• cząstka w nieskończenie głębokiej jamie potencjału; • efekt tunelowy; • atom wodoru, równanie Schrodingera, separacja f.falowej na część radialną $R(r)$ i część kątową $Y(\vartheta, \varphi)$; • liczby kwantowe; • moment pędu;

1. 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 piasku o masie 10^{-7} kg zamknięte w obszarze o szerokości 1 mm. b) Oblicz najmniejszą możliwą prędkość tej cząstki.
Jakie wnioski można wyciągnąć z obliczeń?

2. 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;
$$\varphi_1 = a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx} \text{ (superpozycja fali padającej i odbitej od bariery)},$$
$$\varphi_2 = a_2 e^{-\varkappa x} + b_2 e^{\varkappa x},$$
$$\varphi_3 = a_3 e^{ikx},$$
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 $D = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2}$ jest współczynnikiem przeniknięcia przez barierę, a $R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2}$ - 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:
$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - E)}\,L}.$$

3. 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.

4. Zadanie nadobowiązkowe.
A. Zestaw rozwiązań ogólnych w zad. 2 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
$$D \approx 16\,\frac{E}{U_o}\left(1 - \frac{E}{U_o}\right) e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - E)}\,L} \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - E)}\,L}.$$
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: $a_1 = \frac{1}{4} a_3\, e^{ikL} e^{\kappa L}\left(1 - \frac{ik}{\kappa} + 1 - \frac{\kappa}{ik}\right) = \frac{1}{4} a_3\, e^{ikL} e^{\kappa L} \frac{(k + ik)^2}{i\kappa k}$);
• dalej radźcie sobie sami.
B) Spróbuj uzasadnić, że w przypadku gdy bariera ma kształt $U(x)$ (nie jest prostokątna) to wzór na współczynnik przenikania D można uogólnić następująco:
$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)}\,dx},$$
gdzie x_1, x_2 są miejscami zerowymi funkcji $U(x) - E$.

5. 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).

6. 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 $Y(\vartheta,\varphi)$.

   wskaz.: Laplasjan w układzie sferycznym

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

7. Funkcja falowa $\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}}e^{-r/r_1}$ (konfiguracja $1s^1$), gdzie $r_1 = 4\pi\varepsilon_o\hbar^2/me^2$ jest pierwszym promieniem Bohra, opisuje stan podstawowy elektronu w atomie wodoru. Oblicz, dla jakiej odległości od jądra atomu prawdopodobieństwo znalezienia elektronu jest największe dla tego stanu.

   Wskaz.: jest symetria sferyczna, brak zależności od kątów ϑ,φ, czyli prawdopodobieństwo znalezienia elektronu pomiędzy r a $r+dr$ jest $dp = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$

8. Jaka jest wartość energii E (podaj w eV) i momentu pędu L elektronu w atomie wodoru w stanie $3p$ oraz w stanie $4p$? Czy elektron może znajdować się w stanie $4f$?

Uzupełnienia:

Przyjęte oznaczenia stanów elektronowych (dla atomów wieloelektronowych: litery s, p, d, f... oznaczają odpowiednio stany o liczbie pobocznej $l = 0, 1, 2, 3$. Symbol np. $4d^3$ oznacza, że 3 elektrony znajdują się w stanie o głównej liczbie kwantowej $n = 4$ i pobocznej $l = 2$.

Operator kwadratu momentu pędu: $\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$

Kwantowanie kwadratu momentu pędu: $L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad l = 0, 1, \dots n-1$

Operator składowej z-owej momentu pędu: $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

Kwantowanie rzutu momentu pędu L na oś z: $L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \cdots \pm l$

Kwantowanie przestrzenne wektora momentu pędu względem wyróżnionej osi:
Wektor orbitalnego momentu pędu $\vec{L}$ jest skwantowany w przestrzeni względem danego kierunku z (np. kierunku pola magnetycznego), dozwolone są jedynie określone ustawienia $\vec{L}$, a więc określone położenia orbit elektronowych.
Przykładowy diagram dla $l = 1$: $L = \sqrt{1\cdot(1+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar$; $L_z = -\hbar, 0, \hbar$).