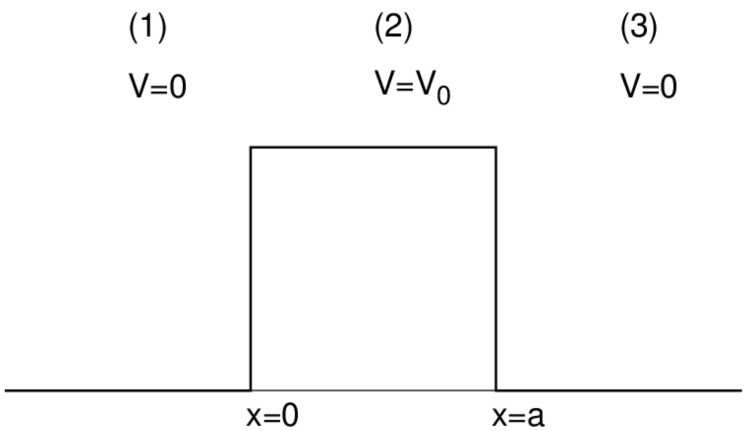
Kvantni delec na potencialni plasti

Delec, ki se giblje premo enakomerno, pride na mejo, kjer potencial v hipu naraste s potenciala 0 na potencial V_0 in nato po razdalji a pade nazaj na vrednost 0. Takšno potencialno funkcijo zapišemo kot

$$V(x) = \begin{Bmatrix} 0, (x \leq 0) \vee (x \geq a) \\ V_0, 0 < x < a \end{Bmatrix}.$$



Slika 1: Odvisnost potenciala od položaja delca.

Za klasične delce imamo podoben primer, če pridejo na kratek in zelo strm klanec, in ko se povzpnejo nanj, imajo potem kratko ravnino, nato pa se spustijo na prvotno višino. Pri klasičnih delcih imamo dve možnosti, če imajo kinetično energijo manjšo od skoka potencialne energije, se nekje na klancu obrnejo in gibanje nadaljujejo v nasprotno smer. Rečemo lahko, da so se vsi delci v tem primeru na plasti odbili. Če pa imajo kinetično energijo večjo kot je velik potencialni skok, se vsi povzpnejo na vrh klanca in na drugi strani navzdol in nadaljujejo gibanje na drugi strani prepreke z enako kinetično energijo. Rečemo lahko tudi, da se ni noben delec odbil, da so vsi prešli oviro.

V kvantnem opisu moramo rešiti stacionarno Schrödingerjevo enačbo na prvem, druge in tretjem območju (glej sliko 1). Oglejmo si najprej primer, ko je energija delca večja kot potencialni skok ($E > V_0$). Na prvem in tretjem področju imamo enačbo enako enačbi, kot smo jo imeli pri prostem delcu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1.$$

Tu imamo rešitvi

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

in

$$\psi_3(x) = Ee^{ikx} + Fe^{-ikx}.$$

Na drugem področju pa imamo isto enačbo in rešitev kot na potencialnem skoku

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{dx}^2}+\mathrm{V}_0\psi_2=\mathrm{E}\psi_2.$$

$$\psi_2(\mathrm{x})=\mathrm{Ce}^{\mathrm{iqx}}+\mathrm{De}^{-\mathrm{iqx}}.$$

Celotna valovna funkcija mora biti zvezna, zato mora veljati, da je

$$\psi_1(0)=\psi_2(0), \psi_2(a)=\psi_3(a),$$

prav tako mora biti odvod zvezen

$$\frac{\mathrm{d}\psi_1}{dx}(0)=\frac{\mathrm{d}\psi_2}{dx}(0), \frac{\mathrm{d}\psi_2}{dx}(a)=\frac{\mathrm{d}\psi_3}{dx}(a).$$

Iz teh dveh pogojev dobimo naslednje enačbe, ki povezujejo koeficiente A, B, C, D, E in F

$$\mathrm{A}+\mathrm{B}=\mathrm{C}+\mathrm{D}$$

$$\mathrm{C}e^{iqa}+\mathrm{D}e^{-iqa}=\mathrm{E}e^{ika}+\mathrm{F}e^{-ika}$$

$$\mathrm{ikA}-\mathrm{ikB}=\mathrm{iqC}-\mathrm{iqD}$$

$$\mathrm{iqC}e^{iqa}-\mathrm{iqD}e^{-iqa}=\mathrm{ikE}e^{ika}-\mathrm{ikF}e^{-ika}$$

Dodatni pogoj pa postavimo, da je F=0, ker delci ne prihajajo z desne strani (glej kvantni delec na potencialnem skoku). Enačbe se poenostavijo na

$$\mathrm{A}+\mathrm{B}=\mathrm{C}+\mathrm{D}$$

$$\mathrm{C}e^{iqa}+\mathrm{D}e^{-iqa}=\mathrm{E}e^{ika}$$

$$\mathrm{ikA}-\mathrm{ikB}=\mathrm{iqC}-\mathrm{iqD}$$

$$\mathrm{iqC}e^{iqa}-\mathrm{iqD}e^{-iqa}=\mathrm{ikE}e^{ika}$$

Sistem lahko rešimo z Gaussovo eliminacijsko metodo in dobimo za B in E

$$B=\frac{A(-1+e^{2iaq})(k^2-q^2)}{-k^2+e^{2iaq}k^2-2kq-2e^{2iaq}kq-q^2+e^{2iaq}q^2}$$

$$E=-\frac{4Ae^{-iak+iaq}kq}{-k^2+e^{2iaq}k^2-2kq-2e^{2iaq}kq-q^2+e^{2iaq}q^2}$$

Izraza se, če upoštevamo, da je

$$\sin(qa)=\frac{e^{iqa}-e^{-iqa}}{2i}, \cos(qa)=\frac{e^{iqa}+e^{-iqa}}{2},$$

poenostavita na

$$B = \frac{Ai(k^2 - q^2)\sin(qa)}{i(k^2 + q^2)\sin(qa) - 2kq\cos(qa)}$$

$$E = \frac{-2Ae^{-iak}kq}{i(k^2 + q^2)\sin(qa) - 2kq\cos(qa)}$$

Delež odbitega toka na oviri oziroma verjetnost, da se delec na plasti odbije, je

$$\eta_{od} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(qa)}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(qa) + 4k^2q^2}$$

ter delež prepuščenega toka, oziroma verjetnost, da delec preide potencialni skok je

$$\eta_{pre} = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \frac{4k^2q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(qa) + 4k^2q^2}$$

Vidimo, da velja

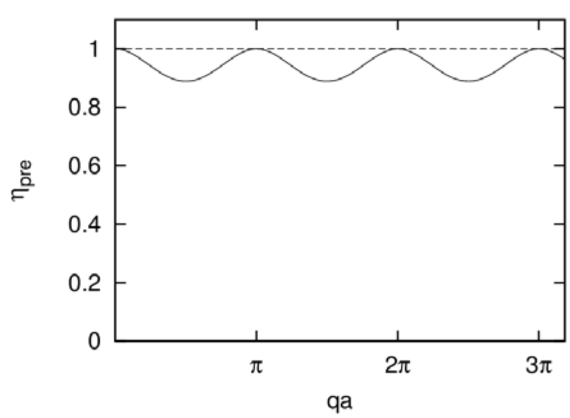
$$\eta_{od} + \eta_{pre} = 1.$$

Delež prepuščenih delcev lahko zapišemo tudi

$$\eta_{pre} = \frac{1}{\frac{(k^2 - q^2)^2}{4k^2q^2}\sin^2(qa) + 1}$$

Sedaj upoštevamo še, da velja $\frac{2\mathrm{mE}}{\hbar^2} = \mathrm{k}^2$ in $\frac{2\mathrm{m}(\mathrm{E}-V_0)}{\hbar^2} = \mathrm{q}^2$ in dobimo

$$\eta_{pre} = \frac{1}{\frac{V_0^2}{4E(\mathrm{E} - V_0)}\sin^2(qa) + 1}$$



Slika 2: Odvisnost prepustnosti od qa za energijo delcev 10 eV in velikost plasti 5 eV.

Opazimo, da delež delcev, ki preide oviro, niha z vrednostjo qa. Ko je qa mnogokratnik π, oviro prečkajo vsi delci.

Sedaj si poglejmo še primer, ko je energija delca manjša kot potencialni na plasti ($E < V_0$). Na drugem delu je sedaj rešitev

$$\psi_2(\mathrm{x}) = \mathrm{C}e^{-\chi\mathrm{x}} + \mathrm{D}e^{\chi\mathrm{x}}.$$

Tudi tu morata biti funkcija in njen odvod zvezen, iz česar sledi

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \psi_2(a) = \psi_3(a),$$

$$\frac{\mathrm{d}\psi_1}{dx}(0) = \frac{\mathrm{d}\psi_2}{dx}(0), \frac{\mathrm{d}\psi_2}{dx}(a) = \frac{\mathrm{d}\psi_3}{dx}(a).$$

Iz teh dveh pogojev dobimo naslednji dve enačbi, ki povezujeta koeficiente A, B, C in D

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} = \mathrm{C} + \mathrm{D}$$

$$\mathrm{C}e^{-\chi a} + \mathrm{D}e^{\chi a} = \mathrm{E}e^{ika} + \mathrm{F}e^{-ika}$$

$$\mathrm{ikA} - \mathrm{ikB} = -\chi\mathrm{C} + \chi\mathrm{D}$$

$$-\chi\mathrm{C}e^{-\chi a} + \chi\mathrm{D}e^{\chi a} = \mathrm{ikE}e^{ika} - \mathrm{ikF}e^{-ika}$$

Tudi tu postavimo pogoj, da je F=0 in dobimo

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} = \mathrm{C} + \mathrm{D}$$

$$\mathrm{C}e^{-\chi a} + \mathrm{D}e^{\chi a} = \mathrm{E}e^{ika}$$

$$\mathrm{ikA} - \mathrm{ikB} = -\chi\mathrm{C} + \chi\mathrm{D}$$

$$-\chi\mathrm{C}e^{-\chi a} + \chi\mathrm{D}e^{\chi a} = \mathrm{ikE}e^{ika}$$

Sistem lahko rešimo z Gaussovo eliminacijsko metodo in dobimo za B in E

$$B = \frac{A(-1 + e^{2a\chi})(k^2 + \chi^2)}{-k^2 + e^{2a\chi}k^2 + 2ik\chi + 2ie^{2a\chi}k\chi + \chi^2 - e^{2a\chi}\chi^2}$$

$$E = -\frac{4Ae^{-iak+a\chi}k\chi}{-ik^2 + ie^{2a\chi}k^2 - 2k\chi - 2e^{2a\chi}k\chi + i\chi^2 - ie^{2a\chi}\chi^2}$$

Izraza se, če upoštevamo, da je

$$\mathrm{sh}(\chi a) = \frac{e^{\chi a} - e^{-\chi a}}{2}, \mathrm{ch}(\chi a) = \frac{e^{\chi a} + e^{-\chi a}}{2},$$

poenostavita na

$$B = \frac{A(k^2 + \chi^2)\mathrm{sh}(\chi a)}{(k^2 - \chi^2)\,\mathrm{sh}(\chi a) + 2ik\chi ch(\chi a)}$$

$$E = \frac{2iAe^{-iak}k\chi}{(k^2 - \chi^2)\,\mathrm{sh}(\chi a) + 2ik\chi ch(\chi a)}$$

Delež odbitega toka na plasti oziroma verjetnost, da se delec na plasti odbije, je

$$\eta_{od} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k^2 + \chi^2)^2\mathrm{sh}^2(\chi a)}{(k^2 + \chi^2)^2\,\mathrm{sh}^2(\chi a) + 4k^2\chi^2}$$

ter delež prepuščenega toka, oziroma verjetnost, da delec preide potencialni skok je

$$\eta_{pre} = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \frac{4k^2\chi^2}{(k^2 + \chi^2)^2\,\mathrm{sh}^2(\chi a) + 4k^2\chi^2}$$

Za velike vrednosti χa je člen $(k^2 + \chi^2)^2\,\mathrm{sh}^2(\chi a)$ veliko večji kot $4k^2\chi^2$ in izraz lahko poenostavimo na

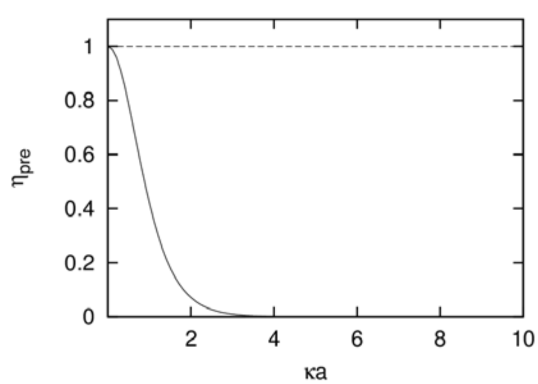
$$\eta_{pre} = \frac{4k^2\chi^2}{(k^2 + \chi^2)^2\,\mathrm{sh}^2(\chi a)}$$

prav tako je pri velikih χa $sh(\chi a)$ približno enak kar $\frac{e^{\chi a}}{2}$, tako da se izraz za prepustnost v tem primeru poenostavi na

$$\eta_{pre} = \frac{16k^2\chi^2}{(k^2 + \chi^2)^2}e^{-2\chi a}$$

Sedaj upoštevajmo še $\frac{2\mathrm{mE}}{\hbar^2} = \mathrm{k}^2$ in $\frac{2\mathrm{m}(V_0 - E)}{\hbar^2} = \chi^2$ ter dobimo

$$\eta_{pre} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}e^{-2\chi a}$$



Slika 3: Odvisnost prepustnosti od qa za energijo delcev 5 eV in velikost plasti 10 eV.

V drugem primeru smo opazili, da lahko preide zajeten delež delcev skozi plast z višjo energijo. Temu pojavu pravimo tunelski efekt. V šali lahko rečemo, da si v primeru, če kvantni delci nimajo dovolj energije, da bi šli preko potencialne plasti, skopljejo tunel.