Příklad 6: Bariéra a tunelový jev

Předpokládejme, že částice o hmotnosti m a energii E dopadá zleva na potenciálovou bariéru (viz obrázek) o výšce V_0. Energie částice je menší než výška potenciálové bariéry, takže by částice v klasickém případě bariérou nemohla prolétnout, protože nemá dosti velkou energii na to, aby se „přehoupla“ přes bariéru. V kvantové mechanice to možné je. Průběh potenciálu má jednoduchý tvar

$$V(x) = \begin{cases} V_0\,; & x \in (0, L)\,, \\ 0\,; & x \notin (0, L)\,. \end{cases} \tag{1}$$

Řešení Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi \tag{2}$$

rozdělíme, tak jako v předchozích případech, do tří oblastí, ve kterých má potenciál jednu konkrétní konstantní hodnotu. Na bariéře se pro letící částici již řešení nerozdělí na sadu sudých a lichých řešení (tak jak tomu bylo v symetrické jámě), a tak ztrácí smysl psát řešení jako superpozici lichého sinu a sudého kosinu a udržovat počátek souřadnic uprostřed bariéry. Namísto toho využijeme superpozici kmitavých exponenciálních funkcí, se kterými se v obecném případě lépe zachází (například je jednodušší jejich derivace). Řešení Schrödingerovy rovnice v jednotlivých oblastech bude mít tvar:

$$\begin{aligned} &\psi_{\mathrm{I}}(x) = A_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,; && x \in \mathrm{I}\,, && h^2 \equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\,; \\ &\psi_{\mathrm{II}}(x) = A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{hx} + B_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{-hx}\,; && x \in \mathrm{II}\,, && \\ &\psi_{\mathrm{III}}(x) = A_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,; && x \in \mathrm{III}\,, && k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}\,. \end{aligned} \tag{3}$$

Vzhledem k pravděpodobnostnímu charakteru kvantové mechaniky musíme pokus mnohokrát opakovat, což znamená, že máme připraveno velké množství částic ve stejném stavu (se stejnou energií a hybností), které opakovaně posíláme zleva na bariéru. Vlnová funkce $\psi(x)$ má význam amplitudy pravděpodobnosti výskytu částic a její kvadrát $w(x) = \psi^*\psi$ má význam hustoty pravděpodobnosti výskytu částic. V klasické teorii vlnění mají rovinné vlny šířící se ve směru (+) a proti směru (–) osy x tvar

$$\begin{aligned} \varphi_+(t,x) &= A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kx-\omega t]}\,; \\ \varphi_-(t,x) &= A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[-kx-\omega t]}\,. \end{aligned} \tag{4}$$

Odsud snadno nahlédneme, že řešení v oblastech I a III je superpozicí vln šířících se doprava a doleva. Vzhledem k tomu, že zprava na bariéru žádné částice nepřicházejí, musí platit

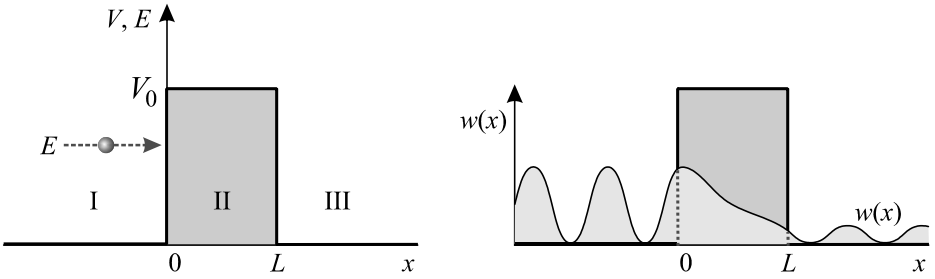
$$B_{\mathrm{III}} = 0\,. \tag{5}$$

V levé části (před bariérou) superpozice zůstane. Vlna šířící se doprava koresponduje s částicemi, které posíláme na bariéru, vlna šířící se doleva je způsobena částicemi odraženými od bariéry. Podmínky spojitosti vlnové funkce a její první derivace na levé a pravé straně bariéry vedou na rovnice

$$\psi_{\mathrm{I}}(0)=\psi_{\mathrm{II}}(0)\,;\qquad \psi'_{\mathrm{I}}(0)=\psi'_{\mathrm{II}}(0)\,;$$
$$\psi_{\mathrm{II}}(L)=\psi_{\mathrm{III}}(L)\,;\qquad \psi'_{\mathrm{II}}(L)=\psi'_{\mathrm{III}}(L)\,. \tag{6}$$

Po dosazení dostaneme vztahy mezi konstantami A, B:

$$\begin{aligned} A_{\mathrm{I}}+B_{\mathrm{I}} &= A_{\mathrm{II}}+B_{\mathrm{II}}\,;\\ A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{hL}+B_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{-hL} &= A_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL}\,;\\ \mathrm{i}kA_{\mathrm{I}}-\mathrm{i}kB_{\mathrm{I}} &= hA_{\mathrm{II}}-hB_{\mathrm{II}}\,;\\ A_{\mathrm{II}}h\,\mathrm{e}^{hL}-B_{\mathrm{II}}h\,\mathrm{e}^{-hL} &= \mathrm{i}kA_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL}\,. \end{aligned} \tag{7}$$



Průběh potenciálu (nalevo) a pravděpodobnost výskytu (napravo) částice letící na jednorozměrnou pravoúhlou potenciálovou bariéru.

Vzhledem k tomu, že máme 4 podmínky pro pět konstant, je vše v pořádku a jedna konstanta zůstává volná pro normování nalezené vlnové funkce. Jinou možností je vzít nenormovanou vlnovou funkci a amplitudu dopadajících vln volit rovnou

$$A_{\mathrm{I}}=1\,. \tag{8}$$

V tomto případě budeme mít mimořádně jednoduchý výpočet koeficientu propustnosti bariérou. Ten je definován jako podíl počtu prošlých částic ku podílu počtu dopadlých částic a vypočteme ho jako podíl hustot pravděpodobností prošlé a dopadající vlny:

► $$T=\frac{A^*_{\mathrm{III}}A_{\mathrm{III}}}{A^*_{\mathrm{I}}A_{\mathrm{I}}}=A^*_{\mathrm{III}}A_{\mathrm{III}}\,. \tag{9}$$

Obdobně můžeme zavést koeficient odrazu

► $$R=\frac{B^*_{\mathrm{I}}B_{\mathrm{I}}}{A^*_{\mathrm{I}}A_{\mathrm{I}}}=B^*_{\mathrm{I}}B_{\mathrm{I}}\,. \tag{10}$$

Soustavu (7) přepíšeme do maticové podoby, volba $A_{\mathrm{I}}=1$ dá vzniknout pravé straně soustavy:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 \\ \mathrm{e}^{hL} & 0 & \mathrm{e}^{-hL} & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL} \\ h & \mathrm{i}k & -h & 0 \\ h\mathrm{e}^{hL} & 0 & -h\mathrm{e}^{-hL} & -\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{\mathrm{II}} \\ B_{\mathrm{I}} \\ B_{\mathrm{II}} \\ A_{\mathrm{III}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \mathrm{i}k \\ 0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

Vzhledem k tomu, že chceme určit koeficienty propustnosti bariéry, stačí určit jen konstantu A_{III} a ostatní eliminovat. Matici můžeme převést na trojúhelníkovou matici nebo použít metodu subdeterminantů, metodu inverzní matice atd. Výpočet je již přímočarý. Výsledek je:

► $$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2 \sinh^2(hL)}{4E(V_0 - E)}} . \tag{12}$$

Koeficient odrazivosti R můžeme snadno určit ze zákona zachování počtu částic:

► $$R + T = 1 . \tag{13}$$

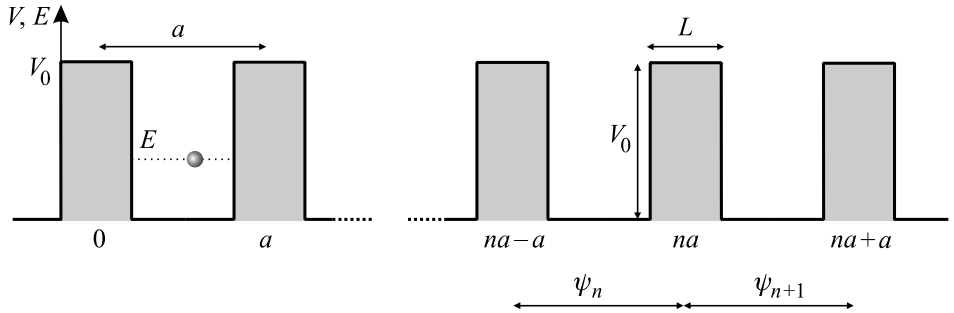
Kvantová teorie připouští průchod částice bariérou i v případě, že částice má nižší energii, než je hodnota potenciálu na vrcholu bariéry. Je to dáno nekomutativností potenciální a kinetické energie. Z Heisenbergových relací neurčitosti potom plyne, že obě hodnoty nemůžeme současně přesně měřit. Neurčitost kinetické a potenciální energie umožní tu a tam průchod částice bariérou. Tomuto jevu říkáme tunelový jev. Pravděpodobnost jevu exponenciálně klesá s tloušťkou bariéry. Typickým příkladem mohou být dvě oblasti kovu oddělené tenkým izolantem, přes který mohou tunelovat elektrony. Dalším příkladem jsou alfa částice tunelující z atomového jádra přes Coulombovu bariéru při radioaktivním alfa rozpadu. Na tunelovém jevu je založena tunelová dioda, rastrovací tunelový mikroskop a další zařízení.

Příklad 7: Periodický potenciál a pásové spektrum

Velmi častý je také pohyb částic v nelokalizovaném potenciálu, například v periodickém potenciálu krystalické mříže, který splňuje základní podmínku

$$V(x+a) = V(x)\,, \tag{14}$$

kde a je perioda potenciálu. K pochopení základních vlastností periodického potenciálu postačí řešit případ nekonečné posloupnosti střídajících se jam a bariér. Tento průběh potenciálu se nazývá Kronigův-Penneyův model. Poprvé ho použili německo-americký fyzik Ralph Kronig a anglický matematik William Penney. Budeme předpokládat, že výška opakujících se bariér je V_0, jejich šířka L a periodicita a.



Kronigův-Penneyův model krystalu s periodickým potenciálem.

Kronigův-Penneyův model

Kvalitativní charakter spektra nezávisí na šířce jednotlivých bariér. Budeme je deformovat tak, aby zůstala zachována jejich plocha, tj. provedeme limitu $L \to 0$, $V_0 \to \infty$, tak, aby se součin LV_0 neměnil. Tím získáme potenciál složený z nekonečné řady Diracových impulzů a na každé bariéře postačí jedno jediné navázání vlnové funkce. Budeme tedy mít potenciál

$$V(x) = LV_0 \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \delta(x - na)\,, \tag{15}$$

pro který snadno nalezneme řešení na intervalu (na–a, na), kde je potenciál nulový:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= A_n \cos[k(x-na)] + B_n \sin[k(x-na)]\,; \\ \psi_n'(x) &= -A_n k \sin[k(x-na)] + B_n k \cos[k(x-na)]\,; \\ k &\equiv 2mE/\hbar^2\,; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots \end{aligned} \tag{16}$$

Argument kmitavého řešení je vždy posunut do lokálního počátku v místě každého Diracova impulzu, takže sinus začíná u každé bariéry od nuly a kosinus od jednotky. Při navazování vlnových funkcí využijeme tři podmínky. Samotná vlnová funkce bude spojitá, první derivace bude mít skok (jde o Diracův impulz) a periodicita potenciálu

povede na periodicitu hustoty pravděpodobnosti. Rozepišme nyní tyto tři podmínky pro navázání na *n*-tém Diracově impulzu (resp. na *n*-té infinitezimální bariéře):

1. spojitost vlnové funkce

Na každé bariéře musíme předpokládat spojitost vlnové funkce. Kdyby byla nespojitá, první derivace by dala distribuci a druhá derivace obsažená ve Schrödingerově rovnici by byla derivací distribuce, kterou by nebylo možné žádným dalším členem kompenzovat. Musí tedy platit:

$$\psi_n(na) = \psi_{n+1}(na)\,. \tag{17}$$

Odsud dostaneme první z výše zmíněných tří podmínek:

► $$A_n = A_{n+1}\cos(ka) - B_{n+1}\sin(ka)\,. \tag{18}$$

2. Skok v první derivaci

Napišme Schrödingerovu rovnici v naší situaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi\,. \tag{19}$$

Rovnici budeme integrovat v ε-okolí *n*-tého Diracova impulzu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}\psi''(x)\,\mathrm{d}x + \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}\delta(x-na)\psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}E\psi(x)\,\mathrm{d}x\,.$$

Prostřední integrál lze spočítat vzhledem k přítomnosti Diracovy distribuce velmi snadno. V ostatních provedeme limitní přechod $\varepsilon \to 0$. Integrál na pravé straně dá díky spojitosti ψ nulu a levý integrál příslušný skok:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\psi'\right]_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} + \psi_n(na) = 0\,,$$

odsud plyne podmínka pro skok první derivace ψ na *n*-tém Diracově impulzu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'_{n+1}(na) - \psi'_n(na)\right] + \psi_n(na) = 0\,. \tag{20}$$

Po dosazení řešení (16) máme druhou podmínku:

► $$A_{n+1}\sin(ka) + B_{n+1}\cos(ka) - B_n = \frac{2mLV_0}{k\hbar^2}A_n\,. \tag{21}$$

3. Periodicita

Z periodicity potenciálu (14) plyne periodicita hustoty pravděpodobnosti

$$w(x+a) = w(x)\,; \qquad w(x) \equiv \psi^*(x)\,\psi(x)\,. \tag{22}$$

Odsud je jasné, že pro vlnovou funkci musí platit

$$\psi(x+a) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,\psi(x)\,, \tag{23}$$

kde ϕ je nějaké fázové posunutí. Pro naše konstanty potom plyne:

► $$B_{n+1} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\, B_n \,; \qquad A_{n+1} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\, A_n \,. \tag{24}$$

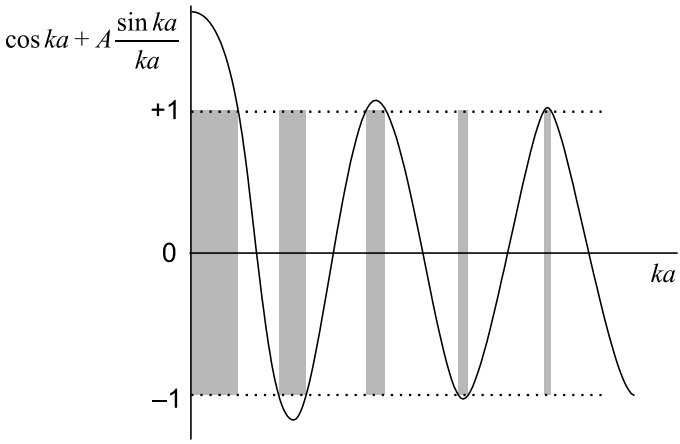
Nyní dosadíme (24) do podmínek (18) a (21). Tím získáme soustavu rovnic pro neznámé konstanty A_n a B_n:

$$\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\cos ka - 1, & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin ka \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin ka - \xi\,, & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\cos ka - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = 0 \,; \qquad \xi \equiv \frac{2mLV_0}{k\hbar^2} \,. \tag{25}$$

Nenulové řešení získáme jen tehdy, pokud bude determinant soustavy nulový, což vede na podmínku:

► $$\cos\phi = \cos ka + A\frac{\sin ka}{ka} \,; \qquad A \equiv \frac{mLaV_0}{\hbar^2} \,. \tag{26}$$

Pravá strana této podmínky musí být z intervalu <–1, 1>, jinak úhel ϕ na levé straně nelze nalézt a řešení neexistuje. Výsledkem jsou pásy, ve kterých se částice pohybovat může, a zakázané pásy, ve kterých řešení neexistuje, tj. částice s takovou energií se v periodickém potenciálu nemůže vyskytovat. Připomeňme si, že vlnový vektor **k** je v podmínce (26) provázán s energií podle vztahu (16), tj. platí $k = 2mE/\hbar^2$.



V grafu je vynesena pravá strana podmínky (26). Tam, kde je křivka mimo interval <–1,1>, řešení neexistuje a na grafu je šedou barvou označen zakázaný pás.

Zakázané pásy jsou typické v krystalových mřížích, v polovodičích, ale třeba i v periodických strukturách motýlích křídel, kde způsobují zajímavé, jakoby nepřirozené barvy.