4. predavanje

Vladimir Dananić

24. listopada 2011.

Sadržaj

Kvantnomehanička struja

Valna funkcija, odnosno stanje valnoga paketa takva je da gustoća vjerojatnosti ovisi o vremenu. U stacionarnome stanju ta gustoća ne ovisi o vremenu, što znači da je vjerojatnost nalaženja čestice u određenomu dijelu prostora uvijek ista i ovisna samo o dijelu prostora kojega promatramo. Budući da je vjerojatnost nalaženja čestice u cijelom prostoru nuždno uvijek jednaka 1, to znači da smanjenje gustoće vjerojatnosti u jednom dijelu prostora nuždno znači povećanje gustoće u nekom drugom dijelu prostora. To pak znači da nuždno postoji tok vjerojatnosti, odnosno struja vjerojatnosti. Naime, ništa se iz jednoga dijela prostora ne može izgubiti, niti u njega ući, a da ne prođe kroz površinu kojom je određeni dio prostora omeđen. Veličinu koja opisuje to "prolaženje kroz površinu" zovemo gustoćom struje vjerojatnosti. To je u potpunosti slično s gibanjem fluida, za koje imamo jednadžbu kontinuiteta. Ta jednadžba kaže da se gustoća fluida u jednom dijelu prostora može promijeniti samo tako da kroz površinu kojom je prostor omeđen izađe, ili u njega uđe, određena količina fluida.

Kvantnomehanička struja

Pogledajmo jednadžbu kontinuiteta u jednoj prostornoj dimenziji. Tu će "volumen" biti jednak prostornom intervalu na pravcu, a "površina" koja omeđuje taj "volume" sastoji se od dvije točke koje su skrajnje točke intervala. Schrödingerova jednadžba ima oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{1}$$

No, i valna funkcija $\Psi^*(x,t)$ također zadovoljava Schrödingerovu jednadžbu, koja je jednaka kompleksno konjugiranoj jednadžbi (1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi^*(x,t) = -i\hbar\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t} \tag{2}$$

Množeći jednadžbu (1) s $\Psi^*(x,t)$, a jednadžbu (2) s $\Psi(x,t)$ i oduzimajući tako nastale dvije jednadžbe, dobivamo sljedeći rezultat:

Kvantnomehanička struja

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi^*(x,t)\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}-\Psi(x,t)\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2}\right]=i\hbar\frac{\partial\left|\Psi(x,t)\right|^2}{\partial t} \qquad (3)$$

Jednadžbu (3) možemo prepisati ovako:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial J}{\partial x}=0 \qquad (4)$$

gdje je $\rho=\left|\Psi\right|^2$, a $J=\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)$. Veličina je ρ očito jednaka gustoći vjerojatnosti, a veličinu J moramo onda tumačiti kao kvantnomehaničku gustoću struje. Primijetimo da jednadžba kontinuiteta (4) vrijedi za svaki i bilo koji potencijal $V(x)$ što se pojavljuje u Schrödingerovoj jednadžbi. To je posljedica realnosti funkcije $V(x)$. Izraz za kvantnomehaničku struju jednostavno možemo poopćiti na tri dimenzije, tako da dobivamo struju $\vec{J}$:

$$\vec{J}=\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi-\Psi\vec{\nabla}\Psi^*\right) \qquad (5)$$

Kvantnomehanička struja

Jednadžbu kontinuiteta (4) poopćujemo na tri dimenzije i dobivamo:

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{J}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \tag{6}$$

Jednadžba se (6) po svojemu obliku ne razlikuje od klasične jednadžbe kontinuiteta u mehanici fluida. Primijenjena na stacionarna stanja, za koja vrijedi $\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$, ta nam jednadžba kaže da kvantnomehanička struja (5) mora zadovoljavati uvjet $\vec{\nabla}\cdot\vec{J}=0$. U jednoj prostornoj dimenziji taj uvjet jednostavno znači da struja ne ovisi o prostornoj koordinati x, tj. $\frac{\partial J}{\partial x}=0$. Za jedan ravni val u jednoj dimenziji vrijedi $\Psi(x,t)=Ae^{ikx-i\omega t}$, pa za struju dobivamo $J=|A|^2\,\frac{\hbar k}{m}$. Omjer $\frac{\hbar k}{m}$ očito moramo shvaćati kao brzinu čestice v, a kvadrat amplitude $|A|^2$ kao gustoću vjerojatnosti ρ. Dakle, vrijedi klasični odnos između gustoće struje i gustoće vjerojatnosti: $J=\rho v$.

Stanja raspršenja i vezana stanja

Promatrat ćemo potencijalnu energiju čestice $V(x)$ koja ima sljedeća svojstva:

- $V(x)$ se značajno mijenja samo u ograničenom dijelu prostora, recimo $a \leq x \leq b$.
- Postoje dva dijela prostora izvan $a \leq x \leq b$, naime $-\infty < x < a$ i $b < x < +\infty$. U ta dva dijela prostora potencijalna energija stalna je i ima vrijednosti V_- odnosno V_+. Uzmimo da je $V_- < V_+$.
- Najniža vrijednost potencijalne energije, V_{min} može biti V_- ali može biti i vrijednost potencijalne energije unutar odsječka $a \leq x \leq b$ tako da vrijedi $V_{min} < V_-$. Sve te mogućnosti promatrat ćemo zasebno. Međutim, u svakom je slučaju sigurno da energija stacionarnoga stanja ne može biti niža od najniže vrijednosti potencijalne energije, tj. $E \geq V_{min}$.

Stanja raspršenja–potencijalna stepenica

Promatrajmo česticu s potencijalnom energijom oblika:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ako } x \leq 0 \\ V_0 > 0 & \text{ako } x > 0 \end{cases}$$

Taj se oblik potencijalne energije zove **potencijalna stepenica**. Ovdje je najniža vrijednost potencijalne energije jednaka $V_{min} = 0$. Energija se čestice može nalaziti u dva različita područja: $0 \leq E \leq V_0$ i $V_0 < E < +\infty$. Za bilo koju energiju čestice, valnu funkciju podijelit ćemo na dva dijela, u skladu s oblikom potencijalne energije. Tako imamo:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_I & \text{ako } x \leq 0 \\ \Psi_{II} & \text{ako } x > 0 \end{cases}$$

Za funkcije $\Psi_I(x)$ i $\Psi_{II}(x)$ imamo sljedeće jednadžbe:

Stanja raspršenja–potencijalna stepenica

$$\begin{aligned}\frac{d^2\Psi_I(x)}{dx^2} + k^2\Psi_I(x) &= 0\ ,\ k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\\ \frac{d^2\Psi_{II}(x)}{dx^2} + K^2\Psi_{II}(x) &= 0\ ,\ K^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\end{aligned}$$

Budući da je energija čestice pozitivna, tj. $E \geq 0$, funkcija $\Psi_I(x)$ ima opće rješenje:

$$\Psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{7}$$

Ova funkcija očito predstavlja superpoziciju dvaju valova: prvi, koji s amplitudom A dolazi s lijeva na potencijalnu stepenicu i drugi, koji se s amplitudom B odbija od te stepenice. Dakle, imamo upadni i reflektirani val. Kvantnomehanička struja koja pripada ovom stanju jednaka je

$$J_I = \frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right) \tag{8}$$

Stanja raspršenja–potencijalna stepenica

Narav funkcije Ψ_{II} ovisi o energiji. Za razliku od funkcije $\Psi_I(x)$, koja je oscilatorna za svaku dopustivu energiju E, funkcija Ψ_{II} bit će oscilatorna za energije $E > V_0$ i eksponencijalno trnuća za energije $E < V_0$. Proučit ćemo ta dva područja energije zasebno.

1. $E \leq V_0$
   Za te energije vrijedi $K^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} = -\kappa^2 \leq 0$. Tada je opće rješenje:
   $$\Psi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{+\kappa x} \tag{9}$$
   No, zbog uvjeta normalizabilnosti gustoće vjerojatnosti moramo izabrati $D = 0$, zato što funkcija $e^{+\kappa x}$ eksponencijalno raste za $x \to +\infty$. Pripadajuća kvantnomehanička struja $J_{II} = 0$. Budući da struja mora biti neovisna o x, mora vrijediti $J_I = J_{II} = 0$ tj. $|A|^2 = |B|^2$. To znači da sve što s energijom $E < V_0$ "udari" o stepenicu, mora se od nje i odbiti.

Stanja raspršenja–potencijalna stepenica

1. Međutim, to odbijanje od stepenice nema klasični značaj. Naime, valna funkcija $\Psi_{II}(x)$ nije jednaka 0 u području stepenice, premda u tom području eksponencijalno trne. To znači da kvantnomehanički val prodire u područje stepenice premda mu je to, po klasičnom shvaćanju, zabranjeno jednostavno zato što mu energija nije viša od energije stepenice. No, još moramo obaviti dio posla koji se odnosi na valnu funkciju stanja $\Psi(x)$ kao cjeline. Ona mora biti neprekidna, tj. jednoznačna, u svakoj točci prostora i njezina prva derivacija također mora biti neprekidna. Jedina točka gdje valna funkcija mijenja svoj značaj je $x = 0$. Tu moramo postaviti uvjete neprekidnosti:

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0), \tag{10a}$$
$$\Psi'_I(0) = \Psi'_{II}(0), \tag{10b}$$

Stanja raspršenja–potencijalna stepenica

1. Uvjeti neprekidnosti (10) daju nam sljedeći sustav jednadžbi za amplitude A, B i C:

$$A + B = C, \tag{11a}$$

$$ik\,(A - B) = -\kappa C, \tag{11b}$$

Rješenje sustava jednadžbi (11) jednako je:

$$B = \frac{ik + \kappa}{ik - \kappa} A \ , \quad C = \frac{2ik}{ik - \kappa} A \tag{12}$$

Iz rješenja (12) vidljivo je da vrijedi $|B|^2 = |A|^2$, kao što i mora biti po zakonu očuvanja struje $J = 0$. Unutar područja potencijala $V(x) = V_0$ struja je jednaka 0, no to očito ne znači da je i valna funkcija tamo također jednaka 0. Značenje toga je da čestice prodru do neke udaljenosti (što dalje to je manje vjerojatno) u područje "stepenice", ali se onda i vrate, tj. reflektiraju.

Stanja raspršenja–potencijalna stepenica

2. $E > V_0$
   Za te energije valne funkcije čestice bit će oscilatorne na cijelom području koordinate x. Razlikovat će se samo valni vektori u područjima $-\infty < x \leq 0$ i $0 \leq x < +\infty$. U prvome području valna funkcija ima isti oblik kao i prije, za energije $E \leq V_0$, tj. imamo upadni i odbijeni val. U drugome području valna bi funkcija, kao opće rješenje Schrödingerove jednadžbe, također mogla sadržavati dva vala, jedan koji ide s lijeva na desno i drugi koji ide u suprotnom smislu. No, ovaj drugi val ne možemo tumačiti kao odbijeni val jer se nije imao od čega odbiti. Dakle, u drugome području uzet ćemo valnu funkciju oblika $\Psi_{II}(x) = Ce^{iKx}$. Matematički gledano, dobivamo iste jednadžbe kao i u prethodnom slučaju, samo što u izrazima (10), (11) i (12) napravimo zamjenu $\kappa \rightarrow -iK$, gdje je $K = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$.

Stanja raspršenja–potencijalna stepenica

2. Kvantnomehanička struja u području “stepenice” sada nije jednaka 0, nego je jednaka $J = \frac{\hbar K}{m} |C|^2$. Zakon očuvanja struje sada povlači jednakost

$$\frac{\hbar k}{m} \left(|A|^2 - |B|^2\right) = \frac{\hbar K}{m} |C|^2 \tag{13}$$

Možemo prepisati rješenje (12) uz zamjenu $\kappa \rightarrow -iK$ i dobivamo:

$$B = \frac{k-K}{k+K} A \ , \ \ C = \frac{2k}{k+K} A \tag{14}$$

Lako se je uvjeriti da rješenje (14) zadovoljava izraz za struju (13). Definiramo koeficijente odbijanja (refleksije) R i propuštanja (transmisije) T kao $R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$ i $T = \left|\frac{C}{A}\right|^2$. Očito je da vrijedi odnos $R + \frac{K}{k} T = 1$. Taj odnos ima takav oblik zato što se u području $0 < x < +\infty$ mogu naći samo ravni valovi s valnim vektorom K, a nikada s valnim vektorom k.

Stanja raspršenja–potencijalna zaprjeka

Na primjeru s potencijalnom stepenicom naučili smo važnu stvar, a ta je da čestica može prodrijeti i u područje koje joj je, po klasičnom shvaćanju, zabranjeno, ali isto tako da se može odbiti od područja u koje bi, po klasičnom shvaćanju, morala u potpunosti ući, tj. ne odbiti se uopće. Naime, iz definicije koeficijenta refleksije poslije jednadžbe (14) vidimo da taj koeficijent nije jednak 0 premda čestica ima dovoljno energije da se u potpunosti nastavi gibati u području "stepenice". Zašto se, ipak, "djelomično" odbije? To se dogodi iz istoga razloga zašto se u slučaju kada joj je energija niža od visine "stepenice" "djelomično" giba u "zabranjenom" području. Naime, kontinuitet valne funkcije i zakon očuvanja struje očituju valna svojstva. Slikovito rečeno, logika klasične čestice je "može-ne može", a logika je kvantne čestice "može i ne može, kako kada". Da bismo jasnije vidjeli te pojave, proučit ćemo primjer potencijalne energije koju možemo zvati potencijalnom stepenicom konačne duljine, odnosno potencijalnom zaprjekom ili barijerom.

Stanja raspršenja–potencijalna zaprjeka

Promatrajmo česticu s potencijalnom energijom oblika:

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

Parametar se V_0 zove visinom zaprjeke, a parametar se a zove širinom zaprjeke. Kao i u slučaju potencijalne stepenice i ovdje ćemo za vrijednosti energije razlikovati dva slučaja: $0 \leq E \leq v_0$ i $E > V_0$. Budući da ova potencijalna energija dijeli prostor na tri dijela, tako ćemo i valnu funkciju podijeliti na tri dijela:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_I(x) & \text{ako } x \leq 0 \\ \Psi_{II}(x) & \text{ako } 0 < x \leq a \\ \Psi_{III}(x) & \text{ako } x > a \end{cases}$$

Stanja raspršenja–potencijalna zaprjeka

1. $0 \leq E \leq V_0$

$$\Psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \ , \ k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{15a}$$

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \ , \ \kappa = \sqrt{\frac{2m\left(V_0 - E\right)}{\hbar^2}} \tag{15b}$$

$$\Psi_{III}(x) = Fe^{ikx} \ , \ k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{15c}$$

Stanja raspršenja–potencijalna zaprjeka

1. Iz uvjeta neprekidnosti valne funkcije dobijemo:

$$B = iA\frac{\left(k^2+\kappa^2\right)\sinh(\kappa a)}{2k\kappa\cosh(\kappa a)+i\left(k^2-\kappa^2\right)\sinh(\kappa a)} \tag{16a}$$

$$C = kAe^{-\kappa a}\frac{ik+\kappa}{2k\kappa\cosh(\kappa a)+i\left(k^2-\kappa^2\right)\sinh(\kappa a)} \tag{16b}$$

$$D = kAe^{\kappa a}\frac{-ik+\kappa}{2k\kappa\cosh(\kappa a)+i\left(k^2-\kappa^2\right)\sinh(\kappa a)} \tag{16c}$$

$$F = 2k\kappa Ae^{-ika}\frac{1}{2k\kappa\cosh(\kappa a)+i\left(k^2-\kappa^2\right)\sinh(\kappa a)} \tag{16d}$$

Stanja raspršenja–potencijalna zaprjeka

1. Za koeficijente refleksije i transmisije dobijemo:

$$R(E) = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{f(E)}{1+f(E)}\;,\;\; T(E) = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{1}{1+f(E)} \tag{17}$$

   gdje je $f(E) = \left(\frac{k^2+\kappa^2}{2k\kappa}\right)^2 \sinh^2(\kappa a)$. Očito ovdje vrijedi $R + T = 1$ zato što su valni vektori prije i poslije barijere jednaki.

2. $E > V_0$
   U ovome slučaju dobijemo izraze koje možemo dobiti iz jednadžbi (16) zamjenom $\kappa \to iK$, gdje je $K = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$. Pri tome hiperbolne funkcije sinh i cosh prelaze u trigonometrijske funkcije. Imamo $\sinh(iKa) = i\sin(Ka)$ i $\cosh(iKa) = \cos(Ka)$. Za koeficijente refleksije i transmisije dobijemo izraze:

Stanja raspršenja–potencijalna zaprjeka

2.
$$R(E) = \frac{g(E)}{1+g(E)}\ ,\ \ T(E) = 1 - R(E) = \frac{1}{1+g(E)} \tag{18}$$

gdje je $g(E) = \left(\frac{k^2-K^2}{2kK}\right)^2 \sin^2(Ka)$.

Koeficijent propusnosti (17) uvijek je manji od 1. Međutim, važno je to da čestica, koja po klasičnom shvaćanju ne bi smjela proći kroz zaprjeku zato što joj je energija preniska za taj prolaz, ipak može proći. Ne uvijek, nego s vjerojatnošću koja monotono raste kako se energija čestice povisuje. Isto tako je karakteristično ponašanje za koeficijent odbijanja zadan izrazom (18), koji nije jednak 0, nego može imati i vrijednosti veće od 0 čak i za energije koje jako nadvisuju potencijalnu zaprjeku. Prolaz čestice kroz potencijalnu zaprjeku koja nadvisuje energiju čestice zove se **učinak tuneliranja**.

Zadatci

1. Izvedite jednadžbe za koeficijente odbijanja i propusnosti čestice na potencijalnoj zaprjeci visine V_0 i širine a. Prikažite ovisnost koeficijenta propusnosti o energiji. Pri tome prikažite izraze u ovisnosti o varijabli $x = \frac{E}{V_0}$ i parametru $\xi = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}$.
2. Izračunajte električnu struju koju "proizvodi" elektron u stanju zadanom valnom funkcijom

$$\Psi(x) = Ne^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}+ikx}$$

gdje je $\sigma = 0,1\,nm$ i $k = 6 \cdot 10^{10}\ m^{-1}$. Izračunajte prosječnu brzinu elektrona u tom stanju, kao i brzinu koju bismo dobili iz struje na način $v = \frac{J}{\rho}$.

Zadatci

3. Elektron se giba u potencijalnom polju oblika:

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

Skicirajte tu potencijalnu energiju u ovisnosti o x. Postavite jednadžbe neprekidnosti za valnu funkciju elektrona u stacionarnome stanju. Što očekujete za koeficijent propusnosti elektrona energije $E < V_0$?