

A VEZÉRHULLÁMTÓL AZ ALAGÚTHATÁSIG

1	A diszperziós reláció	2
2	Az időtől függő Schrödinger-egyenlet (dinamikai egyenlet).....	2
3	Az időtől függő Schrödinger-egyenlet szeparálása - A stacionárius Schrödinger-egyenlet	3
4	Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása konstans potenciális energia esetén - A megoldás értelmezése	3
4.1	Az időfüggést leíró differenciálegyenlet megoldása	3
4.2	A helyfüggést leíró differenciálegyenlet megoldása	4
4.3	Az állapotfüggvény fizikai jelentése	4
4.4	Regularitási feltételek	5
5	Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet alkalmazása.....	5
5.1	Potenciálvölgy	5
5.2	Az 1 dimenziós potenciáldoboz	6
5.3	Potenciálgát, alagúteffektus	8
5.4	Valószínűségi áramsűrűség, transzmissziós tényező	9

1 A diszperziós reláció

1924-ben Louis de Broglie doktori disszertációjában azt javasolta, hogy minden mv impulzusú anyagi részecskéhez rendeljünk hozzá egy hullámot, amelynek hullámhossza

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}$$

ahol λ az ún. de Broglie-hullámhossz, h a Planck-féle állandó ($6,626 \cdot 10^{-34}$ Js), m a részecske tömege, v pedig a sebessége, p az impulzusa. Ezt a hullámot vezérhullának nevezte. Az x irányba haladó hullám a

$$\psi(x, t) = A e^{(kx - \omega t)}$$

időtől és helytől függő függvénnyel írható $e^{i(kx - \omega t)}$, ahol A egy konstans amplitúdó, k a hullámszám, ω a körfrekvencia. Ez az ún. állapotfüggvény, amelynek összenergiája az

$$\sum E = \hbar \omega$$

összefüggésből számítható, ahol $\hbar = h/2\pi$, a redukált Planck-állandó. Mivel szabadon mozgó részecskéről van szó, ezért a potenciális energiát nullának tekintjük. Ekkor a részecske, mint rendszer energiájára a következő összefüggés írható fel, felhasználva a mozgási energia klasszikus fizikából ismert definícióját és a de Broglie hullámhosszat:

$$\begin{aligned} \sum E &= E_{\text{kinetikus}} + E_{\text{potenciális}} \\ \hbar \omega &= \frac{p^2}{2m} \\ \hbar \omega &= \frac{\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned} \quad (1)$$

Ez utóbbi összefüggésből látható, hogy az mv impulzussal rendelkező részecskéhez rendelt hullám körfrekvenciája és hullámszáma közötti összefüggés nem lineáris, a hullám tehát diszperzív (a (1) összefüggés az ún. diszperziós reláció). A diszperziós relációt kiterjeszthetjük konstans potenciális energia (V_0) esetére is, ekkor

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

2 Az időtől függő Schrödinger-egyenlet (dinamikai egyenlet)

Láttuk, hogy az anyagi részecskékhez rendelt síkhullám diszperzív hullám. Fejezzük ki az ω körfrekvenciát és a k hullámszámot az állapotfüggvény deriváltjaival:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dt} = -j\omega\psi &\rightarrow \omega = -\frac{1}{j} \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dt} \rightarrow \hbar \omega = -\frac{\hbar}{j} \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dt} \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi &\rightarrow k^2 = -\frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} \rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} \end{aligned}$$

A diszperziós relációból tehát a következő differenciálegyenlet adódik:

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

¹ Az elektron korpuszkuláris jellegét számtalan kísérlet bizonyítja. A síkhullám azonban egy térben kiterjedt objektum. Ezt az ellentmondást úgy oldhatjuk fel, ha az elektronhoz nem egyetlen síkhullámot, hanem egy hullámcsomagot rendelünk, amely nem más, mint különböző hullámszámú síkhullámok szuperpozíciója. A megfelelő (hullámszám)spektrum kiválasztásával elérhető, hogy az eredő hullám térben lokalizált legyen.

$$-\frac{\hbar}{j} \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0 \quad /* \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{d\psi}{dt} \quad (2)$$

A (2) egyenlet az időtől függő Schrödinger-egyenlet egy dimenzióban, konstans potenciális energia esetén. Általánosítsuk az összefüggést három dimenzióra és tetszőleges, időtől és helytől egyaránt függő potenciális energiára:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}, t)\psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{d\psi}{dt}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(\vec{r}, t)\psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{d\psi}{dt}$$

3 Az időtől függő Schrödinger-egyenlet szeparálása - A stacionárius Schrödinger-egyenlet

Az időtől függő Schrödinger-egyenlet időtől független potenciális energia esetén (konzervatív rendszer) szeparálható, tehát a megoldás felírható egy csak helytől és egy csak időtől függő függvény szorzataként. ($\psi(x, t) = \Phi(x)\tau(t)$) Szeparáljuk az időtől függő Schrödinger-egyenletet konstans potenciális energia esetén, egy dimenzióban:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{d\psi}{dt}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2(\Phi\tau)}{dx^2} + V_0\Phi\tau = -\frac{\hbar}{j} \frac{d(\Phi\tau)}{dt}$$

Mivel $\Phi(x)$ független az időtől, $\tau(t)$ pedig a helykoordinátától, ezért

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} \tau + V_0\Phi\tau = -\frac{\hbar}{j} \frac{d\tau}{dt} \Phi \quad /* \frac{1}{\Phi\tau}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} \frac{1}{\Phi} + V_0 = -\frac{\hbar}{j} \frac{d\tau}{dt} \frac{1}{\tau}$$

Látható, hogy a kapott összefüggés bal oldala csak x -től, jobb oldala csak t -től függ. A két oldal csak úgy lehet egyenlő, ha mindkét oldal ugyanazzal a konstanssal egyenlő. Ez a konstans a rendszer összenergiája: E

$$-\frac{\hbar}{j} \frac{d\tau}{dt} = E\tau$$

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

Ez utóbbi összefüggés nem más, mint az időtől függő (stacionárius) Schrödinger-egyenlet. Általánosítsuk az összefüggést tetszőleges, helytől függő potenciális energiára és három dimenzióra:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Phi + V(\vec{r})\Phi = E\Phi$$

4 Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása konstans potenciális energia esetén - A megoldás értelmezése

4.1 Az időfüggést leíró differenciálegyenlet megoldása

Az állapotfüggvény időfüggését leíró differenciálegyenlet egy elsőrendű, állandó együtthatós, lineáris differenciálegyenlet, amely egyszerű integrálással megoldható:

$$-\frac{\hbar}{j} \frac{d\tau}{dt} = E\tau$$

$$\int \frac{1}{\tau} d\tau = -j \frac{E}{\hbar} \int dt$$

$$\ln(|\tau|) + C = -j \frac{E}{\hbar} t$$

$$\tau = e^{-j \frac{E}{\hbar} t + C} = C e^{-j \frac{E}{\hbar} t}$$

A $\tau(0) = I$ kezdeti feltételnek eleget tevő megoldás tehát:

$$\tau(t) = e^{-j \frac{E}{\hbar} t} \quad (3)$$

Az időfüggést leíró differenciálegyenletben nem szerepel a potenciális energia. Tehát a (3), időbeli viselkedést leíró függvény tetszőleges potenciálviszonyok között ilyen alakú lesz.

4.2 A helyfüggést leíró differenciálegyenlet megoldása

Konstans potenciális energia esetén a helyfüggést leíró differenciálegyenlet (1 dimenzióban) a következő:

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

Ez az egyenlet egy másodrendű, állandó együtthatós, lineáris differenciálegyenlet, amelynek megoldásai exponenciális függvények. Az általános megoldást tehát

$$\Phi(x) = Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x}$$

alakú, ahol λ_1 és λ_2 a differenciálegyenlet karakterisztikus egyenletének gyökei. Némi átrendezés után a karakterisztikus egyenlet könnyen felírható:

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

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\Phi = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) = 0$$

A karakterisztikus egyenlet gyökei:

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad \lambda_2 = -\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Az általános megoldás tehát:

$$\Phi(x) = Ae^{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} x} + Be^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} x}$$

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet teljes megoldása tehát (konstans potenciális energia esetén, 1 dimenzióban):

$$\psi(x, t) = \left(Ae^{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} x} + Be^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} x} \right) e^{-j \frac{E}{\hbar} t}$$

4.3 Az állapotfüggvény fizikai jelentése

A kvantummechanikára általánosságban igaz az, hogy csak valószínűségi kijelentéseket tesz. Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldását a következőképpen értelmezzük: A $\Phi(x)$ állapotfüggvény egy valós változós komplex értékű függvény. E függvény abszolútértékének négyzetét integrálva a vizsgált térrészre megkapjuk annak a valószínűségét, hogy a részecske az adott térrészben megtalálható (Max Born, 1926):

$$P(\text{részecske} \in V) = \int_V |\Phi|^2 dV$$

Az integrandus neve megtalálási valószínűség-sűrűség. A valószínűségi értelmezésből következik egy ún. normálási feltétel, amely azt mondja ki, hogy a részecske mindenképpen megtalálható valahol a térben:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi|^2 dV = 1$$

4.4 Regularitási feltételek

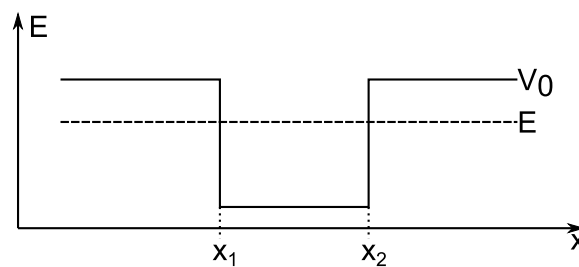
Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásai csak olyan függvények lehetnek, amelyek

- négyzetesen integrálhatók: a valószínűségi értelmezésből következik
- egyértékűek: ezt a klasszikus fizikában már megszokhattuk
- folytonosan deriválhatók: az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet másodrendű deriváltakat is tartalmaz

5 Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet alkalmazása

5.1 Potenciálvölgy

Oldjuk meg az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet az 1. ábra szerinti potenciálviszonyokra:



1. ábra

Induljunk ki a konstans potenciálokra igaz általános megoldásból, és használjuk fel a regularitási feltételeket is. Ekkor

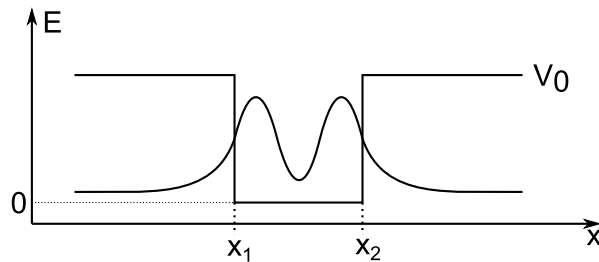
$$\text{ha } x < x_1: \lim_{x \rightarrow -\infty} \Phi(x) = 0 \rightarrow \Phi(x) = A e^{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}x}$$

$$\text{ha } x \in (x_1; x_2): V_0 = 0 \rightarrow \Phi(x) = A e^{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}x} + B e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}x} = A e^{j\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}Ex} + B e^{-j\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}Ex} =$$

$$A \sin\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}Ex\right) + B \cos\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}Ex\right)$$

$$\text{ha } x > x_2: \lim_{x \rightarrow \infty} \Phi(x) = 0 \rightarrow \Phi(x) = B e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}x}$$

A potenciálvölgy határain a regularitási feltételeknek megfelelően kell illeszteni egymáshoz az egyes tartományokra kapott megoldásokat. Az állapotfüggvénynek és deriváltjának egyaránt folytonosnak kell lennie. Ezek alapján a megoldás a 2. ábrának megfelelő alakú lesz:



2. ábra

5.2 Az 1 dimenziós potenciáldoboz

Ha a potenciálvölgy fala végtelenül magas, akkor a megoldás a következőképpen alakul:

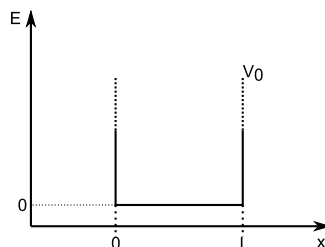
$$\text{ha } x < x_1 \text{ vagy } x > x_2: \Phi(x) \equiv 0$$

$$\text{ha } x \in (x_1; x_2): V_0 = 0 \rightarrow \Phi(x) = A \sin\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} Ex\right) + B \cos\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} Ex\right)$$

A teljes megoldás csak akkor lesz folytonos, ha a potenciálgödör két szélén az állapotfüggvény nulla (Ebben az esetben reményünk sincs arra, hogy az állapotfüggvényt amplitúdóban és deriváltban is illesszük a tartományok határán. A végtelen mély potenciálgödör esetén tehát nincsen folytonosan deriválható reguláris megoldás, ami egyszerűen abból következik, hogy végtelen mély potenciálgödör sem létezik.):

$$\Phi(x_1) = \Phi(x_2) = 0 \rightarrow \Phi(x) = A \sin\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} Ex\right)$$

Vegyük fel a koordináta-rendszert úgy, hogy az x_1 pont az origó-ba essen, továbbá vezessük be a potenciálgödör szélességét jelölő L változót:



3. ábra

Tudjuk, hogy $x = L$ -ben az állapotfüggvény értéke nulla. Számítsuk ki, hogy ez a feltétel mely E energiaszintek esetén teljesül:

$$A \sin\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} EL\right) = 0$$

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} EL = n\pi$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} EL^2 = n^2 \pi^2$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

Az állapotfüggvény alakja tehát:

$$\Phi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Az A amplitúdó értékét a valószínűségi értelmezésből adódó feltételből számíthatjuk ki. A részecske megtalálási valószínűsége a teljes térben biztosan 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi|^2 dx = 1$$

Mivel a potenciáldobozon kívül az állapotfüggvény mindenütt nulla, ezért

$$\int_0^L |A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)| dx = 1$$

$$\frac{A^2}{2} \int_0^L \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right] dx = 1$$

$$\frac{A^2}{2} \left[\int_0^L 1 dx - \int_0^L \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right) dx \right] = 1$$

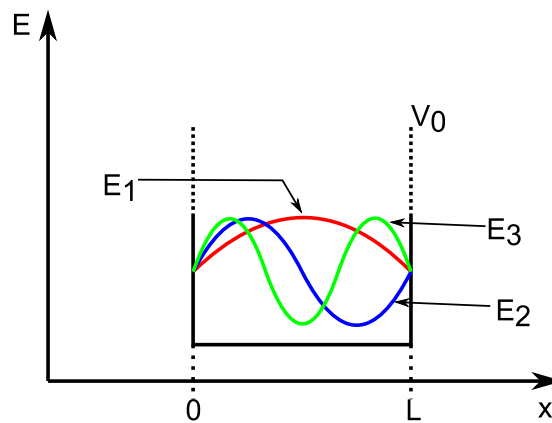
$$\frac{A^2}{2} \left[[x]_0^L - \left[\frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)}{\frac{2n\pi}{L}} \right]_0^L \right] = 1$$

$$\frac{A^2}{2} [L - 0] = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Az állapotfüggvény és a lehetséges energiaszintek végtelen magas potenciáldoboz esetén tehát a következők:

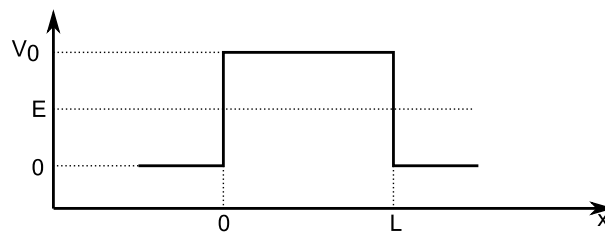
$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$



4. ábra

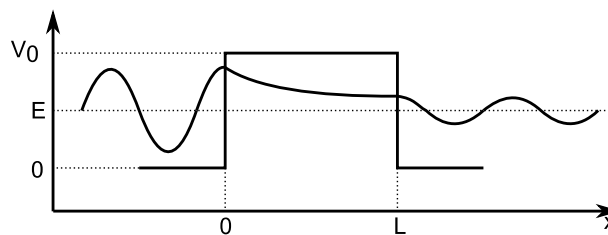
5.3 Potenciálgát, alagúteffektus

Vizsgáljuk az állapotfüggvény alakulását a következő potenciálviszonyokra:



5. ábra

Az 5.1. pontban láttuk, hogy ha a részecske energiája nagyobb, mint a potenciális energia, akkor az állapotfüggvény szinuszos, ellenkező esetben exponenciális. Ezek alapján a potenciálgát esetére az állapotfüggvény kvalitatív alakja felrajzolható:



6. ábra

A 6. ábrán megfigyelhető, hogy az $x < 0$ tartomány felől érkező részecske megtalálási valószínűsége a potenciálgát jobb oldalán is egy véges érték lesz. A klasszikus fizika törvényeivel ez nem magyarázható. Az effektus neve alagúthatás. A következő pontban számszerűen meghatározzuk az alagutazás valószínűségét, a transzmissziós tényezőt.

5.4 Valószínűségi áramsűrűség, transzmissziós tényező

Az állapotfüggvény abszolútértékének négyzeteként definiált megtalálási valószínűség-sűrűség az energiához és a töltéshez hasonlóan megmaradó mennyiség. Ebből következőn felírható rá egy kontinuitási egyenlet:

$$\frac{dJ}{dx} = -\frac{d}{dt}|\Phi|^2$$

Három dimenzióra általánosítva:

$$\text{div}(J) = -\frac{d}{dt}|\Phi|^2$$

A részecske állapotát az időfüggő Schrödinger-egyenlet írja le, ezért a kontinuitási egyenletben szereplő J , ún. valószínűségi áramsűrűséget is a dinamikai egyenlet definiálja:

$$J = \frac{\hbar}{2mj} \left(\Phi^* \frac{d\Phi}{dt} - \Phi \frac{d\Phi^*}{dt} \right)$$

Szabadon mozgó részecske állapotfüggvénye egy síkhullám:

$$\Phi(x) = Ae^{ikx}$$

Ebben az esetben a valószínűségi áramsűrűség a következő:

$$J = \frac{\hbar}{2mj} \left(\Phi^* \frac{d\Phi}{dt} - \Phi \frac{d\Phi^*}{dt} \right) = \frac{\hbar}{2mj} (A^* e^{-jkx} jkAe^{jkx} + Ae^{jkx} jkA^* e^{-jkx}) = \frac{\hbar}{2mj} (|A|^2 k + |A|^2 k) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 = \frac{p}{m} |A|^2 = v|A|^2$$

Mindezek alapján kiszámíthatjuk a potenciálgáton való áthaladás valószínűségét. A 6. ábrán látható állapotfüggvény az $x < 0$ tartományból érkező, és a potenciálgáton átalagutazó részecske valószínűségi áramsűrűségét írja le. Az $x < 0$ tartományban beeső és visszaverődő áramsűrűségről, míg a potenciálgát jobb oldalán továbbhaladó áramsűrűségről beszélhetünk. Az átjutás valószínűségét a következőképpen definiáljuk:

$$T = \frac{J_{\text{továbbhaladó}}}{J_{\text{beeső}}} = \frac{v_{\text{továbbhaladó}} |A_L|^2}{v_{\text{beeső}} |A_0|^2}$$

Mivel a részecske energiája - ezáltal sebessége - változatlan az átalagutazás során, ezért

$$T = \frac{|A_L|^2}{|A_0|^2}$$

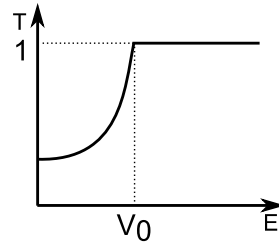
A potenciálgát bal és jobb oldalán egyaránt szabad részecskéről van szó, lévén a potenciális energia nulla. A regularitási feltételeknek megfelelően az állapotfüggvénynek folytonosnak kell lennie, így a transzmissziós tényező felírható a potenciálgát belsejében érvényes megoldás segítségével is:

$$T = \frac{|A_L|^2}{|A_0|^2} = \left| \frac{\Phi_{\text{gáton belül}}(L)}{\Phi_{\text{gáton belül}}(0)} \right|^2 = \left| \frac{\mathbf{B} e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}L}}{\mathbf{B} e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}0}} \right|^2 = e^{-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}L}$$

Tetszőleges alakú potenciálgáton való átjutás valószínűsége visszavezethető végtelenül kis szélességű, négyzetes potenciálgáton való átjutási valószínűségek szorzatára:

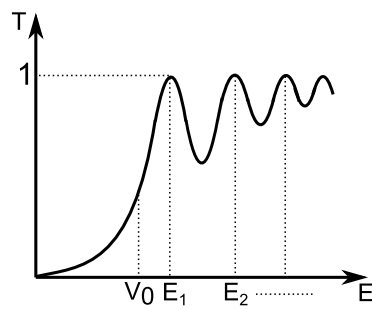
$$T = \prod \left[e^{-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}dx} \right] = e^{-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{V(x)-E} dx}$$

A transzmissziós tényező a részecske energiájának függvényében:



7. ábra

A 7. ábrán látható görbe az átalagutazás valószínűségének csak közelítő számítására alkalmas (GAMOW-közelítés). Ez annak a következménye, hogy a levezetés során csak az állapotfüggvénynek a folytonosságát követeltük meg, a deriváltét nem. Ha a derivált folytonosságát is megköveteljük, akkor a transzmissziós tényező energiatfüggése a következőképpen néz ki:



8. ábra