Lucrarea 10 :
Studiul barierei de potenţial

1 Consideraţii teoretice

Considerăm o particulă cuantică ce se mişcă într-o regiune unde energia potenţială (*Figura 1*) este dată de relaţia

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \in [0,l] \\ 0, & x \notin [0,l] \end{cases} \tag{1}$$

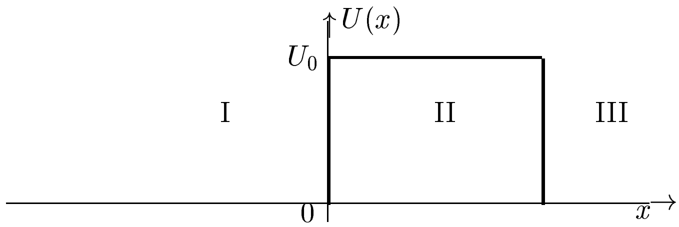

Figura 1

Deosebim trei regiuni distincte : I, II, respectiv III, precum şi trei situaţii în funcţie de raportul dintre U_0 şi ε : $\varepsilon > U_0$, $\varepsilon = U_0$, respectiv $\varepsilon < U_0$. Vom discuta pe rând cele trei situaţii. Începem cu cazul $\varepsilon > U_0$. Scriem ecuaţia lui Schrödinger pentru fiecare din cele trei regiuni

$$\varphi_1{}''(x) + \frac{2m_0}{\hbar^2}\varepsilon\varphi_1(x) = 0 \tag{2}$$

$$\varphi_2{}''(x) + \frac{2m_0}{\hbar^2}(\varepsilon - U_0)\varphi_2(x) = 0 \tag{3}$$

$$\varphi_3{}''(x) + \frac{2m_0}{\hbar^2}\varepsilon\varphi_3(x) = 0 \tag{4}$$

Introducem notaţiile $k_1^2 = \dfrac{2m_0}{\hbar^2}\varepsilon$, respectiv $k_2^2 = \dfrac{2m_0}{\hbar^2}(\varepsilon - U_0)$ şi obţinem pentru ecuaţiile (2), (3) şi (4) soluţiile

$$\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} = \varphi_i(x) + \varphi_r(x) \tag{5}$$

$$\varphi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \tag{6}$$

$$\varphi_3(x) = Ee^{ik_1x} + Fe^{-ik_2x} = \varphi_\tau(x) \tag{7}$$

Am considerat nul coeficientul F, neavând motiv pentru existenţa undei reflectate în regiunea III. Pentru determinarea coeficienţilor reali A, B, C, D, E facem apel la condiţiile ce trebuie îndeplinite de funcţia de stare. Coordonatele pentru care se pune problema continuităţii funcţiei de stare şi a derivatei ei de ordinul întâi sunt 0 şi l.

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \Longrightarrow A + B = C + D \tag{8}$$

$$\varphi_1{}'(0) = \varphi_2{}'(0) \Longrightarrow A - B = \frac{k_2}{k_1}(C - D) \tag{9}$$

$$\varphi_2(l) = \varphi_3(l) \Longrightarrow Ce^{ik_2l} + De^{-ik_2l} = Ee^{ik_1l} \tag{10}$$

$$\varphi_2{}'(l) = \varphi_3{}'(l) \Longrightarrow Ce^{ik_2l} - De^{-ik_2l} = \frac{k_1}{k_2}Ee^{ik_1l} \tag{11}$$

Am obţinut un sistem de patru ecuaţii cu cinci necunoscute, sistem ce este nedeterminat. Calculăm acum densităţile curenţilor probabilităţii de localizare pentru cele trei situaţii : incidenţă, j_i, reflexie, j_r, şi transmisie, j_τ

$$j_i = \frac{k_1\hbar}{m_0}|A|^2 \tag{12}$$

$$j_r = -\frac{k_1\hbar}{m_0}|B|^2 \tag{13}$$

$$j_\tau = \frac{k_1\hbar}{m_0}|E|^2. \tag{14}$$

Pentru *coeficientul de reflexie*, R, respectiv *coeficientul de transmisie*, T, obţinem relaţiile

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \tag{15}$$

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2}. \tag{16}$$

Pentru determinarea coeficienţilor de reflexie, respectiv de transmisie, avem nevoie de parametri B şi E. Considerăm coeficientul A ca fiind parametru şi rezolvăm sistemul celor patru ecuaţii cu patru necunoscute acum funcţie de parametrul A. Pentru coeficienţii de interes obţinem relaţiile

$$B = \frac{(k_1^2 - k_2^2)(1 - e^{i2k_2l})}{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2 e^{i2k_2l}} \cdot A \tag{17}$$

$$E = 4\frac{k_1 k_2 e^{i(k_1 - k_2)l}}{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2 e^{i2k_2l}} \cdot A. \tag{18}$$

Cu aceste expresii pentru cei doi coeficienţi obţinem

$$R = \frac{U_0^2 \sin^2\left(\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m_0(\varepsilon - U_0)}\right)}{U_0^2 \sin^2\left(\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m_0(\varepsilon - U_0)}\right) + 4\varepsilon(\varepsilon - U_0)} \tag{19}$$

$$T = \frac{4\varepsilon(\varepsilon - U_0)}{U_0^2 \sin^2\left(\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m_0(\varepsilon - U_0)}\right) + 4\varepsilon(\varepsilon - U_0)}. \tag{20}$$

Observăm că transparenţa totală a barierei, $T = 1$, apare doar pentru situaţia $\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m_0(\varepsilon - U_0)} = n\pi$ unde $n = 1, 2, 3, \ldots$. În această situaţie energia particulei ia valorile

$$\varepsilon_n = U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 l^2} n^2. \tag{21}$$

Numai pentru aceste valori ale energiei ei particula nu vede bariera, şi putem spune că particula a găsit un tunel în regiunea barierei, de unde s-a dat problemei pe care o tratăm în acest paragraf numele de *efect tunel*. Pentru celelalte situaţii T are valori subunitare, deci putem spune că particula nu găseşte întotdeauna tunelul.

Să tratăm acum situaţia $\varepsilon = U_0$. Expresiile coeficienţiilor de reflexie şi de transmisie se obţin din relaţiile (19) şi (20) calcuând limita lor pentru $\varepsilon \to U_0$. Obţinem

$$R_0 = \lim_{\varepsilon \to U_0} R = \left(1 + \frac{2\hbar^2}{m_0 l^2 U_0}\right)^{-1} \tag{22}$$

$$T_0 = \lim_{\varepsilon \to U_0} T = \left(1 + \frac{m_0 l^2 U_0}{2\hbar^2}\right)^{-1}, \tag{23}$$

valori dictate de parametrii barierei de potenţial.

Pentru situaţia $\varepsilon < U_0$ observăm că obţinem $k_2^2 < 0$, şi, fie ne întoarcem la început şi reluăm calculele pentru această situaţie, fie în rezultatele obţinute pentru situaţia $\varepsilon > U_0$ facem substituţia $k_2 \to ik$ substituţie ce se traduce în $\sin k_2 x \to i\mathrm{sh} kx$. Obţinem rezultatele

$$R = \frac{U_0^2 \mathrm{sh}^2\left(\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - \varepsilon)}\right)}{U_0^2 \mathrm{sh}^2\left(\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - \varepsilon)}\right) + 4\varepsilon(U_0 - \varepsilon)} \tag{24}$$

$$T = \frac{4\varepsilon(U_0 - \varepsilon)}{U_0^2 \mathrm{sh}^2\left(\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - \varepsilon)}\right) + 4\varepsilon(U_0 - \varepsilon)} \tag{25}$$

Bariera dreptunghiulară de potenţial este un exemplu didactic ce ne permite să înţelegem efectul tunel. Barierele reale de potenţial nu sunt dreptunghiulare, dar cum la calculul integralei am acoperit o suprafaţă oarecare cu dreptunghiuri a căror lăţime am făcut-o să tindă la zero putem extinde procedeul şi la bariera de potenţial oarecare, situaţie în care coeficientul T este dat de o expresie de forma

$$T = const \cdot e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m_0(U(x) - \varepsilon)}dx} \tag{26}$$

Efectul tunel poate explica *efectul fotoelectric, emisia α, diferenţa de potenţial de contact, funcţionarea multor dispozitive electronice etc.*

2 Modul de lucru

În aceasta lucrare studiem transparenţa unei bariere pe potenţial a cărei lărgime şi lăţime le putem controla. Totodată putem stabili şi energia particulei ce este trimisă spre barieră. Putem face toate acestea cu programul SQPOT [1].

[1] Programul face parte dintr-un pachet de fizică editat la editura Springer, program pe care autorul l-a primit gratuit

1. Se lansează în execuţie programul sqpot.exe,
2. Prin interfaţa programului se pot stabili valoarea pentru înălţimea barierei, U_0, lăţimea barierei a şi energia cinetică particulei E_0 după care se rulează programul ce va afişa valoarea coeficientului de transmisie al barierei.
3. Se vor studia următoarele situaţii :
   (a) Pentru o barieră de potenţial fixată (U_0, a) se modifică valoarea energiei cinetice a particulei, într-un interval cu limita inferioară sub înălţimea barierei, respectiv cu limita superioară peste înălţimea barierei, şi se reţine în *Tabelul 1* de mai jos valoarea coeficientului de transmisie.

   Se vor considera mai multe situaţii. Se reprezintă grafic coeficientul de transmisie T şi coeficientul de reflexie R în funcţie de raportul celor două energii E_0/U_0.

   (b) Pentru un produs aU_0 constant, obţinut prin modificarea celor doi parametri, în sensul păstrării produsului lor constant, şi o valoare constantă a energiei cinetice a particulei se determină valoarea coeficientului de transmisie. Rezultatele se trec în *Tabelul 2* de mai jos.

Tabelul 1

$U_0 =$ [eV] $a =$

$E_0[eV]$	T	R=1-T	E_0/U_0

Tabelul 2

$E_0 =$ [eV] $aU_0 =$

a	U_0	T	R=1-T

Se discută rezultatele obţinute.