

V.  
RÓWNANIA MECHANIKI  
KWANTOWEJ

# 1 Postulaty mechaniki kwantowej

Istota teorii kwantowej może być sformułowana za pomocą **postulatów**, których spełnienie **postulujemy** i których **nie można wyprowadzić** z żadnych innych bardziej podstawowych zasad.

Słuszność tych postulatów opiera się na zgodności z doświadczeniem wynikających z nich wniosków.

W podejściu tym odnajdujemy analogię z **wprowadzeniem równań ruchu mechaniki klasycznej**, których także **nie da się wyprowadzić** z bardziej fundamentalnych zasad.

Np. klasyczne równanie ruchu (II zasada dynamiki Newtona)

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} \quad (1)$$

jest **postulatem mechaniki klasycznej**.

Przedstawię tutaj wybrane postulaty mechaniki kwantowej.

## 1.1 Postulat I: Informacja zawarta w funkcji falowej

Każdy układ fizyczny złożony z  $N$  cząstek w stanie kwantowym  $|\psi(t)\rangle$  jest całkowicie opisany przez **funkcję falową**  $\psi(r, t)$ , gdzie  $r = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  oznacza zbiór wektorów położeń cząstek.

**Opis całkowity** oznacza, że każdą dostępną informację dotyczącą układu fizycznego można otrzymać znając funkcję falową  $\psi(r, t)$  za pomocą reguł podanych w kolejnych postulatach.

### Interpretacja fizyczna funkcji falowej

Znając funkcję falową  $\psi(r, t)$  możemy obliczyć następującą wielkość:

$$dP_\psi(t) = \psi^*(r, t)\psi(r, t)dr = |\psi(r, t)|^2 d^{3N}r, \quad (2)$$

gdzie  $dr \equiv d^{3N}r = d^3r_1 d^3r_2 \times d^3r_N$  jest  $3N$ -wymiarowym elementem objętości w przestrzeni położeń cząstek, przy czym wektory położeń we współrzędnych kartezjańskich mają postać

$$\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1), \mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_2), \dots, \mathbf{r}_N = (x_N, y_N, z_N).$$

Wielkość  $dP_\psi(t)$  zawiera następującą informację fizyczną:

**$dP_\psi(t)$  jest prawdopodobieństwem znalezienia układu  $N$  cząstek w połozeniach**

$$x_1 \in [x_1, x_1 + dx_1], y_1 \in [y_1, y_1 + dy_1], z_1 \in [z_1, z_1 + dz_1],$$

$$x_2 \in [x_2, x_2 + dx_2], y_2 \in [y_2, y_2 + dy_2], z_2 \in [z_2, z_2 + dz_2],$$

...

**w stanie kwantowym  $|\psi\rangle$  w chwili  $t$ .**

## Gęstość prawdopodobieństwa

$$\varrho_\psi(r, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dP_\psi}{dr} = |\psi(r, t)|^2 \quad (3)$$

Wielkość  $A$  taką, że  $|A|^2 = \varrho$  jest gęstością prawdopodobieństwa nazywamy **amplitudą gęstości prawdopodobieństwa**.

$\implies$  **Funkcja falowa**  $\psi(r, t)$  jest **amplitudą gęstości prawdopodobieństwa** takiego zdarzenia, że w chwili  $t$  układ  $N$  cząstek znajduje się w stanie kwantowym  $|\psi\rangle$ , przy czym cząstki znajdują się w położeniach  $r = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ .

**Uwaga** Gęstość prawdopodobieństwa jest funkcją położeń  $r$  układu  $N$  cząstek. Natomiast prawdopodobieństwo znalezienia cząstek w  $3N$ -wymiarowym punkcie  $r$  jest równe zero. Niezerowe prawdopodobieństwo otrzymamy wyłącznie dla pewnej niezerowej objętości przestrzeni zmiennych  $r$ .

### Wnioski

- (1) Prawdopodobieństwo znalezienia układu fizycznego w stanie kwantowym  $|\psi\rangle$  w chwili  $t$  w skończonej objętości  $\Omega$

$$P_\psi(\Omega, t) = \int_{\Omega} dr \varrho_\psi(r, t) = f(t) \leq 1. \quad (4)$$

- (2) Prawdopodobieństwo znalezienia układu fizycznego w stanie kwantowym  $|\psi\rangle$  w chwili  $t$  w całej (dostępnej) przestrzeni o objętości  $\Omega_\infty$

$$P_\psi(\Omega_\infty) = \int_{\Omega_\infty} dr \varrho_\psi(r, t) = 1 \quad \forall t. \quad (5)$$

**Ważne spostrzeżenie:**  $P_\psi(\Omega_\infty)$  nie zależy od czasu, pomimo iż  $P_\psi(\Omega, t)$  od czasu zależy.

Wzór (5) jest **warunkiem unormowania funkcji falowej**, który można przepisać jako

$$\int_{\Omega_\infty} dr |\psi(r, t)|^2 = 1 \quad \forall t. \quad (6)$$

**Warunek unormowania posiada następującą interpretację fizyczną:**

Suma prawdopodobieństw zdarzeń takich, że cząstki przyjmują wszystkie możliwe położenia  $r$  w przestrzeni położeń, a rozważany układ cząstek znajduje się w stanie kwantowym  $|\psi(t)\rangle$ , jest równa 1.

Jest to **prawdopodobieństwo zdarzenia pewnego**.

## Wymiar funkcji falowej jednej cząstki

Wymiar gęstości prawdopodobieństwa dla jednej cząstki:

$$[\text{długość}]^{-3}$$

w układzie SI:

$$\text{m}^{-3}$$

$\implies$  wymiar funkcji falowej pojedynczej cząstki:

$$[\text{długość}]^{-3/2} = \text{m}^{-3/2}$$

## Faza funkcji falowej

Jeżeli dokonamy następującej zmiany funkcji falowej,

$$\psi \longrightarrow \psi e^{i\theta} = \psi' , \quad (7)$$

gdzie  $\theta \in \mathbb{R}$  ( $\mathbb{R}$  = zbiór liczb rzeczywistych), to

$$\varrho_{\psi'} = |\psi'|^2 = |\psi|^2 |e^{i\theta}|^2 = |\psi|^2 = \varrho_{\psi} . \quad (8)$$

$\implies$  Pomnożenie funkcji falowej przez **czynnik fazowy**  $e^{i\theta}$  nie zmienia gęstości prawdopodobieństwa, czyli nie prowadzi do żadnych zmian własności fizycznych układu.

**$\implies$  Funkcja falowa określona jest z dokładnością do czynnika fazowego  $e^{i\theta}$ , gdzie  $\theta \in \mathbb{R}$ .**

## 1.2 Postulat II: Równanie własne

**Równanie własne** ma postać

$$\widehat{\Omega}\psi_{\nu} = \omega_{\nu}\psi_{\nu} \quad (9)$$

$\widehat{\Omega}$  = operator (hermitowski) odpowiadający wielkości fizycznej  $\Omega$   $\psi_{\nu}$  = funkcja własna operatora  $\widehat{\Omega}$  w stanie kwantowym  $\nu$   $\omega_{\nu}$  = wartość własna (liczba rzeczywista będąca wynikiem pomiaru)

### Przykłady

- operator pędu cząstki  $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$   $\widehat{\mathbf{p}} = (\widehat{p}_x, \widehat{p}_y, \widehat{p}_z)$  operatory składowych pędu  $\widehat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ ,  $\widehat{p}_y = -i\hbar\partial/\partial y$ ,  $\widehat{p}_z = -i\hbar\partial/\partial z$

- operator energii kinetycznej cząstki

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$$

$m$  = masa spoczynkowa cząstki

- operator energii cząstki, **operator Hamiltona, hamiltonian**

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(\mathbf{r})$$

$\hat{U}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$  = operator energii potencjalnej cząstki

### 1.3 Postulat III: Kwantowe równanie ruchu

Ewolucja w czasie funkcji falowej układu fizycznego określona jest **równaniem Schrödingera zależnym od czasu**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (10)$$

gdzie  $\hat{H}$  jest **hamiltonianem układu**.

Równanie (16) jest **kwantowym równaniem ruchu**.

Równanie (16) jest równaniem różniczkowym cząstkowym, które pozwala na **przewidywanie ewolucji w czasie funkcji falowej**  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , jeżeli znamy jej wartości  $\psi(\mathbf{r}, 0)$  w chwili początkowej  $t = 0$ .

Są to **warunki początkowe**.

Ponadto w celu znalezienia jednoznacznych rozwiązań równania (16) musimy znać **warunki brzegowe**, czyli  $\psi(r_{brzeg}, t)$ , gdzie  $r_{brzeg}$  są wartościami współrzędnych brzegu obszaru, w którym znajduje się układ fizyczny.

#### **Komentarze**

(1) Zależne od czasu równanie Schrödingera jest odpowiednikiem II zasady dynamiki Newtona (klasycznego równania ruchu) w mechanice klasycznej<sup>†</sup>.

<sup>†</sup> Czy klasyczne równanie ruchu (II zasada dynamiki Newtona) zawiera kompletną (makroskopowo dostępną) informację o ruchu cząstki klasycznej?

Równanie to ma postać

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}. \quad (11)$$

Przyspieszenie cząstki

$$\mathbf{a} = \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (12)$$

można zmierzyć np. mierząc zmianę prędkości  $d\mathbf{v}$  w czasie  $dt$ .

Jednak równanie (11) zawiera dwie nieznanne wielkości: siłę  $\mathbf{F}$  i masę cząstki  $m$ . Zasady dynamiki Newtona nie podają niezależnych definicji (sposobów pomiaru) siły i masy cząstki, a zatem równanie (11) można uznać za definicję zarówno siły jak i masy.

⇒ Siła i masa nie są dobrze określone?

Rozwiązaniem tego problemu jest zapisanie równania (11) w równoważnej postaci układu dwóch równań (równań Hamiltona)

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad (13)$$

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} . \quad (14)$$

Pęd cząstki  $\mathbf{p}$  może być bezpośrednio zmierzony (np. w zderzeniu sprężystym).

Zgodnie z równaniem (13) siła zdefiniowana jest jako zmiana pędu cząstki. Tak zdefiniowana siła jest wielkością mierzalną.

**Uwaga:**

Trajektoria cząstki jest jednoznacznie określona, tzn. potrafimy wyznaczyć położenie  $\mathbf{r}(t)$  i prędkość cząstki  $\mathbf{v}(t)$  w dowolnej chwili czasu, jeżeli znamy **wartości początkowe** położenia cząstki

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(t = 0)$$

i prędkości cząstki

$$\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(t = 0) .$$

### (2) **Determinizm kwantowy**

Równanie Schrödingera zależne od czasu pozwala na **jednoznaczne** przewidywanie czasowej ewolucji funkcji falowej układu, jeżeli znamy jej wartości w chwili początkowej

$$\psi(r, 0) \longrightarrow \psi(r, t) \quad \forall t > 0 \quad (15)$$

oraz odpowiednie warunki brzegowe. Wyłącznie w tym sensie możemy mówić o deterministycznym charakterze mechaniki kwantowej.

### (3) **Indeterminizm kwantowy (probabilistyczny charakter mechaniki kwantowej)**

W swej istocie mechanika kwantowa jest jednak **teorią probabilistyczną**.

(a) Znajomość funkcji falowej dostarcza nam informacji o prawdopodobieństwie, czyli informacji o **charakterze probabilistycznym**

$$\varrho_\psi(r, t) = |\psi(r, t)|^2 . \quad (16)$$

(b) W mikroświecie występuje **nieokreśloność trajektorii cząstek** (informacja o trajektoriach cząstek jest niedostępna, co wynika z zasady nieoznaczoności Heisenberga).

## Dyskusja

- (1) Filozoficzna interpretacja mechaniki kwantowej: **szkoła kopenhaska (Bohr) • Opis probabilistyczny tkwi w sposób immanentny w każdym równaniu kwantowym.**
- (2) Kwantowa teoria pomiaru: istota pomiaru sprowadza się do zastosowania schematu: **aparatura eksperymentalna  $\Rightarrow$  obiekt mierzony  $\Rightarrow$  obserwator**
- (3) Subiektywistyczna teoria poznania

### **Podsumowanie postulatów mechaniki kwantowej**

- Zgodnie z teorią kwantową wielkość fizyczną możemy zmierzyć dokładnie jedynie wtedy, gdy układ fizyczny znajduje się w stanie własnym operatora odpowiadającego wielkości mierzonej.

**$\Rightarrow$  Brak informacji o układzie kwantowym pomiędzy pomiarami.**

- Kwantowe podejście do procesu pomiaru: Pomiar przy użyciu aparatury makroskopowej jest **silnym zaburzeniem** stanów mikroświata.
- Tzw. "natura" materii (cząstek i promieniowania) zależy od rodzaju wykonanego eksperymentu, np. eksperyment interferencyjny odsłania falowy charakter cząstek.

- Pełną informację o układzie kwantowym posiadamy jedynie w sensie znajomości prawdopodobieństwa, wartości własnych, wartości oczekiwanych i ich ewolucji w czasie.

**Trajektoria cząstki kwantowej nie jest mierzalna.**

Natomiast **wartości własne wielkości fizycznych w stanach własnych są dokładnie mierzalne.**

### **Przykład**

Mogłoby się wydawać, że potrafimy wyznaczać trajektorie cząstek, np. za pomocą komór pęcherzykowych.

Jednakże w komorze tej mierzymy ślad cząstki, którego szerokość jest  $\sim 10^8 - 10^{10}$  razy większa od rozmiarów cząstki elementarnej.

Szacowany błąd takiego pomiaru jest o ponad 8 rzędów wielkości większy od rozmiarów cząstki.

$\Rightarrow$  Nie można zatem uznać, że w tych pomiarach wyznaczana jest trajektoria cząstki elementarnej.

## 2 Stany stacjonarne

Jeżeli hamiltonian układu nie zależy od czasu, czyli

$$\hat{H} \neq f(t), \quad (17)$$

to w zależnym od czasu równanie Schrödingera (16) można rozseparować zmienne przestrzenne  $r$  od czasu  $t$  i otrzymać czasową zależność rozwiązań w postaci

$$\psi(r, t) = \varphi(r)e^{-i\omega t}, \quad (18)$$

gdzie  $\varphi(r)$  jest **częścią przestrzenną funkcji falowej**, a  $\omega = E/\hbar$ .

### Uwaga

Dla układu w stanie stacjonarnym gęstość prawdopodobieństwa nie zależy od czasu, ponieważ

$$\varrho(r, t) = |e^{-i\omega t}|^2 |\varphi(r)|^2 = |\varphi(r)|^2 \neq f(t). \quad (19)$$

Funkcja falowa  $\varphi(r)$  spełnia **niezależne od czasu równanie Schrödingera**

$$\hat{H}\varphi(r) = E\varphi(r). \quad (20)$$

Równanie (20) jest **równaniem własnym operatora Hamiltona (hamiltonianu)**, którego wartościami własnymi są energie układu w różnych stanach kwantowych  $\varphi_\nu(r)$

$$E = E_\nu. \quad (21)$$

$\nu$  = zbiór liczb kwantowych, określających dany stan kwantowy

W dalszym toku wykładu będziemy się zajmować stanami stacjonarnymi, a zatem będziemy rozwiązywać równanie (20).

## 3 Cząstka swobodna

Dla cząstki swobodnej  $U = 0$ , a zatem

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}. \quad (22)$$

Równanie własne operatora (22) ma postać

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (23)$$

Łatwo sprawdzić, że rozwiązaniami równania (23) są fale płaskie (w przestrzeni położeń)

$$\psi(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (24)$$

gdzie  $C$  jest stałą normalizacyjną.

Fale płaskie spełniają relacje de Broglie'a

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (25)$$

oraz

$$E = \hbar \omega . \quad (26)$$

Jeżeli cząstka swobodna znajduje się w skończonej części przestrzeni o objętości  $\Omega$ , to stałą normalizacyjną wyznaczamy następująco:

$$\int_{\Omega} d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2 = |C|^2 \Omega = 1 , \quad (27)$$

czyli

$$C = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} . \quad (28)$$

A zatem pełne rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki swobodnej ma postać

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} . \quad (29)$$

Cząstka swobodna posiada energię

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} . \quad (30)$$

Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki swobodnej w dowolnym położeniu w dostępnej części przestrzeni

$$\varrho = \frac{1}{\Omega} = const . \quad (31)$$

## 4 Jednowymiarowy próg potencjału

Energia potencjalna cząstki dla progu (schodka) potencjału ma postać

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < 0 \\ V_0 & \text{dla } x \geq 0 \end{cases} \quad (32)$$

W zależności od wartości energii  $E$  cząstki względem wysokości progu potencjału  $V_0$  mamy do czynienia z dwoma przypadkami.

### (a) Przypadek $E > V_0$

W tym przypadku cząstka jest swobodna dla  $x < 0$ , natomiast odczuwa odpychający potencjał  $V_0$  dla  $x \geq 0$ .

Definiujemy wielkości

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (33)$$

$$k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \quad (34)$$

W obszarze (1) ( $x < 0$ ) równanie Schrödingera przyjmuje postać

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + k_1^2 \right) \psi_1(x) = 0, \quad (35)$$

a w obszarze (2) ( $x \geq 0$ )

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + k_2^2 \right) \psi_2(x) = 0. \quad (36)$$

Najogólniejsze rozwiązanie tych równań ma postać

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0), \quad (37)$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad (x \geq 0), \quad (38)$$

gdzie  $Ae^{ik_1x}$  oraz  $Ce^{ik_2x}$  odpowiadają falam biegnącym w kierunku  $(+x)$ , natomiast  $Be^{-ik_1x}$  oraz  $De^{-ik_2x}$  odpowiadają falam biegnącym w kierunku  $(-x)$ .

Jesteśmy zainteresowani cząstką, która (w chwili początkowej) pada na próg potencjału z lewej strony, czyli w obszarze (1) jej funkcja falowa ma postać  $Ae^{ik_1x}$ . Cząstka ta może zostać odbita od progu potencjału lub przejść przez ten próg. W obszarze (2) cząstka nie ulega odbiciu ze względu na brak progu potencjału w tym obszarze, a zatem  $D = 0$ .

Zależne od czasu rozwiązanie równania Schrödingera dla progu potencjału ma postać funkcji falowej stanu stacjonarnego

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} Ae^{i(k_1x - \omega t)} + Be^{-i(k_1x + \omega t)} & \text{dla } x < 0 \\ Ce^{i(k_2x - \omega t)} & \text{dla } x \geq 0, \end{cases} \quad (39)$$

gdzie  $A \exp[i(k_1x - \omega t)]$  opisuje **falę padającą** (biegnącą w prawo),

$B \exp[-i(k_1x + \omega t)]$  opisuje **falę odbitą** (biegnącą w lewo),

natomiast  $C \exp[i(k_2x - \omega t)]$  opisuje **falę przechodzącą (transmitowaną)** do obszaru (2) (biegnącą w prawo).

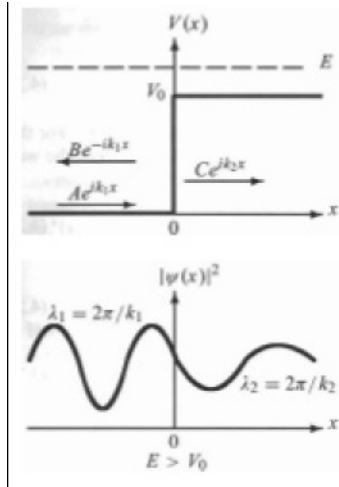
#### **Interpretacja rozwiązań (39)**

Cząstka padająca z lewej strony na próg potencjału może ulec odbiciu (z amplitudą prawdopodobieństwa  $B$ ) lub transmisji do obszaru progu (z amplitudą prawdopodobieństwa  $C$ ).

Cząstka padająca, odbita i przepuszczona opisana jest funkcją falową w postaci **fali płaskiej**.

Energia potencjalna  $V(x)$  (górny rysunek) i gęstość prawdopodobieństwa  $|\psi(x)|^2$  (dolny rysunek) znalezienia cząstki w położeniu  $x$  dla progu potencjału. Rysunki odpowiadają przypadkowi  $E > V_0$ .

### **(b) Przypadek $E < V_0$**



W tym przypadku dla  $x < 0$  równanie Schrödingera ma tę samą postać, jak w przypadku (a) [por. równanie (35)]. Natomiast dla  $x \geq 0$  równanie Schrödingera przyjmuje postać

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - k_2' \right) \psi_2(x) = 0 \quad (x \geq 0), \quad (40)$$

gdzie

$$k_2' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (41)$$

Rozwiązaniem równania (40) jest funkcja

$$\psi_2(x) = C e^{-k_2' x} + D e^{+k_2' x}. \quad (42)$$

Wyraz  $D e^{+k_2' x}$  jest rozbieżny przy  $x \rightarrow \infty$ . Funkcja falowa jako amplituda gęstości prawdopodobieństwa musi być skończona dla dowolnego  $x$ , a zatem  $D$  musi zniknąć.

Ostatecznie zależna od czasu funkcja falowa ma postać

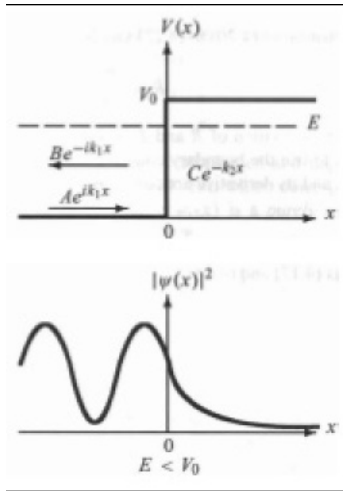
$$\Psi(x, t) = \begin{cases} A e^{i(k_1 x - \omega t)} + B e^{-i(k_1 x + \omega t)} & \text{dla } x < 0, \\ C e^{-k_2' x} e^{-i\omega t} & \text{dla } x \geq 0. \end{cases} \quad (43)$$

Dla  $x \geq 0$  gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w obszarze proggu potencjału

$$\varrho(x) = |C|^2 e^{-2k_2' x}$$

przyjmuje wartości niezerowe i maleje eksponencjalnie do zera, co oznacza, że cząstka kwantowa może z **niezerowym prawdopodobieństwem** znaleźć się w obszarze **zabronionym dla cząstki klasycznej**, czyli w obszarze, w którym  $E < V_0$ .

Energia potencjalna  $V(x)$  (górny rysunek) i gęstość prawdopodobieństwa  $|\psi(x)|^2$  (dolny rysunek) znalezienia cząstki w położeniu  $x$  dla proggu potencjału. Rysunki odpowiadają przypadkowi  $E < V_0$ .



## 5 Jednowymiarowa bariera potencjału

### (a) Przypadek $E > V_0$

Energia potencjalna  $V(x)$  (górny rysunek) i gęstość prawdopodobieństwa  $|\psi(x)|^2$  znalezienia cząstki (dolny rysunek) dla bariery potencjału. Rysunki odpowiadają przypadkowi  $E > V_0$ .

### (a) Przypadek $E < V_0$

Energia potencjalna  $V(x)$  (górny rysunek) i gęstość prawdopodobieństwa  $|\psi(x)|^2$  znalezienia cząstki (dolny rysunek) dla bariery potencjału. Rysunki odpowiadają przypadkowi  $E < V_0$ .

Dolny rysunek pokazuje **kwantowy efekt tunelowy**.

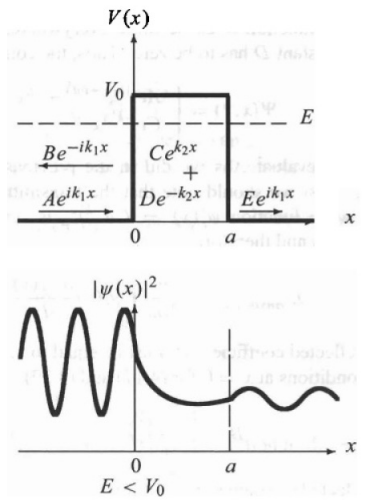
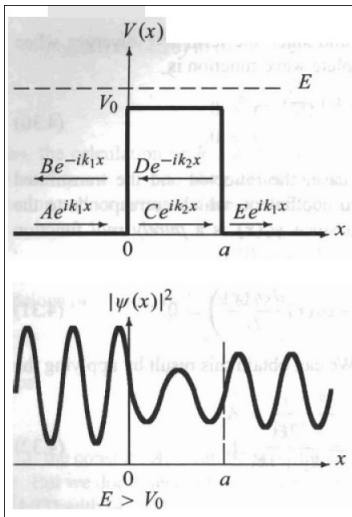
### Zastosowania

- kwantowy efekt tunelowy w nanoprzyrządach półprzewodnikowych
- sterowanie prądami płynącymi w nanoprzyrządach półprzewodnikowych

## 6 Jednowymiarowa nieskończona studnia potencjału

W nieskończenie głębokiej studni potencjału cząstka posiada energię potencjalną

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{dla } x < 0, \\ 0 & \text{dla } 0 \leq x \leq a, \\ +\infty & \text{dla } x > a, \end{cases} \quad (44)$$



gdzie  $a$  jest szerokością studni.

Jeżeli zdefiniujemy wielkość

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (45)$$

to równanie Schrödingera przyjmuje postać

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = 0. \quad (46)$$

Rozwiązaniami równania (46) są funkcje

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx). \quad (47)$$

Są to **fale stojące**.

Ze względu na nieskończoną wartość energii potencjalnej funkcje falowe (47) muszą zniknąć na brzegach studni, czyli

$$\psi(0) = \psi(a) = 0.$$

Warunek  $\psi(0) = 0$  oznacza, że  $B = 0$ .

Natomiast warunek  $\psi(a) = A \sin(ka) = 0$  prowadzi do dozwolonych wartości własnych składowej  $x$  wektora falowego

$$k \equiv k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad (48)$$

gdzie  $n = 1, 2, \dots$

Z dozwolonych wartości własnych wektora falowego otrzymujemy – na podstawie (45) – dozwolone wartości własne energii

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad (49)$$

gdzie  $n = 1, 2, \dots$

Energia cząstki uwięzionej w nieskończenie głębokiej studni potencjału jest **skwantowana**.

Funkcje falowe  $\psi_n(x)$  ( $n = 1, 2, 3$ ) trzech pierwszych stanów cząstki w nieskończenie głębokiej studni potencjału o szerokości  $a$ .

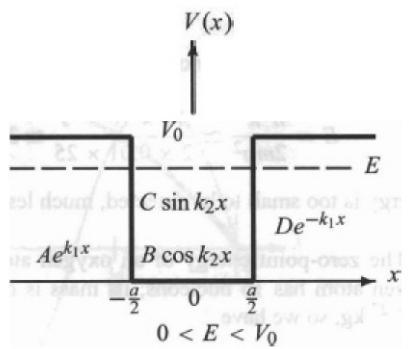
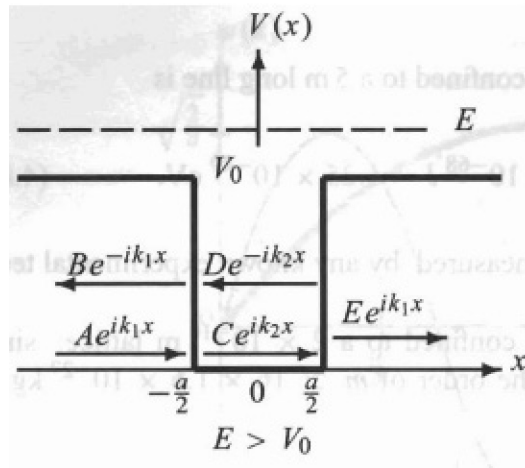
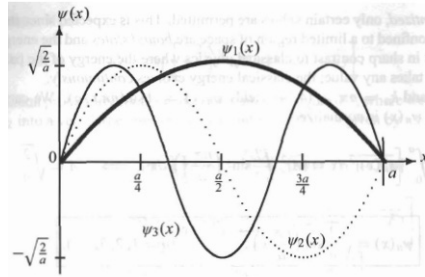
## 7 Jednowymiarowa skończona studnia potencjału

### (a) Przypadek $E > V_0$

Energia potencjalna  $V(x)$  oraz funkcje falowe  $\psi(x)$  cząstki w jednowymiarowej studni potencjału o skończonej głębokości  $V_0$ . Rysunek odpowiada przypadkowi  $E > V_0$ .

### (b) Przypadek $0 < E < V_0$

Energia potencjalna  $V(x)$  oraz funkcje falowe  $\psi(x)$  cząstki w jednowymiarowej studni potencjału o skończonej głębokości  $V_0$ . Rysunek odpowiada przypadkowi  $0 < E < V_0$ .



## Zastosowania

- studnie kwantowe
- kropki kwantowe

## 8 Jednowymiarowy oscylator harmoniczny

Energia potencjalna cząstki wykonującej tzw. **małe drgania** wokół położenia równowagi ma postać

$$U(x) = kx^2. \quad (50)$$

Jest to energia potencjalna jednowymiarowego **oscylatora harmonicznego**.

Parametr  $k$  jest stałą sprężystości, która ma wymiar

$$[\text{energia}] \times [\text{długość}]^{-2} = \text{Jm}^{-2} = \text{kg} \times \text{s}^{-2}$$

Ten sam wymiar ma wielkość

$$[\text{masa}] \times [\text{częstość}]^2.$$

Możemy zatem zapisać stałą sprężystości jako

$$k = \frac{1}{2}m\omega^2, \quad (51)$$

gdzie  $\omega$  = częstość drgań,  $m$  = masa cząstki, a  $1/2$  została wprowadzona ze względu na prostotę obliczeń.

Dla cząstki w polu jednowymiarowego oscylatora harmonicznego hamiltonian ma postać

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (52)$$

a równanie Schrödingera zapisujemy jako

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (53)$$

Energie własne dane są wzorem

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (54)$$

gdzie  $n = 0, 1, 2, \dots$  jest **oscylatorową liczbą kwantową**.

Funkcja falowa stanu podstawowego dana jest wzorem

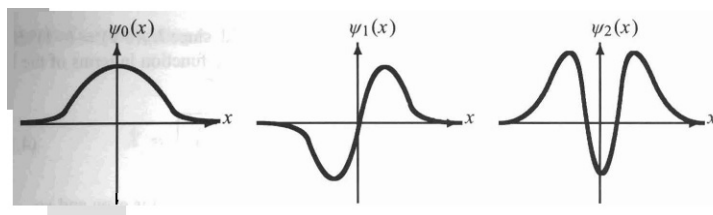
$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} l^{1/2}} e^{-x^2/(2l^2)}, \quad (55)$$

gdzie

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

jest parametrem o wymiarze długości.

Funkcje falowe  $\psi_n(x)$  ( $n = 0, 1, 2$ ) trzech pierwszych stanów jednowymiarowego oscylatora harmonicznego.



### Wnioski

- w potencjale oscylatora harmonicznego cząstka kwantowa wykonuje drgania o skwantowanych częstościach i energiach
- energia kwantu drgań  $\Delta E = \hbar\omega$  [por. problem promieniowania ciała doskonale czarnego]
- przejścia kwantowe pomiędzy stanami  $n$  i  $n'$  zachodzą z absorpcją/emisją energii  $|E_n - E_{n'}| = |n - n'| \hbar\omega$
- funkcje falowe cząstki są zlokalizowane w obszarze działania potencjału harmonicznego (ale z możliwością penetracji do obszarów zabronionych klasycznie)

### Zastosowania

- drgania atomów wokół położenia równowagi w molekułach i kryształach
- elektron uwięziony w nanostrukturze półprzewodnikowej
- drgania pola elektromagnetycznego