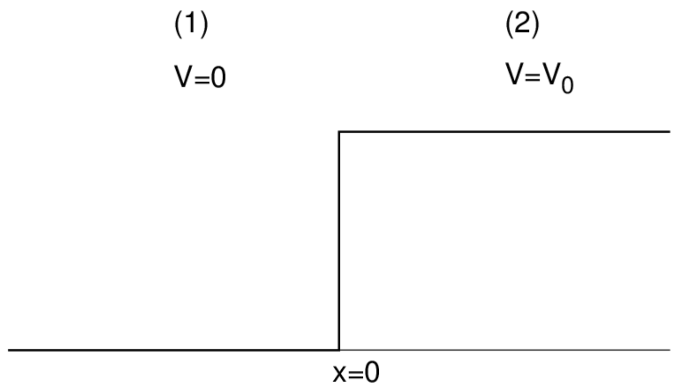
Kvantni delec na potencialnem skoku

Delec, ki se giblje premo enakomerno, pride na mejo, kjer potencial naraste s potenciala 0 na potencial V_0. Takšno potencialno funkcijo zapišemo kot

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



Slika 1: Odvisnost potenciala od položaja delca.

Tak približek potenciala je dober, če se spremeni potencial na majhni razdalji, manjši od valovne dolžine delca. Za klasične delce je podoben primer: ravnina – kratek, zelo strm klanec – ravnina. 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. V tem primeru lahko rečemo, da so se vsi delci na oviri odbili. Če pa imajo kinetično energijo večjo kot je velik potencialni skok, se vsi povzpnejo na vrh klanca in nadaljujejo gibanje z zmanjšano kinetično energijo. Rečemo lahko tudi, da so vsi prešli oviro in da se nobeden delec ni odbil.

V kvantnem opisu moramo rešiti stacionarno Schrödingerjevo enačbo na prvem in na drugem območju (glej sliko 1). Oglejmo si najprej primer, ko je energija delca večja kot potencialni skok ($E > V_0$). Na prvem področju je enačba enaka tisti pri prostem delcu

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

kjer smo imeli rešitev

$$\psi_1(\mathrm{x}) = \mathrm{A}e^{\mathrm{ikx}} + \mathrm{B}e^{-\mathrm{ikx}}.$$

Na drugem področju pa imamo Hamiltonov operator z naslednjo obliko

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2} + V_0.$$

Schrödingerjeva enačba je tu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+V_0\psi_2=E\psi_2.$$

Celo enačbo pomnožimo z (-2m), delimo s $\hbar^2$, vse prenesemo na eno stran in dobimo

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi_2=0.$$

Če sedaj uvedemo novo spremenljivko $\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}=q^2$, dobimo enačbo iste oblike kot na prvem delu, le namesto k imamo q. Rešitev se sedaj tu zapiše kot

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

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

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

prav tako mora biti odvod v isti točki zvezen

$$\frac{d\psi_1}{dx}(0)=\frac{d\psi_2}{dx}(0).$$

Ta dva pogoja sta posledica zahteve, da se pri gibanju preko ovire na meji ne spremeni število delcev. Ohraniti se mora verjetnost, to pa je možno le v primeru zveznosti in zvezne odvedljivost valovne funkcija. Odvoda valovnih funkcija sta

$$\frac{d\psi_1}{dx}(x)=Aike^{ikx}-Bike^{-ikx}$$

in

$$\frac{d\psi_2}{dx}(x)=Ciqe^{iqx}-Diqe^{-iqx}.$$

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

$$A+B=C+D$$

in

$$ikA-ikB=iqC-iqD.$$

Dodatni pogoj pa postavimo, da je D=0. Če pošiljamo delce iz negativnega dela abscisne osi, nam ta curek delcev določa konstanto A. Ko pride ta curek do potencialnega skoka, se del curka odbije (velikost toka določa konstanta B), del curka pa nadaljuje pot (velikost toka določa konstanta C). Ta curek sedaj v drugem delu nadaljuje svojo pot v smeri pozitivne osi. Ker tu nimamo več nobene ovire, se ta curek nič ne odbije. Prav tako pa nimamo pri velikih x-ih nobenega izvora delcev, ki bi jih pošiljal v nasprotni smeri, tako da mora biti konstanta D enaka 0. Ne moremo namreč imeti na drugem delu toka delcev v smeri proti levi. Enačbi se poenostavita na

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

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

Če zgornjo enačbo pomnožimo z ik in ju seštejemo, se nam členi, ki vsebujejo B, izničijo in dobimo za C

$$\mathrm{C} = \frac{2kA}{k+q}$$

in za B

$$\mathrm{B} = \frac{(k-q)A}{k+q}.$$

Gostota toka delcev iz izvira je

$$j_{1\rightarrow} = \frac{\hbar k|A|^2}{2m},$$

gostota toka, ki se odbije od ovire

$$j_{1\leftarrow} = \frac{\hbar k|B|^2}{2m} = \frac{\hbar k|A|^2(k-q)^2}{2m(k+q)^2}.$$

Upoštevali smo, da je

$$|\mathrm{B}|^2 = \frac{(k-q)^2|A|^2}{(k+q)^2}.$$

Gostota toka delcev, ki prečka potencialni skok, pa je

$$j_{2\rightarrow} = \frac{\hbar q|C|^2}{2m} = \frac{\hbar q|A|^2(2k)^2}{2m(k+q)^2}.$$

Tu smo upoštevali, da velja

$$|\mathrm{C}|^2 = \frac{(2k)^2|A|^2}{(k+q)^2}.$$

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

$$\eta_{od} = \frac{j_{1\leftarrow}}{j_{1\rightarrow}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2}$$

Delež prepuščenega toka, oziroma verjetnost, da delec preide potencialni skok, je

$$\eta_{pre} = \frac{j_{2\rightarrow}}{j_{1\rightarrow}} = \frac{q|C|^2}{k|A|^2} = \frac{4kq}{(k+q)^2}.$$

Vidimo, da velja

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

kar je pravilno, saj noben delec na oviri ne izgine. Opazimo tudi, da se nekaj delcev v curku vedno odbije, kar je v nasprotju z opažanjem pri klasičnih delcih. Kvantni delci se na potencialnem skoku obnašajo kot valovanje in ne kot delci. Del delcev se odbije, podobno, kot se odbije del valovanja pri prehodu iz medija z eno hitrostjo v medij z drugo hitrostjo valovanja. Če povzamemo: pri kvantnih delcih imamo vedno od 0 različno verjetnost, da se delec na potencialnem skoku odbije, četudi ima dovolj energije, da premaga potencialni skok. Pri klasičnih delcih vsi delci preidejo na področje višjega potenciala, če imajo dovolj kinetične energije.

Sedaj si poglejmo še primer, ko je energija delca manjša od potencialnega skoka ($E < V_0$). Na prvem področju imamo isto enačbo in rešitev kot v prvem primeru. Na drugem delu, pa je razlika, ko prenesemo vse na eno stran. Tu dobimo sedaj enačbo

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi_2=0.$$

Če sedaj uvedemo novo spremenljivko $\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} = \chi^2$, dobimo za rešitev neperiodično funkcijo

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

Tudi tu morata biti funkcija in odvod zvezna

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

$$\frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0).$$

Odvod valovnih funkcija na drugem delu je tu

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

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

$$A + B = C + D$$

in

$$ikA - ikB = -\chi C + \chi D.$$

Dodatni pogoj pa postavimo, da je D=0. Člen, ki vsebuje ta koeficient, narašča, ko gremo proti pozitivnim x-om. To pomeni, da bi gostota naraščala pri velikih x-ih, pričakujemo pa, da je gostota pri velikih vrednostih x enaka 0, saj ne pričakujemo delcev na tem delu. Enačbi se poenostavita na

$$A + B = C$$

$$ikA - ikB = -\chi C.$$

Če zgornjo enačbo pomnožimo z ik in ju seštejemo, se nam členi, ki vsebujejo B, izničijo in dobimo za C

$$\mathrm{C} = \frac{2ikA}{ik - \chi}$$

in za B

$$\mathrm{B} = \frac{(ik+\chi)A}{ik-\chi}.$$

Gostota toka delcev iz izvira je

$$j_{1\rightarrow} = \frac{\hbar k|A|^2}{2m},$$

gostota toka, ki se odbije od ovire, pa

$$j_{1\leftarrow} = \frac{\hbar k|B|^2}{2m} = \frac{\hbar k|A|^2}{2m}.$$

Upoštevali smo, da je

$$|\mathrm{B}|^2 = \left|\frac{(ik+\chi)A}{ik-\chi}\right|^2 = \frac{(-ik+\chi)A^*}{-ik-\chi}\frac{(ik+\chi)A}{ik-\chi} = \frac{(k^2+\chi^2)A^*A}{(k^2+\chi^2)} = |A|^2.$$

A^* je tu kompleksno konjugirana vrednost parametra A.

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

$$\eta_{od} = \frac{j_{1\leftarrow}}{j_{1\rightarrow}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1$$

ter delež prepuščenega toka enak 0, kar je pravilno, saj delci nimajo dovolj energije, da bi nadaljevali pot v področje višjega potenciala. Opazimo pa, da imamo na drugem področju valovno funkcijo od nič različno, kar pomeni, da je takšna tudi gostota.

$$\psi_2(\mathrm{x}) = \mathrm{Ce}^{-\chi\mathrm{x}}$$

$$\rho_2(\mathrm{x}) = \psi_2^*\psi_2 = |\mathrm{C}|^2\mathrm{e}^{-2\chi\mathrm{x}}$$

Gostota delcev eksponentno pojema z oddaljenostjo od potencialnega skoka, kar je v nasprotju s klasičnimi delci. Kvantni delci lahko pridejo v področje večjih energij kljub temu, da nimajo dovolj energije. To je možno zaradi Heisenbergove neenakosti

$$\Delta E \Delta t \geq h.$$

Če je čas nahajanja delca nedoločen, je njegova energija tudi nedoločena, in če je nedoločenost časa majhna, potem je nedoločenost energije dovolj velika, da delec pride tudi na področje, za katerega nima dovolj energije. Lahko si predstavljamo, da si je kvantni delec sposoben sposoditi energijo od okolice, da lahko za nekaj časa pride na prepovedano področje. Gostota delcev pa pada z oddaljenostjo od meje. Da se delec lahko nahaja na večji oddaljenosti, potrebuje za to več časa, nedoločenost časa je tu večja, nedoločenost energije pa manjša in s tem je verjetnost, da se delec nahaja pri večjih razdaljah, manjša.