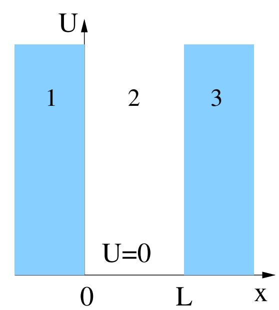
• równanie Schrödingera; • cząstka w głębokiej studni potencjału; • efekt tunelowy

1. a) Pokaż, że rozwiązując pełne równanie Schrödingera zależne od czasu
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y,z,t)\right]\psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t)$$
dla cząstki swobodnej (fala płaska, na cząstkę nie działają siły, energia potencjalna $U = 0$) uzyskuje się rozwiązanie jak w zadaniu 6 poprzedniego zestawu $\psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}((Et-px)}$.

wskaz: niech cząstka porusza się w kierunku x; przedstaw f.falową $\psi(x,t)$ jako iloczyn dwóch funkcji, jednej zależnej tylko od czasu, drugiej tylko od wsp. przestrzennej $\psi(x,t) = \varphi(x)\cdot\Phi(t)$, doprowadź do separacji zmiennych: lewa strona zależna tylko od x, prawa tylko od t, co pozwala rozbić równanie wyjściowe na dwa równania: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E\varphi(x)$, $\quad i\hbar\frac{d\Phi(t)}{dt} = E\Phi(t)$.

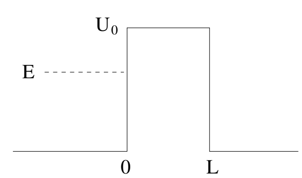
b) Analogiczna separacja równania Schrödingera dla przypadku gdy pole sił nie zmienia się w czasie, czyli gdy energia potencjalna nie zależy od czasu $U = U(x,y,z)$, prowadzi do tzw. równania niezależnego od czasu (pokaż), opisującego stany stacjonarne:
$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y,z)\right)\varphi(x,y,z) = E\,\varphi(x,y,z).}$$
Aby uzyskać pełną f.falową $\psi(x,y,z,t)$ należy uzyskane rozwiązanie $\varphi(x,y,z)$ zawsze pomnożyć przez czynnik $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$. Obecność tego czynnika nie wpływa na gęstość prawdopodobieństwa, gdyż $|e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|^2 = 1$.

2. Cząstka o masie m znajduje się w jednowymiarowej prostokątnej jamie potencjału U o szerokości L i nieprzepuszczalnych ściankach ($U(x) = 0$ dla $(0 < x < l)$, $U(x) = \infty$ dla $x < 0$ lub $x > 0$). Zakładamy że wewnątrz jamy cząstka zachowuje się jak cząstka swobodna, nie działają na nią żadne siły.
Znaleźć: a) rozwiązanie równania Schrödingera; b) dopuszczalne wartości energii cząstki (z czego wynika fakt skwantowania poziomów energetycznych cząstki?); c) unormowaną funkcję falową $\varphi(x)$; d) dla trzech pierwszych dozwolonych stanów energetycznych narysować wykresy f.falowej oraz gęstości prawdopodobieństwa $|\varphi(x)|^2$; e) prawdopodobieństwo znalezienia cząstki o najmniejszej energii (stan podstawowy) w obszarze $\frac{1}{3}l < x < \frac{2}{3}l$. (*patrz* → *Wskazówki*)



3. W problemie ∞ głębokiej studni potencjału rozważ dwa przypadki:
I) założyć, że cząstką jest elektron zamknięty w obszarze liniowym $L = 2\cdot 10^{-10}$ m. Obliczyć dla tej cząstki: a) najmniejszą możliwą energię E_1 (energię zerową) jaką może ona mieć, b) odstęp energii pomiędzy E_1, a następnym możliwym poziomem E_2, $\Delta E = E_2 - E_1$;
II) podobnie jak w punkcie poprzednim oblicz E_1 i ΔE, jeśli cząstką jest ziarenko o masie 10^{-7} kg zamknięte w obszarze o szerokości 1 mm (zakładamy stan nieważkości). b) Oblicz najmniejszą możliwą prędkość tej cząstki. Jakie wnioski można wyciągnąć z obliczeń?

4. Przechodzenie cząstek przez barierę potencjału. Zakładamy, że bariera jest jednowymiarowa i ma kształt prostokątny: $U = 0$ dla $x < 0$ (obszar (1)), $U(x) = U_o$ dla $0 \leqslant x \leqslant L$ (obszar (2)), i $U(x) = 0$ dla $x > L$ (obszar (3)). Cząstka swobodna pada na barierę z obszaru (1) i ma energię kinetyczną mniejszą niż wysokość bariery ($E < U_o$).



a) Zapisz dla każdego z trzech obszarów właściwe równanie stacjonarne Schrödingera.
b) Pokaż, że rozwiązania ogólne dla każdego z obszarów są takie;
$$\varphi_1 = a_1e^{ikx} + b_1e^{-ikx} \text{ (superpozycja fali padającej i odbitej od bariery)},$$
$$\varphi_2 = a_2e^{-\varkappa x} + b_2e^{\varkappa x},$$
$$\varphi_3 = a_3e^{ikx},$$
gdzie $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $\varkappa = \sqrt{2m(U_o - E)}/\hbar$. Dlaczego dla rozwiązania φ_3 pojawia się tylko jedna stała a_3?
c) Sformułuj i zapisz 4 warunki brzegowe (ciągłość f.falowej i jej pochodnej):
(1): $\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$; (2): $\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0)$; (3): $\varphi_2(L) = \varphi_3(L)$; (4): $\varphi_2'(L) = \varphi_3'(L)$.
d) Uzasadnij, że $D = \dfrac{|a_3|^2}{|a_1|^2}$ jest współczynnikiem przeniknięcia przez barierę, a $R = \dfrac{|b_1|^2}{|a_1|^2}$ - współczynnikiem odbicia od powierzchni bariery.

Po rozwiązaniu układu czterech równań wynikających z warunków brzegowych uzyskuje się wzór na prawdopodobieństwo przejścia przez barierę (prostokątną) w wyniku efektu tunelowego:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_o-E)}\,L}.$$

5. Elektrony wewnątrz metalu traktujemy jako cząstki swobodne. Jaki procent elektronów o energiach 1 eV przeniknie przez barierę potencjału na powierzchni metalu, którym jest cez, w wyniku efektu tunelowego? Bariera ma wysokość 4 eV (praca wyjścia dla cezu) i szerokość $2 \cdot 10^{-10}$ m.

6. Proton i duteron padają na barierę energii potencjalnej o szerokości 10 fm i wysokości 10 MeV. Przed zderzeniem z barierą każda z cząstek miała energię kinetyczną 3 MeV. a) Ile wynosi prawdopodobieństwo przejścia dla każdej z cząstek? b) Ile wynoszą ich energie kinetyczne po przejściu przez barierę (przyjmując, że przez nią przeszły)? c) Ile wynoszą odpowiednie energie tych, które się odbiły od bariery? *zadanie z Halliday, Resnick, Walker, t.5, rozdz. 39.9, nr. 79*

7. Zadanie o tunelowaniu samochodu przez górę: *zad. Halliday, Resnick, Walker, t.5, rozdz. 39.9, nr. 83.*

8. Zadanie nadobowiązkowe.
   Efekt tunelowy. **A**. Zestaw rozwiązań ogólnych w zad. 4 zawiera pięć dowolnych stałch a_1, a_2, a_3, b_1, b_2. Cztery równania wynikające z warunków brzegowych pozwalają na wyznaczenie wartości stosunku dwóch dowolnych stałych, np. a_3/a_1. Pokazać że prawdopodobieństwo przeniknięcia cząstki przez barierę, jeśli $\varkappa L >> 1$, wynosi
   $$D \approx 16\,\frac{E}{U_o}\left(1-\frac{E}{U_o}\right)e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_o-E)}\,L} \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_o-E)}\,L}.$$
   B) Uzasadnij, że w przypadku gdy bariera ma kształt $U(x)$ (nie jest prostokątna) to wzór na współczynnik przenikania D można uogólnić następująco:
   $$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\int\limits_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x)-E)}\,dx},$$
   gdzie x_1, x_2 są miejscami zerowymi funkcji $U(x) - E$.

9. Atom wodoru. Funkcja falowa elektronu (ψ_{nlm}) w atomie wodoru zależy od trzch liczb kwantowych n, l, m. Pokaż, że dla zadanej głównej liczby kwantowej n liczba możliwych stanów (poziomów) energetycznych wynosi n^2 (bez uwzględnienia spinu elektronu).

10. Atom wodoru. Ruch elektronu (wynikający z jego stanu energetycznego) zachodzi w polu kulombowskim wytworzonym przez proton, energia potencjalna elektronu zależy więc tylko od r, do takiego zagadnienia wygodny jest sferyczny układ współrzędnych. Zapisz równanie Schrödingera dla funkcji falowej elektronu $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ w atomie wodoru w tym układzie. Przyjmując $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$, rozseparuj to równanie na dwa równania, pierwsze - dla funkcji radialnej $R(r)$, i drugie - dla części kątowej $Y(\vartheta, \varphi)$. *To zadanie zrobimy wspólnie na ćwiczeniach, o ile czas pozwoli*
    Laplasjan w układzie sferycznym:
    $$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$
    o układzie sferycznym: patrz `www.ftj.agh.edu.pl/~wozniak/abc_math/abc.uklady.pdf`

Wskazówki.

Zad.2) Zapisz równanie Schrödingera dla obszaru 2, w którym może się znajdować cząstka (z założenia o nieprzepuszczalności ścianek mamy zerowe prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarach 1 i 3, czyli f.falowa jest tam równa zero) - jest to proste równanie ($\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -k^2\varphi$, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$) znane z rozważania drgań harmonicznych. Jego rozwiązanie $\varphi(x)$ możesz przedstawić bądź jako $A\sin(kx+\delta)$, bądź $ae^{ikx}+be^{-ikx}$, jest to obojętne, ale pierwsza forma jest chyba prostsza? Dalej - zastosuj warunki brzegowe dla f.falowej $\varphi(x = 0)$ i $\varphi(x = L)$, stąd uzyskasz warunek kwantowania dla k, a więc dla energii.

Zad.8. *Pomoc*: • z dwóch ostatnich równań wynikających z war. brzegowych, pkt. c) z zadania 4, wyraź a_2 i b_2 przez a_3; • widać, że gdy $\varkappa L >> 1$ (czy to sensowny warunek?), to $b_2 << a_2$, czyli w dwóch pierwszych równaniach można b_2 zaniedbać w porównaniu z a_2; • teraz z tych dwóch pierwszych równań trzeba wyznaczyć a_1 rugując b_1, a za a_2 podstawić wyrażenie otrzymane wcześniej - w tak uzyskanym równaniu występują tylko a_1 i a_3 (powinno się otrzymać: $a_1 = \dfrac{1}{4}a_3\, e^{ikL}e^{\kappa L}\dfrac{(\kappa+ik)^2}{i\kappa k}$); • dalej radźcie sobie sami.