Loengud kvantmehaanikast: kümnes teema

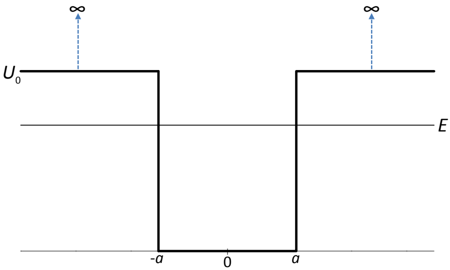
Matti Selg

Tartu Ülikooli Füüsika Instituut

Tunnel- ja resonantsefektid kvantmehaanikas

Ülekandemaatriksi meetod (transfer matrix method)

Hajumisteoorias keskendusime lainefunktsioonide asümptootilise käitumine uurimisele, jättes potentsiaali konkretiseerimata ja hajumistsentris toimuva tahaplaanile. Nüüd võtame lähema vaatluse alla situatsiooni, mil osakese liikumisvabadust piirab näiteks sügav potentsiaaliauk või kõrge potentsiaalibarjäär, kusjuures tema energia võib olla nii positiivne kui negatiivne. Olgu vaatlusalune potentsiaal selline, nagu näeme joonisel 1: $U(x) = 0$, kui $x \in (-a, a)$ ja $U(x) = U_0$ kõikjal mujal.



Joonis 1: Osake ühemõõtmelises potentsiaaliaugus.

Tunnel- ja resonantsefektid kvantmehaanikas

Lihtne on veenduda, et $E < U_0$ korral peab lahend väljaspool potentsiaaliauku omama kuju

$$\Psi(x) = \text{const} \cdot \exp(-\varkappa |x|), \ \varkappa = \sqrt{\frac{U_0 - E}{C}}, \tag{1}$$

kuna ainult sel juhul sumbub lahend mõlemas suunas eksponentsiaalselt, rahuldades seega füüsikalisi ääretingimusi. Ühemõõtmeline statsionaarne Schrödingeri võrrand

$$\Psi''(x) = \frac{U(x) - E}{C} \Psi(x), \ C \equiv \frac{\hbar^2}{2m}, \tag{2}$$

on alati suhteliselt kergesti numbriliselt lahenduv. Kuna see on teist järku diferentsiaalvõrrand, on tal kaks erilahendit, millest tuleb moodustada õige, füüsikalistele ääretingimustele vastav lineaarkombinatsioon: ainult siis on lahendid tegelikud energia omafunktsioonid ehk lainefunktsioonid. Ääretingimused sõltuvad konkreetse ülesande spetsiifikast.

Kui eeldada, et koordinaat $x \in (-\infty, \infty)$, siis diskreetsete omaseisundite lainefunktsioonide jaoks kehtib nõue $\Psi(x) \to 0$, kui $x \to \pm\infty$, pideva spektripiirkonna omafunktsioonid peavad aga lõpmatuses ($x \to \pm\infty$) saama tasalaineteks. Lisaks kehtib üldine nõue, et nii lainefunktsioon ise kui ka tema esimene tuletis peavad olema kõikjal pidevad.

Vaatame nüüd, millised on võrrandi (2) võimalikud lahendid piirkonnas $|x| \leq a$ (vt joonist 1). Kuna potentsiaal (ja seega ka hamiltoniaan) on sümmeetriline, peavad need lahendid olema kas **paaris**- või **paaritud** funktsioonid (vt lk 69 raamatus). Eriti lihtne on analüüsida juhtumit $U_0 \to \infty$, mil kooskõlas valemiga (1) peavad kehtima pidevuse tingimused

$$\Psi(-a) = 0, \ \Psi(a) = 0, \ U_0 \to \infty. \tag{3}$$

Siit järeldub üheselt, et lahenditeks saavad olla ainult trigonomeetrilised funktsioonid

$$\Psi_E(x) = A\cos(kx) \text{ (paarisfunktsioon)} \tag{4}$$

või

$$\Psi_E(x) = A\sin(kx) \text{ (paaritu funktsioon)}, \tag{5}$$

kus A on normeerimistegur, mis määratakse tingimusest $\int_{-a}^{a} [\Psi_E(x)]^2\, dx = 1$, ja

$$k = \sqrt{\frac{E}{C}}. \tag{6}$$

Selleks, et lainefunktsioon saaks äärepunktides $\pm a$ nulliks, peab lainearv ilmselt rahuldama tingimust

$$k = (2n+1)\frac{\pi}{2a},\; n = 0, 1, 2, ..., \tag{7}$$

kui lahend arvutatakse valemi (4) abil, ning

$$k = 2n\left(\frac{\pi}{2a}\right),\; n = 1, 2, 3, ... \tag{8}$$

(miks $n = 0$ mängust välja jääb?), kui kasutatakse valemit (5).

Seega saame järgmised (siin juba ka korrektselt normeeritud) lahendid:

$$\Psi_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \cos\left[(n + \frac{1}{2})\frac{\pi x}{a}\right], \tag{9}$$

$$\Psi_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sin\left(n\frac{\pi x}{a}\right). \tag{10}$$

Kasutades valemeid (6)-(8), on lihtne fikseerida ka vastavad energia omaväärtused:

$$E_l = l^2 \frac{C\pi^2}{4a^2},$$

kus $l = 1, 2, 3, ...$ ning täisarvude l ja n vahel kehtib seos

$$n = \frac{2l - 1 + (-1)^l}{4},$$

kusjuures paaritu l vastab valemile (9) ja paarisarvuline l - paaritule lahendile (10). Madalaima energiaga seisund ($l = 1$, $n = 0$) on sümmeetriline, järgmine seisund ($l = 2$, $n = 1$) - antisümmeetriline jne.

Lõpliku sügavusega potentsiaaliauk

Kui U_0 on lõplik, osutub energia omaväärtusprobleem keerukamaks, kuid endiselt täpselt lahenduvaks. Uus nüanss on selles, et nüüd saavad võimalikuks ka barjääri kõrgust ületavad energiaväärtused (vt joonist 1). Esmalt uurime siiski piirkonda $E < U_0$, kus $|x| \leq a$ jaoks saab endiselt kasutada valemeid (4)-(6). Nüüd aga tuleb need lahendid sujuvalt ühendada lahenditega väljaspool potentsiaaliauku, kooskõlas valemiga (1). Kuna lainefunktsioon ja tema tuletis peavad olema kõikjal (kaasa arvatud $x = \pm a$) pidevad, saame **sümmeetriliste** lahendite jaoks punktis $x = a$ tingimused

$$\cos(ka) = \mathrm{const} \cdot \exp(-\varkappa a), \tag{11}$$

$$-k \sin(ka) = -\mathrm{const} \cdot \varkappa \exp(-\varkappa a), \tag{12}$$

mille läbijagamine annab seose parameetrite

$$x \equiv ka, \; y \equiv \varkappa a \tag{13}$$

vahel:

$$y = x \tan(x). \tag{14}$$

Valemitest (1) ja (6) aga järeldub, et

$$x^2 + y^2 = r^2 \equiv \frac{U_0 a^2}{C}, \tag{15}$$

mis pole midagi muud kui ringjoone võrrand. Järelikult vastavad energia omaväärtused punktidele, kus võrrandiga (14) määratud kõver lõikub selle ringjoonega.

Täiesti analoogiliselt saab analüüsida antisümmeetrilisi (paarituid) lahendeid, mil lainefunktsiooni ja tema tuletise pidevusest punktis $x = a$ järeldub seos

$$y = -x/\tan(x). \tag{16}$$

ning omaväärtused on määratud kõverate (15) ja (16) lõikepunktidega. Tuleb muidugi arvesse võtta, et $\tan(x)$ on perioodiline funktsioon perioodiga π, kuid see just rõhutabki, et uuritava süsteemi omaseisundid on kvantiseeritud.

Kui "ringi raadius" on fikseeritud, siis madalaim (sümmeetriline) seisund ($n = 0$) vastab kõverate (14) ja (15) lõikepunktile piirkonnas $x \in (0, \pi/2)$.

Lõpliku sügavusega potentsiaaliauk

Järgmise (antisümmeetrilise) seisundi ($n = 1$) puhul $x \in (\pi/2, \pi)$, sellele järgneva sümmeetrilise seisundi ($n = 2$) puhul $x \in (\pi, 3/2\pi)$ jne.

Kõike seda on väga mugav kujutada graafiliselt, mida demonstreerib joonis 3. Erinevat värvi jämedate punktidega on seal kujutatud viiele erineva sügavusega potentsiaaliaugule vastavaid võimalikke energia omaväärtusi. Näeme, et barjääri kõrguse kasvades suureneb ka võimalike diskreetsete (ehk seotud) seisundite arv. Täpsemini, kui on täidetud tingimus

$$s\frac{\pi}{2} < \sqrt{\frac{U_0 a^2}{C}} < (s+1)\,\frac{\pi}{2}, \tag{17}$$

siis eksisteerib **täpselt** $s + 1$ diskreetset seisundit. Järelikult, kui näiteks $U_0 < \dfrac{C\pi^2}{4a^2}$, siis $s = 0$ ehk süsteemil on ainult üks (sümmeetriline) seotud seisund.

Lõpliku sügavusega potentsiaaliauk

Joonisel 4 on kujutatud lainefunktsioonid (neid ongi täpselt 3), mis vastavad ”ringile raadiusega” $r = 4$. Näeme, et need omafunktsioonid, nagu ka nende tuletised, on tõepoolest pidevad ning omavad õiget sümmeetriat. Oluline on aga see, et nad erinevad üsna tuntavalt nullist ka piirkondades $|x| \geq a$, kuhu osake klassikaliste ettekujutuste kohaselt ei saa üldse tungida. Järelikult on see puhas kvantefekt.

Sfäärilise potentsiaaliaugu diskreetsed seisundid
Valem (17) on peaaegu identne tingimusega

$$(2n-1)^2 \frac{\pi^2}{4} \leq \frac{V_0 r^2}{C} < (2n+1)^2 \frac{\pi^2}{4}, \tag{18}$$

millele viitasime, analüüsides hajumist sfäärilises potentsiaaliaugus. On siiski üks põhimõtteline erinevus. Nimelt puuduvad sfäärilisel potentsiaalil sümmeetrilised lahendid, kuna radiaalkoordinaat ei saa olla negatiivne.

Siit järeldub automaatselt, et sfäärilise potentsiaaliaugu (raadiusega r) jaoks eksisteerib "kriitiline" sügavus $V_{kr} = \frac{C\pi^2}{4r^2}$: sellest madalama potentsiaaliaugu jaoks **seotud seisundid puuduvad**. Muus osas jäävad analüüsi põhimõtted samaks.
Ülesande spetsiifkat arvestades on mõistlik defineerida dimensioonitud muutujad

$$x \equiv r\sqrt{\frac{V_0 - |E|}{C}}, \; y \equiv r\sqrt{\frac{|E|}{C}}. \tag{19}$$

Sel juhul jääb kehtima valem (16), mille võib teisendada kujule

$$\sin x = \pm\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \pm\frac{x}{r\sqrt{V_0/C}}. \tag{20}$$

Saadud võrrandi võib samuti lahendada graafiliselt, mida demonstreerib joonis 5. Sellel on kujutatud sinusoid $\sin x$ ja mõned erineva kaldenurgaga sirgepaarid, mis vastavad võrrandi (20) paremale poolele.

Lahendite fikseerimisel tuleb arvesse võtta, et kehtib tingimus (16), millest järeldub, et mitte iga joonisel 5 kujutatud lõikepunkt pole ülesande lahendiks, vaid ainult need, mis jäävad vahemikku

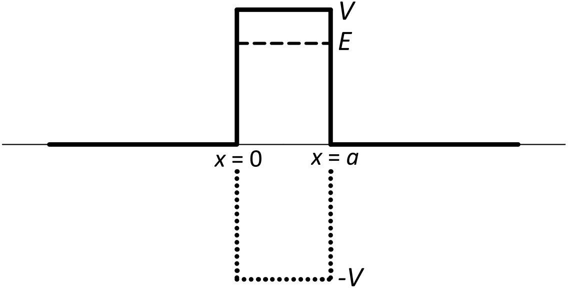
$$x \in [(2n-1)\frac{\pi}{2}, n\pi), \;\; n = 1, 2, 3, \ldots \tag{21}$$

Siit omakorda järeldub seos sfäärilise potentsiaaliaugu sügavuse ja seotud seisundite koguarvu vahel, mida väljendab valem (18). **NB!** Absoluutväärtuselt sama kaldenurgaga kaht sirget joonisel 5 tuleb käsitleda ühtse tervikuna ning leida vastava murdjoone "lubatud" lõikepunktid sinusoidiga.

Lõpmata lai mitmeastmeline potentsiaal

Erinegu potentsiaal nullist ainult vahemikus $x \in (0, a)$, kus ta on konstantne (joonis 2).

Lõpmata lai mitmeastmeline potentsiaal



Joonis 2: Lõpliku kõrgusega potentsiaalibarjäär (ja potentsiaaliauk).

Esmalt analüüsime varianti, mil $a \to \infty$, see tähendab,

$$\begin{aligned} U(x) &= 0, \text{ kui } x < 0, \\ U(x) &= V, \text{ kui } x > 0. \end{aligned} \tag{22}$$

Potentsiaali puudumisel ($U(x) = 0$) on Schrödingeri võrrandi üheks erilahendiks tasalaine, mis vastab x-telje suunas liikuvale osakesele (voo tiheduse vektor ühtib kiirusvektoriga).

Lõpmata lai mitmeastmeline potentsiaal

Kuna Schrödingeri võrrand ise on reaalne, siis mistahes erilahendi kaaskompleksne suurus on samuti selle võrrandi lahendiks. Järelikult piirkonnas $x < 0$ võib teiseks lahendiks võtta kaaskomplekse tasalaine, ning see vastab vastasuunas liikuvale osakesele (barjäärilt tagasipeegeldunud lainele). Kui $E > V$, siis kehtivad analoogilised kaalutlused ka piirkonna $x > 0$ suhtes. Schrödingeri võrrandi üldlahend ehk kahe erilahendi lineaarkombinatsioon on seega järgmine:

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x), & x < 0, \\ A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x), & x > 0, \end{cases} \tag{23}$$

kus

$$k_1 = \frac{p}{\hbar} = \sqrt{\frac{E}{C}}, \; k_2 = \sqrt{\frac{E-V}{C}}. \tag{24}$$

Ülesande spetsiifikat silmas pidades on ilmne, et piirkonnas $x > 0$ ei saa tagasipeegeldunud lainet reaalselt eksisteerida (puudub barjäär, millelt tagasi peegelduda).

Seega võime võtta $B_2 = 0$, mis võimaldab kergesti fikseerida ka koefitsiendid B_1 ja A_2. Selleks kasutame lainefunktsiooni ja tema tuletise pidevuse tingimusi äärepunktis $x = 0$:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2, \\ A_1 - B_1 = \dfrac{k_2}{k_1} A_2. \end{cases} \tag{25}$$

Siit saame

$$A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1 \tag{26}$$

ja

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1 . \tag{27}$$

Arvutame kolme kõnealuse laine vootihedused, kasutades valemit

$$\boxed{\boldsymbol{j}(x,t) \equiv \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \boldsymbol{I}.}$$

Lõpmata lai mitmeastmeline potentsiaal

Pealelangeva laine $A_1 \exp(ik_1 x)$ puhul on tulemuseks $j_0 \equiv \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2$, tagasipeegeldunud laine jaoks saame $j_R \equiv -\frac{\hbar k_1}{m} |B_1|^2$ ja barjäärist läbitulnud laine puhul $j_T \equiv \frac{\hbar k_2}{m} |A_2|^2$. Analoogia põhjal vastavate optika terminitega nimetatakse suurust $T \equiv \frac{j_T}{j_0} = \frac{k_2 |A_2|^2}{k_1 |A_1|^2}$ barjääri läbilaskvuseks, suurust $R \equiv \left|\frac{j_R}{j_0}\right| = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$ aga peegelduskoefitsiendiks. Seega antud juhul

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2, \tag{28}$$

$$T = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \tag{29}$$

ning, nagu lihtne veenduda,

$$R + T = 1. \tag{30}$$

Kui $E < V$, siis muutub parameeter k_2 puhtimaginaarseks. Tähistades $k_2 \equiv i\varkappa$ (ning stiili ühtsuse huvides $k_1 \equiv k$), ning võttes lihtsuse mõttes $A_1 = 1$, saame

$$B_1 = \frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa} \tag{31}$$

ja seega

$$R = |B_1|^2 = \left|\frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa}\right|^2 = 1, \;\; T = 1 - R = 0. \tag{32}$$

Niisiis muutub amplituud B_1 kompleksseks, mis tekitab peegeldunud lainele täiendava faasinihke:

$$B_1 \exp(-ikx) = \frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa} \exp(-ikx) = \exp\left[-ik(x + \delta)\right].$$

Kuna

$$\exp\left(-i\delta\right) = \frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa} = \frac{k^2 - \varkappa^2 - 2ik\varkappa}{k^2 + \varkappa^2},$$

siis

$$\delta = \arg\left(\frac{k + i\varkappa}{k - i\varkappa}\right) = \arctan\left(\frac{2k\varkappa}{k^2 - \varkappa^2}\right).$$

Valemist (32) järeldub, et $E < V$ korral toimub täielik tagasipeegeldus, mis üllataval kombel aga ei tähenda, et osake ei saa sel juhul piirkonda $x > 0$ tungida. Tõepoolest, kooskõlas valemitega (23) ja (26) saab lainefunktsioon selles piirkonnas kuju

$$A_2 \exp(ik_2 x) = \frac{2k}{k + i\varkappa} \exp(-\varkappa x), \; E < V, \; x > 0.$$

Järelikult, vaatamata täielikule tagasipeegeldusele eksisteerib nullist erinev tõenäosus

$$|\Psi_E(x)|^2 \sim \frac{4k^2}{k^2 + \varkappa^2} \exp(-2\varkappa x) > 0,$$

et osake asub suvalises punktis $x > 0$. Niisugune tulemus on klassikaliste ettekujutustega selges vastuolus ja spetsiifiline kvantnähtus, millest siin jutt, on saanud nime **tunnelefekt**.

Suvalise kujuga monotoonselt kasvav potentsiaal

Valemite (28) ja (29) puhul tasuks tähele panna, et nad on k_1 ja k_2 suhtes sümmeetrilised, mis tähendab, et pole tähtsust, mis suunas osake liigub.

Sama potentsiaali ja sama $E > V$ puhul oleksime võinud eeldada, et liikumine toimub vastupidises suunas (paremalt vasakule), ning saanud täpselt samasuguse peegelduskoefitsiendi ja läbilaskvuse. See tulemus pole sugugi ainuomane lõpmata laiale astmelisele potentsiaalile, vaid on potentsiaalibarjääride üldine ja väga tähtis omadus. Näitame seda monotoonselt kasvava potentsiaali korral, mil valemid (22) ja (23) kehtivad ainult asümptootiliselt, see tähendab

$$U(x) \to 0, \text{ kui } x \to -\infty,$$
$$U(x) \to V, \text{ kui } x \to \infty,$$

ja vastavalt

$$\Psi_E(x) \to \begin{cases} A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x), & x \to -\infty, \\ A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x), & x \to \infty, \end{cases} \tag{33}$$

kus k_1 ja k_2 on defineeritud valemiga (24) ning $E > V$.

Mõlemad avaldised valemis (33) kirjeldavad lineaarse diferentsiaalvõrrandi (Schrödingeri võrrandi) ühe ja sama üldlahendi kaht erinevat asümptootilist kuju. See aga tähendab, et koefitsiendid A_2 ja B_2 on avaldatavad koefitsientide A_1 ja B_1 lineaarkombinatsioonidena (kooskõlas diferentsiaalvõrrandite teooriaga). Olgu näiteks

$$A_2 = \alpha A_1 + \beta B_1, \tag{34}$$

kus konstandid α ja β sõltuvad konkreetse potentsiaali kujust (mis meid hetkel ei huvita). Schrödingeri võrrandi lahendi kaaskompleks on samuti selle võrrandi lahend. Seega kirjeldab üldlahendi asümptootilist käitumist valemiga (33) samaväärselt ka

$$\Psi_E^*(x) \to \begin{cases} B_1^* \exp(ik_1 x) + A_1^* \exp(-ik_1 x), & x \to -\infty, \\ B_2^* \exp(ik_2 x) + A_2^* \exp(-ik_2 x), & x \to \infty. \end{cases} \tag{35}$$

Võrdluse hõlbustamiseks vahetasime siin liidetavate järjekorra. Üldlahendid kujul (33) ja (35) erinevad ainult kordajate tähistusviisi poolest. Seega, eeldades seose (34) kehtivust, peab täpselt samasugune seos kehtima ka koefitsiendi B_2^* fikseerimiseks B_1^* ja A_1^* kaudu. Teisisõnu, $B_2^* = \alpha B_1^* + \beta A_1^*$ ehk

$$B_2 = \alpha^* B_1 + \beta^* A_1 . \tag{36}$$

Statsionaarsete seisundite jaoks on voo tihedus piki x-telge konstantne:

$$k_1 \left(|A_1|^2 - |B_1|^2 \right) = k_2 \left(|A_2|^2 - |B_2|^2 \right).$$

Teisendades selle avaldise paremat poolt valemite (34) ja (36) abil, jõuame järgmise üldise seoseni:

$$\left(|A_1|^2 - |B_1|^2 \right) \left[k_1 - k_2 \left(|\alpha|^2 - |\beta|^2 \right) \right] = 0.$$

Kuna üldjuhul $|A_1|^2 \neq |B_1|^2$, järeldub siit

$$|\alpha|^2 - |\beta|^2 = \frac{k_1}{k_2}.$$

Valemite (34) ja (36) abil on lihtne arvutada peegelduskoefitsiendid ükskõik kummas suunas barjääri kohal liikuva osakese jaoks. Tõepoolest, kui liikumine toimub positiivses suunas (x kasvab), tuleb füüsikalistest kaalutlustest lähtudes võtta $B_2 = 0$, ja seega valemi (36) tõttu $B_1/A_1 = -\beta^*/\alpha^*$. Kui aga osake liigub negatiivses suunas (x kahaneb), tuleb samadel kaalutlustel võtta $A_1 = 0$ ($B_2 \exp(-ik_2 x)$ on sel juhul pealelangeva laine rollis). Valemitest (34) ja (36) järeldub siis, et $A_2/B_2 = \beta/\alpha^*$. Vastavad peegelduskoefitsiendid

$$R_1 = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \left|\frac{\beta^*}{\alpha^*}\right|^2, \quad R_2 = \left|\frac{A_2}{B_2}\right|^2 = \left|\frac{\beta}{\alpha^*}\right|^2$$

on võrdsed, m. o. t. t.

Lõpliku laiusega potentsiaalibarjäär

Analüüsime nüüd juhtumit, mil potentsiaalibarjääri laius a on lõplik (vt (joonist 2):

Lõpliku laiusega potentsiaalibarjäär

$$U(x) = V, \text{ kui } x \in (0, a), \qquad (37)$$
$$U(x) = 0, \text{ kui } x \notin (0, a).$$

Lähenegu osake potentsiaalibarjäärile vasakult ning olgu esialgu $E < V$, mis klassikaliste ettekujutuste kohaselt tähendaks, et punktis $x = 0$ peaks toimuma osakese tagasipööre. Kvantmehaanika reeglite kohaselt tuleb aga Schrödingeri võrrandi (2) lahend moodustada kolmest omavahel sujuvalt ühendatud komponendist:

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} \exp(ikx) + A\exp(-ikx), & x < 0, \\ Be^{-\varkappa x} + Ce^{\varkappa x}, & 0 < x < a, \\ D\exp\left[ik(x-a)\right], & x > a, \end{cases} \qquad (38)$$

kus

$$k = \sqrt{\frac{E}{C}}, \quad \varkappa = \sqrt{\frac{V-E}{C}}. \qquad (39)$$

Nagu varemgi, kirjeldab tasalaine $\exp(ikx)$ x-telje suunas liikuvat osakest ning $A\exp(-ikx)$ - vastupidises suunas liikuvat osakest ehk tagasipeegeldunud lainet.

Lõpliku laiusega potentsiaalibarjäär

Piirkonnas $x > a$ saab aga rääkida barjäärist läbitunginud (tunneleerunud) ja x-telje suunas liikumist jätkavatest osakestest. Näitame, et niisugune nähtus on kvantmehaanikas tõepoolest võimalik.
Lihtne arvutus näitab, et pealelangeva laine vootihedus $j_0 = \dfrac{\hbar k}{m}$, tagasipeegeldunud lainel $j_0 \left|A\right|^2$ ja läbitulnud lainel $j_0 \left|D\right|^2$. Barjääri läbipaistvus (ehk tunneleerumise tõenäosus) on järelikult $\left|D\right|^2$ ja peegelduskoefitsient $\left|A\right|^2$. Nende suuruste arvutamiseks tuleb jällegi kasutada lainefunktsiooni $\Psi_E(x)$ ja tema tuletise pidevuse tingimusi äärepunktides $x = 0$ ja $x = a$. Kooskõlas valemiga (38) on need tingimused järgmised:

$$\begin{cases} 1 + A = B + C, \\ ik(1 - A) = -\varkappa(B - C), \\ D = Be^{-\varkappa a} + Ce^{\varkappa a}, \\ ikD = -\varkappa(Be^{-\varkappa a} - Ce^{\varkappa a}). \end{cases} \tag{40}$$

Siit pole raske jõuda seosteni

$$e^{\varkappa a} = \frac{\varkappa(1+A) - ik(1-A)}{D(\varkappa - ik)} = \frac{1}{D} + \frac{A}{D} \cdot \frac{\varkappa + ik}{\varkappa - ik} \qquad (41)$$

ja

$$e^{-\varkappa a} = \frac{\varkappa(1+A) + ik(1-A)}{D(\varkappa + ik)} = \frac{1}{D} + \frac{A}{D} \cdot \frac{\varkappa - ik}{\varkappa + ik}. \qquad (42)$$

Elimineerides valemitest (41) ja (42) suuruse $\frac{A}{D}$, saame

$$D = \left[\cosh(\varkappa a) - i\frac{k^2 - \varkappa^2}{2k\varkappa}\sinh(\varkappa a)\right]^{-1} \rightarrow \qquad (43)$$

$$\boxed{T(E) = |D|^2 = \left\{1 + \frac{\left[\sinh\left(\sqrt{\frac{V-E}{C}}a\right)\right]^2}{4E/V\,(1-E/V)}\right\}^{-1}, \quad E < V.} \qquad (44)$$

Lõpliku laiusega potentsiaalibarjäär

Saadud tulemus on kergesti üldistatav ka barjääri kõrgusest suurema energiaga osakeste kirjeldamiseks. Selleks tuleb lihtsalt asendada $V - E \to E - V$ ning hüperboolne siinus tavalise siinusega:

$$T(E) = \left\{ 1 + \frac{\left[\sin\left(\sqrt{\frac{E-V}{C}}a\right)\right]^2}{4E/V\,(E/V-1)} \right\}^{-1}, \quad E > V. \qquad (45)$$

Võib näidata (tehke seda!), et ka antud juhul

$$R(E) + T(E) = 1, \qquad (46)$$

seega on viimased valemid kasutatavad ka peegelduskoefitsiendi arvutamiseks.

Tulemusi illustreerivad joonised 6-9, mis toovad esile kõik tunneleerumisele iseloomulikud jooned.

Lõpliku laiusega potentsiaalibarjäär

$E < V$ korral eksisteerib alati nullist suurem tõenäosus, et osake tungib läbi barjääri. Seda õigupoolest nimetataksegi tunnelefektiks, ning kõige markantsemalt on see näha joonisel 6. Tunneleerumise tõenäosuse annab valem (44) ning seda mõjutavad niihästi barjääri kõrgus kui ka laius.

Kui $E > V$, siis on läbilaskvus $T(E)$ ostsilleeruv funktsioon, omades tervet rida (tegelikult lõpmata palju) maksimume, kus $T = 1$. Siin on tegu interferentsefektiga: barjääri seintelt $x = 0$ ja $x = a$ peegeldunud lained kustutavad teineteist täielikult, mistõttu barjäär osutubki ideaalselt läbipaistvaks.

Valem(45) on rakendatav ka potentsiaaliaugule, eeldades, et $E > 0$. Sel juhul tuleb lihtsalt asendada $V \to -|V|$, nii et

$$T(E) = \left\{ 1 + \frac{\left[\sin \left(\sqrt{\frac{E+|V|}{C}} a \right) \right]^2}{4E/|V| \left(E/|V| + 1 \right)} \right\}^{-1}, \quad V < 0, \; E > 0. \qquad (47)$$

Ülekandemaatriksi meetod (*transfer matrix method*)

Valemiga (37) (vt ka joonist 2) defineeritud potentsiaalibarjääri läbilaskvuse arvutamiseks saab kasutada ülaltoodust üldisemat lähenemisviisi, mis on eriti kasulik selle poolest, et ta võimaldab lahendada ka märksa keerukamaid tunneleerumisülesandeid. Võtame Schrödingeri võrrandi üldlahendi jaoks kolmes osapiirkonnas kasutusele eraldi tähised:

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) \equiv A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x), & x < 0, \\ \Psi_2(x) \equiv A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x), & 0 < x < a, \\ \Psi_3(x) \equiv A_3 \exp(ik_1 x) + B_3 \exp(-ik_1 x), & x > a, \end{cases}$$

kus

$$k_1 = \sqrt{\frac{E}{C}}, \ k_2 = \sqrt{\frac{E - V}{C}}. \tag{48}$$

NB! Siin ei eeldata, et mõni koefitsientidest omaks fikseeritud väärtust, samuti pole tähtsust, kas parameeter k_2 on reaalne või imaginaarne.

Lainefunktsiooni komponendid võib esitada vastavate rea- ja veeruvektorite korrutisena

$$\Psi_n(x) = \begin{pmatrix} \exp(ik_n x) & \exp(-ik_n x) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(ik_n x) & \exp(-ik_n x) \end{pmatrix} \Phi_n, \;\; n = 1, 2, 3. \tag{49}$$

Sarnaselt valemiga (40), fikseerime pidevuse tingimused kohal $x = 0$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ ik_1(A_1 - B_1) = ik_2(A_2 - B_2), \end{cases} \tag{50}$$

ja viime need maatrikskujule

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_1 & -ik_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_2 & -ik_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \tag{51}$$

Ülekandemaatriksi meetod (*transfer matrix method*)

Kasutades 2 × 2-maatriksite pööramise reeglit

$$\boxed{\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad-bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix},} \tag{52}$$

saame seose lahendivektorite vahel:

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = D_{12}\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = D_{12}\Phi_2, \tag{53}$$

kus

$$D_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_1 & -ik_1 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_2 & -ik_2 \end{pmatrix} = \tag{54}$$

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\dfrac{k_2}{k_1} & 1-\dfrac{k_2}{k_1} \\ 1-\dfrac{k_2}{k_1} & 1+\dfrac{k_2}{k_1} \end{pmatrix}.$$

Kuna maatriks D_{12} ühendab piirkondi 1 ja 2 katkevuspunktis $x = 0$, tavatsetakse teda nimetada **katkevusmaatriksiks** (ingl. *discontinuity matrix*).

Samasuguse mõttekäigu abil võime leida seose üldlahendi komponentide Φ_2 ja Φ_3 vahel. Lähtume pidevuse tingimustest äärepunktis $x = a$, kuid nihutame koordinaadistikku nii, et üleminekupunkt nihkuks kohale $x' = 0$. Sellega saavutame täieliku analoogia situatsiooniga, mida kirjeldavad valemid (50)-(53), nii et uues koordinaadistikus võime lõpptulemuse kohe välja kirjutada:

$$\Phi_2' = D_{21}\Phi_3', \tag{55}$$

kus maatriks D_{21} on kujult täpselt samasugune nagu D_{12} ainult selle vahega, et suurused k_1 ja k_2 vahetavad kohad (kuna nüüd on lähtepiirkonnas lainearvuks k_2 ja lõpp-piirkonnas k_1):

$$D_{21} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + \dfrac{k_1}{k_2} & 1 - \dfrac{k_1}{k_2} \\ 1 - \dfrac{k_1}{k_2} & 1 + \dfrac{k_1}{k_2} \end{pmatrix}. \tag{56}$$

Saadud tulemus on vaja teisendada lähtekoordinaadistikku, mida on väga lihtne teha, kuna

$$\Psi_2(x) = \Psi_2'(x-a) \tag{57}$$

(*prim* viitab kõikjal nihutatud koordinaadistikule $x' = x - a$). Järelikult, meenutades valemit (49), saame kirjutada

$$\Psi_2(x) = \begin{pmatrix} \exp\left[ik_2(x-a)\right] & \exp\left[-ik_2(x-a)\right] \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_2' \\ B_2' \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \exp(ik_2x) & \exp(-ik_2x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2'e^{-ik_2a} \\ B_2'e^{ik_2a} \end{pmatrix}. \tag{58}$$

Näeme, et reavektorid valemites (49) (võttes seal $n = 2$) ja (58) on identsed, millest järeldub, et

$$\Phi_2 = \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_2'e^{-ik_2a} \\ B_2'e^{ik_2a} \end{pmatrix} = P_2\Phi_2'. \tag{59}$$

Maatriksit

$$P_2 \equiv \begin{pmatrix} e^{-ik_2 a} & 0 \\ 0 & e^{ik_2 a} \end{pmatrix} \tag{60}$$

nimetatakse **levikumaatriksiks** (ingl. *propagation matrix*) piirkonnas 2.
Analoogia põhjal võime kohe kirjutada ka $\Phi_3 = P_1 \Phi_3'$ (levikumaatriksi indeks on sama, mis vastava piirkonna lainearvul) ehk

$$\Phi_3' = P_1^{-1} \Phi_3 = \begin{pmatrix} e^{ik_1 a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 a} \end{pmatrix} \Phi_3 . \tag{61}$$

Jääb veel üle ühendada valemid (53), (55), (59) ja (61), mille tulemuseks on järgmine üldine seos piirkondade 1 ja 3 lahendivektorite vahel (meenutagem, et neis mõlemis on lainearv k_1):

Ülekandemaatriksi meetod (*transfer matrix method*)

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = T_{11}\Phi_3 = T_{11}\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}. \qquad (62)$$

Siin defineerisime **ülekandemaatriksi** (ingl. *transfer matrix*)

$$T_{11} = D_{12}P_2D_{21}P_1^{-1}. \qquad (63)$$

Valemi (62) rakendamiseks tuleb võtta $B_3 = 0$ (viimases piirkonnas tagasipeegeldust ei toimu), täpselt samuti nagu valemis (38). Siis

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = T_{11}\begin{pmatrix} A_3 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} T_1A_3 \\ T_2A_3 \end{pmatrix} \qquad (64)$$

(lihtne on veenduda, et viimase vektori üldkuju on just selline). Läbilaskvus- ja peegelduskoefitsiendi jaoks saame seega

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{1}{|T_1|^2}, \quad R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \frac{|T_2|^2}{|T_1|^2}. \qquad (65)$$

Ülekandemaatriksi meetod (*transfer matrix method*)

Kui kõik teisendused läbi teha, on tulemuseks muidugi needsamad põhivalemid (44) ja (45), mis me juba tuletasime. Praegust lähenemisviisi on aga lihtne üldistada suvalise kujuga potentsiaalibarjääri läbilaskvuse ja peegelduskoefitsiendi kindlakstegemiseks. Selleks tuleb potentsiaali lähendada trepikujulise murdjoonega, nii nagu joonisel 10 (lihtsuse mõttes eeldame, et kõigi astmete laius on a). Seos lainefunktsiooni esimese (Φ_1) ja viimase (Φ_n) komponendi vahel jääb endiseks (valemites (62) ja (64) tuleb ainult asendada $3 \to n$), kuid valem (63) omandab üldisema kuju

$$\boxed{T_{11} = D_{01}P_1D_{12}P_2D_{23}P_3...P_nD_{n0}P_0^{-n}, \ n = 1, 2, ...,} \qquad (66)$$

kus indeks n tähistab "trepiastmete" koguarvu, $D_{i,i+1}$ on katkevusmaatriks üleminekul piirkonnast i, milles $V(x) \equiv V_i$ (kusjuures $V_0 = V_{n+1} \equiv 0$) piirkonda $i+1$ ja P_i on i-nda piirkonna levikumaatriks.

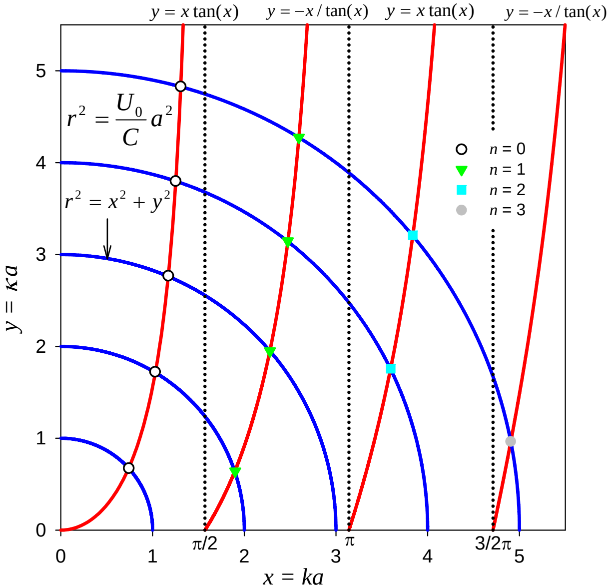
Ülekandemaatriksi meetod (*transfer matrix method*)

Ka siin toob viimane levikumaatriks

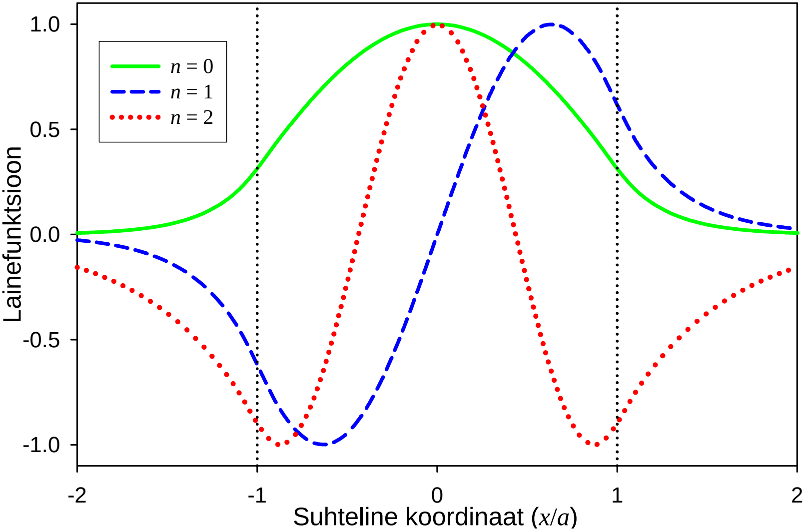
$$P_0^{-n} = \left(P_0^{-1}\right)^n = \begin{pmatrix} e^{ik_0 na} & 0 \\ 0 & e^{-ik_0 na} \end{pmatrix}$$

süsteemi tagasi õigesse koordinaadistikku, kusjuures läbilaskvus- ja peegelduskoefitsiendi arvutamiseks polegi teda tegelikult tarvis, kuna ta ei muuda vootiheduste suhet. Tõepoolest, ka üldjuhul tuleb võtta $B_n = 0$ ehk lainefunktsiooni viimane komponent on $\begin{pmatrix} A_n \\ 0 \end{pmatrix}$. Pärast maatriksiga P_0^{-n} läbikorrutamist saab sellest $\begin{pmatrix} A_n e^{ik_0 na} \\ 0 \end{pmatrix} = e^{ik_0 na} \begin{pmatrix} A_n \\ 0 \end{pmatrix}$, ning nagu näeme, lahendivektori moodul sellest ei muutu.

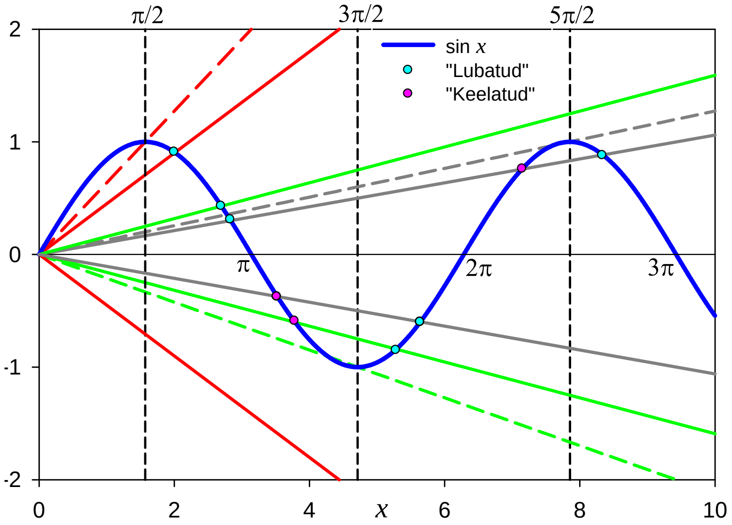
Kuna 2×2-maatriksite manipuleerimine on arvutustehniliselt äärmiselt lihtne, siis on ülekandemaatriksi meetod tõhus abivahend väga mitmesuguste lainete levikuga seotud ülesannete lahendamisel.



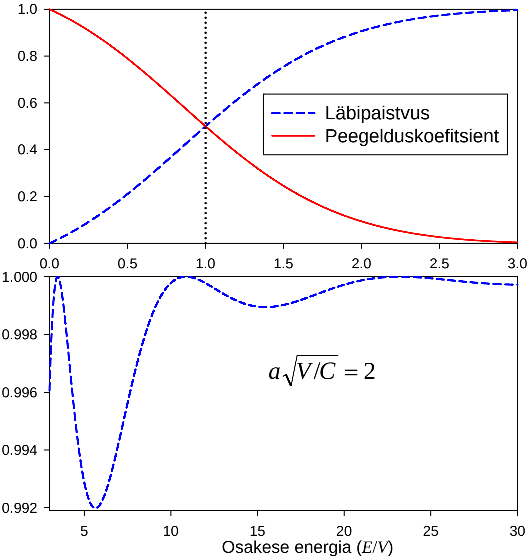
Joonis 3: Lõpliku sügavusega potentsiaaliaugu diskreetsete seisundite demonstratsioon.



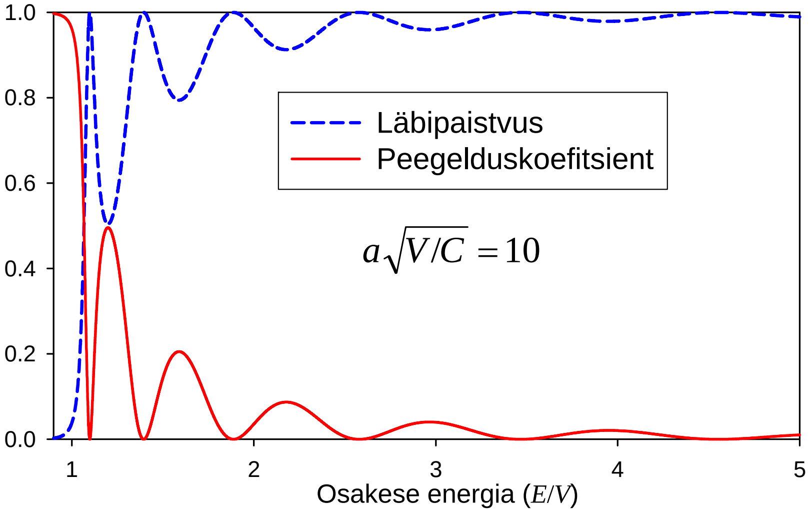
Joonis 4: Lõpliku sügavusega potentsiaaliaugu diskreetsete seisundite omafunktsioonid ($r = 4$).



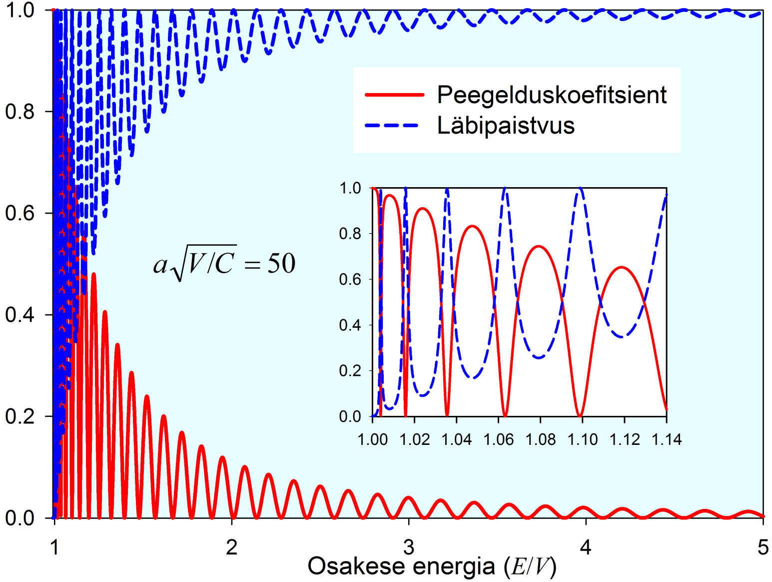
Joonis 5: Sfäärilise potentsiaaliaugu diskreetsete seisundite asukoha leidmine graafilisel meetodil. Nimetatud seisundid on võrrandi (20) lahenditeks, kuid peavad rahuldama ka lisatingimust (21).



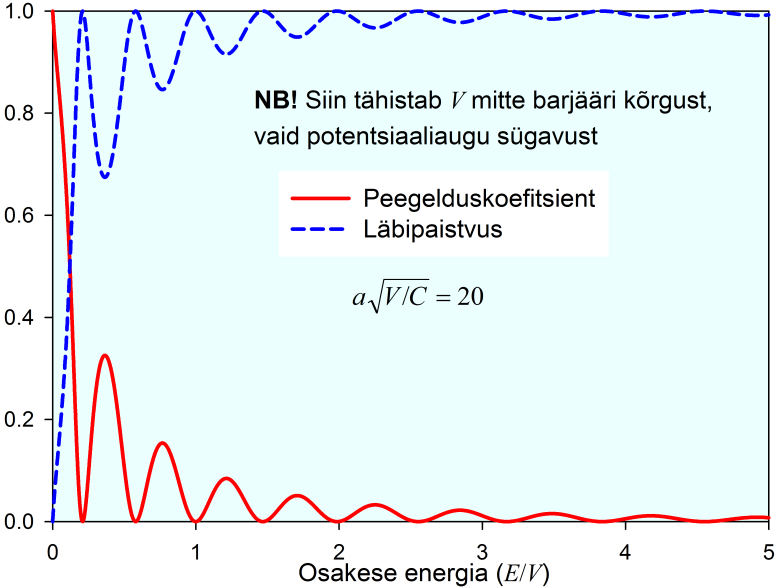
Joonis 6: Lõpliku laiusega potentsiaalibarjäär ($s = 2$). Alumine joonis algab koordinaadist, millega ülemine joonis lõpeb. Punktiir tähistab barjääri kõrgusele vastavat energiat.



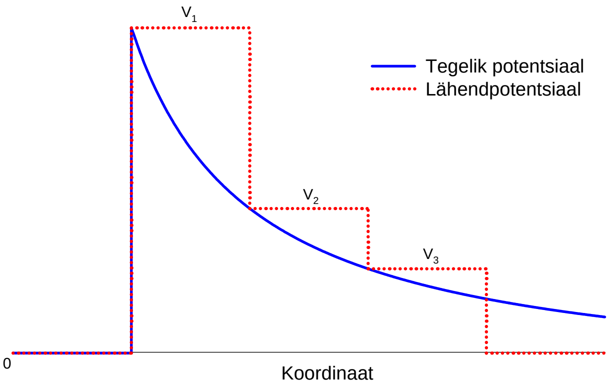
Joonis 7: Lõpliku laiusega potentsiaalibarjäär ($s = 10$).



Joonis 8: Lõpliku laiusega potentsiaalibarjäär ($s = 50$).



Joonis 9: Lõpliku laiusega potentsiaaliauk ($s = 20$).



Joonis 10: Potentsiaali lähendamine trepikujulise murdjoonega.

Valemid, millele leidub tekstis viiteid

(1) $$\Psi(x) = \text{ const} \cdot \exp(-\varkappa\,|x|),\ \varkappa = \sqrt{\frac{U_0 - E}{C}}.$$

(2) $$\Psi''(x) = \frac{U(x) - E}{C}\Psi(x),\ C \equiv \frac{\hbar^2}{2m}.$$

(4) $$\Psi_E(x) = A\cos(kx) \text{ (paarisfunktsioon).}$$

(5) $$\Psi_E(x) = A\sin(kx) \text{ (paaritu funktsioon).}$$

(6), (7) $$k = \sqrt{\frac{E}{C}},\ k = (2n+1)\frac{\pi}{2a},\ n = 0, 1, 2, ...$$

(8) $$k = 2n\left(\frac{\pi}{2a}\right),\ n = 1, 2, 3, ...$$

(14), (16) $$y = x\tan(x),\ y = -x/\tan(x).$$

(17) $$s\frac{\pi}{2} < \sqrt{\frac{U_0 a^2}{C}} < (s+1)\,\frac{\pi}{2}.$$

Valemid, millele leidub tekstis viiteid

(18) $$(2n-1)^2\frac{\pi^2}{4} \le \frac{V_0 r^2}{C} < (2n+1)^2\frac{\pi^2}{4}.$$

(20) $$\sin x = \pm\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} = \pm\frac{x}{r\sqrt{V_0/C}}.$$

(21) $$x \in \left[(2n-1)\frac{\pi}{2}, n\pi\right), \; n = 1, 2, 3, ...$$

(22) $$U(x) = 0, \text{ kui } x < 0,$$
$$U(x) = V, \text{ kui } x > 0.$$

(23) $$\Psi_E(x) = \begin{cases} A_1\exp(ik_1x) + B_1\exp(-ik_1x), & x < 0, \\ A_2\exp(ik_2x) + B_2\exp(-ik_2x), & x > 0. \end{cases}$$

(24) $$k_1 = \frac{p}{\hbar} = \sqrt{\frac{E}{C}}, \; k_2 = \sqrt{\frac{E-V}{C}}.$$

(26), (28), (29) $$A_2 = \frac{2k_1}{k_1+k_2}A_1, \; R = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2, \; T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}.$$

Valemid, millele leidub tekstis viiteid

$$(33) \quad \Psi_E(x) \to \begin{cases} A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x), & x \to -\infty, \\ A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x), & x \to \infty, \end{cases}$$

$$(34) \quad A_2 = \alpha A_1 + \beta B_1 .$$

$$(35) \quad \Psi_E^*(x) \to \begin{cases} B_1^* \exp(ik_1 x) + A_1^* \exp(-ik_1 x), & x \to -\infty, \\ B_2^* \exp(ik_2 x) + A_2^* \exp(-ik_2 x), & x \to \infty. \end{cases}$$

$$(36) \quad B_2 = \alpha^* B_1 + \beta^* A_1 .$$

$$(37) \quad \begin{aligned} U(x) &= V, \text{ kui } x \in (0, a), \\ U(x) &= 0, \text{ kui } x \notin (0, a). \end{aligned}$$

$$(38) \quad \Psi_E(x) = \begin{cases} \exp(ikx) + A \exp(-ikx), & x < 0, \\ B e^{-\varkappa x} + C e^{\varkappa x}, & 0 < x < a, \\ D \exp\left[ik(x-a)\right], & x > a, \end{cases}$$

$$k = \sqrt{\frac{E}{C}}, \quad \varkappa = \sqrt{\frac{V-E}{C}}.$$

Valemid, millele leidub tekstis viiteid

$$(40) \qquad \begin{cases} 1 + A = B + C, \\ ik(1 - A) = -\varkappa(B - C), \\ D = Be^{-\varkappa a} + Ce^{\varkappa a}, \\ ikD = -\varkappa(Be^{-\varkappa a} - Ce^{\varkappa a}). \end{cases}$$

$$(44) \qquad \boxed{T(E) = |D|^2 = \left\{ 1 + \frac{\left[\sinh\left(\sqrt{\frac{V-E}{C}}a\right)\right]^2}{4E/V\,(1 - E/V)} \right\}^{-1}, \quad E < V.}$$

$$(45) \qquad T(E) = \left\{ 1 + \frac{\left[\sin\left(\sqrt{\frac{E-V}{C}}a\right)\right]^2}{4E/V\,(E/V - 1)} \right\}^{-1}, \quad E > V.$$

Valemid, millele leidub tekstis viiteid

(49)
$$\Psi_n(x) = \begin{pmatrix} \exp(ik_n x) & \exp(-ik_n x) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(ik_n x) & \exp(-ik_n x) \end{pmatrix} \Phi_n, \; n = 1, 2, 3.$$

(50)
$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ ik_1(A_1 - B_1) = ik_2(A_2 - B_2), \end{cases}$$

(51)
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_1 & -ik_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_2 & -ik_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}.$$

(52)
$$\boxed{\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}}.$$

(53), (55)
$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = D_{12} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = D_{12}\Phi_2, \; \Phi_2' = D_{21}\Phi_3'.$$

Valemid, millele leidub tekstis viiteid

(59) $$\Phi_2 = \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_2' e^{-ik_2 a} \\ B_2' e^{ik_2 a} \end{pmatrix} = P_2 \Phi_2'.$$

(62) $$\Phi_1 = \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = T_{11}\Phi_3 = T_{11} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}.$$

(63) $$T_{11} = D_{12} P_2 D_{21} P_1^{-1}.$$

(64) $$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = T_{11} \begin{pmatrix} A_3 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} T_1 A_3 \\ T_2 A_3 \end{pmatrix}.$$