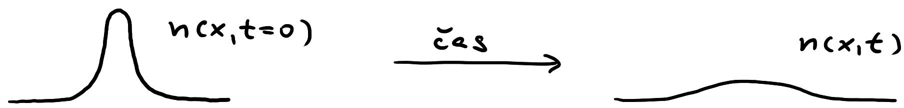
Schrödingerova rovnice v 1D – rozptylové stavy

1 Tok pravděpodobnosti a rovnice kontinuity

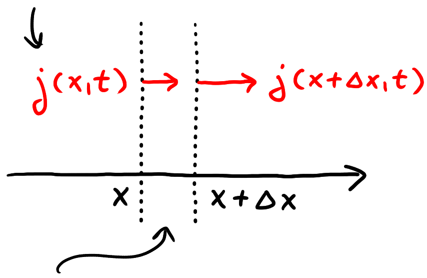
- motivační připomínka difúze a rovnice kontinuity



– koncentrační profil difundující substance

– odvození rovnice kontinuity:

tok v místě x a čase t



aktuální množství

$n(x,t)\Delta x$

změna množství substance $n\Delta x$ za čas Δt

$$n(x,t+\Delta t)\Delta x - n(x,t)\Delta x = j(x,t)\Delta t - j(x+\Delta x,t)\Delta t$$

přítoče   odteče

$$\downarrow$$

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\Delta t\right)\Delta x = \left(-\frac{\partial j}{\partial x}\Delta x\right)\Delta t \quad \rightarrow \quad \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

(1D rovnice kontinuity)

– získali jsme 1D rovnici kontinuity, její 3D verze zní $\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j} = 0$

– v dalším odvodíme rovnici kontinuity pro hustotu pravděpodobnosti $|\psi|^2$ a odhalíme tok $\vec{j}$

- formální cesta k rovnici kontinuity – sledujeme časovou derivaci $|\psi|^2$ a zapojíme Sch.r.

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$

časové derivace ψ si obstaráme z nestacionární Schrödingerovy rovnice a komplexně sdružené

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi \quad \xrightarrow{*} \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi + V\psi^*\psi\right) - \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^* + V\psi\psi^*\right) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi\right)$$

pomocná úprava

$$\nabla\cdot(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) = \nabla\psi\cdot\nabla\psi^* + \psi\overbrace{\nabla\cdot\nabla\psi^*}^{\nabla^2\psi^*} - \nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - \psi^*\overbrace{\nabla\cdot\nabla\psi}^{\nabla^2\psi} = \psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi$$

vyšla **rovnice kontinuity** ve tvaru $\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \nabla\cdot\vec{j} = 0$

s **tokem hustoty pravděpodobnosti** $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$

Př. pro $\psi(\vec{r},t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ s homogenní $|\psi|^2 = |A|^2$:

$$\left.\begin{aligned}\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi &= ik|A|^2\\ \psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^* &= -ik|A|^2\end{aligned}\right\} \quad j = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

(lze číst jako rychlost × $|\psi|^2$)

- úhrnná pravděpodobnost

Schrödingerova rovnice zachovává úhrnnou pravděpodobnost (= unitární časový vývoj)

odvození:

$$\frac{d}{dt}\underbrace{\iiint |\psi|^2\, d^3\bar{r}}_{\text{přes všeobjímající oblast}} = \iiint \frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}\, d^3\bar{r} \underset{\text{rovnice kontinuity}}{\overset{\uparrow}{=}} \iiint -\nabla\cdot\bar{j}\; d^3\bar{r} \underset{\text{Gaussova věta}}{\overset{\uparrow}{=}} -\oint\!\!\oint \bar{j}\cdot d\bar{S}$$

hranice oblasti jsou dostatečně vzdáleny → $\bar{j}=0$ a úhrnná P má tedy nulovou $\frac{d}{dt}$

→ je-li $\iiint |\psi|^2 d^3\bar{r} = 1$ na počátku, bude řešení Sch.r. $\psi(\bar{r},t)$ normované již navždy

2 Rozptylové stavy v 1D – obecný pohled

motivace: – studium chování částic dopadajících na různé potenciálové bariéry

– vyzdvihneme tunelování, tj. průnik bariérou, kterou by klas. částice nepřekonala

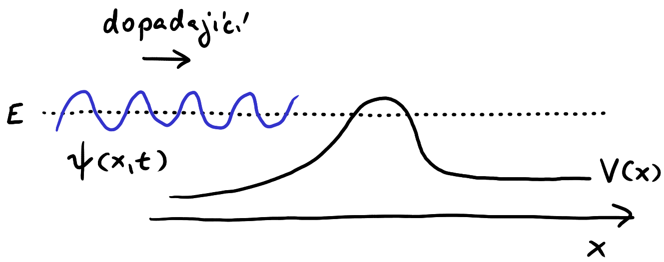
Př. tunelování elektronů oxidovou vrstvou na drátu, α – rozpad jádra

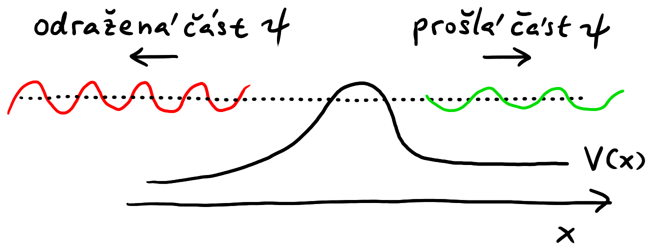
daleko od bariéry je dopadající, odražená a případně prošlá částice popsána $\psi(x,t)$ podobnou vlně (jako u volné částice), E tedy musí ležet nad asymptotickou hodnotou potenciálu (stačí z jedné strany)

Př. $E > V_{-\infty}, V_{\infty}$ – dopad možný zleva i zprava, nastane odraz i průchod

$E > V_{-\infty}$ ale $E < V_{\infty}$ – dopad možný jen zleva, dojde jen k odrazu

vlnové komponenty rozptylového stavu s určitou E – vlnová funkce $\psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$





– nelze normovat ($\int|\psi|^2dx$ diverguje), musel by se složit balík, pak ovšem zastoupeny různé energie E

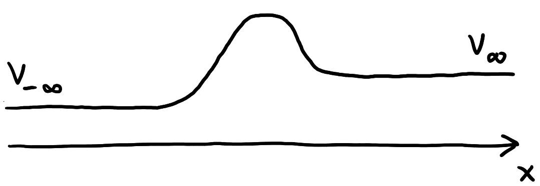
- kvantifikace rozptylu – způsob využívající stacionární stavy vlnové povahy

pracujeme se stacionární Schrödingerovou rovnicí, v ní zvolíme energii dopadající částice E nad asymptotickou hodnotou potenciálu a hledáme stacionární stav s asymptotickým chováním následujícího typu (zde střílíme zleva a $E > V_{-\infty}, V_{\infty}$)

dopadající + odražená

$$\psi(x) \to e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

$$k = \frac{\sqrt{2m(E-V_{-\infty})}}{\hbar}$$

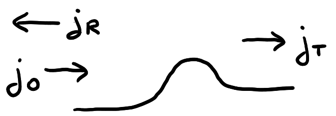


prošlá

$$\psi(x) \to Te^{ik'x}$$

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_{\infty})}}{\hbar}$$

- koeficienty R a T závisí na E (nebo k) a získáme je řešením stacionární Sch.r.
- v situaci s kontinuálně dopadající vlnou určíme pravděpodobnost průchodu a odrazu na základě toků hustoty pravděpodobnosti (nemáme „kopečky" v $|\psi|^2$ jako v animaci)

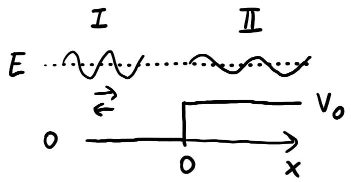


$$P(\text{odraz}) = P_R = \frac{j_R}{j_0} = |R|^2 \qquad P(\text{průchod}) = P_T = \frac{j_T}{j_0} = \frac{k'}{k}|T|^2$$

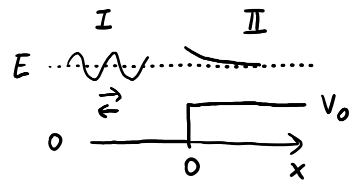
(pro rovinnou vlnu je $j = \frac{\hbar}{m} k \, |\text{amplituda}|^2$)

3 Potenciálový schod (velmi jednoduché díky jediné dvojici „sešívacích" podmínek)

1) $E > V_0$



2) $E < V_0$



1):

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

$$\psi_{II}(x) = T e^{ik'x} \quad \text{(jen prošlá vlna)}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

2):

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

$$\psi_{II}(x) = T e^{-\varkappa x} \quad (\text{nulový tok } j_T \to P_T = 0)$$

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

Ad 1)

$$\left.\begin{array}{ll} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) & 1+R = T \\ \psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) & ik(1-R) = ik'T \end{array}\right\} \quad 2 = \left(1+\frac{k'}{k}\right)T \;\to\; T = \frac{2k}{k+k'}$$

$$R = 1 - T = \frac{k'-k}{k+k'}$$

pravděpodobnosti:

$$\left.\begin{array}{l} P_T = \frac{k'}{k}|T|^2 = \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{4}{\left(\sqrt{\frac{k}{k'}}+\sqrt{\frac{k'}{k}}\right)^2} \\ P_R = |R|^2 = \frac{(k'-k)^2}{(k+k')^2} \end{array}\right\} \quad P_T + P_R = 1 \quad (\text{zachování } P)$$

explicitní výraz pro propustnost

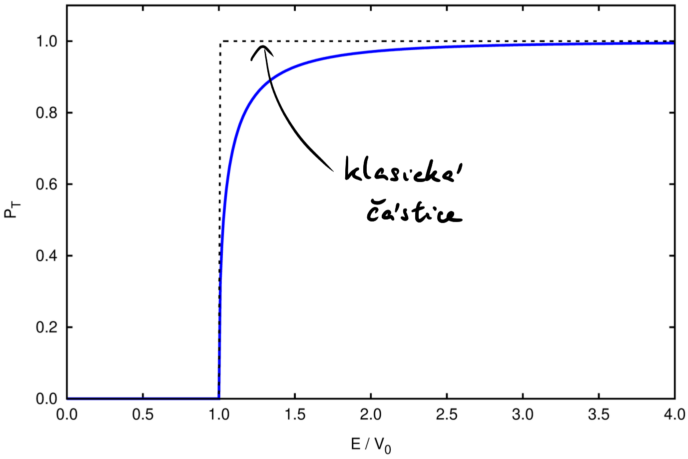
$$P_T(E>V_0) = \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{4}{\frac{k}{k'}+\frac{k'}{k}+2} = \frac{2}{1+\frac{k^2+k'^2}{2kk'}} = \frac{2}{1+\frac{E-\frac{V_0}{2}}{\sqrt{E(E-V_0)}}} = \frac{2}{1+\frac{1-\frac{\alpha}{2}}{\sqrt{1-\alpha}}} \qquad \alpha = \frac{V_0}{E} < 1$$

Ad 2)

$$\left.\begin{array}{ll} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) & 1+R = T \\ \psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) & ik(1-R) = \varkappa T \end{array}\right\} \quad 1 + R - \frac{ik}{\varkappa}(1-R) = 0$$

$$\to R = \frac{\frac{ik}{\varkappa}-1}{\frac{ik}{\varkappa}+1} \qquad P_R = |R|^2 = \frac{\left|\frac{ik}{\varkappa}-1\right|^2}{\left|\frac{ik}{\varkappa}+1\right|^2} = 1$$

pravděpodobnost odrazu musí v tomto případě vyjít rovna jedné a skutku vyšla výsledný graf propustnosti



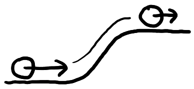
srovnání s chováním klasické částice

1) $E < V_0$ odpovídá situaci

$E_k < mgh$

vždy se vrátí zpět $\rightarrow$ $P_T = 0$

2) $E > V_0$ odpovídá situaci

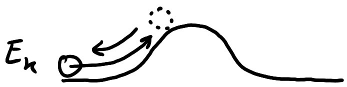


$E_k > mgh$

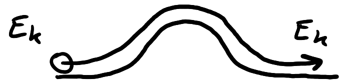
vyjede do kopce a pokračuje dále $\rightarrow$ $P_T = 1$

4 Tunelový jev

– průnik kvantové částice bariérou, kterou by klasická částice nepřekonala kvůli nedostatku energie

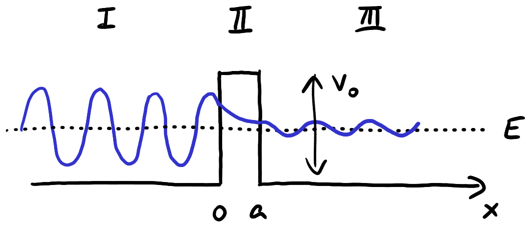


$\updownarrow$ $mgh > E_k$



$\updownarrow$ $mgh < E_k$

- sestavení příslušného řešení stacionární Sch. rovnice



bariéra s výškou $V_0 > E$, vlnová funkce prosakne napravo

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + R\,e^{-ikx}$$

$$\psi_{II}(x) = A\,e^{\varkappa x} + B\,e^{-\varkappa x}$$

$$\psi_{III}(x) = T e^{ik(x-a)}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

„sešívací" podmínky spojitosti a hladkosti

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) : \quad 1 + R = A + B$$

$$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) : \quad ik(1-R) = \varkappa(A-B)$$

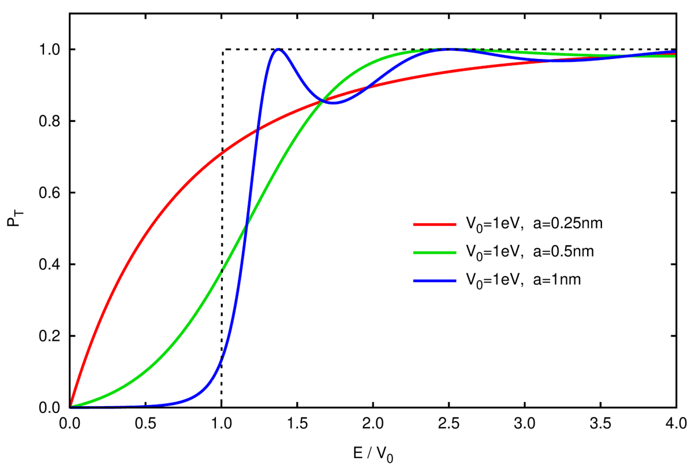
$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) : \quad A e^{\varkappa a} + B e^{-\varkappa a} = T$$

$$\psi_{II}'(a) = \psi_{III}'(a) : \quad \varkappa(A e^{\varkappa a} - B e^{-\varkappa a}) = ikT$$

pro libovolné E lze nalézt koeficienty R, T, A, B, z koeficientu T se určí

- pravděpodobnost průchodu (detailně na cvičení)

$$P_T = |T|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{\varkappa}{k} + \frac{k}{\varkappa}\right)^2 \sinh^2 \varkappa a}$$



- pro málo proniknutelnou bariéru ($\varkappa a >> 1$) klesá pravděpodobnost exponenciálně, v tomto režimu aproximujeme:

$$\sinh^2 \varkappa a = \frac{1}{4}\left(e^{\varkappa a} + e^{-\varkappa a}\right)^2 \approx \frac{1}{4} e^{2\varkappa a}$$

jedničku ve jmenovateli oproti $e^{2\varkappa a}$ zanedbáme

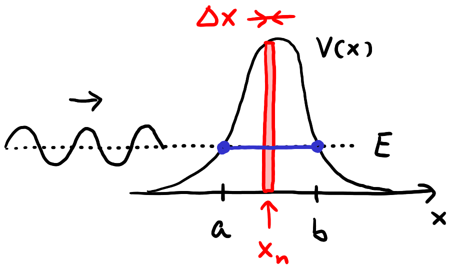
$$P_T \approx \frac{16}{\left(\frac{\varkappa}{k}+\frac{k}{\varkappa}\right)^2}\, e^{-2\varkappa a}$$

dále pro jednoduchost nahradíme prefaktor jedničkou (je to hrubé, ale pro řádový odhad vyhovující)

s těmito zjednodušeními: $P_T \approx e^{-2\varkappa a} = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\,a}$

- výraz odvozený pro pravoúhlou bariéru často nedá ani řádově správný odhad pro realistické průběhy potenciálových bariér, v dalším pro tyto případy odvodíme Gamowovu formuli

• **Gamowova formule** – odhad, ale pro málo propustné bariéry poměrně uspokojivý



bariéru v klasicky nedostupné oblasti ($E < V(x)$) nahradíme sadou N tenkých pravoúhlých bariér s výškami kopírujícími $V(x)$

šířka elem. bariér

$$\Delta x = \frac{b-a}{N}$$

střední polohy bariér

$$x_n = a + \left(n-\tfrac{1}{2}\right)\Delta x \qquad n = 1,2,3,\dots N$$

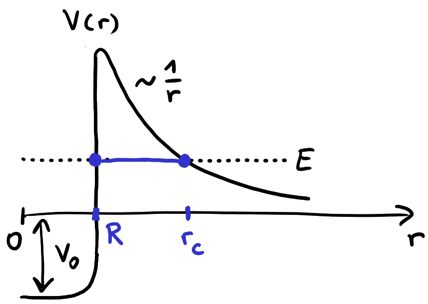
propustnost sady bariér odhadneme jako součin jednotlivých propustností aproximovaných $e^{-2\varkappa\Delta x}$

$$P_T \approx \prod_{n=1}^{N} P_T\left(x_n-\frac{\Delta x}{2},\, x_n+\frac{\Delta x}{2}\right) \approx \prod_{n=1}^{N} e^{-2\varkappa_n \Delta x} = \prod_{n=1}^{N} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m\left[V(x_n)-E\right]}\,\Delta x} =$$

$$= \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\sqrt{2m\left[V(x_n)-E\right]}\,\Delta x\right\} \rightarrow \quad P_T \approx \exp\Big\{\underbrace{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m\left[V(x)-E\right]}\,dx}_{G \quad \text{Gamowův faktor}}\Big\}$$

Př. α-rozpad jader

- pro α-částici, která chce jádro opustit je jádro potenciálovou jámou, vně jádra ($r > R$) zase cítí odpudivý coulombovský potenc.



1) velikost jádra $R \approx R_0 Z^{\frac{1}{3}}$ $\quad R_0 \approx 1.6$ fm (10^{-15} m)

2) potenciál vně $V(r) = \frac{\gamma}{r}$, kde $\gamma = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0} \approx \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$

3) r_c - klasický bod obratu přilétávající částice: $r_c = \frac{\gamma}{E}$

pravděpodobnost tunelování α-částice ven z jádra podle Gamowovy formule

$$P_T = e^{-G} \qquad G = \frac{2}{\hbar}\int_R^{r_c}\sqrt{2m\left(\frac{\gamma}{r}-E\right)}\,dr = \frac{2r_c}{\hbar}\sqrt{2mE}\left[\frac{\pi}{2} - \arcsin\sqrt{\frac{R}{r_c}} - \sqrt{\frac{R}{r_c}\left(1-\frac{R}{r_c}\right)}\right]$$

pro $R \ll r_c$:

$$G \approx \frac{2r_c}{\hbar}\sqrt{2mE}\left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{r_c}}\right) = \frac{2}{\hbar}\,\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 E}\sqrt{2mE}\left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{R_0 Z^{\frac{1}{3}} E\,\frac{4\pi\varepsilon_0}{2Ze^2}}\right) = \beta_1\frac{Z}{\sqrt{E}} - \beta_2 Z^{\frac{2}{3}}$$

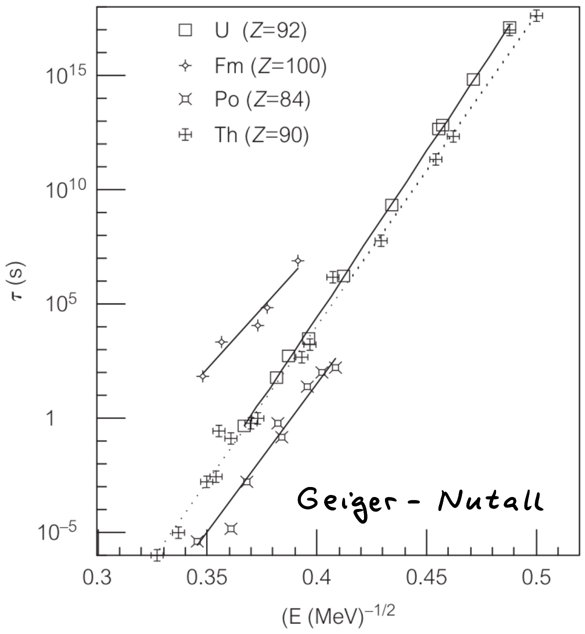


Figure 11.17. Semilog plot of α-decay lifetime (τ in seconds) versus $1/\sqrt{E_\alpha}$ (in MeV) for four different radioactive decay series, the so-called Geiger–Nutall plot. The data are taken from a recent edition of the Chart of the Nuclides (Walker (1983).)

implementace do rozpadového zákona

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{1}{\tau} N \quad \text{s řešením} \quad N(t) = N_0 e^{-t/\tau}$$

$\frac{1}{\tau}$ = pravděpodobnost rozpadu za jednotku času

$$= P_T \times \text{frekvence nárazů } f_0 = \left(\frac{2R}{v}\right)^{-1} \qquad v = \frac{p}{m} = \frac{\sqrt{2mE}}{m}$$

odtud

$$\tau = \frac{1}{f_0} e^{G} \rightarrow \ln\tau = \beta_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - \beta_2 Z^{\frac{2}{3}} - \ln f_0$$

slabá E-závislost $\sim \ln\sqrt{E}$

Př. studená emise (autoemise) – tunelování elektronů z kovu pod vlivem silného elektrického pole

tunelování elektronů ve skenovací tunelovací mikroskopii

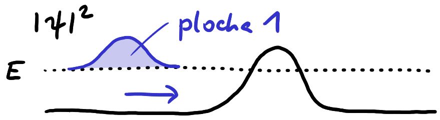
viz prezentace

5 Metastabilní stavy, rezonance

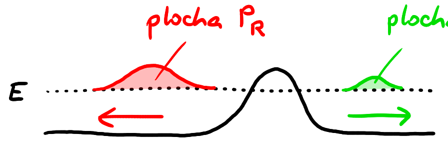
Doplněk

- balíky konstruované z rozptylových stavů (pro jednoduchost vezmeme $V_\infty = V_{-\infty} = 0$, potom $k' = k$)

  – názornější způsob využívající superpozici řešení stac. Sch.r. s různými E, přímý odečet P_R, P_T



pozdější čas :

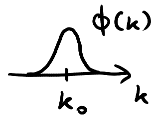


vlevo od bariéry

aproximujeme $R(k_0)$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k) \left[e^{ikx} + R(k)\, e^{-ikx} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$$

amplitudová funkce



$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, e^{i\left(kx - \frac{E_k}{\hbar} t\right)} + R(k_0) \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, e^{i\left[k(-x) - \frac{E_k}{\hbar} t\right]} \approx \chi(x,t) + R(k_0)\, \chi(-x,t)$$

normovaný balík jdoucí doprava

odražený balík jdoucí doleva

vpravo od bariéry

aproximujeme $T(k_0)$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, T(k)\, e^{ikx}\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \approx T(k_0)\, \chi(x,t)$$

prošlý balík jdoucí doprava

pravděpodobnost obsažená v $A\chi(x,t)$, kde $A \in \mathbb{C}$ a $\chi(x,t)$ je normovaný balík:

$$P = \int |A\chi|^2 dx = |A|^2 \int |\chi|^2 dx = |A|^2 \quad \longrightarrow \quad P_R \approx |R(k_0)|^2$$

$$P_T \approx |T(k_0)|^2$$