IX Skok potencjału. Bariera potencjału. Zjawisko tunelowania.

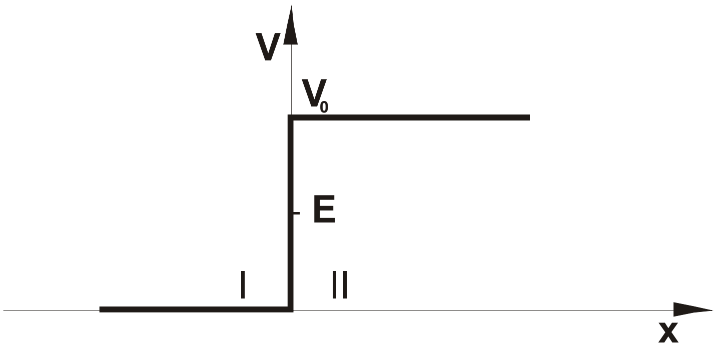
Przedyskutujemy teraz rozwiązania niezależnego od czasu równania Schrödingera dla cząstki, której energię potencjalną można przedstawić w postaci funkcji $V(x)$ mającej różne stałe wartości na kilku kolejnych odcinkach osi x.

By rozwiązanie było fizycznie poprawne, funkcję własną $\Psi(x)$ i ich pochodne $\mathrm{d}\Psi(x)/\mathrm{dx}$ muszą mieć następujące własności:

$\Psi(x)$ musi być skończona,
$\Psi(x)$, $\mathrm{d}\Psi(x)/\mathrm{dx}$ musi być jednoznaczna,
$\Psi(x)$, $\mathrm{d}\Psi(x)/\mathrm{dx}$ musi być ciągła.

Warunki te zapewniają, że funkcje własne są matematycznie „gładkimi" funkcjami, a więc i mierzalne wielkości fizyczne obliczone na podstawie znajomości tych funkcji własnych będą także zmieniać się w sposób gładki.

Skok potencjału



$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

Warunki początkowe: cząsteczka nadlatuje z lewej strony na barierę potencjału od której może się odbić lub wniknąć do obszaru II

1) $\boldsymbol{E < V_0}$

Załóżmy, że cząstka o masie m i całkowitej energii E znajduje się w obszarze $x < 0$ i porusza się w kierunku punktu, w którym $V(x)$ zmienia się skokowo. Według mechaniki klasycznej cząstka będzie się poruszała swobodnie w tym obszarze do chwili, gdy osiągnie punkt $x = 0$, w którym zadziała na nią siła $F(x) = \partial V(x)/\partial x$ działająca w kierunku malejących x. Dalszy ruch cząsteczki zależy, klasycznie biorąc, od związku między E i V_0, co jest również słuszne w mechanice kwantowej.

W celu kwantowego określenia ruchu naszej cząstki musimy znaleźć funkcję falową, która będzie rozwiązaniem równania Schrödingera dla potencjału schodkowego przy energii całkowitej $E<V_0$. Ponieważ mamy do czynienia z

równaniem Schrödingera niezależnym od czasu, problem nasz sprowadza się do rozwiązania go i znalezienia funkcji własnych. Dla takiego potencjału oś x rozpada się na dwa obszary. Równanie Schrödingera w każdym z tych obszarów możemy zapisać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x)\,, \qquad x<0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V_0\Psi(x) = E\Psi(x)\,, \qquad x>0$$

Te dwa równania rozwiązuje się oddzielnie. Wówczas funkcję własną ważną dla całego obszaru x konstruuje się przez połączenie razem w punkcie $x = 0$ tych dwóch rozwiązań w sposób spełniający warunki, które wymagają, aby $\Psi(x)$ i $\mathrm{d}\Psi(x)/\mathrm{dx}$ były wszędzie skończone i ciągłe.

Rozwiązanie pierwszego to:

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Rozwiązanie drugiego:

$$\Psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}\,,$$

ale funkcja musi być ograniczona w ∞ , więc $C = 0$.

Wiemy, że $\qquad \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \quad \Rightarrow \quad A + B = D$

A - określa amplitudę fali padającej
B - amplituda fali odbitej od bariery
D - wiązka przepuszczona przez barierę

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \quad \Rightarrow \quad ik_1(A-B) = -k_2D$$

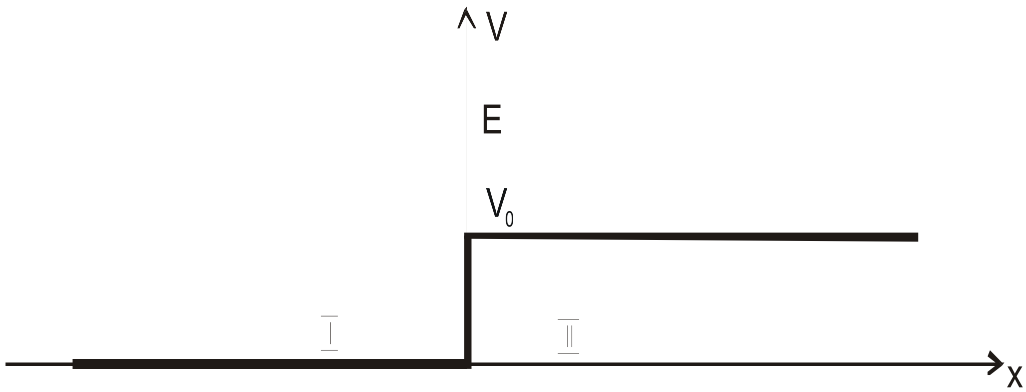
Rozwiązując ten układ równań otrzymujemy :

$$\frac{A}{B} = \frac{k_1 - i\,k_2}{k_1 + i\,k_2} \qquad ; \qquad \frac{D}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + i\,k_2}$$

Można obliczyć tzw. **współczynnik odbicia** $R = \dfrac{B^*B}{A^*A} = 1$. Oznacza to, że fala zostanie odbita całkowicie, ale nie od krawędzi progu, tylko wniknie nieco w głąb.

Oblicza się także tzw. **współczynnik wnikania** $\frac{D^*D}{A^*A}$, którego niezerowa wartość oznacza, że cząsteczka wnika do bariery, a gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząsteczki w obszarze zabronionym maleje wykładniczo z *x*.

2) $E > V_0$



Całe rozumowanie przeprowadzamy podobnie jak poprzednio.

Rozwiązanie:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \cdot e^{ik_1 x} + B \cdot e^{-ik_1 x} \\ C \cdot e^{ik_2 x} + D \cdot e^{-ik_2 x} \end{cases} \quad ; \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad ; \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_{0)}}}{\hbar}$$

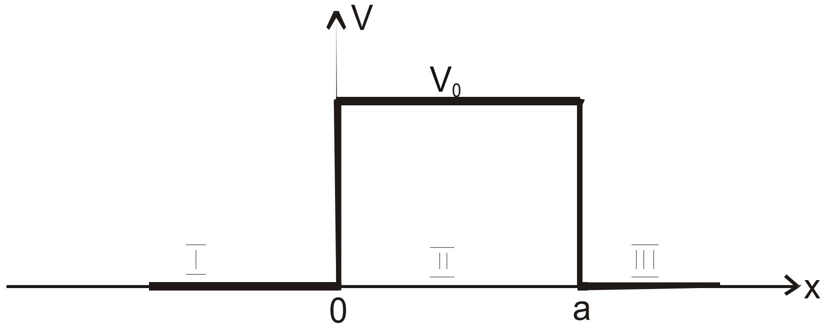
Z warunków brzegowych przyjmujemy D=0 , gdyż w obszarze II fala nie ma od czego się odbić i porusza się tylko w prawo

$$\begin{cases} A + B = C \\ k_1(A - B) = k_2 C \end{cases} \quad \Rightarrow \quad B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \qquad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

Ponieważ $|B|^2 \neq 0$ kwantowo istnieje nieznikająca wiązka odbita, mimo, iż klasycznie cząsteczka w całości przechodzi do obszaru II.
Jeżeli $E >> V_0$ to $k_1 \approx k_2$ i $A \approx 0$ oraz $B \approx 1$, co oznacza, że cząsteczka zachowuje się zgodnie z przewidywaniami klasycznymi.
Jeżeli jednak $V_0 < 0$ i $E_0 << |V_0|$ (skok potencjału silnie ujemny) to $k_1 << k_2$ oraz $A \approx 1$ i $B \approx 0$; następuje całkowite odbicie wiązki padającej (w przeciwieństwie do mechaniki klasycznej, która przewiduje całkowite przejście wiązki do obszaru II). Ten efekt kwantowy obserwuje się w fizyce jądrowej, np. wtedy, gdy padający neutron o niewielkiej energii ulega odbiciu napotykając silny potencjał przyciągający przy zbliżaniu się do powierzchni jądra.

Bariera potencjału

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



(cząsteczki nadlatują z lewej strony)

Rozwiązaniem równania Schrödingera ($E<V_0$) są w każdym z obszarów odpowiednie funkcje:

$$\Psi_1(x) = A \cdot e^{ik_1 x} + B \cdot e^{-ik_1 x} \qquad x < 0 \qquad k_1 = \frac{-\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Psi_2(x) = D \cdot e^{-k_2 x} + F \cdot e^{k_2 x} \qquad 0 < x < a \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\Psi_3(x) = C \cdot e^{ik_1 x} \qquad x > a$$

Należy zapisać warunki ciągłości na funkcje falową i jej pochodną w punktach $x = 0$ i $x = a$. Otrzymujemy cztery równania na współczynniki B, C, D, F wyrażone od amplitudy fali padającej A.

W przypadku bariery mamy do czynienia z ciekawym zjawiskiem - **tunelowaniem.** Polega ono na tym, że istnieje pewne niezerowe prawdopodobieństwo znalezienia cząstki po drugiej stronie bariery potencjału, mimo że $E<V_0$. W rzeczywistości zjawisko tunelowania obserwowane jest w dobrze wszystkim znanym zjawisku: dwa skręcone druty przewodzą prąd pomimo, że na ich powierzchni często znajdują się tlenki i zabrudzenia, które są dobrymi izolatorami. Elektrony tunelują przez tę barierę i prąd może płynąć. Zjawisko tunelowania wykorzystano w tzw. diodach tunelowych. Zjawisko tunelowania obserwujemy również w czasie rozpadów promieniotwórczych.