

Ismétlés

A rendszer állapotát a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ hullámfüggvénye jellemzi. A hullámfüggvény abszolútérték négyzete a részecske megtalálási valószínűségét adja egy kis tér tartományban.

$$p(\mathbf{r})d^3r = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r, \quad \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

Az időfüggő Schrödinger egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\mathbf{r})\Psi$$

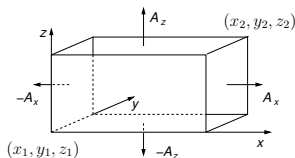
Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_n(\mathbf{r}) + V\varphi_n(\mathbf{r}) = E_n \varphi_n(\mathbf{r})$$

E_n a rendszer lehetséges energiái. Az időfüggő megoldások:

$$\Psi(t, \mathbf{r}) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \varphi_n(\mathbf{r})$$

Kontinuitási egyenlet



Tekintsünk egy kicsiny, téglat-est alakú tartományt, amelyen állandó sűrűségű folyadék folyik keresztül. A hasáb oldalai: dx , dy , dz .

A $v_x(x_2, y, z) - v_x(x_1, y, z)$ mennyiséget közelíthetjük a parciális deriváltja segítségével:

$$v_x(x_2, y, z) - v_x(x_1, y, z) = \frac{\partial v_x}{\partial x}(x_2 - x_1) = \frac{\partial v_x}{\partial x} dx$$

$$-\frac{\Delta m}{\Delta t} = \rho \frac{\partial v_x}{\partial x} dx dy dz + \rho \frac{\partial v_y}{\partial y} dy dx dz + \rho \frac{\partial v_z}{\partial z} dz dx dy = \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \Delta V$$

ahol ΔV a hasáb térfogata.

Az egyes oldalakon egységnyi idő alatt átfolyó folyadék mennyisége:

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta m}{\Delta t} = & \rho(v_x(x_2, y, z)dydz - v_x(x_1, y, z))dydz \\ & + \rho(v_y(x, y_2, z)dx dz - v_y(x, y_1, z))dx dz \\ & + \rho(v_z(x, y, z_2)dx dy - v_z(x, y, z_1))dx dy \end{aligned}$$

ahol a folyadék sebessége $v_x(x, y, z)$, $v_y(x, y, z)$, $v_z(x, y, z)$.

Kontinuitási egyenlet

$$-\frac{\Delta m}{\Delta t} = \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \Delta V$$

$$\Delta \rho = \frac{\Delta m}{\Delta V},$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_x}{\partial x} + \rho \frac{\partial v_y}{\partial y} + \rho \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$$

$\text{div} \mathbf{V} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$ a $\mathbf{v}$ vektormező divergenciája. Vezessük be a $\mathbf{j} = \rho \mathbf{V}$ áramsűrűséget!

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_x}{\partial x} + \rho \frac{\partial v_y}{\partial y} + \rho \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0$$

Kontinuitási egyenlet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0$$

Valószínűségi áramsűrűség

A valószínűségi áramsűrűséget a kontinuitási egyenlet segítségével fogjuk bevezetni:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \rho(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t)^* \psi(\mathbf{r}, t)$$

Az Schrödinger egyenlet és a komplex konjugáltja:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\mathbf{r})\psi, \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V(\mathbf{r})\psi^*,$$

Szorozzuk ψ^* -gal és ψ -vel:

$$i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \Delta \psi + V(\mathbf{r})\psi^* \psi, \quad -i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi \Delta \psi^* + V(\mathbf{r})\psi \psi^*,$$

Vonjuk ki a két egyenletet egymásból:

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = i\hbar \underbrace{\frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t}}_{\frac{\partial \rho}{\partial t}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*)}_{\operatorname{div} ??}.$$

Valószínűségi áramsűrűség

Fejtsük ki részletesen a következő kifejezést:

$$\operatorname{div}(\psi^* \nabla \psi) - \operatorname{div}(\psi \nabla \psi^*) = \sum_{i=1}^3 (\partial_i(\psi^* \partial_i \psi) - \partial_i(\psi \partial_i \psi^*)) , \quad (1)$$

ahol a ∂_i jelölés a helyvektor i -dik komponense szerinti parciális deriváltat jelöli:

$$\partial_i f = \frac{\partial f}{\partial r_i}.$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 (\partial_i(\psi^* \partial_i \psi) - \partial_i(\psi \partial_i \psi^*)) &= \sum_{i=1}^3 (\partial_i \psi^* \partial_i \psi + \psi^* \partial_i^2 \psi - \partial_i \psi \partial_i \psi^* - \psi \partial_i^2 \psi^*) \\ &= \psi^* \sum_{i=1}^3 \partial_i^2 \psi + \psi \sum_{i=1}^3 \partial_i^2 \psi^* = \psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^* . \end{aligned}$$

Az előző egyenletben kihasználtuk, hogy

$$\sum_{i=1}^3 \partial_i^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \Delta \psi . \quad (2)$$

Valószínűségi áramsűrűség

Az imént kapott egyenletet behelyettesítve az időfüggő Schrödinger egyenletből származtatott egyenletbe:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{2im} \operatorname{div} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0$$

Összevetve a két egyenletet, a valószínűségi áramsűrűsége a következő kifejezés adódik:

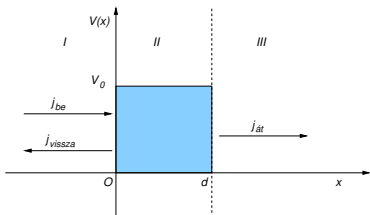
$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) .$$

Egy A amplitudójú, $\mathbf{k}$ hullámszámú síkhullámnak mekkora az áramsűrűsége?

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar |A|^2}{2im} \left(e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} i \mathbf{k} e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} (-i) \mathbf{k} e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right) = |A|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}$$

Egydimenziós szórás

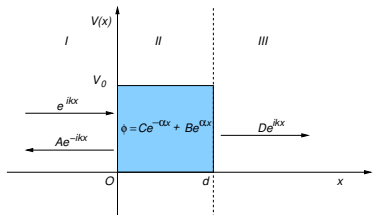


Áram megmaradás:

$$j_{be} = j_{vissza} + j_{at}$$

Visszaverődési együttható: $R = \frac{j_{vissza}}{j_{be}}$

Áthatolási együttható: $T = \frac{j_{at}}{j_{be}}$



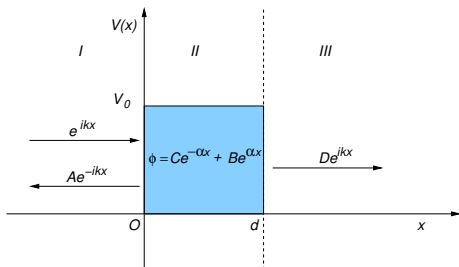
$$j_{be} = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_{vissza} = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}, \quad j_{at} = |D|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

Visszaverődési együttható: $R = |A|^2$

Áthatolási együttható: $T = |D|^2$.

Alagúteffektus

Tekintsünk egy egyszerű egydimenziós modellt:



Az I-II és II-III tartomány határán a hullámfüggvények és deriváltjaik folytonosak. Az egyes tartományokban a Schrödinger egyenlet megoldása:

I. tartomány

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' = E\varphi$$

$$\varphi = e^{ikx}, \quad \varphi = e^{-ikx}$$

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

II. tartomány

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' = (E - V_0)\varphi$$

$$\varphi = e^{\alpha x}, \quad \varphi = e^{-\alpha x}$$

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

III. tartomány

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' = E\varphi$$

$$\varphi = e^{ikx}$$

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

Alagúteffektus

I.-II. tartomány határa

$$\begin{aligned} 1 + A &= B + C \\ ik - ikA &= \alpha B - \alpha C \end{aligned} \quad , \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \alpha & -\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix}$$
$$\frac{1}{2\alpha} \begin{pmatrix} \alpha + ik & \alpha - ik \\ \alpha - ik & \alpha + ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix}$$

II.-III. tartomány határa

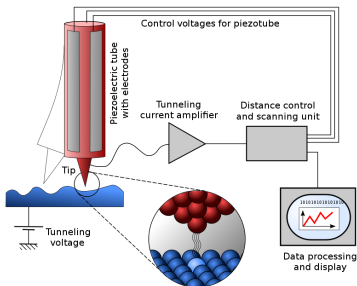
$$\begin{aligned} Be^{\alpha d} + Ce^{-\alpha d} &= De^{ikd} \\ \alpha Be^{\alpha d} - \alpha Ce^{-\alpha d} &= ikDe^{ikd} \end{aligned} \quad , \quad \begin{pmatrix} e^{\alpha d} & e^{-\alpha d} \\ \alpha e^{\alpha d} & -\alpha e^{-\alpha d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = e^{ikd} \begin{pmatrix} D \\ ikD \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e^{\alpha d} & e^{-\alpha d} \\ \alpha e^{\alpha d} & -\alpha e^{-\alpha d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha + ik & \alpha - ik \\ \alpha - ik & \alpha + ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{D} \\ ik\tilde{D} \end{pmatrix} \quad , \quad \tilde{D} = 2\alpha e^{ikd} D$$

Alagúteffektus

$$D = -\frac{4i\alpha k}{(e^{\alpha d} - e^{-\alpha d})(\alpha^2 + k^2)}$$

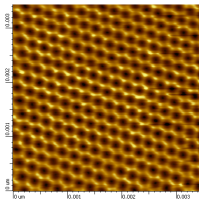
Az átmenő hullám amplitúdója, így az átmenő áram is exponenciálisan csökken a gát szélességével. Klasszikusan nem tudna átjutni egy részecske a potenciálgáton, ha kisebb az energiája mint a gát magassága!



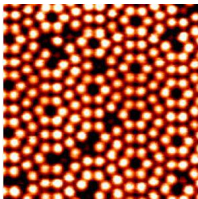
Scannint Tunneling Microscopy (STM)

A tú távolságát a vizsgált anyagtól úgy változtatjuk, hogy az alagút áram állandó legyen.

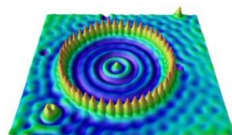
STM



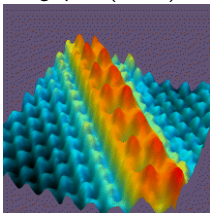
Highly oriented pyrolytic
graphite (HOPG)



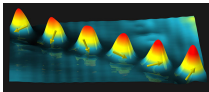
Szilícium felülete



Kvantum karám



Cézium atom lánc GaAs



Kobalt atomok egy atomi
vastag mangán réteggel
borított wolfram 110 felületén



Atomok rendezése felületeken
(National Institute of
Standards)