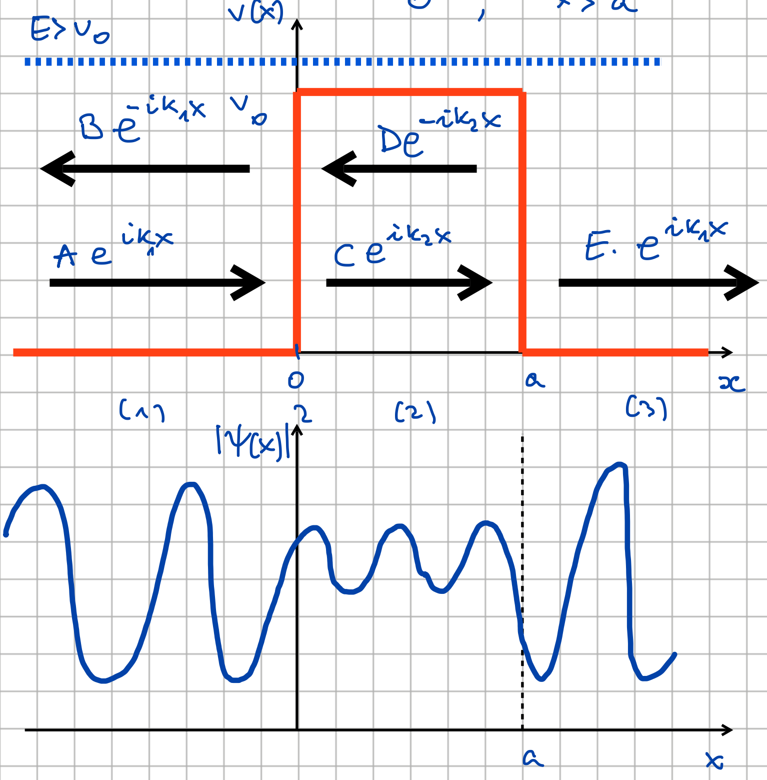
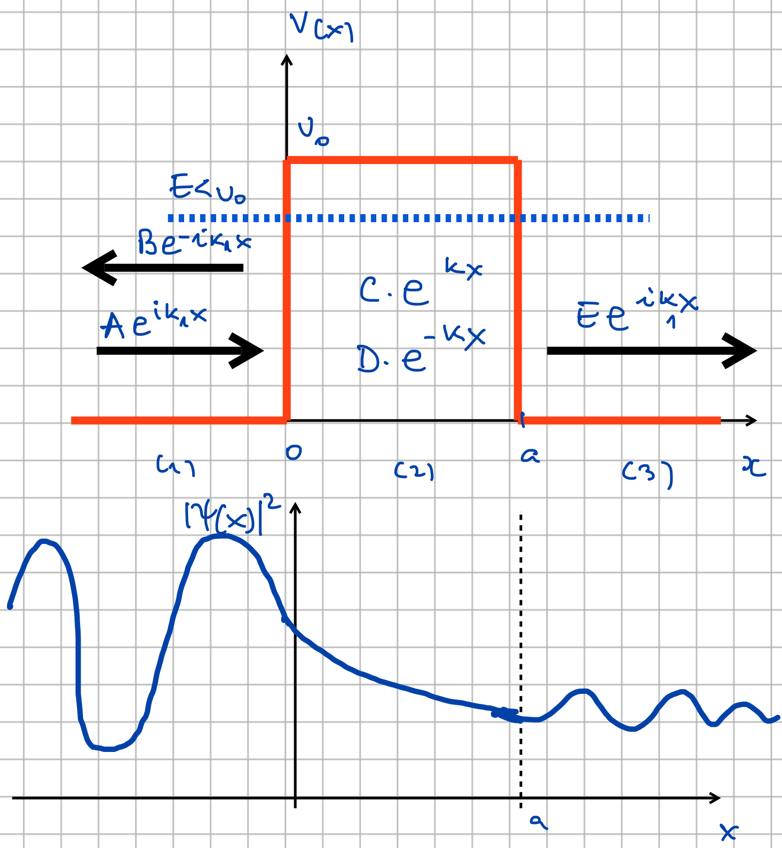
Bariera de potențial:

$$V(x) = \begin{cases} 0; & x < 0 \\ V_0; & 0 \leq x \leq a \\ 0; & x > a \end{cases}$$





$E > V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot \psi''(x) + V(x)\cdot\psi(x) = E\cdot\psi(x)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) ; & x < 0 \\ \psi_2(x) ; & 0 \leq x \leq a \\ \psi_3(x) ; & x > a \end{cases}$$

(1): $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1''(x) = E\psi_1(x) \quad \Big|\cdot\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$

$$\boxed{k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi_1''(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$$

$$\psi_1(x) = A\cdot e^{ik_1x} + B\,e^{-ik_1x}$$

(3): $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_3''(x) = E\,\psi_3(x) \Rightarrow \psi_3(x) = E\cdot e^{ik_1x} + \underbrace{F\,e^{-ik_1x}}_{\text{fără semnificație fizică.}}$

$$(2):\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x)+V_0\psi_2(x)=E\psi_2(x)\quad \Big|\cdot\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$$

$$\psi_2''(x)+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\cdot\psi_2(x)=0$$

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

$$\psi_2''(x)+k_2^2\psi_2(x)=0.$$

$$\psi_2(x)=C\cdot e^{ik_2x}+De^{-ik_2x}$$

$$\boxed{\psi(x)=\begin{cases}\psi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x} & ;\quad x<0\\ \psi_2(x)=Ce^{ik_2x}+De^{-ik_2x} & ;\quad 0\le x\le a\\ \psi_3(x)=Ee^{ik_1x} & ;\quad x>a\end{cases}}$$

Ae^{ik_1x} - unda incidentă

Be^{-ik_1x} - unda reflectată la $x=0$.

$E\cdot e^{ik_1x}$ - unda transmisă la $x=a$.

$C\cdot e^{ik_2x}$ - unda transmisă la $x=0$

De^{-ik_2x} - unda reflectată la $x=a$

Avem un total de 5 necunoscute A, B, C, D, E și doar 4 ecuații din care determinăm B, C, D, E ca funcție de A - amplitudinea undei incidente.

Din condiția de continuitate și derivabilitate a fct de undă:

$$\psi_1(0)=\psi_2(0)\qquad \psi_1'(0)=\psi_2'(0)$$

$$\psi_2(a)=\psi_3(a)\qquad \psi_2'(a)=\psi_3'(a)$$

$$\boxed{\psi'(x)=\begin{cases}\psi_1'(x)=ik_1\cdot Ae^{ik_1x}-ik_1Be^{-ik_1x} & x<0\\ \psi_2'(x)=ik_2Ce^{ik_2x}-ik_2De^{-ik_2x} & 0<x<a\\ \psi_3'(x)=ik_1Ee^{ik_1x} & x>a\end{cases}}$$

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ C \cdot e^{ik_2 a} + D\, e^{-ik_2 a} = E \cdot e^{ik_1 a} \\ ik_1 (A - B) = i k_2 (C - D) \\ ik_2 \cdot \left(C \cdot e^{ik_2 a} - D\, e^{-ik_2 a} \right) = ik_1 E\, e^{ik_1 a} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ rezolvăm sistemul B, C, D, E ca funcție de A.

Dorim să determinăm coeficientul de transmisie din zona (1) în zona (3)

$$T = \frac{|j_{transmis,3}|}{|j_{incident,1}|}$$

$$j_{incident,1} = \frac{\hbar \cdot k_1}{m} \cdot |A|^2 \; ; \qquad T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \left|\frac{E}{A}\right|^2.$$

$$j_{transmis,3} = \frac{\hbar k_1}{m} \cdot |E|^2.$$

$$E = \frac{4 k_1 k_2 \cdot A \cdot e^{-ik_1 a}}{4 k_1 k_2 \cdot \cos k_2 a - 2i (k_1^2 + k_2^2) \cdot \sin k_2 a} \qquad E \in \mathbb{C}$$

$$\frac{E}{A} = \frac{e^{-ik_1 a}}{\cos k_2 a - i \dfrac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_1} \cdot \sin k_2 a}$$

$$\left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{1}{\cos^2 k_2 a + \left(\dfrac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}\right)^2 \cdot \sin^2 k_2 a}$$

$$\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}\right)^2 = 1 + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2}\right)^2$$

$$\left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2}\right)^2 \cdot \sin^2 k_2 a}.$$

$$\boxed{T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2}\right)^2 \cdot \sin^2 k_2 a}}$$ - coeficientul de tunelare (transmisie)

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}.$$

$$\left.\begin{aligned} k_1^2 &= \frac{2m}{\hbar} \cdot E \\ k_2^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) \end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad k_1^2 - k_2^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}.$$

$$2k_1 \cdot k_2 = \frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{E(E - V_0)}$$

$E < V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi(x) + V(x) \cdot \psi(x) = L \cdot \psi(x)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) & ; \quad x < 0 \\ \psi_2(x) & ; \quad 0 \leq x \leq a \\ \psi_3(x) & ; \quad x > a \end{cases}$$

(1): $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1''(x) = E\psi_1(x) \quad \Big| \cdot \left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$

$$\boxed{k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi_1''(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$$

$$\psi_1(x) = A \cdot e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x}$$

(3): $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_3''(x) = E\psi_3(x) \Rightarrow \psi_3(x) = E \cdot e^{ik_1x} + F e^{-ik_1x}$

fără semnificație fizică.

(2): $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x) + V_0\psi_2(x) = E\psi_2(x) \quad \Big| \left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$

$$\psi_2''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\cdot\psi_2(x) = 0.$$

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

$$\psi_2(x) = C e^{kx} + D e^{-kx}$$

$$\boxed{\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} & ; \quad x<0 \\ \psi_2(x) = C e^{kx} + D e^{-kx} & ; \quad 0 \le x \le a \\ \psi_3(x) = E e^{ik_1x} & ; \quad x>a \end{cases}}$$

Din condiția de continuitate și derivabilitate a fct de undă:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \qquad \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \qquad \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

$$\boxed{\psi'(x) = \begin{cases} \psi_1'(x) = ik_1 \cdot A e^{ik_1x} - ik_1 B e^{-ik_1x} & x<0 \\ \psi_2'(x) = k C e^{kx} - k D e^{-kx} & 0<x<a \\ \psi_3'(x) = ik_1 E e^{ik_1x} & x>a \end{cases}}$$

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ C\cdot e^{ka} + D e^{-ka} = E\cdot e^{ik_1a} \\ ik_1(A - B) = k(C - D) \\ k\left(C e^{ka} - D e^{-ka}\right) = ik_1 E e^{ik_1a} \end{cases}$$

Se determină amplitudinile B, C, D, E ca funcție de amplitudinea undei incidente A.

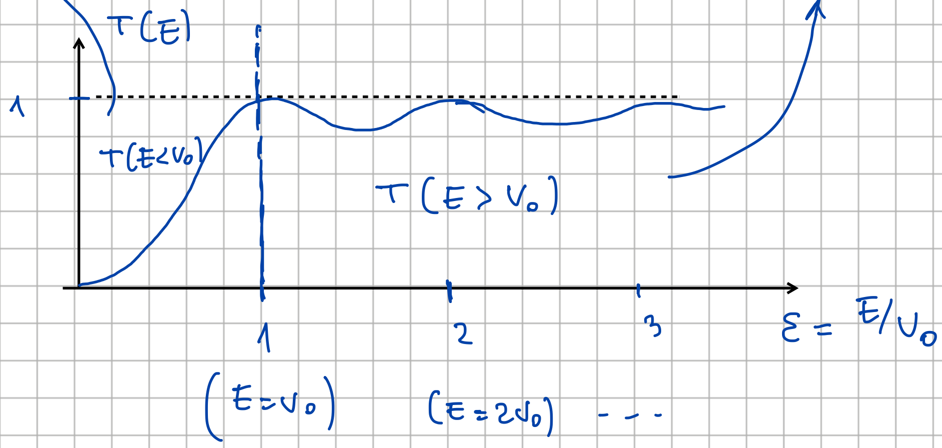
Ne interesează coeficientul de transmisie: $T = \left|\frac{E}{A}\right|^2$.

$$\frac{E}{A} = 2 \cdot e^{-ik_1 \cdot a} \cdot \frac{1}{2\cosh k \cdot a + i\,\frac{k^2 - k_1^2}{k \cdot k_1} \cdot \sinh ka}$$

$$\left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{1}{\cosh^2 ka + \left(\frac{k^2 - k_1^2}{2kk_1}\right)^2 \cdot \sinh^2 ka \quad \left(-\sinh^2 ka + \sinh^2 ka\right)}$$

$$\boxed{T(E<V_0) = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1}\right)^2 \cdot \sinh^2 ka}} \qquad E < V_0$$

$$\boxed{T(E>V_0) = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2}\right)^2 \cdot \sin^2 k_2 a}} \quad ; \quad E > V_0$$



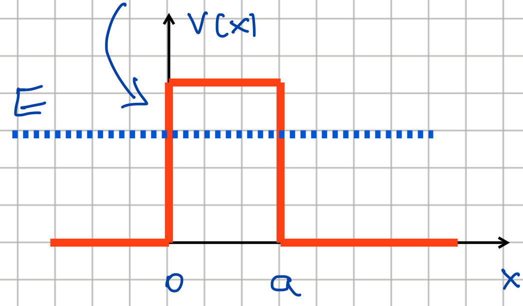
Obs. Pentru orice valoare $E>0$ a energiei, coeficientul de tunelare este finit (non-zero)

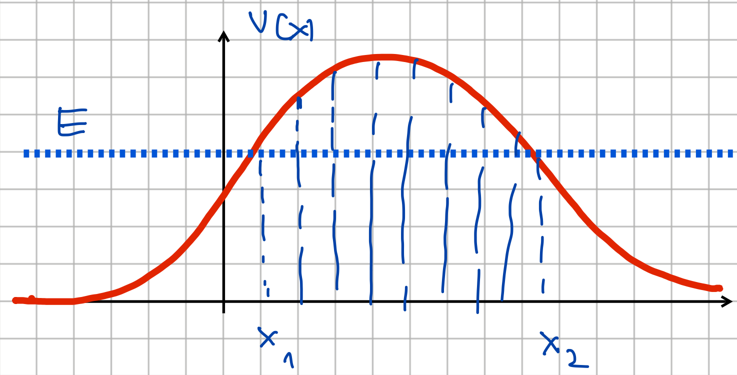
ptr $E \ll V_0$ $\qquad sh\,x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \Rightarrow sh^2 x = \frac{e^{2x} + e^{-2x} - 2}{4}$

ptr $k \cdot a = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \cdot a \Rightarrow sh^2\, ka \approx e^{2 \cdot ka}$

$$T(E \ll V_0) \simeq \frac{1}{sh^2\, ka} \simeq e^{-2ka}$$

$$T(E \ll V_0) \simeq e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$$





La modul general dacă V(x) are o dependență de poziție

$$\boxed{T(E) \propto e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(V(x)-E)}\cdot dx}}$$

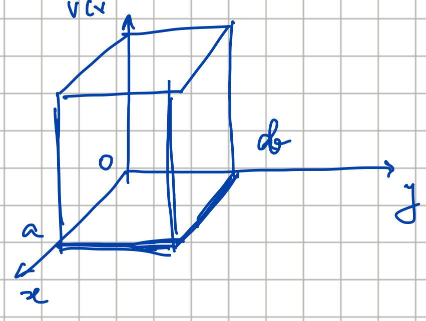
↳ coeficientul de tunelare pentru un potențial general V(x)

Efectul tunel

- constă în trecerea unei particule printr-o regiune "interzisă energetic" în care energia este mai mică decât înălțimea barierei de potențial.
- este un efect pur cuantic și care nu se regăsește în fizica clasică.

Problemă O particulă cu masa m se află într-o groapă de potențial bidimensională cu pereți impenetrabili de laturi a și b. Să se determine valorile proprii ale energiei și fct. proprii corespunzătoare.

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{în interiorul gropii: } 0 < x < a;\ 0 < y < b \\ \infty & \text{altfel} \end{cases}$$



În regiunea cu potențial infinit $V(x,y)=0$, funcția de undă se anulează $\Psi(x,y)=0$

Ec. lui Schrödinger în interiorul gropii este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2\Psi(\vec{r}) = E\cdot\Psi(\vec{r})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(\frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial y^2}\right) = E\cdot\Psi(x,y) \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rightarrow\partial_x^2 \quad \frac{\partial^2}{\partial y^2}\rightarrow\partial_y^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(\partial_x^2\,\Psi(x,y)+\partial_y^2\,\Psi(x,y)\right) = E\cdot\Psi(x,y) \quad \Big|\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$$

Alegem $\Psi(x,y) = \Psi_1(x)\cdot\Psi_2(y)$

$$\partial_x^2\,\Psi(x,y) = \Psi_1''(x)\;\Psi_2(y) = \partial_x^2\,\Psi_1(x)\cdot\Psi_2(y)$$

$$\partial_y^2\,\Psi(x,y) = \Psi_1(x)\;\Psi_2''(y) = \Psi_1(x)\cdot\partial_y^2\,\Psi_2(y)$$

$$\Psi_1''(x)\cdot\Psi_2(y)+\Psi_1(x)\cdot\Psi_2''(y)+\frac{2mE}{\hbar^2}\cdot\Psi_1(x)\cdot\Psi_2(y)=0. \quad \Big|:\frac{1}{\Psi_1(x)\Psi_2(y)}$$

$$\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)}+\frac{\Psi_2''(y)}{\Psi_2(y)}+\frac{2mE}{\hbar^2}=0.$$

$$\boxed{\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2=k_1^2+k_2^2}$$

$$\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)}+\frac{\Psi_2''(y)}{\Psi_2(y)}+k_1^2+k_2^2=0.$$

$$\underbrace{\left(\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)}+k_1^2\right)}_{\overset{\parallel}{0}}+\underbrace{\left(\frac{\Psi_2''(y)}{\Psi_2(y)}+k_2^2\right)}_{\overset{\parallel}{0}}=0.$$

$$\begin{cases} \psi_1''(x) + k_1^2 \cdot \psi_1(x) = 0 & 0 < x < a \\ \psi_2''(y) + k_2^2 \psi_2(y) = 0 & 0 < y < b. \end{cases}$$

Obs: Rezolvarea se reduce la soluția unei probleme unidimensionale, separat după direcția x și direcția y.

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin \frac{n\pi x}{a}; \qquad k_1^2 = \frac{n^2\pi^2}{a^2}, \quad n \in N^*$$

$$\psi_2(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \sin \frac{m\pi y}{b} \qquad k_2^2 = \frac{m^2\pi^2}{b^2}; \quad m \in N^*.$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\psi_{n,m}(x,y) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \sin\left(\frac{m\pi y}{b}\right)} \qquad n, m \in N^*$$

$$\boxed{E_{n,m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2}\right)} \qquad n, m \in N^*.$$

Starea particulei este descrisă de 2 numere cuantice principale.
Fct de undă este normata corespunzător:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, |\psi(x,y)|^2 = 1 \quad \checkmark$$

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \frac{2}{a} \cdot \sin^2 \frac{n\pi x}{a}}_{1} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy \, \frac{2}{b} \cdot \sin^2 \frac{m\pi y}{b}}_{1} = 1$$

Obs: Generalizarea la cazul 3D în care particula se mișcă în interiorul unui paralelipiped dreptunghic cu dimensiunile laturilor a, b, c este imediată.

$$\boxed{\begin{aligned}\psi_{n,m,p}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\sin\frac{n\pi x}{a}\cdot\sqrt{\frac{2}{b}}\cdot\sin\frac{m\pi y}{b}\cdot\sqrt{\frac{2}{c}}\cdot\sin\frac{p\pi z}{c}\\ E_{n,m,p} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{m^2}{b^2}+\frac{p^2}{c^2}\right)\end{aligned}}$$

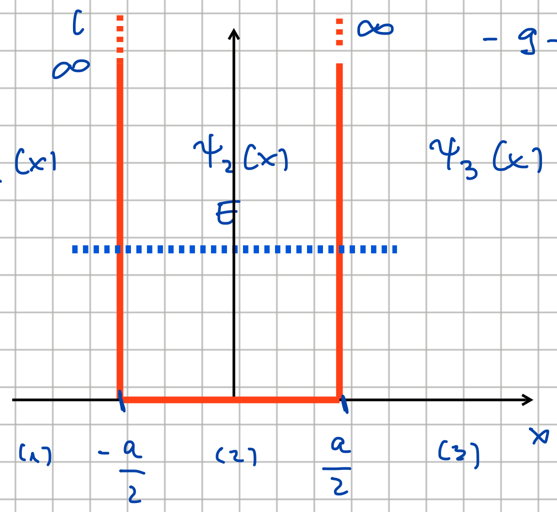
$n, m, p \in \mathbb{N}^*$.

- în fizica nanostructurile astfel de sisteme poartă denumirea de "quantum dot" (punct cuantic)

Groapa de potențial simetrică

- 9 -

$$V(x) = \begin{cases} \infty; & x < -\frac{a}{2} \\ 0; & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \infty & x > \frac{a}{2} \end{cases}$$



În regiunea (1) și (3) $V(x) = \infty \Rightarrow$ funcția de undă se anulează $\psi_1(x) = \psi_3(x) = 0$.

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = 0; & x \leq -\frac{a}{2} \\ \psi_2(x) & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \psi_3(x) = 0 & ; \quad x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

În regiunea (2):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x) = E\,\psi_2(x) \qquad \Big|\cdot -\frac{2m}{\hbar^2}$$

$$\psi_2''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2(x) = 0$$

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

$$\psi_2''(x) + k^2\psi_2(x) = 0$$

$$\psi_2(x) = A \cdot \sin kx + B \cdot \cos kx.$$

Condițiile de continuitate / derivabilitate pt. funcția $\psi(x)$ în $x = -\frac{a}{2}$ și $x = \frac{a}{2}$.

$$\begin{cases} \psi_1(-\frac{a}{2}) = \psi_2(-\frac{a}{2}) \\ \psi_2(\frac{a}{2}) = \psi_3(\frac{a}{2}) \end{cases} \qquad \begin{cases} -A \cdot \sin \frac{ka}{2} + B \cdot \cos \frac{ka}{2} = 0 \\ A \cdot \sin \frac{ka}{2} + B \cdot \cos \frac{ka}{2} = 0. \end{cases}$$

Pt. ca ec. să fie satisfăcute este obligatoriu ca:

$$\begin{cases} A \neq 0 \Rightarrow B = 0. \\ B \neq 0 \Rightarrow A = 0. \end{cases}$$

$\Rightarrow$ vom avea 2 seturi de soluții:

a) $A \neq 0$: $\qquad \psi_2(x) = A \cdot \sin kx$;

$$\psi_2(-\frac{a}{2}) = \psi_2(\frac{a}{2}) = 0 \Rightarrow \sin \frac{ka}{2} = 0 \Rightarrow \frac{k \cdot a}{2} = n \cdot \pi$$

$$k_n = \frac{2n\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$\psi_n(x) = A \cdot \sin \frac{2\pi n x}{a}; \qquad n \in \mathbb{N}^*$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{-a/2} |\psi_1(x)|^2 dx}_{0} + \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} |\psi_n(x)|^2 dx + \underbrace{\int_{\frac{a}{2}}^{\infty} |\psi_3(x)|^2 dx}_{0}$$

$$= A^2 \underbrace{\int_{-\frac{a}{2}}^{a/2} \sin^2 \frac{2\pi n x}{a}}_{\frac{a}{2}} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi n x}{a}, \quad n \in \mathbb{N}^*} \rightarrow \text{f-ț. de undă impară}$$

b) $\underline{\underline{B \neq 0}}$ $\quad \psi_2(x) = B \cdot \cos k \cdot x$

$$\psi_2\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi_2\left(\frac{a}{2}\right) = 0 \Rightarrow \cos\frac{k \cdot a}{2} = 0.$$

$$\Rightarrow \frac{k \cdot a}{\cancel{2}} = (2n+1)\frac{\pi}{\cancel{2}} \Rightarrow k_n = \frac{(2n+1)\pi}{a}.$$

$$\psi_n(x) = B \cdot \cos\frac{(2n+1)\pi}{a}x \qquad n \in N^*$$

Impunând condiția de normare $\Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{a}}$

$$|B|^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{a/2} \cos^2 \frac{(2n+1)\pi}{a} x$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \cos\frac{(2n+1)\pi x}{a} \qquad n \in N^*}$$

↳ fct de undă pară

$$\boxed{\begin{gathered}\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\frac{n\pi x}{a} & ; \quad n = 2, 4, 6, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\frac{n\pi x}{a} & ; \quad n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \\ E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2 m a^2}, \quad n \in N^*\end{gathered}}$$

Obs: Deoarece $V(x) = V(-x)$, funcția de undă are proprietatea că este fie pară $\psi(x) = \psi(-x)$ fie impară $\psi(x) = -\psi(x)$.

dacă $\psi(x) = \psi(-x)$ fct de undă se numește simetrică

$\psi(x) = -\psi(x)$ fct de undă este antisimetrică