

wykład III-IV

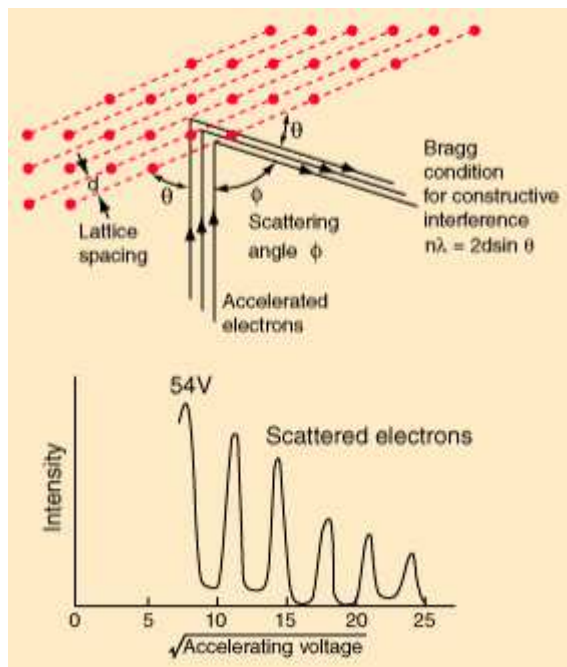
Podstawy Procesów
i Konstrukcji Inżynierskich

Mechanika kwantowa

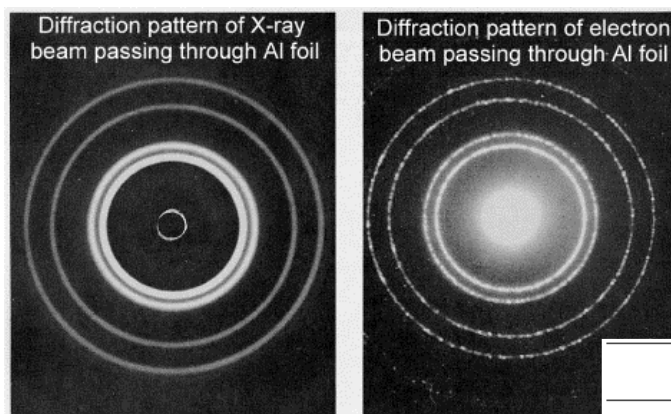
Falowa natura materii

Zarówno fale elektromagnetyczne (fotony) jak i elektrony lub inne obiekty mikroświata, w jednych zjawiskach mogą zachowywać się jak fala, a w innych jak cząstka tzn. wykazują zarówno własności falowe jak i korpuskularne

$$\lambda_x \quad \lambda_e = \lambda_x = \frac{h}{m_e f}$$

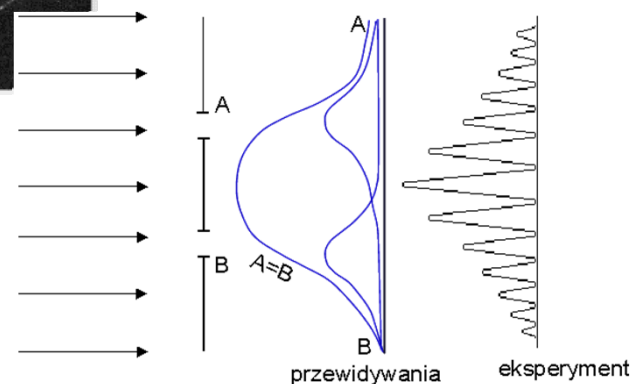


Doświadczenie Davissona-Germera: falowe własności elektronów



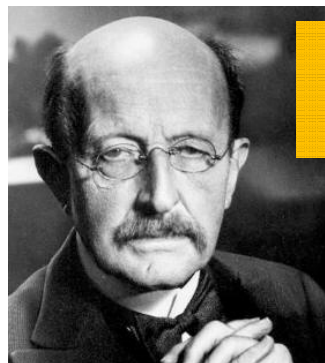
Doświadczenie Thomsona: dyfrakcja elektronów na cienkiej folii polikrystalicznej

Doświadczenie Sterna: dyfrakcja atomów wodoru i helu na kryształach fluorku litu i chlorku sodu



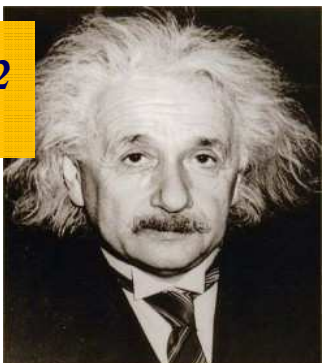
Równanie de Broglie'a i Einsteina

Poniższe równania wiążą cechy falowe z korpuskularnymi:

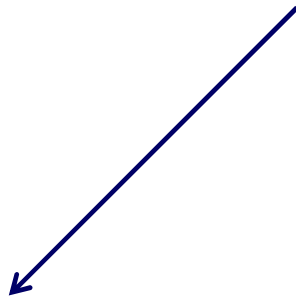


$$E_f = h\nu$$

$$E_f = m_f c^2$$



$$h\nu = m_f c^2$$



$$h \frac{c}{\lambda} = m_f c^2$$



$$\lambda = \frac{h}{p_f}$$

równanie de Broglie'a –
wiąże długość fali z pędem

Zasada komplementarności

- cechy falowe i korpuskularne uzupełniają się wzajemnie, dając pełny opis danego obiektu
- w danym pomiarze stosuje się tylko jeden model, zatem w tych samych warunkach nie można stosować obu modeli
- dany obiekt fizyczny, rejestrowany w wyniku pewnego rodzaju oddziaływania, zachowuje się jak cząstka w tym sensie, że jest zlokalizowany (posiada określoną wielkość, kształt i masę), natomiast kiedy porusza się – zachowuje się jak fala, która nie jest zlokalizowana, lecz rozciąga się w przestrzeni

Zasada nieokreśloności

(Zasada nieoznaczoności Heisenberga)

Nie można z dowolnie dużą dokładnością określić obu wielkości występujących w równaniu tj. pędu i położenia lub energii i czasu; iloczyn nieokreśloności obu wielkości nie może być mniejszy od $\hbar/2$ ($\hbar = h/2\pi$)

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

- jest ona wynikiem dwoistości materii
- mało istotna w makroskali

$$\Delta x \Delta v \geq \frac{\hbar}{2m}$$

Ze wzrostem masy nieoznaczoność staje się mniejsza; dla ciał makroskopowych nieoznaczoność zanika i zarówno położenie jak i prędkość ciała mogą być określone dokładnie

Zasada nieokreśloności

cd.:

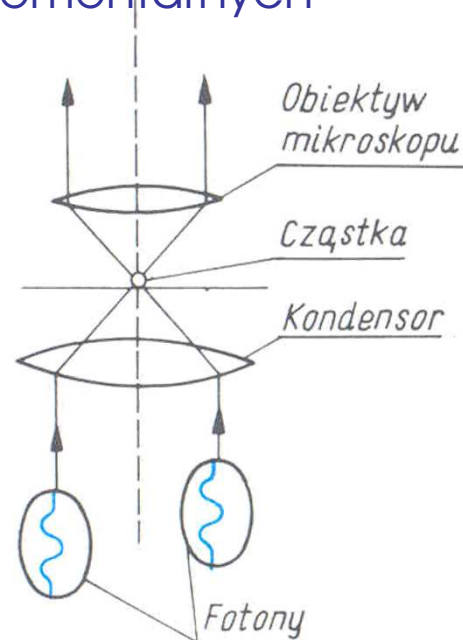
- bardzo ważna dla rozważania cząstek elementarnych

Doświadczenie Bohra – wyznaczenie położenia elektronu

Aby zaobserwować elektron należy go oświetlić. Fotony oddziałują z cząstką powodując jej odrzut w wyniku zjawiska Comptona

Zasada nieoznaczoności odnosi się do samego procesu pomiaru i wyraża fakt, że pomiędzy obserwatorem a

obiektem istnieje zawsze pewne oddziaływanie. Nie ma sposobu na uniknięcie tego oddziaływania lub na uwzględnienie go przed pomiarem.

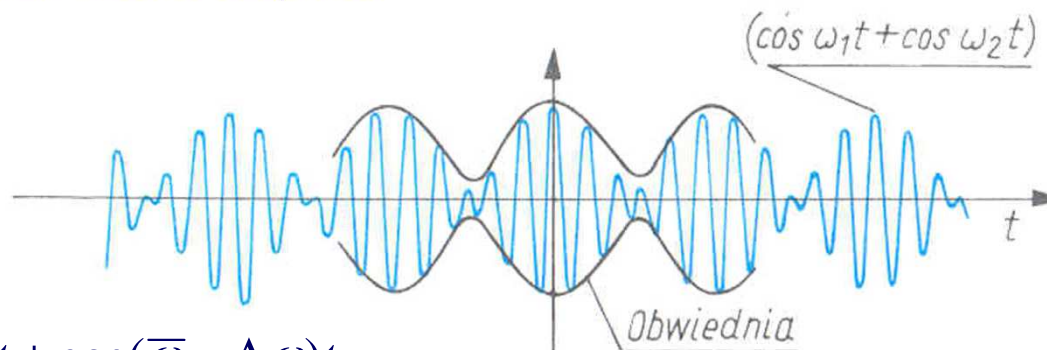


Paczki fal

Fala materii związana z poruszającym się elektronem składa się z nieskończonych ciągów falowych. Amplituda takiej fali jest modulowana tak, że różni się od zera tylko w obszarze przestrzeni w pobliżu cząstki, której ruch opisuje. Fala materii ma więc postać grupy fal (paczek fal) poruszających się z tą samą prędkością co rozważana cząstka.

$$\bar{\omega} \equiv (\omega_1 + \omega_2) / 2$$

$$\Delta\omega \equiv (\omega_2 - \omega_1) / 2$$



$$S(t) = \cos(\bar{\omega} + \Delta\omega)t + \cos(\bar{\omega} - \Delta\omega)t$$

korzystając ze związku $\cos A + \cos B = 2 \cos\left(\frac{A-B}{2}\right) \cos\left(\frac{A+B}{2}\right)$

otrzymamy $S(t) = 2 \cos(\Delta\omega t) \cos \bar{\omega} t = A(t) \cos \bar{\omega} t$

gdzie $A(t) = 2 \cos(\Delta\omega t)$ funkcja modulująca (obwiednia)

Paczki fal- prędkość grupowa

Prędkość paczki fal lub funkcji modulującej nazywa się **prędkością grupową**

Fala będąca sumą dwóch fal o zbliżonych długościach fali:

$$y(x,t) = \cos[(\bar{\omega} + \Delta\omega)t - (\bar{k} + \Delta k)x] + \cos[(\bar{\omega} - \Delta\omega)t - (\bar{k} - \Delta k)x]$$

gdzie $\bar{k} = 2\pi / \lambda$ średnia liczba falowa

korzystając ze związku $\cos A + \cos B = 2\cos\left(\frac{A-B}{2}\right)\cos\left(\frac{A+B}{2}\right)$

otrzymamy $y(x,t) = 2\cos[(\Delta\omega)t - (\Delta k)x]\cos(\bar{\omega}t - \bar{k}x)$

funkcja modulująca $A(x,t) = 2\cos[(\Delta\omega)t - (\Delta k)x]$ osiąga maksimum gdy

$$(\Delta\omega t - \Delta k x) = 0 \quad \text{lub, gdy} \quad \frac{x}{t} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad \text{prędkość grupowa}$$

Paczki fal- prędkość grupowa

Ze związku de Broglie'a wynika, że dla wszystkich cząstek

$$p = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k \quad \text{gdzie} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$E = hf = \hbar 2\pi f = \hbar \omega$$

Podstawiając powyższe równania do $E = p^2 / 2m$

otrzymamy $\hbar \omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ różniczkujemy po k $\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$

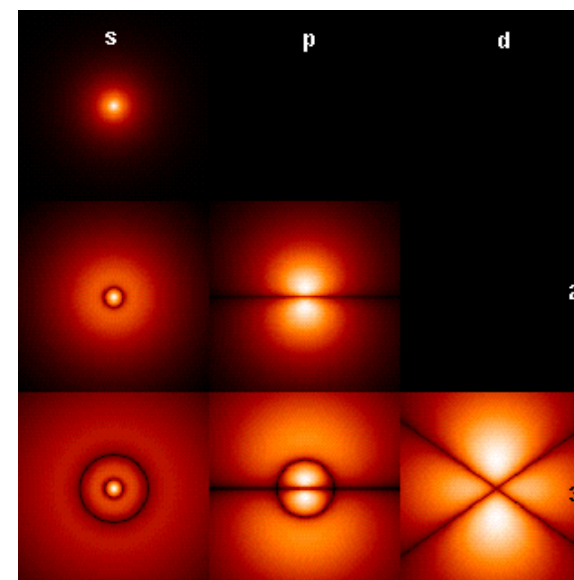
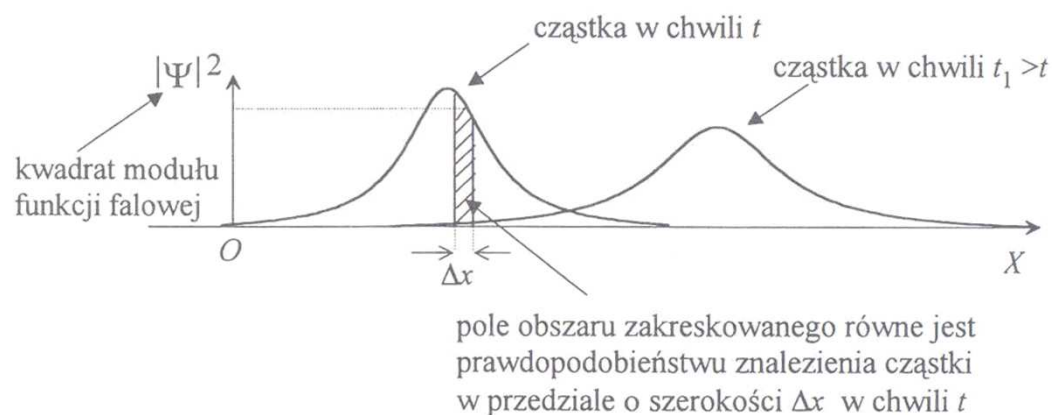
$$v_g = v$$

Oznacza to, że prędkość grupy fal materii jest równa prędkości cząstki, której ruch opisuje.

Funkcja falowa

- własności falowe cząstki (lub innego obiektu) w mechanice kwantowej opisuje funkcja falowa Ψ . Jest to w ogólnym przypadku zespolona funkcja współrzędnych przestrzennych oraz czasu: $\Psi(x,y,z,t)$
- funkcja falowa opisuje prawdopodobieństwo, że jeśli pomiar nastąpił w chwili t to cząstka znajduje się pomiędzy x i $x+dx$. Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki określa **kwadrat modułu funkcji falowej**

$$\Psi^* \Psi = |\Psi|^2$$



Funkcja gęstości prawdopodobieństwa napotkania elektronu atomu wodoru dla pierwszych liczb kwantowych $n=1,2,3$, $l=0,1,2$

Funkcja falowa cd.:

- wielkość $|\Psi|^2 = \Delta p / \Delta V$ nazywamy **gęstością prawdopodobieństwa** znalezienia cząstki w chwili t w pewnym punkcie przestrzeni, w otoczeniu którego wybrano element objętości ΔV

- wielkość $\int_V |\Psi|^2 dV = p$

gdzie ΔV jest małą objętością w przestrzeni, jest równa **prawdopodobieństwu** znalezienia cząstki w chwili t w objętości ΔV

- prawdopodobieństwo tego, że cząstka znajduje się „gdziekolwiek” w przestrzeni wynosi 1.

$$\int_{\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$

Warunek powyższy nosi nazwę **warunku normalizacji** a funkcję Ψ spełniającą ten warunek nazywamy **funkcją unormowaną**

Równanie Schrödingera

Funkcję falową Ψ dla danej cząstki otrzymujemy rozwiązując różniczkowe równanie nazywane równaniem Schrödingera. Równanie nazywamy stacjonarnym, jeśli energia potencjalna cząstki nie zależy od czasu.

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

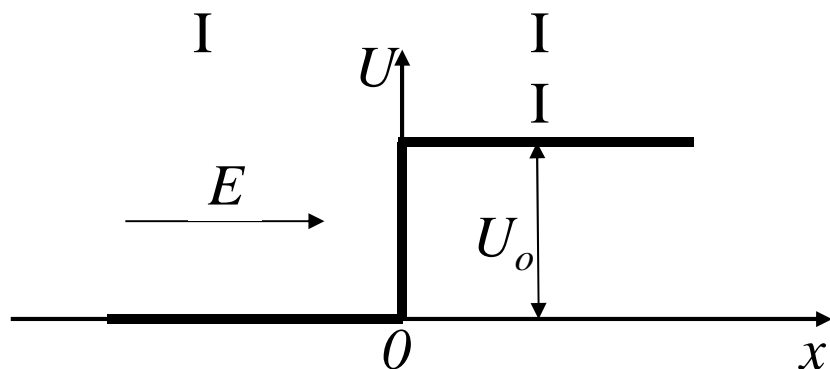


Erwin **SCHRÖDINGER**
(1887 – 1961), fizyk austriacki

Rozwiązaniem tego równania jest możliwe tylko dla pewnych wartości energii E_n , które nazywamy *wartościami własnymi*, a odpowiadające funkcje Ψ_n nazywamy *funkcjami własnymi*.

Przejście cząstek przez bariery potencjału

Rozpraszanie cząstki – próg potencjału



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$$

KLASYCZNIE

Cząstka o energii E poruszająca się w obszarze $x < 0$ dozna działania opóźniającej siły w punkcie $x=0$ $F = -\frac{dV(x)}{dx}$. Działanie to spowolni cząstkę (wyhamuje) i wejdzie ona w obszar $x > 0$. Jej całkowita energia pozostanie stała.:

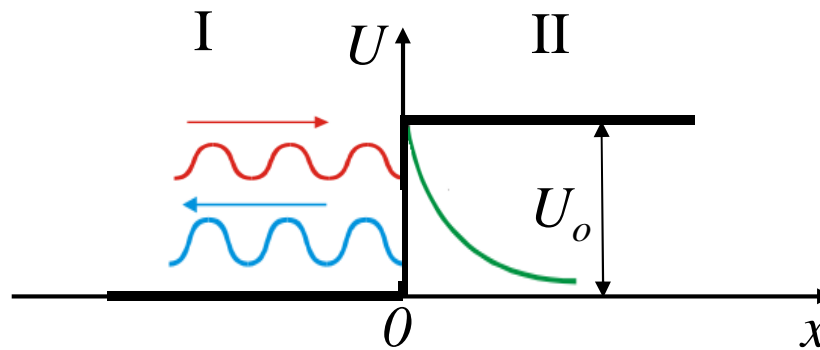
$$\begin{aligned} \text{dla } x < 0 \quad E &= \frac{p_1^2}{2m} \\ \text{dla } x > 0 \quad E - V_0 &= \frac{p_2^2}{2m} \end{aligned}$$

Przejście cząstek przez bariery potencjału

Rozpraszanie cząstki – próg potencjału

KWANTOWO

$$E < U_0$$



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$$

Obszar I

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

Rozwiązanie równania ma postać padającej i odbitej fali de Broglie'a

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} - Be^{-ik_1x} \quad \text{gdzie} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

A – amplituda fali padającej, B – amplituda fali odbitej

Obszar II

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U_0\Psi(x) = E\Psi(x)$$

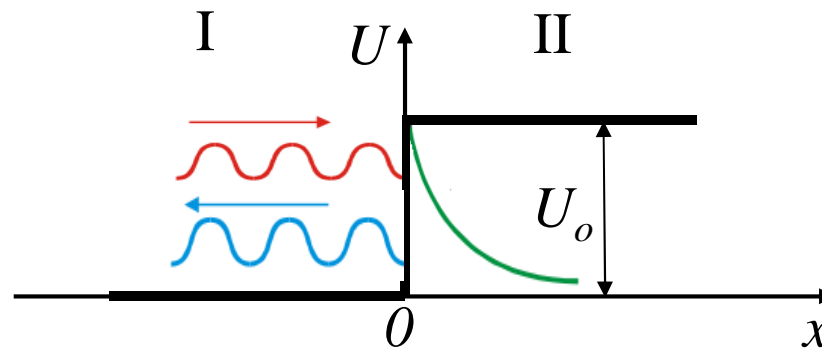
Rozwiązanie równania ma postać $\Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} - De^{-ik_2x}$ gdzie $k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$

Przejście cząstek przez bariery potencjału

Rozpraszanie cząstki – próg potencjału

KWANTOWO

$$E < U_0$$



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$$

Współczynnik odbicia

$$R = \frac{vB^*B}{vA^*A} = \frac{\left(1 - i\frac{k_2}{k_1}\right)^* \left(1 - i\frac{k_2}{k_1}\right)}{\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right)^* \left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right)} = 1$$

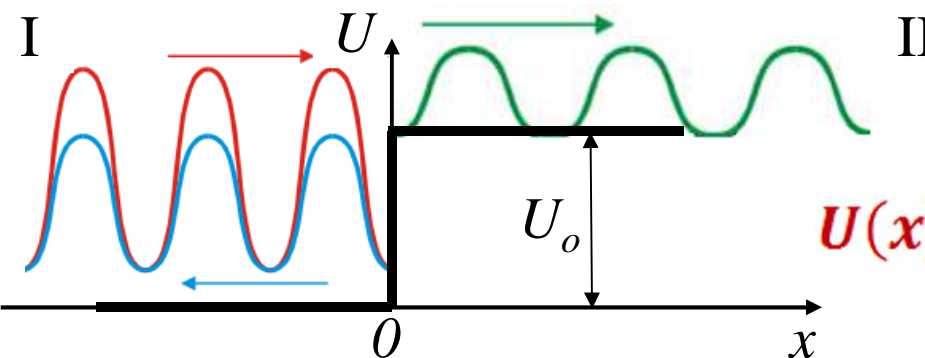
Dla $E < U_0$ wszystkie cząstki zostają odbite od bariery potencjalnej w postaci schodka

Przejście cząstek przez bariery potencjału

Rozpraszanie cząstki – próg potencjału

KWANTOWO

$$E > U_0$$



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$$

Obszar I

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

Rozwiązanie równania ma postać padającej i odbitej fali de Broglie'a

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} - Be^{-ik_1x} \quad \text{gdzie} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

A – amplituda fali padającej, B – amplituda fali odbitej

Obszar II

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U_0\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Rozwiązanie równania ma postać

$$\Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} - De^{-ik_2x} \quad \text{gdzie} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

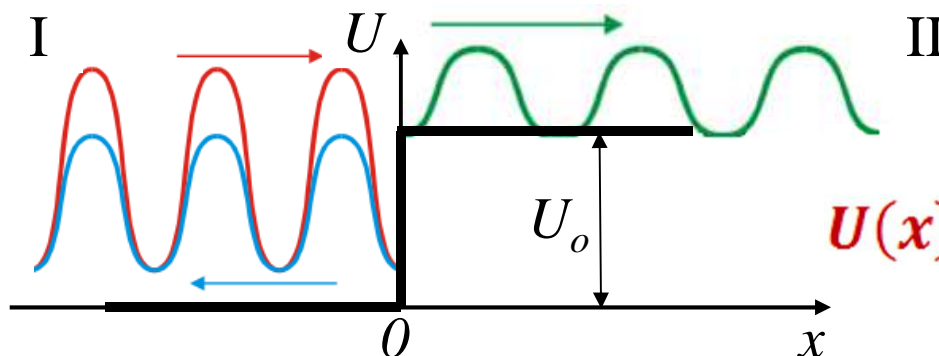
Jeżeli cząstka pada na barierę potencjału z lewej strony (z obszaru I, to nie ma w obszarze II źródeł rozpraszania stąd należy przyjąć $D=0$

Przejście cząstek przez bariery potencjału

Rozpraszanie cząstki – próg potencjału

KWANTOWO

$$E > U_0$$



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$$

Współczynnik odbicia

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Współczynnik przejścia

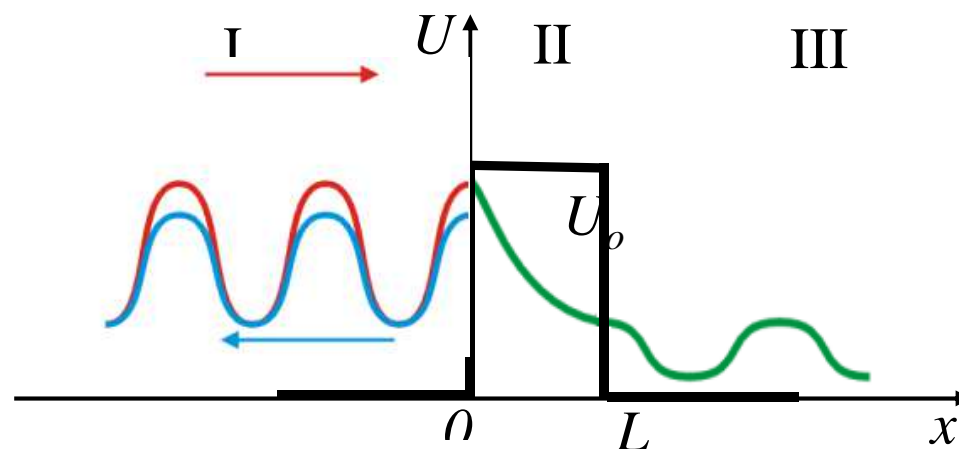
$$T = \frac{v_2 C^* C}{v_1 A^* A} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$R + T = 1$$

Przejście cząstek przez bariery potencjału

Bariera potencjału o skończonej szerokości

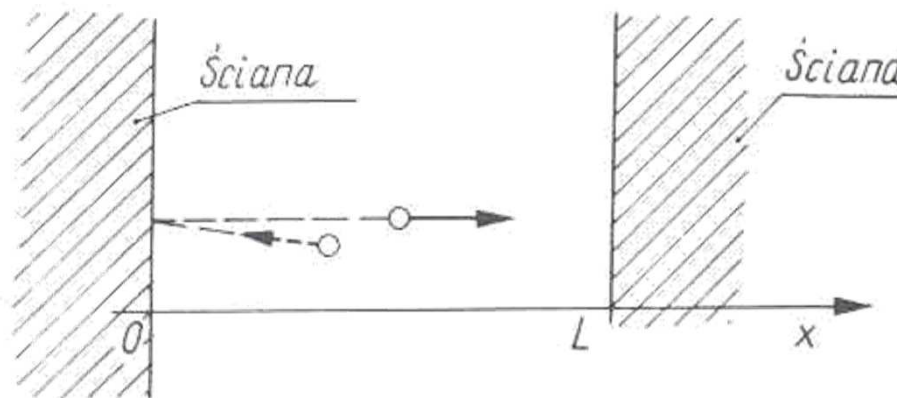
KWANTOWO



Obszar I	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x)$	$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$
Obszar II	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U_0 \Psi(x) = E\Psi(x)$	$k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$
Obszar III	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x)$	$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Cząstka w jamie (studni) potencjału

Jeśli energia potencjalna jest równa zero w obszarze $(0,L)$ a poza nim U_0 , ($U_0 \rightarrow \infty$) to taki kształt energii nazywamy jamą (studnią) potencjału.



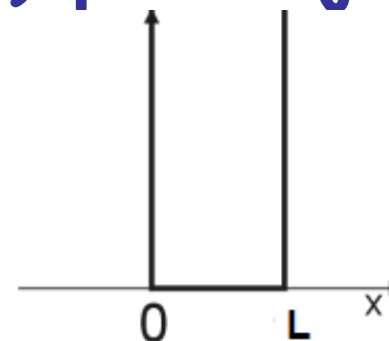
Równanie Schrödingera ma w tym wypadku postać ($U(x)=0$)

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

Cząstka w jamie (studni) potencjału

Funkcja falowa cząstki jest superpozycją fali rozchodzącej się w prawo i w lewo.

$$\Psi(x) = Be^{ikx} - Be^{-ikx} = B(e^{ikx} - e^{-ikx})$$



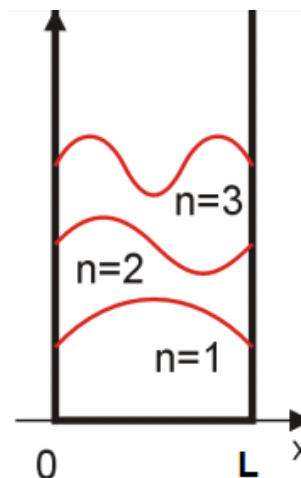
korzystając z $\sin kx = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i}$ otrzymamy $\Psi(x) = A \sin kx$ $A = 2Bi$

Funkcja $\Psi(x)$ musi spełniać warunki brzegowe: $\Psi(0) = 0$ oraz $\Psi(L) = 0$

$$\Psi(L) = 0 \Leftrightarrow kL = n\pi \Rightarrow k_n = n \frac{\pi}{L}$$

W studni potencjału powinna mieścić się całkowita liczba połówek fal

$$\Psi_n(x) = A \sin(n\pi/L)x$$



$$L = n \left(\frac{1}{2} \lambda \right)$$

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

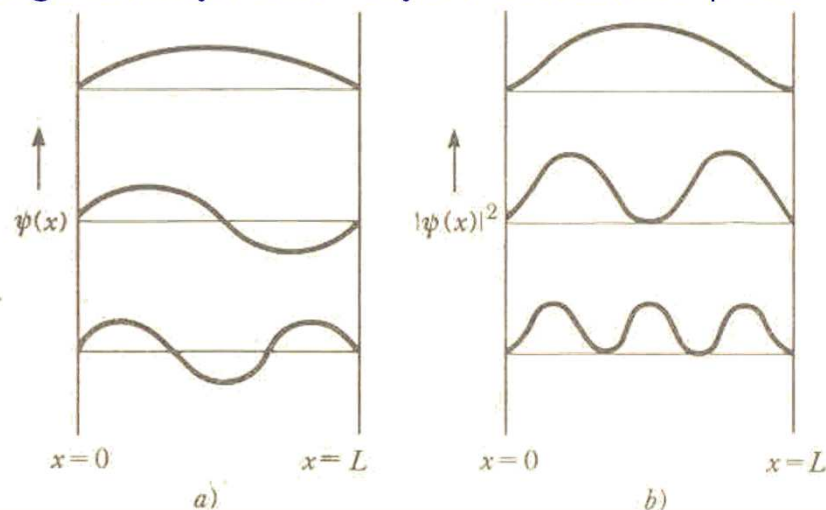
Cząstka w jamie (studni) potencjału cd.:

Odpowiadające tym funkcjom pędy: $p_n = \hbar k_n = n \frac{\pi \hbar}{L}$

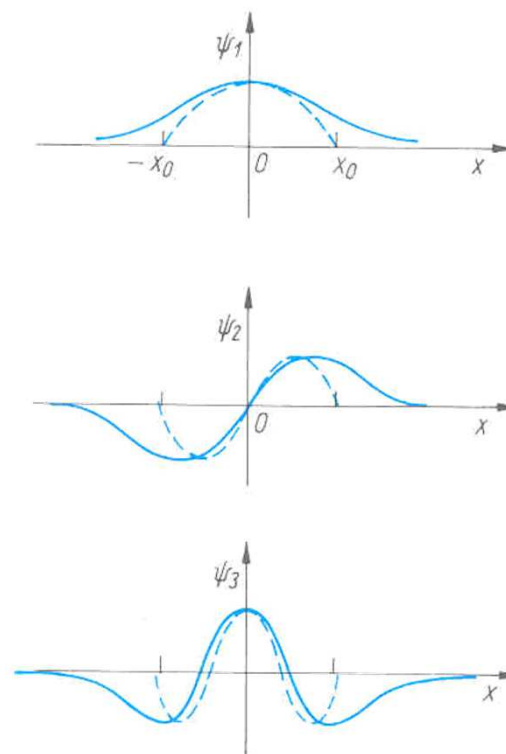
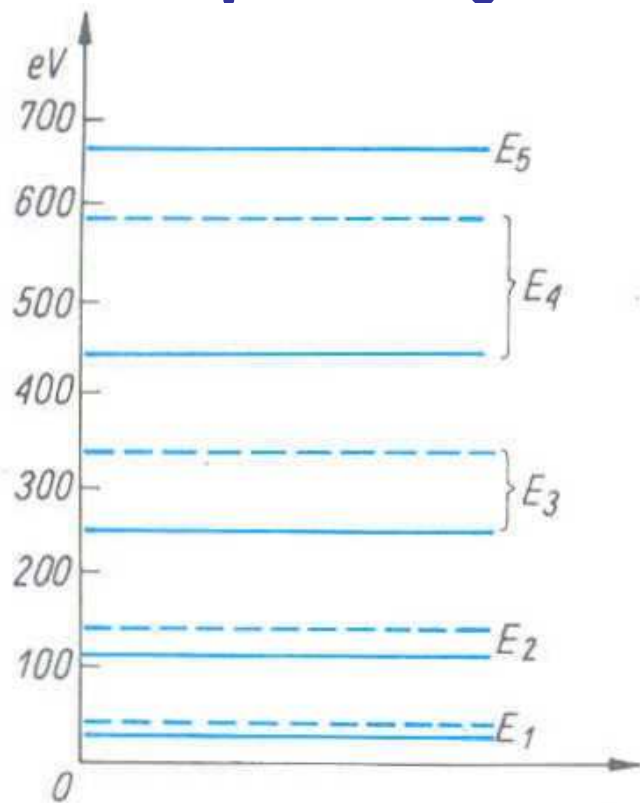
Tym wartościom pędu odpowiadają następujące energie kinetyczne:

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

Najmniejsza wartość energii wynosi $\pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ (dla $n=1$) nosi nazwę energii zerowej a odpowiadająca tej energii funkcja falowa jest dokładnie połówką fali sinusoidalnej



Studnia potencjału o skończonej głębokości



Poziomy energetyczne oraz trzy fale stojące najniższego rzędu (odpowiadające energiom E_1 , E_2 , E_3) dla elektronu w studni potencjału o szerokości 10^{-10}m . Linia ciągła-poziomy studni potencjału o głębokości 800eV ; linia przerywana-nieskończenie głęboka studnia potencjału

Oscylator harmoniczny

▪ klasycznie oscylatorem harmonicznym nazywamy cząstkę o masie m wykonującą jednowymiarowy ruch pod wpływem sprężystej siły $F=-kx$, gdzie k jest współczynnikiem sprężystości

▪ w ujęciu klasycznym energia potencjalna takiej cząstki wynosi $U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

▪ w mechanice kwantowej zagadnienie oscylatora harmonicznego rozwiązujemy równaniem Schrödingera; jako energię potencjalną wstawiamy

$$U(x) = \frac{m\omega_{kl}^2 x^2}{2}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m\omega_{kl}^2 x^2 \right) \Psi$$

Proponowane rozwiązanie $\Psi(x) = e^{-ax^2}$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -2ae^{-ax^2} + 4a^2 x^2 e^{-ax^2}$$

Oscylator harmoniczny

$$(-2a + 4a^2 x^2) e^{-ax^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m \omega_{kl}^2 x^2 \right) e^{-ax^2}$$

Porównujemy współczynniki przy x^2

$$\left. \begin{aligned} 4a^2 &= \frac{m^2 \omega_{kl}^2}{\hbar^2} \rightarrow a = \frac{m \omega_{kl}}{2\hbar} \\ -2a &= -\frac{2mE}{\hbar^2} \end{aligned} \right\} E = \frac{1}{2} \hbar \omega_{kl}$$

Porównujemy wyrazy stałe

wówczas $\Psi_1(x) = e^{-(m\omega_{kl}/2\hbar)x^2}$

Fala następnego rzędu ma postać:

$$\Psi_2(x) = x e^{-(m\omega_{kl}/2\hbar)x^2} \quad \text{z energią własną:} \quad E = \frac{3}{2} \hbar \omega_{kl}$$

Oscylator harmoniczny

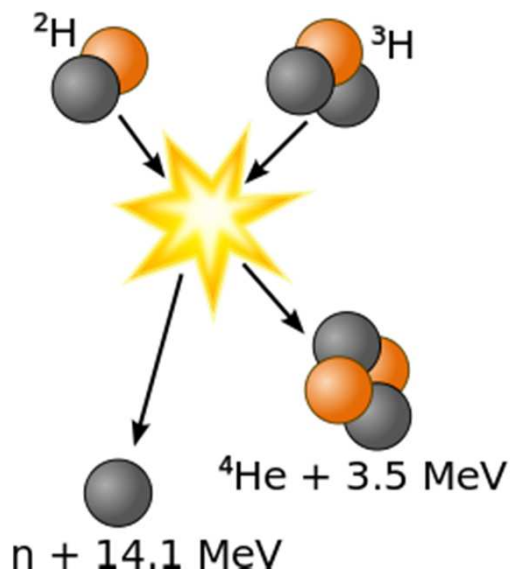
Różnica pomiędzy dwoma przyległymi poziomami wynosi

$$E_2 - E_1 = \hbar \omega$$

Uogólniając, wzór na wartości własne ma postać: $E_n = (n - \frac{1}{2})\hbar \omega_{kl}$

W fizyce klasycznej energia cząstki może mieć każda wartość nie wyłączając zera. W teorii kwantowej możliwe są tylko dozwolone wartości energii

Zastosowania



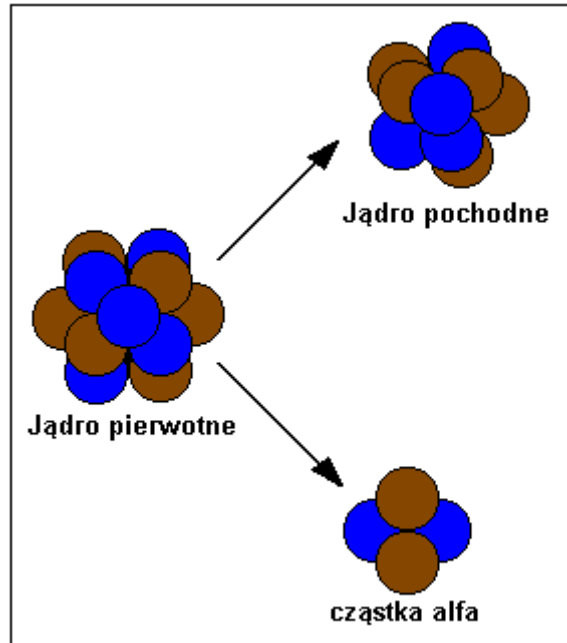
Reakcja fuzji termojądrowej, jądra deuteru i trytu łączą się, powstaje jądro helu, neutron i wydzielana jest energia

Fuzja jądrowa będąca źródłem energii Słońca zachodzi w dużym stopniu dzięki **zjawisku tunelowemu**. Zjawisko to umożliwia pokonanie bariery odpychania kulombowskiego jąder atomów w temperaturze niższej, niż wynikałoby to z praw termodynamiki. Efekt tunelowy stwarza również nadzieje na obniżenie temperatury fuzji przeprowadzanej w sposób kontrolowany.

Źródło: Wikipedia

Zastosowania

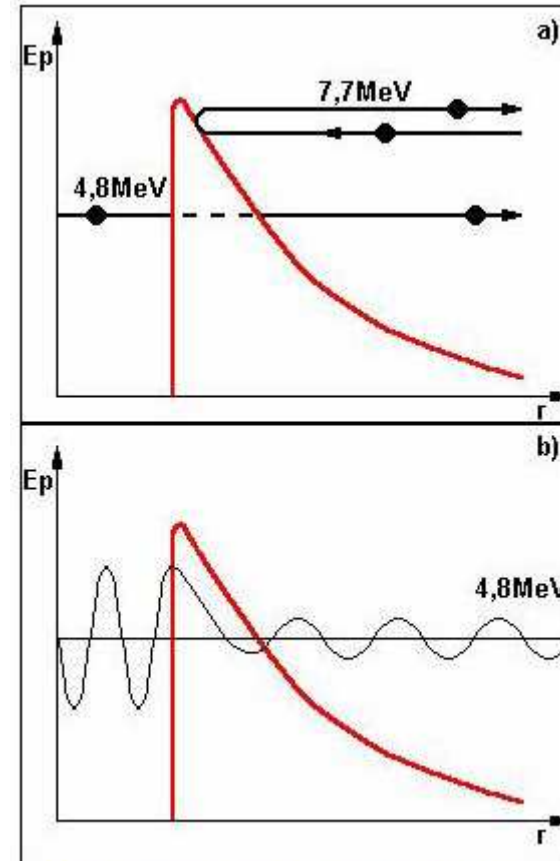
Dzięki zjawisku tunelowemu następuje emisja cząstek α w procesie rozpadu promieniotwórczego masywnych jąder atomowych.



Rozpad α

Rozpad alfa

Źródło: www.libray.thinkquest.org

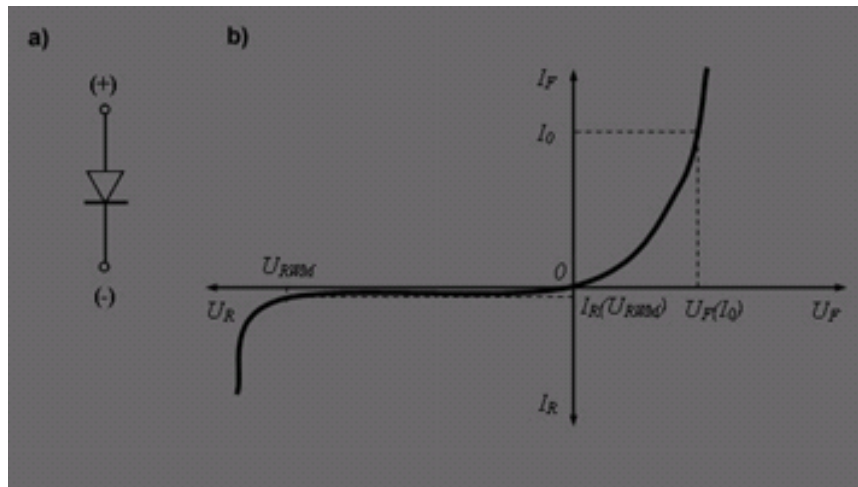


Efekt tunelowania się cząsteczek alfa.

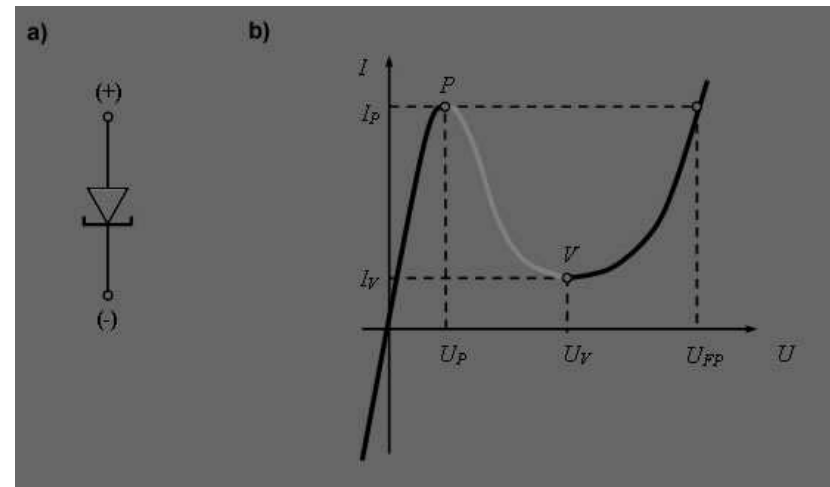
Zastosowania

We współczesnej technice na zjawisku tunelowym oparte jest funkcjonowanie wielu półprzewodnikowych elementów elektronicznych (np. dioda tunelowa) oraz urządzeń takich jak skaningowy mikroskop tunelowy.

DIODA



DIODA TUNELOWA



Źródło: www.marekwierzbicki.cba.pl