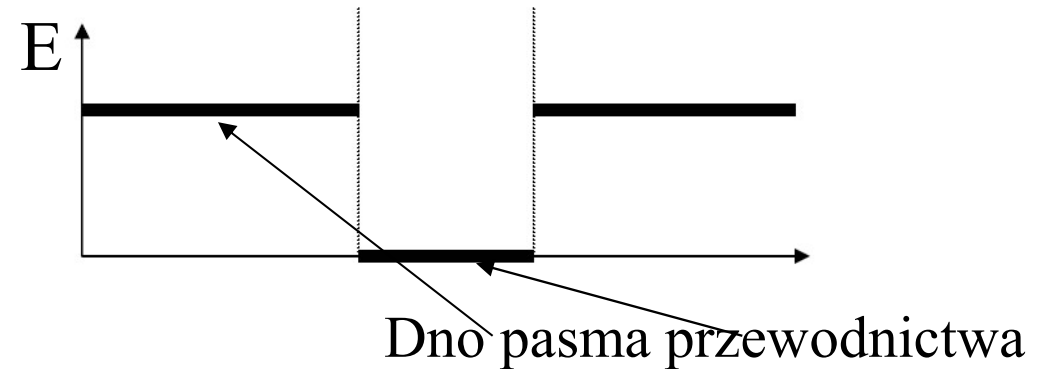
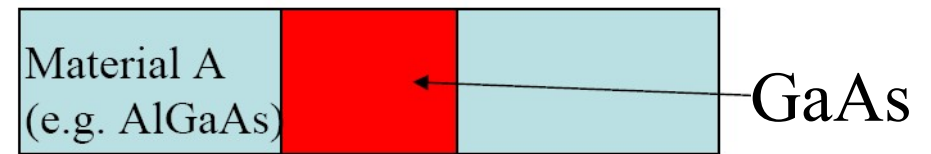
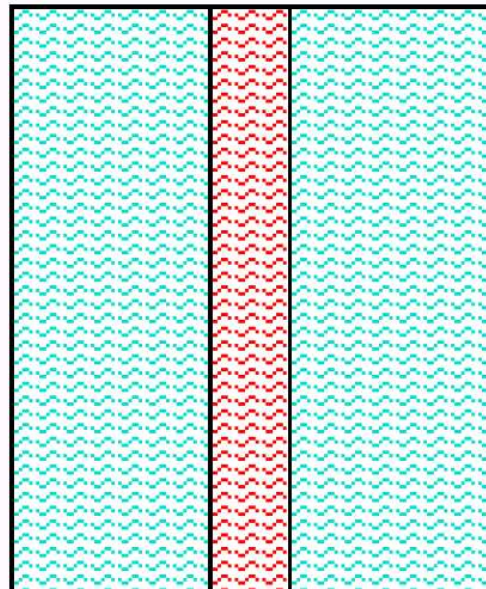
W układzie w którym ruch cząstki jest ograniczony w jednym kierunku obserwuje się skokowy wzrost funkcji gęstości stanów przy przekraczaniu w skali energii poziomu podstawowego w studni. W układzie w którym ruch cząstki nie jest efektywnie ograniczony w żadnym kierunku gęstość stanów dla najniższych energii jest znacznie mniejsza (jest proporcjonalna do pierwiastka kwadratowego z energii). W studni mamy większą gęstość stanów dla energii odpowiadającej stanowi podstawowemu o najniższej energii.



Z kwantowaniem energii cząstek związaną z ich ruchem w jednym kierunku (powstaniem studni 1DIM) mamy do czynienia w przypadku cienkich warstw metalicznych lub heterostruktur złożonych z cienkich warstw utworzonych z różnych półprzewodników, gdzie skwantowana jest energia związana z ruchem cząstki w kierunku prostopadłym do tych warstw.

Heterostruktury są utworzone z warstw wykonanych z różnych półprzewodników o różnej przerwie energetycznej

(GaAl)As GaAs (GaAl)As



Niższe położenie dna pasma przewodnictwa w GaAs niż AlGaAs powoduje to iż w GaAs pojawiają się dyskretne poziomy dla energii elektronów związanej z ich ruchem w kierunku prostopadłym do interfejsów. Kwantowanie to w paśmie przewodnictwa występuje dla energii mniejszych od dna pasma przewodnictwa w AlGaAs (warstwy GaAs stają się studniami kwantowymi)

Heterostruktury można wytwarzać np. przy pomocy metody MBE (epitaksji z wiązek molekularnych) lub MOCVD (osadzanie warstw na powierzchni materiałów poprzez stosowanie związków metaloorganicznych w formie gazowej).

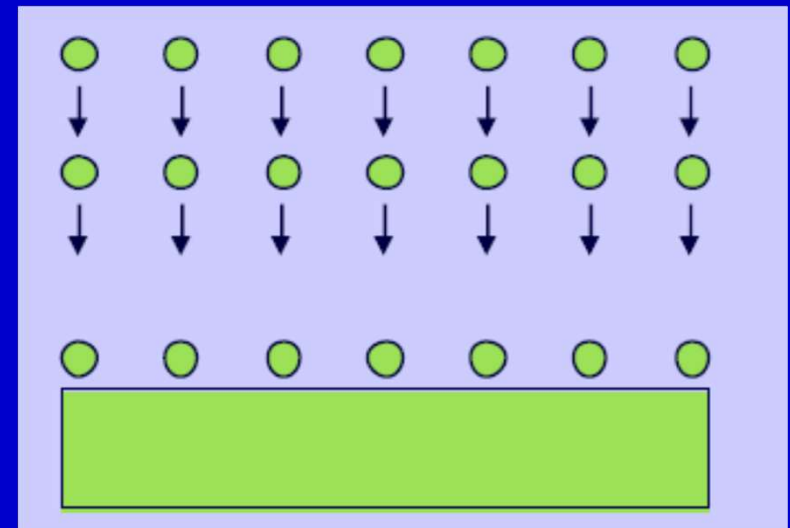
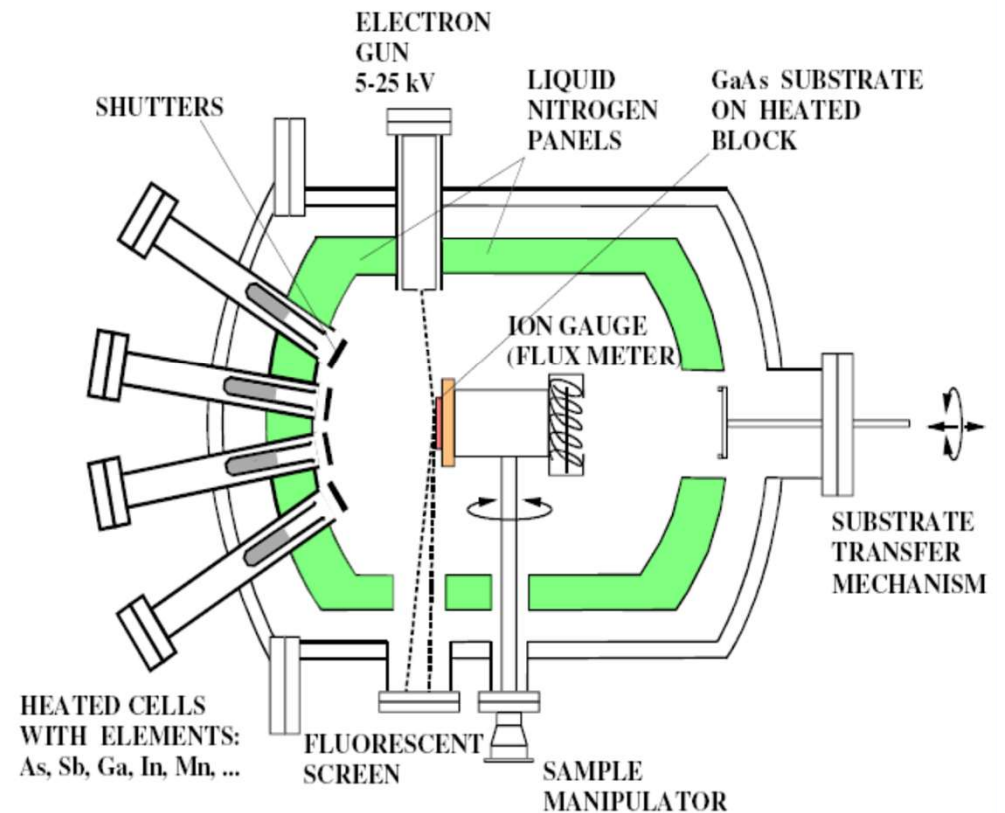
Epitaksja - MBE

Reaktor MBE

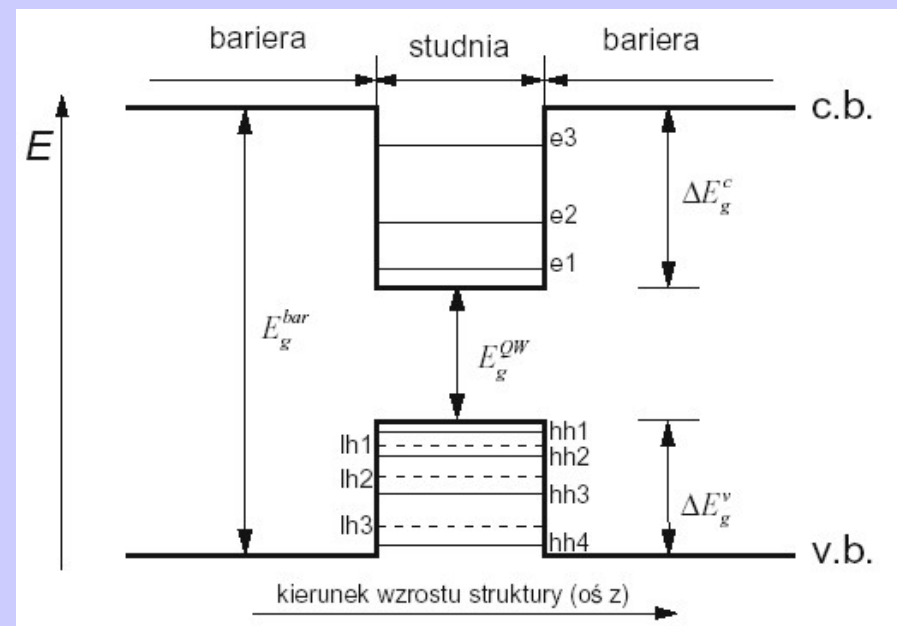
Rozgrzaną płytkę podłoża naświetla się w wysokiej próżni (10^{-8} Pa) wiązkami molekularnymi, utworzonymi z par cząsteczek lub atomów pochodzących ze źródeł (komórek efuzyjnych), gdzie wytwarza się je przy pomocy grzania. Istnieje możliwość regulowania rodzaju i natężenia użytych wiązek co stwarza możliwość regulowania składu i grubości powstałych warstw. Podłoże ma temperaturę 500, 600 °C żeby umożliwić migrację termiczną atomów. Zbudowane jest z kryształu o stałej sieci zbliżonej do stałej sieci hodowanej warstwy krystalicznej. Reaktory MBE mają wbudowane spektroskopy rentgenowskie czy też dyfraktometry elektronowe, dzięki którym można na bieżąco kontrolować wzrost warstwy.

Wadą procesu jest długi czas wzrostu warstwy: 0.5 - 1 $\mu\text{m}/\text{h}$. ale za to istnieje możliwość otrzymywania heterostruktur o grubościach warstw określonych kryształów rzędu pojedynczych warstw atomowych oraz sterowania domieszkowaniem heterostruktur.

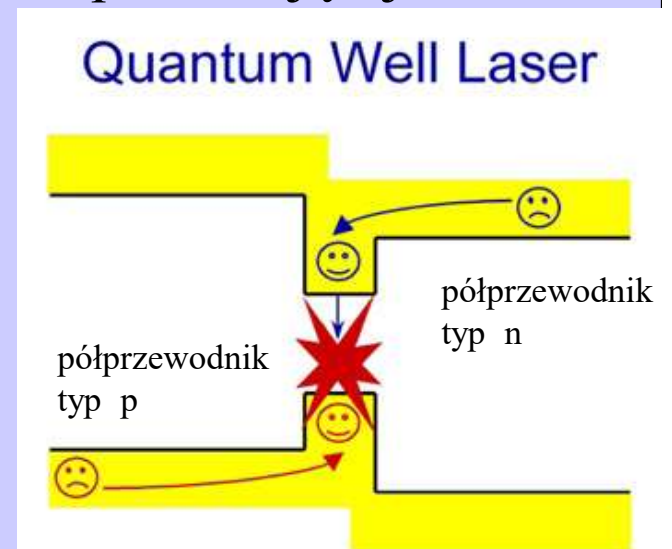
ULTRA-HIGH VACUUM CHAMBER
 10^{-10} - 10^{-9} Tr



Z kwantowaniem energii możemy mieć do czynienia nie tylko w przypadku elektronów w paśmie przewodnictwa ale także dziur w paśmie walencyjnym. Przy przechodzeniu elektronów między poziomami w paśmie przewodnictwa i w paśmie walencyjnym (rekombinacji pary elektron–dziura) może dojść do emisji promieniowania elektromagnetycznego w tym światła.



Długość emitowanej fali zależy od różnicy energii poziomów energetycznych i można ją regulować zmieniając szerokość studni kwantowej a częściowo również wysokość barier poprzez zmianę składu chemicznego materiałów tworzących bariery. Efekt ten wykorzystuje się przy konstruowaniu laserów opartych na studniach. W analizowanych heterostrukturach mamy większą gęstość stanów dla energii odpowiadającej stanowi podstawowemu w studni 1DIM, ponadto elektronom tym trudniej jest studnie opuścić. Ułatwia to osiągnięcie stanu inwersji obsadzeń w laserach półprzewodnikowych opartych na studniach kwantowych. Dzięki temu prąd potrzebny do zainicjowania akcji laserowej w laserach opartych na studniach może być zwykle mniejszy niż w innych typach laserów półprzewodnikowych. Natężenie prądu może być rzędu 10-20 mA.



Drut kwantowy

Układ w którym ruch cząstek jest ograniczony w dwóch kierunkach .
Mamy tu do czynienia z efektywnym kwantowaniem energii ruchu cząstki w dwóch kierunkach.

Kropka kwantowa

Z pełną efektywną kwantyzacją energii cząstki mamy do czynienia w kropce kwantowej zwanej sztucznym atomem czyli w układzie w którym ruch cząstek jest ograniczony we wszystkich kierunkach.

Kropki te możemy wytwarzać np.

- a) przy pomocy metod litograficznych, którym poddaje się strukturę warstwową
- b) elektrostatycznie przy pomocy dodatkowych elektrod wytwarzających pole elektryczne ograniczające ruch cząstek naładowanych
- c) wymuszając wzrost kryształu w postaci wysp. W przypadku kropek samoorganizujących się wzrost taki następuje podczas próby tworzenia przy pomocy metody MBE warstwy krystalicznej na podłożu krystalicznym różniącym się stałą sieci (odległością pomiędzy sąsiednimi atomami) od hodowanego kryształu.
- d) wywołania dyfuzji atomów w strukturach warstwowych z barier potencjału do odpowiednich obszarów studni w celu ograniczenia rozmiarów studni
- e) wytrącania półprzewodnikowych kryształów koloidalnych o wymiarach nanometrycznych z roztworu odpowiedniego materiału w cieczy

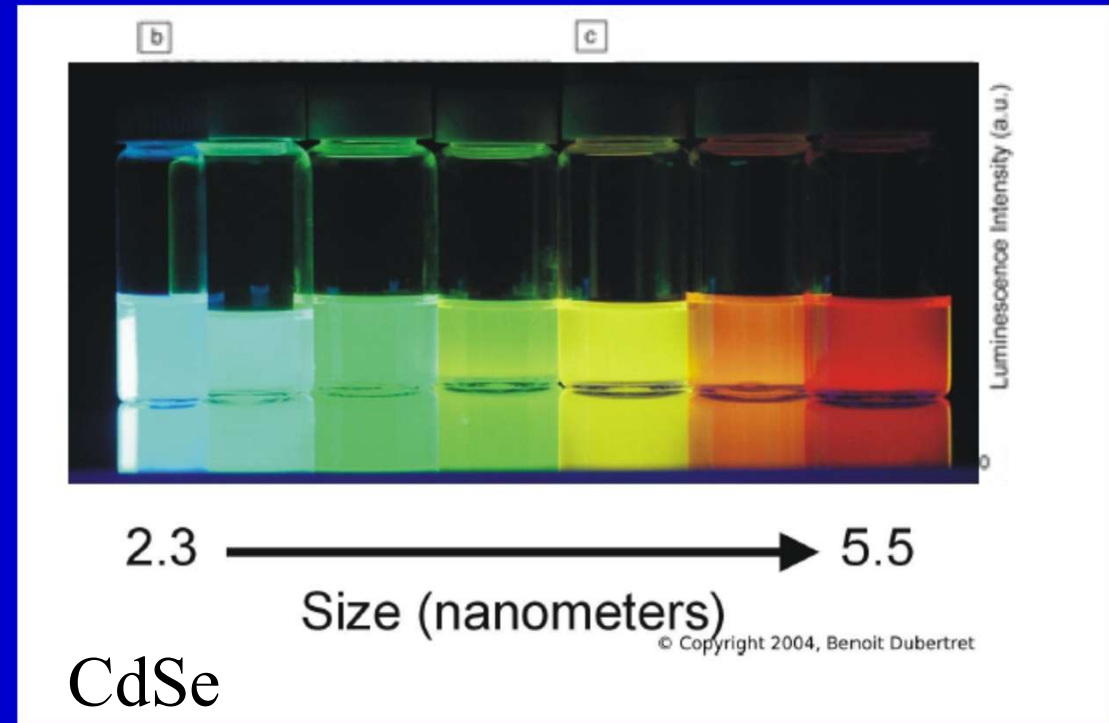
Potencjalne wybrane zastosowania kropek kwantowych

a) lasery i diody świecące emitujące promieniowanie o długości fali zależnej od rozmiaru kropki (częstotliwość promieniowania rośnie wraz ze zmniejszaniem rozmiarów kropki na skutek wzrostu odległości w skali energii pomiędzy poziomami energetycznymi)

b) komputery kwantowe

c) markery służące do określania ruchu pewnych obiektów w organizmach żywych oraz nośniki substancji dostarczanych do wybranych komórek organizmów żywych

d) tranzystory jednoelektronowe



Pytania po wykładzie

1) Omówić przewidywane przez mechanikę kwantową podstawowe własności cząstki poruszającej się w obszarze danym potencjałem

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{dla } x < 0 \\ 0 & \text{dla } 0 < x < L \\ V_0 & \text{dla } x > L \end{cases}$$

(jednowymiarowa studnia kwantowa o skończonej głębokości), jeżeli energia cząstki jest mniejsza od wysokości barier. Które z nich różnią się od własności poruszającej się w takim samym potencjale cząstki opisywanej w ramach mechaniki klasycznej? Rozważyć w szczególności co można powiedzieć na temat energii analizowanej cząstki i gęstości prawdopodobieństwa znalezienia jej w różnych obszarach przestrzeni. Jak możemy praktycznie wytworzyć studnie kwantową?

Przykładowe pytania testowe

Rozważyc cząstkę poruszającą się w obszarze nieskończenie głębokiej studni potencjału danej wzorem

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

Które z poniższych stwierdzeń są prawdziwe?

- 1) Funkcja falowa wnika w obszar barier potencjału.
- 2) Nie jest możliwe znalezienie cząstki w obszarach barier potencjału.
- 3) Długość fali materii λ związanej z cząstką spełnia relacje $L = n\lambda/2$ (n -liczba całkowita dodatnia).
- 4) Odstępy między dozwolonymi wartościami energii cząstki są jednakowe.
- 5) Odstępy pomiędzy dozwolonymi energiami cząstki maleją ze wzrostem szerokości studni kwantowej L .
- 6) Najmniejsza energia cząstki maleje ze wzrostem szerokości studni kwantowej L .
- 7) Najmniejsza energia cząstki jest równa zero.
- 8) Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w dowolnym punkcie w studni (czyli w obszarze o x z zakresu $0 < x < L$) jest jednakowa.
- 9) Istnieją stany o określonej energii w przypadku których w obszarze studni można wyróżnić punkty w których gęstość prawdopodobieństwa znalezienia tam cząstki osiąga wartość zero.

Czy poniższe twierdzenia dotyczące własności cząstki kwantowej o energii $E < V_0$ poruszającej się w potencjale danym wzorem:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{dla } x < 0 \\ 0 & \text{dla } 0 < x < L \\ V_0 & \text{dla } x > L \end{cases}$$

opisującym studnię kwantową o skończonej

głębokości są stwierdzeniami prawdziwymi?

- Energia cząstki może przyjmować tylko wartości dyskretne.
- Energia cząstki nie może być równa zero.
- Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarach barier o $x > L$ oraz $x < 0$ jest równe zero.
- Istnieją stany o określonej energii w przypadku których gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie o $x = 2L$ jest większa niż w punkcie $x = L$.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

