

Schrödingerova rovnice v 1D - rozptylové stavy

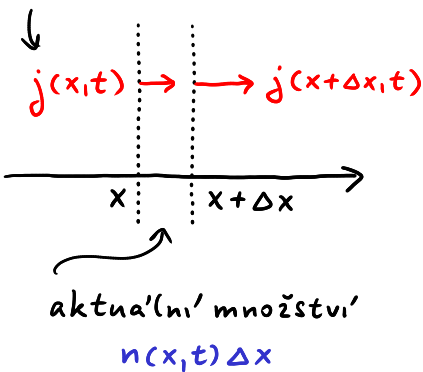
1 Tok pravděpodobnosti a rovnice kontinuity

- motivační připomínka difúze a rovnice kontinuity



- odvození rovnice kontinuity:

tok v místě x a čase t



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

$$n(x, t + \Delta t)\Delta x - n(x, t)\Delta x = \underbrace{j(x, t)\Delta t}_{\text{přítěče}} - \underbrace{j(x + \Delta x, t)\Delta t}_{\text{odtěče}}$$

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

(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

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

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

pomocná úprava

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

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

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

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

$$\left. \begin{aligned} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi &= ik |A|^2 \\ \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* &= -ik |A|^2 \end{aligned} \right\} \vec{j} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \quad (\text{lze číst jako rychlost} \times |\psi|^2)$$

- úhrnná pravděpodobnost

Schrödingerova rovnice zachovává úhrnnou pravděpodobnost (= unitární časový vývoj)
odvození:

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \iiint |\psi|^2 d^3\vec{r}}_{\text{přes všechnu oblast}} = \iiint \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} d^3\vec{r} \stackrel{\uparrow}{=} \iiint -\nabla \cdot \vec{j} d^3\vec{r} \stackrel{\uparrow}{=} - \oint \vec{j} \cdot d\vec{S}$$

rovnice kontinuity Gaussova věta

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

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

2 Rozptylové stavy v 1D - obecný pohled

motivace: - studium chování částic dopadajících na různé potenciálové bariéry
- vydvihneme tunelování, tj. průnik bariérou, kterou by klas. částice nepřekonala

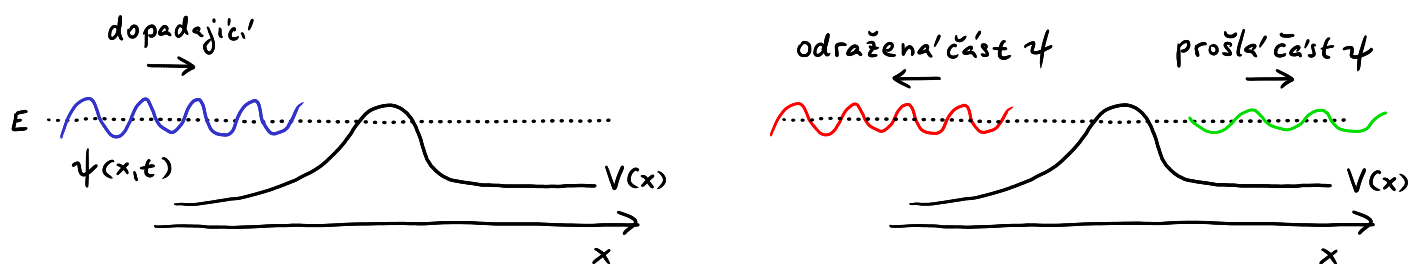
Př. tunelování elektronů oxidovou vrstvou na drátu, α -rozpad jádra

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 $\psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$



- nelze normovat ($\int |\psi|^2 dx$ diverguje), musel by se složit balík, pak ovšem zastoupeng 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 stříháme zleva a $E > V_{-\infty}, V_{\infty}$)

dopadající + odražená

$$\psi(x) \rightarrow e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

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



prošlá

$$\psi(x) \rightarrow T e^{ik'x}$$

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

- koeficienty R a T závisí na E (nebo k) a získáme je řešením stacionární Schr. 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)

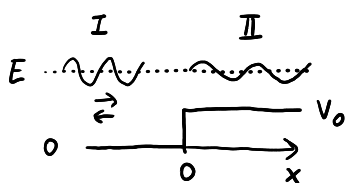


$$P(\text{odraz}) = P_R = \frac{j_R}{j_0} = |R|^2 \quad P(\text{průchod}) = P_T = \frac{j_T}{j_0} = \frac{k'}{k} |T|^2$$

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

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

1) $E > V_0$

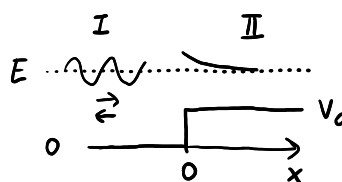


$$\psi_I(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

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

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

2) $E < V_0$



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

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

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

$$\text{Ad 1) } \left. \begin{array}{l} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad 1+R=T \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \quad ik(1-R) = ik'T \end{array} \right\} \quad 2 = \left(1 + \frac{k'}{k}\right) T \rightarrow T = \frac{2k}{k+k'}$$

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

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

explicitní výraz pro propustnost

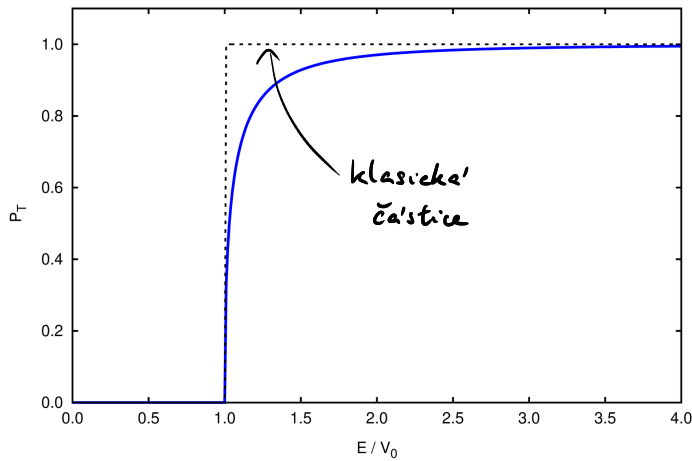
$$P_T(E > V_0) = \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{4}{\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} + 2} = \frac{2}{1 + \frac{k^2+k'^2}{2kk'}} = \frac{2}{1 + \frac{E - \frac{V_0}{2}}{\sqrt{E(E-V_0)}}} = \frac{2}{1 + \frac{1 - \frac{\alpha}{2}}{\sqrt{1-\alpha}}} \quad \alpha = \frac{V_0}{E} < 1$$

$$\text{Ad 2) } \left. \begin{array}{l} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad 1+R=T \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \quad ik(1-R) = \alpha T \end{array} \right\} \quad 1+R - \frac{ik}{\alpha}(1-R) = 0$$

$$\rightarrow R = \frac{\frac{ik}{\alpha} - 1}{\frac{ik}{\alpha} + 1} \quad P_R = |R|^2 = \frac{\left|\frac{ik}{\alpha} - 1\right|^2}{\left|\frac{ik}{\alpha} + 1\right|^2} = 1$$

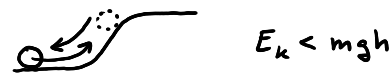
pravděpodobnost odrazu musí v tomto případě vyjít rovna jedné a vskutku vyšla

výsledný graf propustnosti:



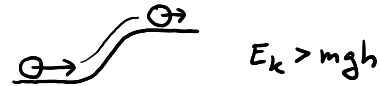
srovnání s chováním klasické částice

1) $E < V_0$ odpovídá situaci



vždy se vrátí zpět $\rightarrow P_T = 0$

2) $E > V_0$ odpovídá situaci



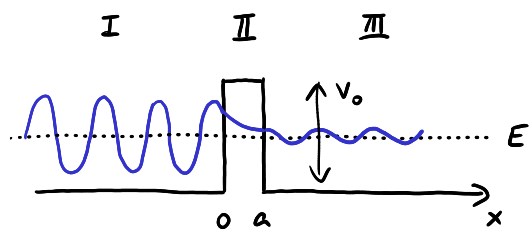
vyjede do kopce a pokračuje dále $\rightarrow P_T = 1$

4) Tunelový jev

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



• sestavení příslušného řešení stacionární Sch. rovnice



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

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

$$\Psi_{II}(x) = A e^{\alpha x} + B e^{-\alpha x}$$

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

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

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

„sešívací“ podmínky spojitosti a hladkosti:

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) : 1 + R = A + B$$

$$\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) : A e^{\alpha a} + B e^{-\alpha a} = T$$

$$\Psi'_I(0) = \Psi'_{II}(0) : ik(1 - R) = \alpha(A - B)$$

$$\Psi'_{II}(a) = \Psi'_{III}(a) : \alpha(A e^{\alpha a} - B e^{-\alpha a}) = ikT$$

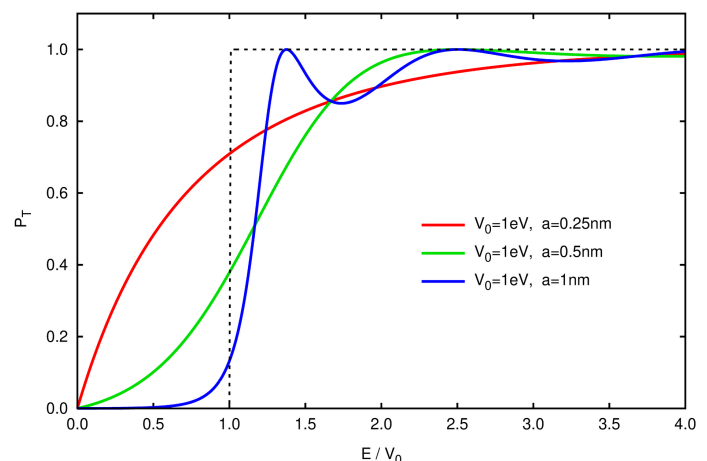
pro libovolné E lze nalézt koeficienty R, T, A, B , z koeficientu T určí

• pravděpodobnost průchodu (detailně na cvičení)

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

• pro málo pronikavou bariéru ($\alpha a \gg 1$) klesá pravděpodobnost exponenciálně, v tomto režimu aproximujeme:

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



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

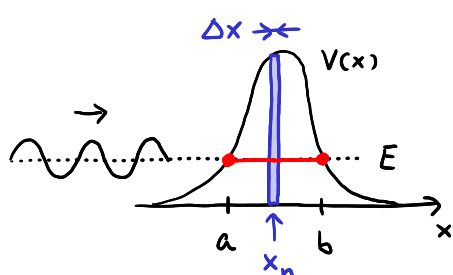
$$P_T \approx \frac{16}{\left(\frac{2\kappa}{k} + \frac{k}{2\kappa}\right)^2} e^{-2\kappa a}$$

další pro jednoduchost nahradíme prefaktor jedničkou (je to hrubší, ale pro řádový odhad vyhovující)

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

- výraz odvozený pro pravouhlou bariéru často nedaří ani řádově správný odhad pro reálnější průběhy potenciálových bariér, v dalších 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 pravouhlých bariér s výškami kopírujícími $V(x)$

šířka elem. bariér

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

střední polohy bariér

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

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

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

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

G Gamowův Faktor

Pr. α -rozpad jader

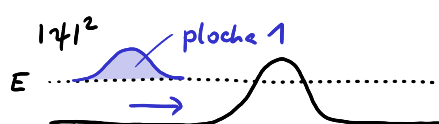
Pr. studená emise (autoemise) - tunelování elektronů z kovů pod vlivem silného elektrického pole
tunelování elektronů ve skenovací tunelovací mikroskopii

viz prezentace

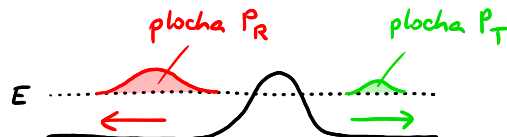
5 Metastabilní stavy, rezonance

Doplňek 1: bahky z rozptylových stavů (pro jednoduchost $V_\infty = V_{-\infty} = 0 \rightarrow k' = k$)

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



pozdější čas:

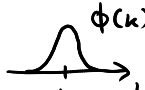


- rozptylové řešení parametrizované $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ je superponováno pomocí $\int_{-\infty}^{\infty} dk$ s užitím amplitudy $\phi(k)$ lokalizované okolo k_0 (např. gaussovka $\phi(k) \sim e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}}$)

vlevo od bariéry

aproximujeme $R(k_0)$

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

amplitudová funkce 

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

↑
normovaný
bálek jdoucí
doprava

↑
odřízný
bálek 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
bálek jdoucí
doprava

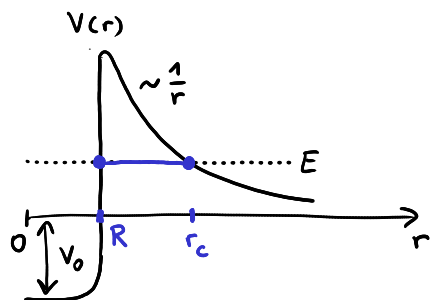
pravděpodobnost obsažena v $A \chi(x,t)$, kde $A \in \mathbb{C}$ a $\chi(x,t)$ je normovaný bálek:

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

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

Doplňek 2: α -rozpad - detailní výpočet

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



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

2) potenciál vně $V(r) = \frac{\gamma}{r}$, kde $\gamma = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0} \approx \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$

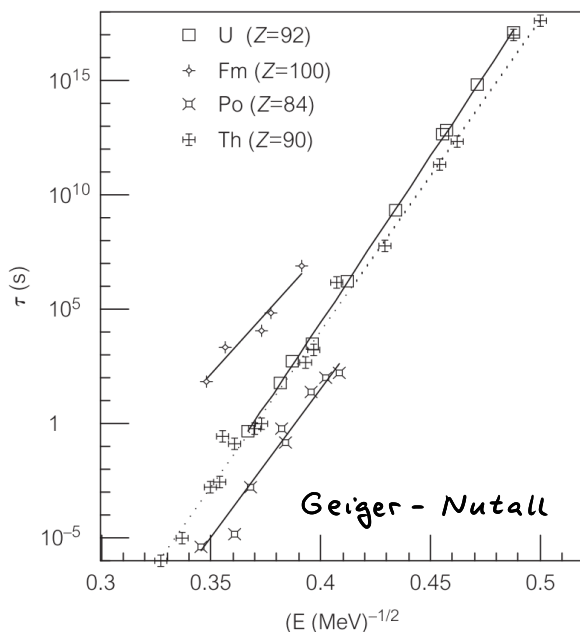
3) r_c - klasický bod obrátu přiletaující částice: $r_c = \frac{\gamma}{E}$

pravděpodobnost tunelování α -částice ven z jádra podle Gamowovy Formule

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

pro $R \ll r_c$:

$$G \approx \frac{2r_c}{\hbar} \sqrt{2mE} \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{r_c}} \right) = \frac{2}{\hbar} \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 E} \sqrt{2mE} \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{R_0 Z^{\frac{2}{3}} E \frac{4\pi\epsilon_0}{2Ze^2}} \right) = \beta_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - \beta_2 Z^{\frac{2}{3}}$$



implementace do rozpadoveho za'kona

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

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

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

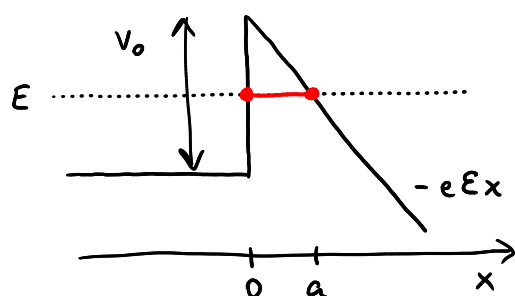
odtud

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

↑
slabá E-závislost $\sim \ln \sqrt{E}$

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–Nuttall plot. The data are taken from a recent edition of the Chart of the Nuclides (Walker (1983).)

Doplňěk 3: vyčíslení pravděpodobnosti autoemise



V_0 - výstupní práce

$\mathcal{E}$ - intenzita elektrického pole

klasicky zakázaná oblast $x \in [0, a = \frac{V_0 - E}{e\mathcal{E}}]$

Gamowův faktor $G = \frac{2}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(V_0 - e\mathcal{E}x - E)} dx = \frac{4\sqrt{2m} (V_0 - E)^{\frac{3}{2}}}{3\hbar e\mathcal{E}} = \frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}$

→ pravděpodobnost tunelování $P_T \approx e^{-G} = e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}}$

→ tunelový proud $I \sim e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}}$ (Fowler & Nordheim, 1928)