

2. Prąd prawdopodobieństwa

Wielkość pomocnicza do analizy wyników: prąd prawdopodobieństwa

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

Dla cząstki swobodnej w 1D o pędzie p (wektorze falowym k):



$$j = |A|^2 \hbar k / m = |A|^2 p / m = |A|^2 v$$

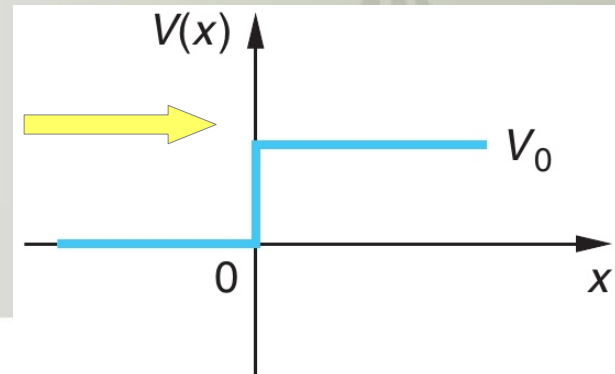
Prąd prawdopodobieństwa spełnia równanie ciągłości, co wynika bezpośrednio z równania Schroedingera:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div } \vec{j}(\vec{r}, t) = 0$$

Jest to kwantowy odpowiednik równania ciągłości z elektromagnetyzmu (tam mamy gęstość ładunku i gęstość prądu, tutaj gęstość i prąd prawdopodobieństwa)

3.1 Próg potencjału

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



Fala „pada” na próg lecąc z lewej strony.

Dzielimy przestrzeń na dwa obszary, I ($V = 0$) i II ($V = V_0$), RS doprowadzamy do

postaci:

$$(x < 0) \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k_1^2\psi(x)$$

$$(x > 0) \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k_2^2\psi(x)$$

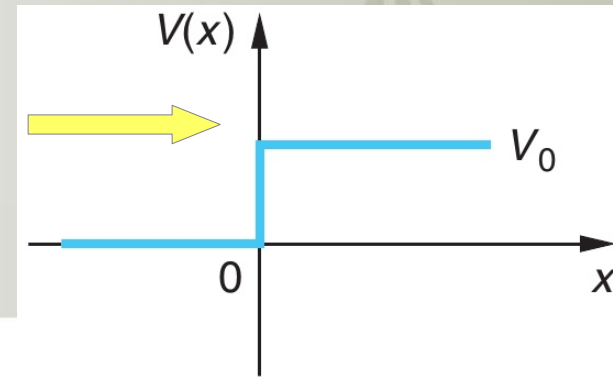
$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{and} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$



W obszarze II takie podstawienie dobre gdy $E > V_0$,

3.1 Próg potencjału

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



Fala „pada” na próg lecąc z lewej strony.

Dzielimy przestrzeń na dwa obszary, I ($V = 0$) i II ($V = V_0$), RS doprowadzamy do postaci:



$$\begin{aligned} (x < 0) \quad & \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k_1^2\psi(x) \\ (x > 0) \quad & \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k_2^2\psi(x) \end{aligned}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{and} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

W obszarze II takie podstawienie dobre gdy $E > V_0$, wówczas:

$$(x < 0) \quad \psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

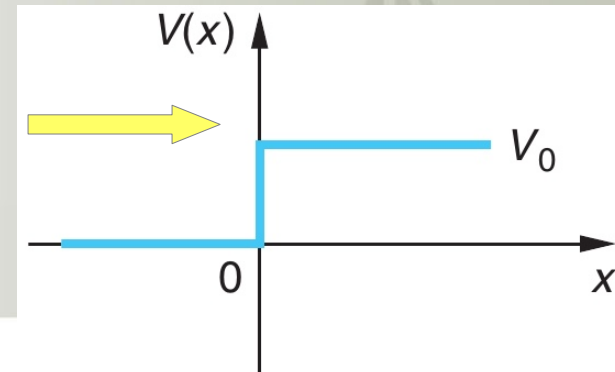
$$(x > 0) \quad \psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

$D = 0$, bo w obszarze II brak fali odbitej (poruszającej się w lewo).
Żądamy ciągłości funkcji falowej oraz jej pochodnej:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \longrightarrow \quad A + B = C$$

$$d\psi_I(0)/dx = d\psi_{II}(0)/dx \quad k_1A - k_1B = k_2C$$

3.1 Próg potencjału



Rozwiązania:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A = \frac{E^{1/2} - (E - V_0)^{1/2}}{E^{1/2} + (E - V_0)^{1/2}} A$$

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A = \frac{2E^{1/2}}{E^{1/2} + (E - V_0)^{1/2}} A$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

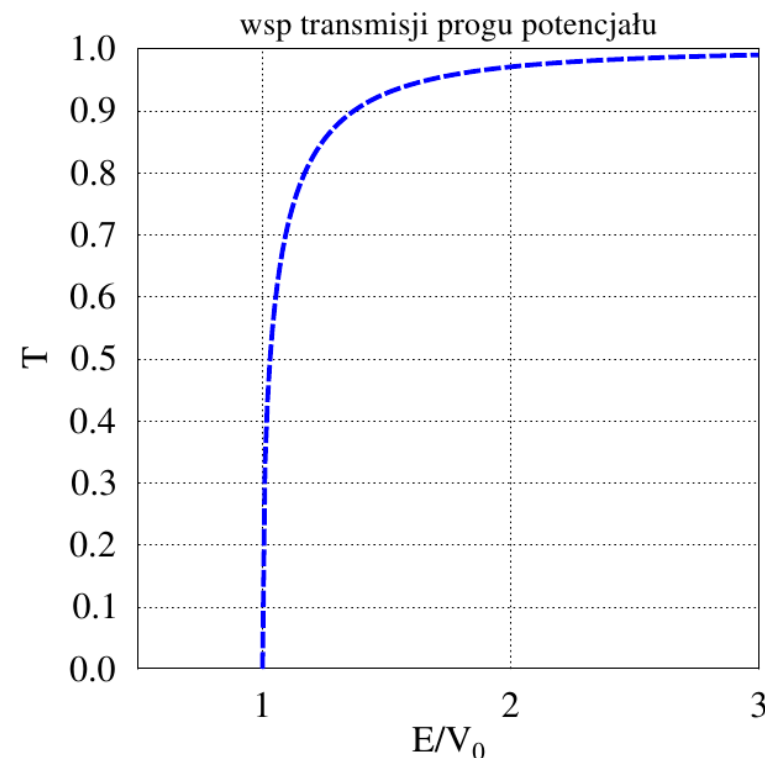
efekty nieklasyczne: nawet dla $E > V_0$
możliwe odbicie

Współczynniki transmisji i odbicia:

$$R = |j_{odb}/j_{pad}| \quad T = |j_{trans}/j_{pad}|$$

$$T + R = 1$$

(albo odbicie albo transmisja)



3.2 Próg potencjału, V ujemne

Rozwiązania: te same, bo $E > V$.

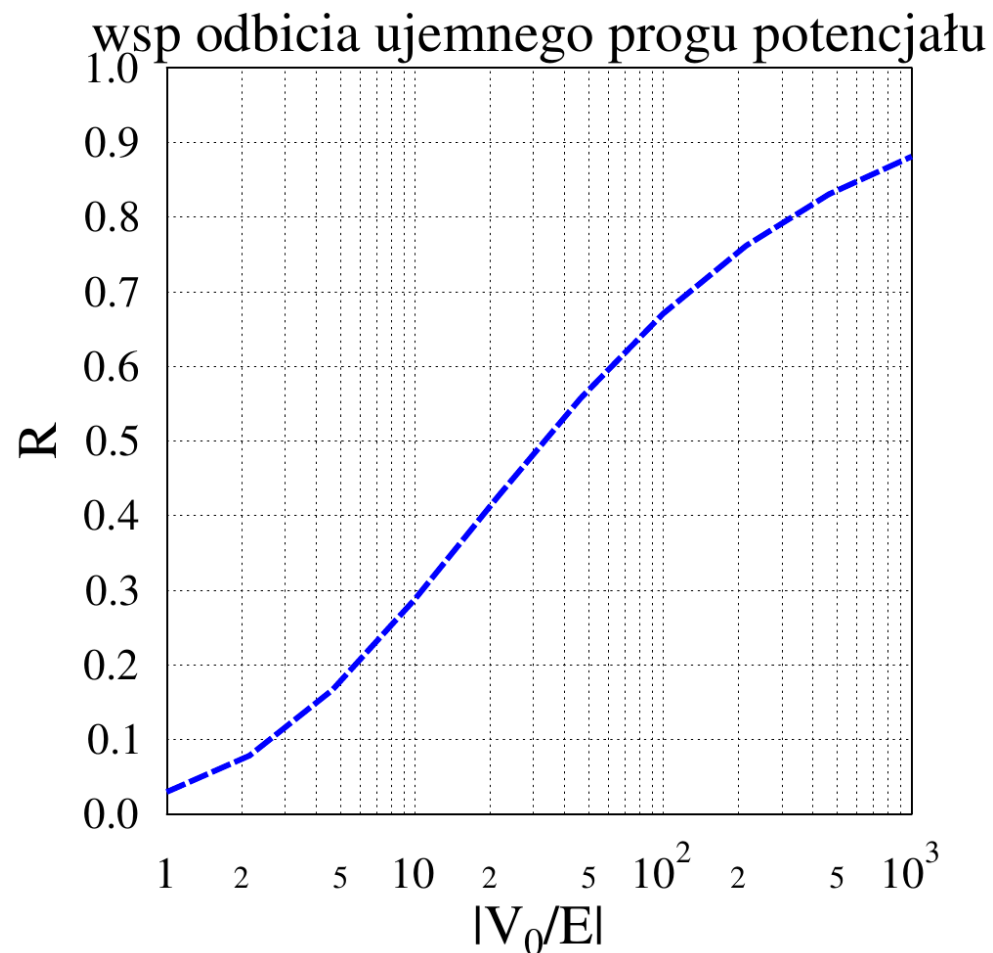
$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

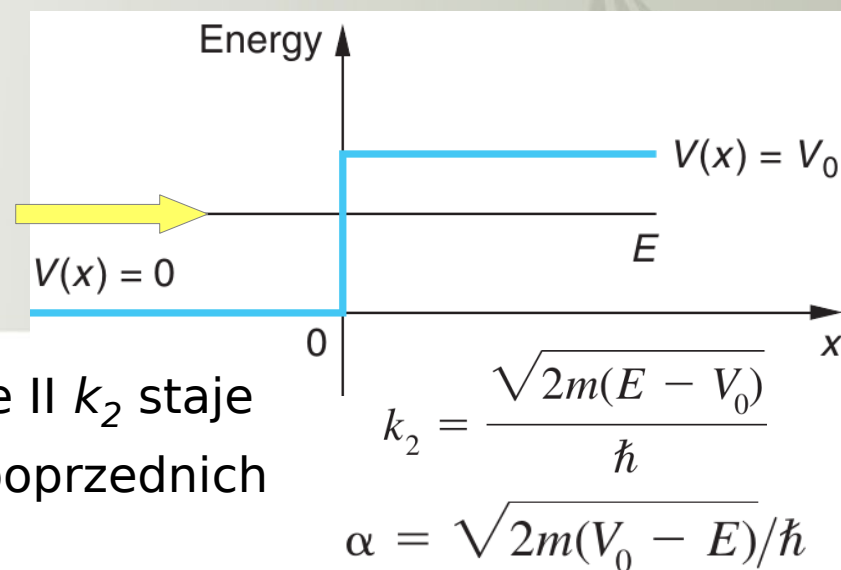
Np $E = 1$ eV, $V = -99$ eV = -99 E

R = 0.67

**efekty nieklasyczne: silne odbicie
od potencjału przyciągającego**



3.3 Próg potencjału, $E < V_0$



Równania takie same jak w 3.1-3.2, ale w obszarze II k_2 staje się zespolone, $k_2 = i\alpha$ ($E - V_0 < 0$) i korzystamy z poprzednich rozwiązań;

albo podstawienie $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ ($V_0 - E > 0$) i inne równanie różniczkowe: $\Psi'' - \alpha^2\Psi = 0$ (ze znakiem minus)

→W obszarze I te same funkcje:

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

→Zmiana charakteru rozwiązań w obszarze II:

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} = Ce^{-\alpha x}$$

(funkcja tłumiona, $\psi_{II} \rightarrow 0$ gdy $x \rightarrow \infty$)

→Warunki ciągłości:

$$A + B = C$$

$$ik_1A - ik_1B = -\alpha C$$



$$B = \frac{k_1 - i\alpha}{k_1 + i\alpha}A$$

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + i\alpha}A$$

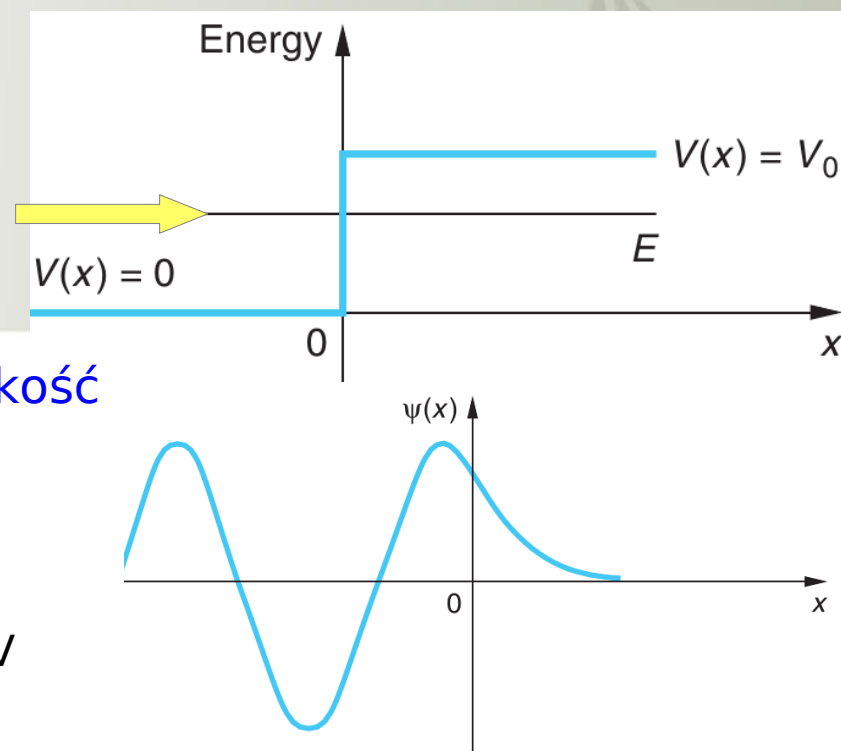


$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1$$

$$T = 0 \quad (j_{\text{trans}} = 0)$$

cząstka na pewno się odbije

3.3 Próg potencjału, $E < V_0$



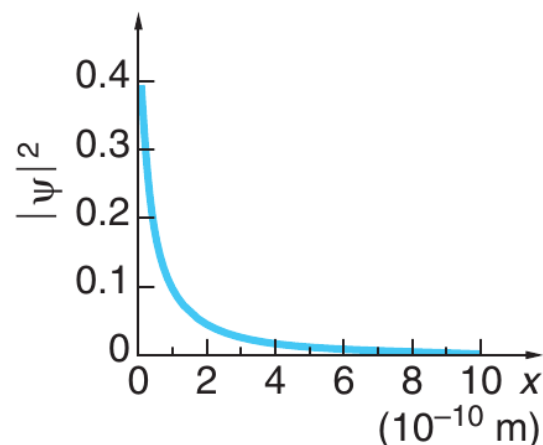
Wynik nieklasyczny: wnikanie na skończoną głębokość

Niezerowa funkcja falowa w obszarze II => prawd. przebywania cząstki w obszarze zabronionym

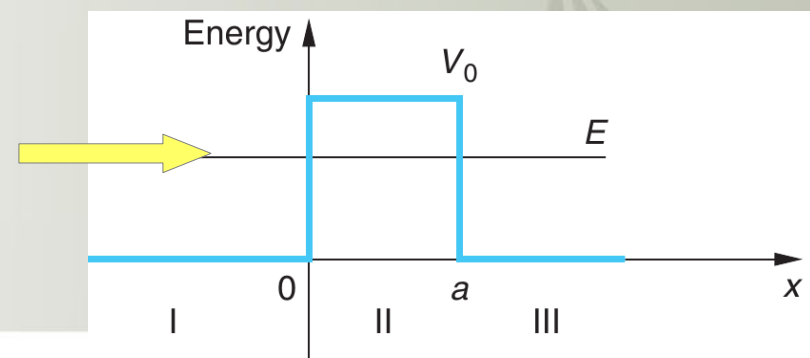
Przykład (z podr. Tiplera): wiązka elektronów o $E = 0.1$ eV pada na barierę 2 eV (rzędu pracy wyjścia w metalu). Jak zmienia się gęstość prawdopodobieństwa?

$x(\text{m})$	$2\alpha x$	$ \psi ^2$
0	0	0.40
0.1×10^{-10}	0.137	0.349
1.0×10^{-10}	1.374	0.101
2.0×10^{-10}	2.748	0.026
5.0×10^{-10}	6.869	0.001
10.0×10^{-10}	13.74	≈ 0

$$|\psi|^2 = C^2 \exp(-2\alpha x)$$



4.1 Bariera potencjału

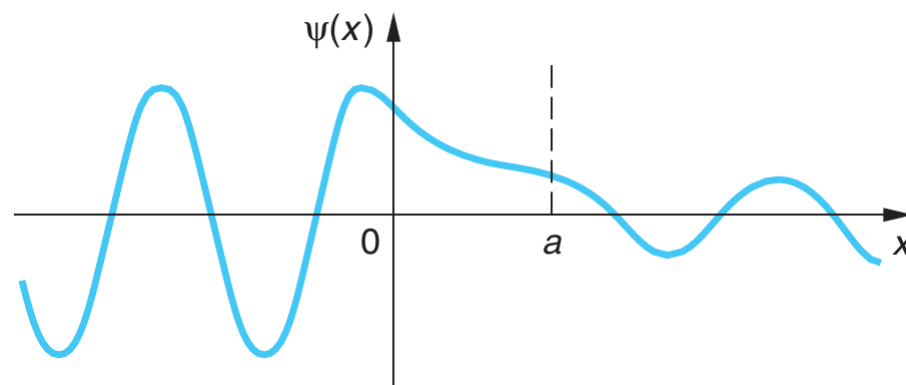


Analogicznie do punktów 3.1-3.3 funkcje falowe w poszczególnych obszarach:

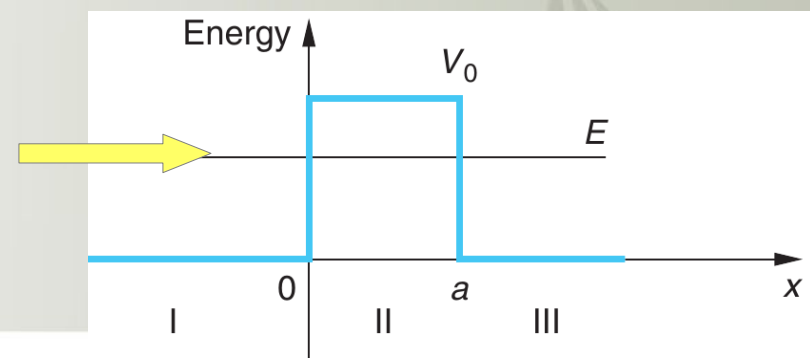
$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 & \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \\ \psi_{\text{II}}(x) &= Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x} & 0 < x < a & \quad \alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \\ \psi_{\text{III}}(x) &= Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x} & x > a & \end{aligned}$$

Warunki ciągłości w $x = 0$ i $x = a$ pozwalają wyznaczyć współczynniki B-F ($G = 0$ – brak fali odbitej w obszarze III) oraz wsp. transmisji: (~2-4 strony A4, zachęcam do przeliczenia)

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{\sinh^2 \alpha a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}$$



4.1 Bariera potencjału

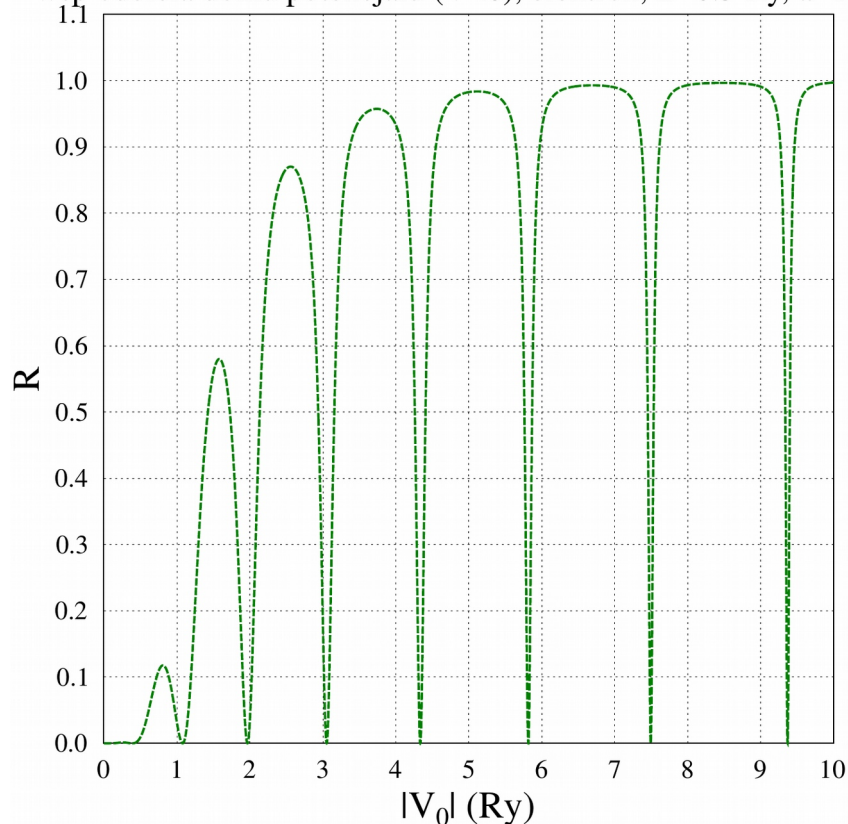


Transmisja zależna od szerokości bariery, masy i energii cząstki

Np. Elektron, $E = 1 \text{ eV}$, $V = 2 \text{ eV}$, $a = 1 \text{ Å}$ (10^{-10} m) $T = 0.78$ – efekt tunelowania

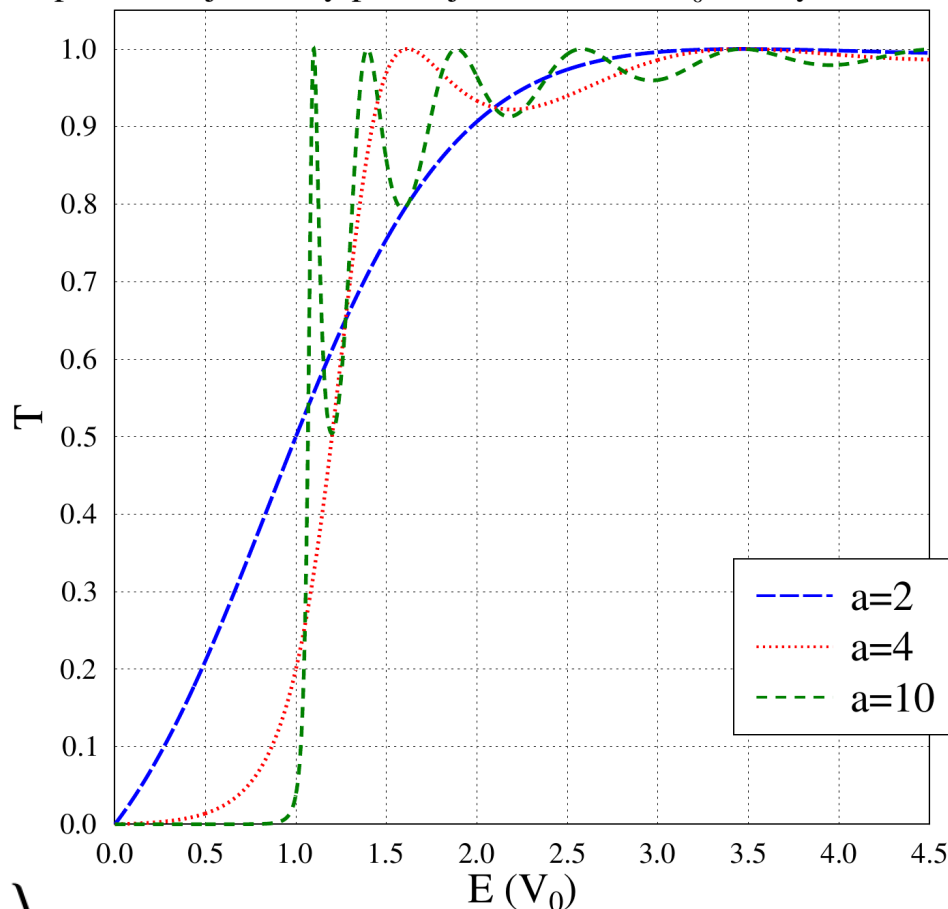
Możliwe odbicie gdy $E > V$ oraz dla $V < 0$

wsp odbicia dołku potencjału ($V < 0$), elektron, $E = 0.5 \text{ Ry}$, $a = 10 \text{ a}_B$



$R = 0$: przenikanie dla $a = n \frac{\lambda}{2}$

wsp transmisji bariery potencjału, elektron, $V_0 = 1 \text{ Ry}$, $a = 2, 4, 10 \text{ a}_B$



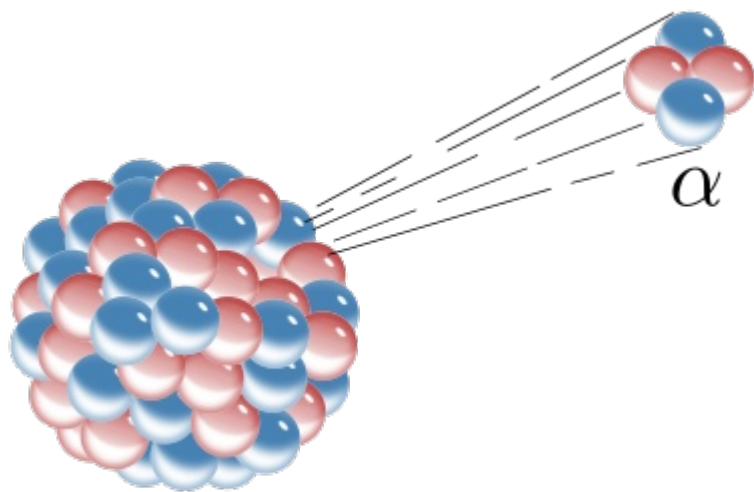
$1 \text{ Ry} = 13.6 \text{ eV}$, $1 \text{ a}_B = 0.529 \text{ Å}$

4.1 Tunelowanie - obserwacje w przyrodzie:

wyjaśnienie rozpadu α

Rozpad alfa – reakcja jądrowa rozpadu ciężkich jąder, w której emitowana jest cząstka α (jądro He), np.: ${}_{92}^{238}\text{U} \rightarrow {}_{90}^{234}\text{Th} + {}_2^4\text{He}^{2+}$

W wyniku rozpadu powstające jądro ma mniejszą o 2 liczbę atomową i o 4 liczbę masową. Zjawisko między innymi wykorzystywane w konstrukcji czujników dymu, w których rozpadające się jądra pierwiastka ameryk-241 emitują cząstki α łapane przez detektor. Jeśli pomiędzy źródło a detektor wpuścimy dym, to dym pochłania cząstki i ich brak detekcji uruchamia alarm.



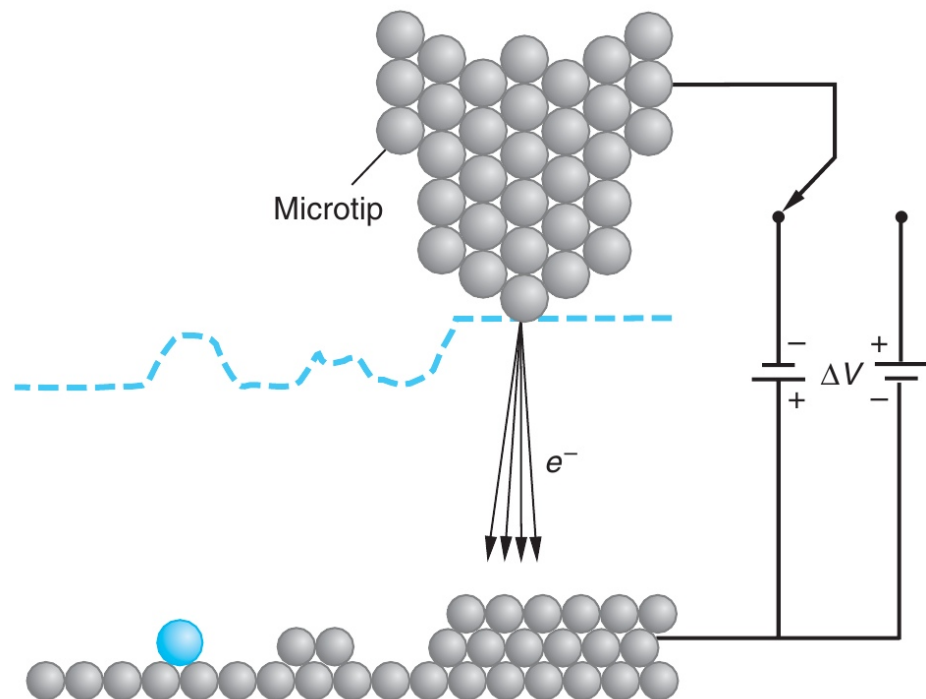
Rozpad alfa wyjaśniony teoretycznie przez G. Gamow. Cząstka alfa czyli silnie połączone 4 nukleony przebywające wewnątrz jądra pokonują barierę sił jądrowych i kulombowskich **tunelując** poza barierę i uciekając na zewnątrz jądra.

rys: wikipedia, domena publiczna

4.2 Tunelowanie - zastosowania w technice

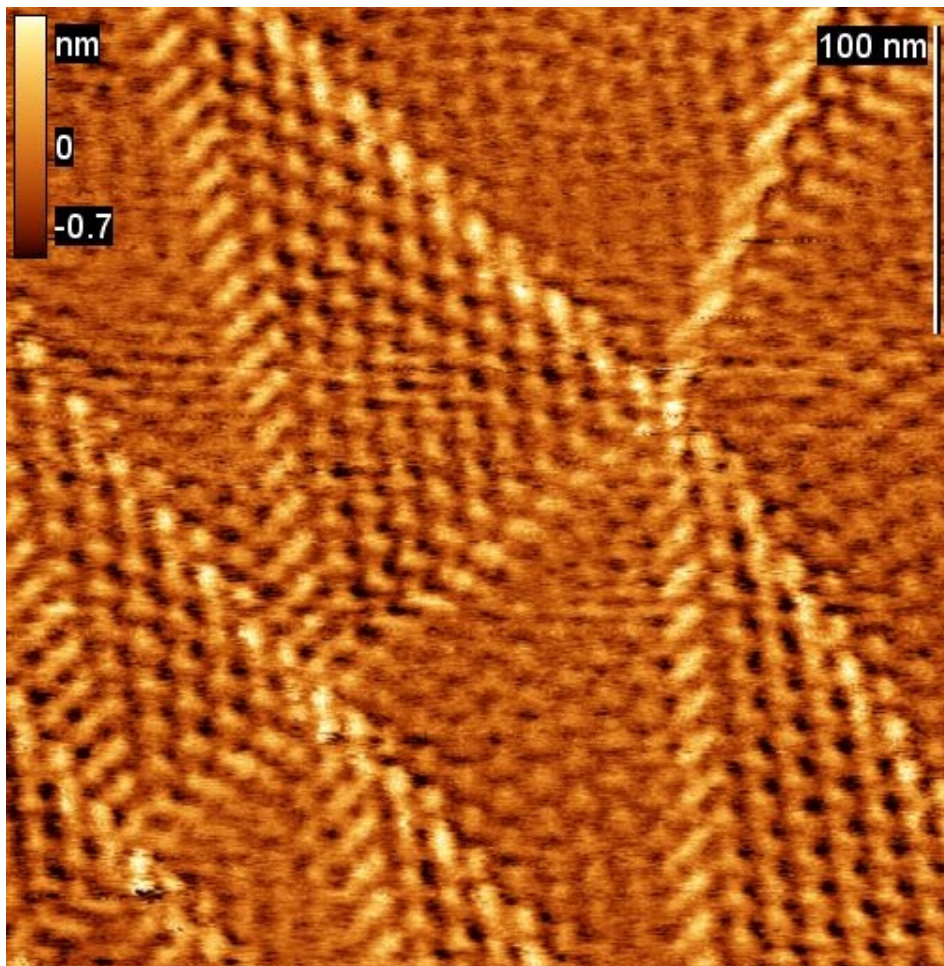
Zachęcam do poszukania informacji w internecie
m.in. o:

- 1) Diodzie tunelowej
- 2) Skaningowym mikroskopie tunelowym (STM)
- 3) Field-emission display (FED)



Prąd tunelowy silnie zależy od odległości ostrza od powierzchni (szerokość bariery), utrzymanie stałego prądu = stałej odległości (układ piezoelektryczny) pozwala na skanowanie powierzchni z rozdzielczością atomową

4.2 Tunelowanie - zastosowania

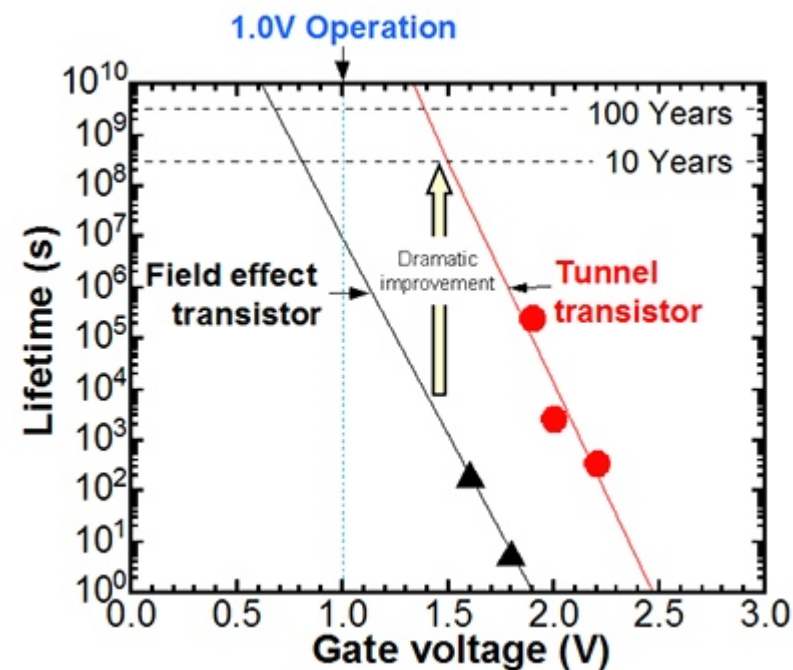
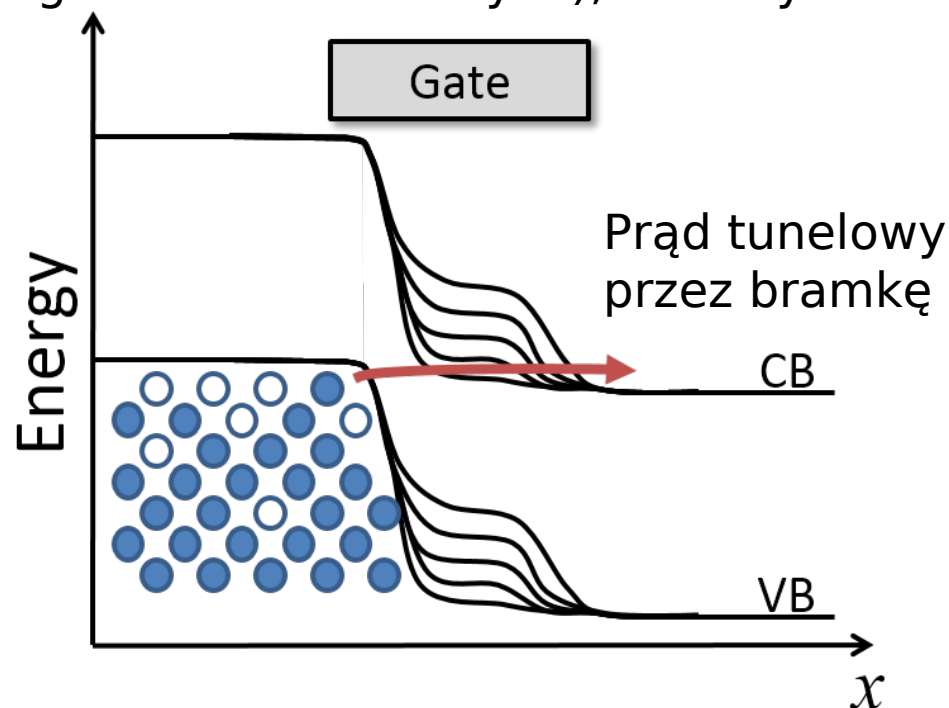


The STM image of graphite surface, dislocation network and Moire pattern

<http://www.nanoscopy.net/en/gallery.php?img=90>

Tranzystor tunelowy

- Przykładowy element, bazujący na czysto kwantowych efektach - **tranzystor tunelowy *tunnel FET***, perspektywa zastosowania w sensorach
- Zaleta: praca przy niskim napięciu, niski pobór mocy (zasilanie autonomiczne np. z ogniw fotowoltaicznych), duża żywotność



5. Symulacje - próg i bariera

<https://phet.colorado.edu/en/simulations/category/physics/quantum-phenomena>

Quantum Tunneling and Wave Packets

(screenshot – przykład na spełnienie warunku “przezroczystości” bariery)

