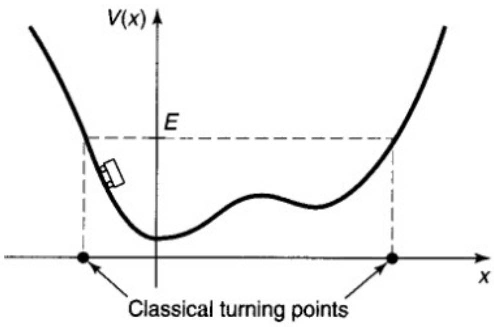
Kvantummechanika 1. gyakorlat
2007/2008

Részecskék kötött és szórt állapotai

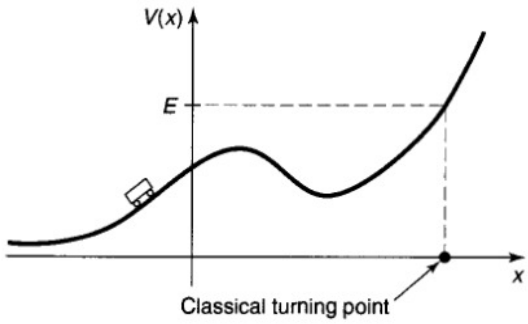
Bevezető

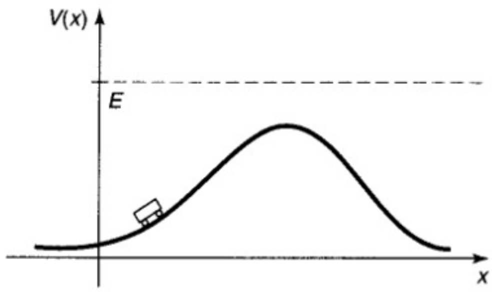
Klasszikus eset:

A klasszikus mechanikában egy időfüggetlen, egydimenziós potenciál hatására két különböző típusú mozgás lehetséges. Ha $V(x)$ mindkét oldalon nagyobb, mint a részecske teljes energiája (E), akkor a részecske "bennragad" a potenciálgödörben, a fordulópontok között oda-vissza ingázik, de kiszabadulni nem tud. Az ilyen típusú állapotot **kötött állapot**nak nevezzük.

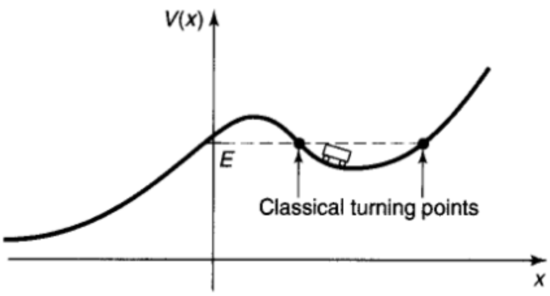


Ha azonban a részecske energiája E meghaladja a $V(x)$ potenciál értékét az egyik (vagy mindkét) oldalon, akkor a részecske a "végtelenből" jön, a potenciál hatására lelassul vagy felgyorsul, majd visszatér a végtelenbe. Az ilyen típusú állapotokat **szórt állapot**oknak nevezzük.





Bizonyos potenciálok esetén csak kötött állapotok lehetségesek (mint pl. a harmonikus oszcillátor esetében), míg másoknál csak szórt állapotok (mint pl. egy olyan potenciálgát esetében, amelyen nincs bemélyedés), de vannak olyan potenciálok is, amelyeknél mindkét típusú állapot lehetséges attól függően, hogy mekkora a részecske energiája.



Klasszikusan kötött, kvantumosan szórt állapot.

Kvantumos eset:

A kvantummechanikában kissé más módon különböztetjük meg a kötött és szórt állapotokat. Ugyanis, mint azt a későbbiekben látni fogjuk, a kvantummechanika szerint annak is van valószínűsége, hogy egy részecske egy véges magasságú potenciálgáton "átszivárogjon", annak ellenére, hogy az energiája kisebb, mint a potencálgát magassága. Vagyis ami itt számít, az a potenciál végtelenben felvett értéke:

$$\begin{aligned} E &< V(-\infty) \text{ és } E < V(\infty) \Longrightarrow \textbf{kötött állapot} \\ E &> V(-\infty) \text{ vagy } E > V(\infty) \Longrightarrow \textbf{szórt állapot} \end{aligned}$$

Azon potenciálok esetében, melyek a végtelenben nullába tartanak, a fenti kritériumok tovább egyszerűsödnek:

$$\begin{aligned} E &< 0 \Longrightarrow \textbf{kötött állapot} \\ E &> 0 \Longrightarrow \textbf{szórt állapot} \end{aligned}$$

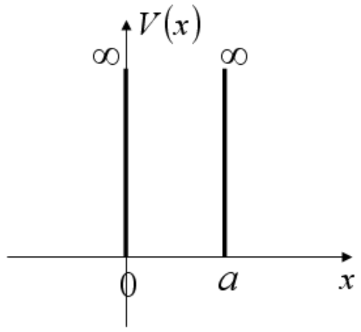
Mivel a végtelen magas falú potenciálgödör és a harmonikus osszcillátor potenciálja $x \longrightarrow \pm\infty$ esetén tart a végtelenbe, ezért esetükben csak kötött állapotok lehetségesek. Mivel a szabad részecske mindenhol nulla potenciálban mozog, ebben az esetben csakis szórt állapotok lehetségesek.

1. Kötött állapotok

1.1. Végtelen potenciálgödörbe zárt részecske

Tekintsük a következő, végtelen magas falú potenciálgödröt

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 < x < a \\ \infty & \text{ha } x \leq 0 \text{ vagy } x \geq a \end{cases}$$



Mivel a potenciál az $x = 0$ és $x = a$ pontokban végtelenül nagy, a gödörben lévő részecskének csak kötött állapotai lehetségesek. A részecske kötött állapotai pedig nem mások, mint ezen probléma Hamilton-operátorának stacionárius állapotai, melyeket az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásával kapunk. Mivel a gödör falai végtelen magasak, a potenciálgödrön kívül a hullámfüggvény azonosan nulla (ez felel meg annak, hogy ott nulla valószínűséggel találjuk a részecskét). Az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet tehát $0 < x < a$ tartományon fogjuk megoldani.

A részecske energiája nyilván nem lehet kisebb, mint a potenciál minimuma (azaz a gödör legmélyebb pontja, jelen esetben 0). Ugyanakkor, E nem lehet egyenlő sem a potenciálgödör minimumával (nem lehet 0), mivel az mindenhol azonosan nulla megoldáshoz vezetne, ami azt jelentené, hogy a részecske nincs is ott. Ezért az időfüggetlen Schrödinger egyenletben $E > 0$, és $V(x) = 0$:

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

Bevezetve a $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$ jelölést kapjuk:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása:

$$\varphi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx),$$

valamilyen A és B (egyelőre ismeretlen) konstans praméterekkel.

Permfeltételek:

A hullámfüggvény folytonos kell legyen minden x-re. Mivel a potenciálgödrön kívül a hullámfüggvény azonosan nulla ezért a következő egyenleteknek kell teljesülniük:

$$\varphi(0) = 0 \quad (1)$$
$$\varphi(a) = 0. \quad (2)$$

Az (12) egyenlet alapján:

$$B\cos 0 = 0,$$

ahonnan kapjuk, hogy $B = 0$, vagyis a potenciálgödrön belüli hullámfüggvény alakja $\varphi(x) = A\sin kx$. Erre a hullámfüggvényre a (13) egyenlet miatt pedig még igaz, hogy

$$A\sin(ka) = 0.$$

Ebben az egyenletben A nem lehet nulla, mert az mindenhol azonosan nulla hullámfüggvényt eredményezne (ami azt jelentené, hogy a részecske nincs is ott), így csak $\sin ka = 0$ lehet. Ez akkor teljesül, ha

$$\sin(ka) = 0 \Longleftrightarrow ka = n\pi, \text{ ahol } n = 1, 2, 3, \ldots$$

Az n azért nem veheti fel a 0 értéket, mert sem a, sem k nem nulla. Azt kaptuk tehát, hogy végtelen sok ilyen k lehetséges, az adott n-hez tartozót jelöljük k_n-nel, ahol

$$k_n = \frac{n\pi}{a}.$$

Adott n-re a hullámfüggvény

$$\varphi_n(x) = A\sin(k_n x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right).$$

Ez a hullámfüggvény még nem normált, a normáláshoz számítsuk ki $\|\varphi_n\|^2$-et:

$$\begin{aligned}
\|\varphi_n\|^2 &= \langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \int_0^a |\varphi_n|^2\,dx = A^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx \\
&= A^2\int_0^a \frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2}dx = A^2\left\{\frac{1}{2}[x]_0^a - \frac{1}{2}\left[\frac{\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{\frac{2n\pi x}{a}}\right]_0^a\right\} \\
&= A^2\frac{a}{2}.
\end{aligned}$$

Ebből $\|\varphi_n\| = A\sqrt{\frac{a}{2}}$, ezzel kell leosztanunk φ_n-et, ahonnan kapjuk:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \text{ahol } n = 1, 2, 3, \ldots$$

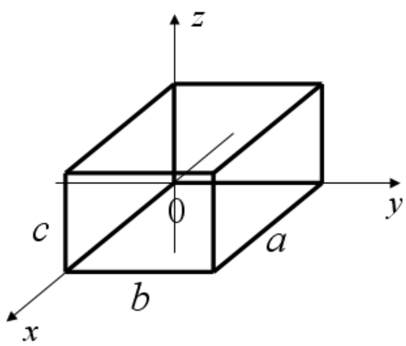
A részecske lehetséges energiái a következők lehetnek (minden n-re más-más)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2, \text{ahol } n = 1, 2, 3, \ldots$$

Vagyis a kvantummechanika szerint a végtelen magas falú potenciálgödörben lévő részecske energiája nem tetszőleges folytonos, hanem a fenti diszkrét (kvantált) energiaértékek valamelyike lehet csak, kötött állapotai pedig állóhullámok, melyeknek a gödör falainál csomópontjai vannak.

1.2. Dobozba zárt részecske

Tegyük fel, hogy a részecske számára megengedett tartomány az alábbi a, b, c oldalú téglatest



Ez a következő potenciálnak felel meg

$$V(x, y, z) = V(x) + V(y) + V(z)$$

ahol az egyes 1-dimenziós potenciálok ugyanolyanok, mint az előző feladatban, azaz

$$\begin{aligned}
V(x) &= \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 < x < a \\ \infty & \text{egyébként} \end{cases}, \\
V(y) &= \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 < y < b \\ \infty & \text{egyébként} \end{cases}, \\
V(z) &= \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 < z < c \\ \infty & \text{egyébként} \end{cases}.
\end{aligned}$$

A részecske most is csak kötött állapotokkal rendelkezhet a dobozon belül, melyeket ismét az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásaiként kapunk (ebben az esetben is $E > 0$ az előző feladatban mondottak miatt):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{d^2\psi}{dy^2}+\frac{d^2\psi}{dz^2}\right)=E\psi$$

ahol $\psi = \psi(x, y, z)$.

Keressük a megoldást $\psi(x, y, z) = \varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z)$ szorzat alakban. Ekkor a Schrödinger-egyenlet (a $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$ jelöléssel):

$$\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2}\varphi_2(y)\varphi_3(z)+\frac{d^2\varphi_2(y)}{dy^2}\varphi_1(x)\varphi_3(z)+\frac{d^2\varphi_3(z)}{dz^2}\varphi_1(x)\varphi_2(y)=-k^2\varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z).$$

Osszuk el ezt az egyenletet $\varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z)$-vel, ekkor kapjuk:

$$\frac{1}{\varphi_1}\frac{d^2\varphi_1}{dx^2}+\frac{1}{\varphi_2}\frac{d^2\varphi_2}{dy^2}+\frac{1}{\varphi_3}\frac{d^2\varphi_3}{dz^2}=-k^2. \tag{3}$$

Vezessük be a $k_1^2 = -\frac{1}{\varphi_1}\frac{d^2\varphi_1}{dx^2}$, $k_2^2 = -\frac{1}{\varphi_2}\frac{d^2\varphi_2}{dy^2}$, illetve $k_3^2 = -\frac{1}{\varphi_3}\frac{d^2\varphi_3}{dz^2}$ jelölést. Igy a fenti (3) egyenlet három, az előző feladatbeli Schrödinger-egyenlettel teljesen analóg egyenletre bomlik

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2}+k_1^2\varphi_1(x) &= 0,\\
\frac{d^2\varphi_2(y)}{dy^2}+k_2^2\varphi_2(y) &= 0,\\
\frac{d^2\varphi_3(z)}{dz^2}+k_3^2\varphi_3(z) &= 0.
\end{aligned}$$

Az előző feladat eredményeit felhasználva a lehetséges k-k:

$$\begin{aligned}
k_1 &= \frac{n_1\pi}{a}, \qquad n_1 = 1,2,3,\ldots\\
k_2 &= \frac{n_2\pi}{b}, \qquad n_2 = 1,2,3,\ldots\\
k_3 &= \frac{n_3\pi}{c}, \qquad n_3 = 1,2,3,\ldots
\end{aligned}$$

a normált hullámfüggvények és energiák:

$$\begin{aligned}
\varphi_{n_1}(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n_1\pi x}{a}\right), \qquad E_{n_1}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_1^2 \qquad n_1 = 1,2,3,\ldots\\
\varphi_{n_2}(y) &= \sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{n_2\pi y}{b}\right), \qquad E_{n_2}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mb^2}n_2^2 \qquad n_2 = 1,2,3,\ldots\\
\varphi_{n_3}(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{n_3\pi z}{c}\right), \qquad E_{n_3}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mc^2}n_3^2 \qquad n_3 = 1,2,3,\ldots
\end{aligned}$$

A részecske teljes hullámfüggvénye és teljes energiája pedig

$$\begin{aligned}
\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n_1\pi x}{a}\right)\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{n_2\pi y}{b}\right)\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{n_3\pi z}{c}\right),\\
k^2 &= k_1^2+k_2^2+k_3^2=\pi^2\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right),\\
E_{n_1n_2n_3} &= \frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right).
\end{aligned}$$

Speciális eset: kockába zárt részecske ($a = b = c$)

Ha a részecske kockába van zárva, akkor az alapállapot (ahol n_1, n_2, n_3 a legkisebb értékét veszi fel) nemdegenerált, ugyanis E_{alap} csak egyféleképpen állhat elő, mégpedig ha $n_1 = n_2 = n_3 = 1$, amikor is $E_{alap} = E_{111} = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$. Minden más energiaszint degenerált, mivel többféle $\{n_1, n_2, n_3\}$ számhármassal is előállítható.

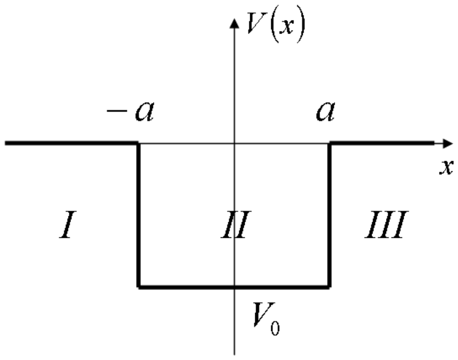
Példa: $E_{112} = E_{121} = E_{211}$, ugyanakkor ψ_{112}, ψ_{121} és ψ_{211} lineárisan független sajátfüggvények, amelyek tehát ugyanahhoz az energiához tartoznak, vagyis ebben az esetben a degeneráció foka 3.

1.3. Véges magasságú, szimmetrikus potenciálgödörben lévő részecske

Tegyük fel, hogy a részecske a következő szimmetrikus, $2a$ szélességű, V_0 mélységű potenciálvölgyben mozog:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| \geq a \\ V_0 < 0 & \text{ha } |x| < a \end{cases}$$

ahol $a > 0$.



Keressük a részecske **kötött állapotait**, azaz jelen esetben a $V_0 < E < 0$ energiájú állapotokat. (Könnyen ellenőrizhető, hogy az $E = V_0$ eset azonosan nulla hullámfüggvényre vezetne, ezért zárjuk ezt ki). Mivel most a potenciál fala nem végtelen magas, a részecske hullámfüggvényéről nem állíthatjuk, hogy az azonosan nulla a völgyön kívül. Meg kell tehát oldanunk az időfüggetlen Schrödiger-egyenletet a teljes térre (mivel most 1-dimenzióban vagyunk: a számegyenesre) vonatkozóan. Ehhez bontsuk a számegyenest 3 tartományra.

I. **tartomány** ($x < -a$)**:**

Ebben a tartomáyban $V(x) = 0$, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = E\psi_I(x).$$

Átrendezve ezt, az alábbi egyenletet kapjuk:

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I(x) = 0.$$

Bevezetve a $\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$ pozitív paramétert (hiszen $E < 0$ energiájú részecskét vizsgálunk), a Schrödinger-egyenlet a következő egyszerű alakot ölti:

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} - \kappa^2\psi_I(x) = 0.$$

Ennek az egyenletnek a megoldása

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

ahol A és B egyelőre ismeretlen konstansok.

Ennek a hullámfüggvénynek azonban a $-\infty$-ben lecsengőnek kell lennie:

$$\psi_I(-\infty) = 0.$$

Mivel ψ_I-ben az $e^{\kappa x}$-es tag $-\infty$-ben eleve lecseng, az $e^{-\kappa x}$-es tag viszont ∞ naggyá válik, a fenti feltétel akkor teljesíthető, ha $A = 0$. A megoldásunk erre a tartományra tehát

$$\psi_I(x) = Be^{\kappa x}$$

alakú.

$II.$ **tartomány** $(-a < x < a)$**:**

Ebben a tartomáyban $V(x) = V_0$, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + V_0\psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x).$$

Átrendezve:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi_{II}(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{II}(x), \\
\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi_{II}(x) &= 0.
\end{aligned}$$

Mivel $V_0 < E < 0$, ezért $E - V_0 > 0$. Vezessük most be a $k = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} > 0$ pozitív paramétert, amellyel a Schrödinger-egyenlet az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + k^2\psi_{II}(x) = 0.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása

$$\psi_{II}(x) = C\sin(kx) + D\cos(kx),$$

ahol C és D a peremfeltételekből meghatározható konstansok

$III.$ **tartomány** $(x > a)$**:**

Ebben a tartomáyban $V(x) = 0$ ismét, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet ugyanolyan alakú, mint az $I.$ tartományban:

$$\frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} - \kappa^2\psi_{III}(x) = 0,$$

itt is $\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$. Ennek az egyenletnek az általános megoldása (csakúgy, mint az I. tartományban)

$$\psi_{III}(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x},$$

de mivel erről a hullámfüggvényről is elvárjuk, hogy a $+\infty$-ben lecsenő legyen (mely feltételt az $e^{-\kappa x}$-es tag igen, de az $e^{\kappa x}$-es tag nem teljesít), így

$$\psi_{III}(\infty) = 0 \Longrightarrow G = 0.$$

A peremfeltételt teljesítő megoldás ebben a tartományban tehát:

$$\psi_{III}(x) = Fe^{-\kappa x}.$$

Összefoglalva tehát a megoldásokat a három tartományban:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Be^{\kappa x}, \quad (\text{ha } x < -a) \\ \psi_{II}(x) &= C\sin(kx) + D\cos(kx), \quad (\text{ha } -a < x < a) \\ \psi_{III}(x) &= Fe^{-\kappa x}, \quad (\text{ha } x > a). \end{aligned} \tag{4}$$

Ahhoz, hogy a részecske hullámfüggvénye a teljes számegyenesen folytonos és differenciálható függvény legyen, a $\psi_I(x)$, $\psi_{II}(x)$ és $\psi_{III}(x)$ hullámfüggvényeket és azok deriváltjait össze kell illesztenünk az egyes tartományok határain azaz

$$I.\text{és } II. \text{ határán} \quad \left\{ \begin{array}{c} \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \\ \left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=-a} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=-a} \end{array} \right. ,$$

$$II. \text{ és } III. \text{ határán} \quad \left\{ \begin{array}{c} \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \\ \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=a} \end{array} \right. ,$$

melyek az alábbi egyenletekre vezetnek:

$$\left. \begin{array}{r} Be^{-\kappa a} = -C\sin(ka) + D\cos(ka) \\ \kappa Be^{-\kappa a} = k\left[C\cos(ka) + D\sin(ka)\right] \end{array} \right\} \tag{5}$$

$$\left. \begin{array}{r} Fe^{-\kappa a} = C\sin(ka) + D\cos(ka) \\ \kappa Fe^{-\kappa a} = k\left[-C\cos(ka) + D\sin(ka)\right] \end{array} \right\} \tag{6}$$

Elimináljuk D-t a fenti egyenletekből! Ehhez vonjuk ki (6) első egyenletéből (5) első egyenletét, illetve (5) második egyenletéből (6) második egyenletét, ekkor kapjuk:

$$\left. \begin{array}{r} (F-B)\,e^{-\kappa a} = 2C\sin(ka) \\ -\kappa(F-B)\,e^{-\kappa a} = 2kC\cos(ka) \end{array} \right\}. \tag{7}$$

Hasonlóan, most adjuk össze (5) első (második) egyenletét (6) első (második) egyenletével:

$$\left. \begin{array}{r} (F+B)\,e^{-\kappa a} = 2D\cos(ka) \\ \kappa(F+B)\,e^{-\kappa a} = 2kD\sin(ka) \end{array} \right\}. \tag{8}$$

Ha $C \neq 0$, akkor (7)-ból láthatóan $F \neq B$ és (7) egyenleteinek hányadosa az alábbi egyenletre vezet:

$$k\cot(ka) = -\kappa. \tag{9}$$

Ha $D \neq 0$, akkor (8)-ból látszik, hogy $F \neq -B$ és (8) egyenleteinek hányadosából

$$k \tan(ka) = \kappa. \tag{10}$$

A fenti (9) és (10) egyenletek **nem teljesíthetők egyszerre**. (Tegyük fel ugyanis, hogy teljesíthetők egyszerre és írjuk be κ helyére $k\tan(ka)$-t (9)-ban. Ez a $\tan^2(ka) = -1$ egyenletre vezet, $\tan(ka)$ viszont valós, így ellentmondásra jutunk.) Két típusú megoldást különböztethetünk meg tehát:

$$\begin{array}{llll} \mathbf{(1)} & C = 0, & F = B & \text{és} \quad k\tan(ka) = \kappa \\ \mathbf{(2)} & D = 0, & F = -B & \text{és} \quad k\cot(ka) = -\kappa \end{array}$$

A megoldások **(1)** csoportjában a részecske hullámfüggvénye **páros** függvény, míg a **(2)** csoportban **páratlan** függvény. (Ez a tulajdonság egyébként következik abból hogy a potenciál $x = 0$-ra nézve szimmetrikus, azaz $V(-x) = V(x)$. Hiszen ekkor a részecskének a potenciálvölgy $x < 0$ oldalán való megtalálási valószínűsége meg kell hogy egyezzen a potenciálvölgy $x > 0$ oldalán való megtalálási valószínűségével, azaz $|\psi(-x)|^2 = |\psi(x)|^2$, melyből pedig következik, hogy $\psi(-x) = \pm\psi(x)$, vagyis a hullámfüggvény páros, vagy páratlan függvény.)

Az **(1)** ill. **(2)** esetekben a részecske kötött állapotainak energiaszintjei az (10), ill. (9) egyenletek grafikus megoldásával határozhatók meg. Ehhez vezessük be a következő jelölést:

$$\begin{aligned} X &= ka, \\ Y &= \kappa a, \end{aligned}$$

ahol $X, Y > 0$, hiszen $k = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} > 0$ és $\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$. Mivel

$$X^2 = k^2 a^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} a^2,$$

és

$$Y^2 = \kappa^2 a^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} a^2,$$

ezekből előállíthatunk egy olyan konstansot, amelyik csak a megadott $V_0 < 0$ és a paraméterektől függ:

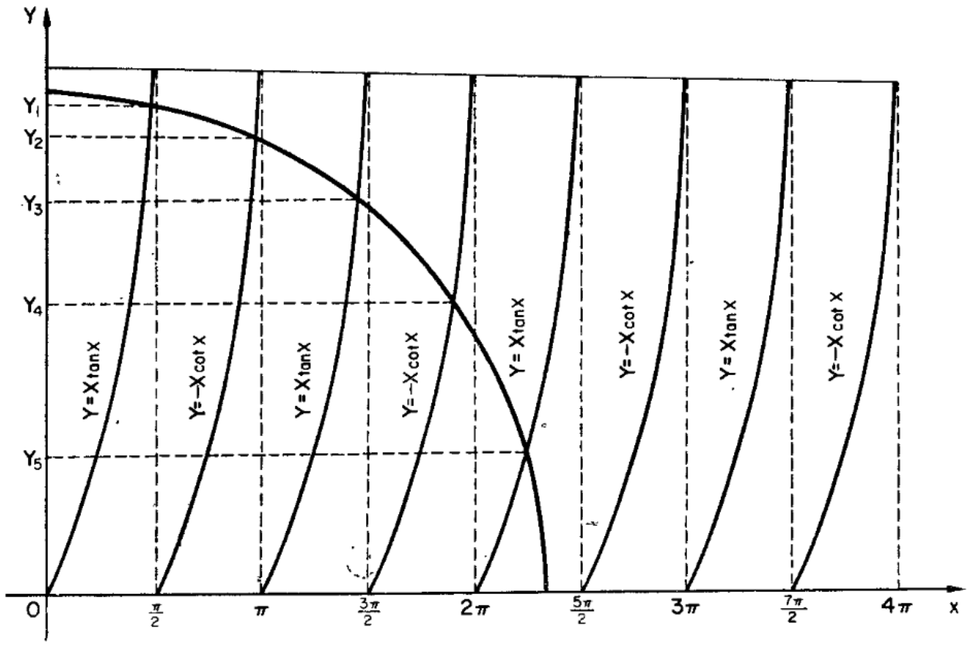
$$\begin{aligned} X^2 + Y^2 &= \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} a^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} a^2 \\ &= \frac{2m(E-V_0-E)}{\hbar^2} a^2 = -\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} \\ &= \frac{2ma^2 |V_0|}{\hbar^2} = R^2. \end{aligned} \tag{11}$$

Így a lehetséges $E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}$ energiaszinteket az **(1)** és **(2)** esetekben az

$$\mathbf{(1)} \quad \begin{cases} X\tan X = Y \\ X^2 + Y^2 = \frac{2ma^2|V_0|}{\hbar^2} \end{cases}$$

$$\mathbf{(2)} \quad \begin{cases} X\cot X = -Y \\ X^2 + Y^2 = \frac{2ma^2|V_0|}{\hbar^2} \end{cases}$$

görbék ($X > 0$, $Y > 0$ tartománybeli) metszéspontjainak megfelelő Y értékekből határozhatjuk meg, ahogyan azt az alábbi ábra is mutatja.



Az ábráról és az R-re vonatkozó (11) kifejezésből láthatjuk, hogy a kötött állapotok száma $a^2\,|V_0|$-lal növekszik, és véges, ha $a^2\,|V_0|$ véges. Az is látható, hogy ha $\frac{N}{2}\pi \leq R \leq \frac{N+1}{2}\pi$, (ahol $N = 0, 1, 2, ...$) akkor a kötött állapotok száma $N+1$. (Nincs kötött állapot, ha $0 < R < \frac{\pi}{2}$.)

2. Szórt állapotok

Abban az esetben, ha egy részecske szórt állapotait vizsgáljuk valamely potenciálon, általában arra vagyunk kíváncsiak, hogy a részecske mekkora valószínűséggel jut át, vagy verődik vissza az adott potenciálról.

Az áthatolás valószínűségét a T transzmissziós, a visszaverődés valószínűségét pedig az R reflexiós együttható adja meg, melyek az áthaladt illetve a visszavert és a beeső hullám valószínűségi áramsűrűségeinek hányadosaiként vannak definiálva:

$$T = \left|\frac{j_t}{j_i}\right|, \qquad R = \left|\frac{j_r}{j_i}\right|,$$

ahol a valószínűségi áramsűrűséget az alábbi összefüggésből számíthatjuk ki:

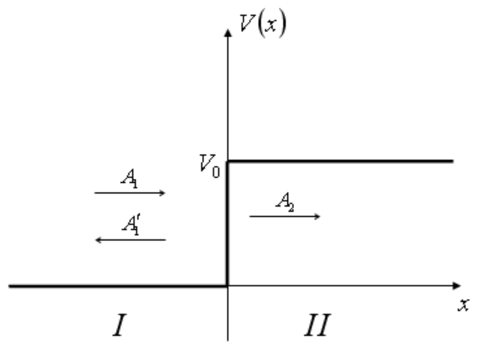
$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\varphi^*(x)\frac{d\varphi(x)}{dx} - \varphi(x)\frac{d\varphi^*(x)}{dx}\right].$$

Nyilvánvaló okokból $|j_i| = |j_t| + |j_r|$ és $T + R = 1$.

2.1. Lépcsős potenciálon történő szóródás

Vizsgáljuk a részecske mozgását a következő potenciál esetében

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } x < 0 \\ V_0 > 0 & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$



Keressük az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásait az I ($x < 0$) és II ($x > 0$) tartományokon. Két esettel foglalkozunk: **1.** $E > V_0$ és **2.** $E < V_0$. Mindkét esetben szórt állapotokat kapunk.

1) $E > V_0$ (részleges reflexió esete)

I. **tartomány:**

Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet alakja ($V(x) = 0$):

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

Bevezetve a $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$ jelölést kapjuk:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k_1^2\psi(x) = 0.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása:

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1x} + A_1' e^{-ik_1x}.$$

Ez a hullámfüggvény megegyezik a szabad részecske mozgásának vizsgálatakor kapottal. Az $A_1 e^{ik_1x}$ tag -∞-ből jobbra, míg az $A_1' e^{-ik_1x}$ az ellenkező irányba haladó síkhullámot ír le (A_1 és A_1' a megfelelő amplitúdók).

II. **tartomány:**

Itt az időfüggetlen Schrödinger egyenlet alakja ($V(x) = V_0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x).$$

Mivel $E > V_0$, a $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} > 0$ jelölést vezetjük be, ekkor kapjuk:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k_2^2\psi(x) = 0.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása:

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2x} + A_2' e^{-ik_2x}.$$

A továbbiakban feltesszük, hogy $\psi_{II}(x)$-nek nincs a potenciállépcsőre az x-tengely pozitív irányából érkező összetevője, azaz $A_2' = 0$, vagyis

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2x}.$$

Illesztés $x = 0$-ban:

A hullámfüggvénynek és deriváltjának folytonosnak kell lennie ott, ahol a potenciálnak ugrása van:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Longrightarrow A_1 + A_1' = A_2 \tag{12}$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_0 = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_0 \Longrightarrow ik_1(A_1 - A_1') = ik_2A_2 \tag{13}$$

A (13) egyenletben i-vel egyszerűsítünk és A_2-t az (12) egyenletből behelyettesítjük:

$$k_1(A_1 - A_1') = k_2(A_1 + A_1').$$

Rendezzük külön oldalra A_1-et és A_1'-t, vagyis:

$$A_1(k_1 - k_2) = A_1'(k_1 + k_2). \tag{14}$$

Az (12) egyenlet k_1-szeresét hozzáadva a (13) egyenlethez pedig kapjuk:

$$2k_1A_1 = (k_1 + k_2)A_2. \tag{15}$$

Reflexiós együttható:

A reflexiós együtthatót a bevezető részben mondottak alapján tehát a visszavert és a beeső hullám valószínűségi áramsűrűségeinek hányadosaként definiáljuk. A beeső hullám nem más, mint ψ_I azon tagja, mely a potenciállépcső felé haladó hullámot írja le, azaz $A_1 e^{ik_1 x}$. Jelöljük ezt a hullámot a továbbiakban φ_i-vel. A ψ_I másik tagja a visszavert hullám, hiszen ez a lépcsőtől távolodik. Jelöljük ezt φ_r-rel. Tehát

$$\begin{aligned} \varphi_i(x) &= A_1 e^{ik_1 x}, \\ \varphi_r(x) &= A_1' e^{-ik_1 x}. \end{aligned}$$

A megfelelő valószínűségi áramsűrűségek pedig

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{\hbar}{2mi}\left[\varphi_i^*(x)\frac{d\varphi_i(x)}{dx} - \varphi_i(x)\frac{d\varphi_i^*(x)}{dx}\right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi}|A_1|^2\left[e^{-ik_1 x}(ik_1)e^{ik_1 x} - e^{ik_1 x}(-ik_1)e^{-ik_1 x}\right] \\ &= \frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2, \end{aligned}$$

és

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{\hbar}{2mi}\left[\varphi_r^*(x)\frac{d\varphi_r(x)}{dx} - \varphi_r(x)\frac{d\varphi_r^*(x)}{dx}\right] \\ &= -\frac{\hbar k_1}{m}|A_1'|^2. \end{aligned}$$

A reflexiós együttható tehát:

$$R = \left|\frac{j_r}{j_i}\right| = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2,$$

amely annak a valószínűsége, hogy a részecske visszaverődik a potenciállépcsőről. A (14) egyenletből kapjuk, hogy

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

Vagyis a részecske véges valószínűséggel akkor is visszaverődhet, ha energiája nagyobb, mint a potenciállépcső magassága.

Transzmissziós együttható:

A transzmissziós együtthatót a bevezető részben mondottak alapján az áthaladt és a beeső hullám valószínűségi áramsűrűségeinek hányadosaként definiáljuk. Az áthaladt hullám maga a $\psi_{II}(x)$, hiszen ez csak az x-tengely pozitív irányába haladó hullámot tartalmaz (feltettük, hogy jobbról balra nem halad hullám a II tartományban). A neki megfelelő valószínűségi áramsűrűség a következő

$$j_t = \frac{\hbar k_2}{m}|A_2|^2.$$

A transzmissziós együttható tehát:

$$T = \left|\frac{j_t}{j_i}\right| = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2 = 1 - R,$$

ez annak a valószínűségét mondja meg, hogy a részecske áthalad a potenciállépcsőn. A (15) egyenletből (vagy az $1-R$ összefüggésből) kapjuk, hogy

$$T=\frac{4k_1k_2}{\left(k_1+k_2\right)^2}.$$

Ha a részecske energiája jóval nagyobb, mint a potenciállépcső magassága ($E\gg V_0$), akkor $k_1\approx k_2$ és a transzmisszós valószínűség $T\longrightarrow\frac{4k_1^2}{4k_1^2}=1$.

2) $E<V_0$ (teljes reflexió esete)

I. **tartomány:**

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet most is

$$\frac{d^2\psi\left(x\right)}{dx^2}+k_1^2\psi\left(x\right)=0.$$

A megoldás tehát ezen a tartományon ugyanolyan, mint az előző esetben:

$$\psi_I\left(x\right)=A_1e^{ik_1x}+A_1'e^{-ik_1x}.$$

II. **tartomány:**

Itt az időfüggetlen Schrödinger egyenlet alakja ($V\left(x\right)=V_0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi\left(x\right)}{dx^2}+V_0\psi\left(x\right)=E\psi\left(x\right).$$

Most $E<V_0$, és a $\rho_2=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}>0$ jelölést vezetjük be, mellyel:

$$\frac{d^2\psi\left(x\right)}{dx^2}-\rho_2^2\psi\left(x\right)=0.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása:

$$\psi_{II}\left(x\right)=B_2e^{\rho_2x}+B_2'e^{-\rho_2x}.$$

A $\psi_{II}\left(+\infty\right)=0$ peremfeltétel miatt most $B_2=0$, vagyis

$$\psi_{II}\left(x\right)=B_2'e^{-\rho_2x}.$$

Illesztés $x=0$-ban:

A hullámfüggvénynek és deriváltjának most is folytonosnak kell lennie a potenciál ugrásának helyén:

$$\psi_I\left(0\right)=\psi_{II}\left(0\right)\Longrightarrow A_1+A_1'=B_2' \tag{16}$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_0=\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_0\Longrightarrow ik_1\left(A_1-A_1'\right)=-\rho_2B_2' \tag{17}$$

A (17) egyenletben B_2'-t az (16) egyenletből behelyettesítjük:

$$ik_1 (A_1 - A_1') = -\rho_2 (A_1 + A_1').$$

A_1-et és A_1'-t külön oldalra rendezve

$$A_1 (ik_1 + \rho_2) = A_1' (ik_1 - \rho_2). \tag{18}$$

Reflexiós együttható:

A reflexiós együtthatót most is

$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2,$$

módon számíthatjuk ki. A (18) egyenletből kapjuk, hogy

$$R = \left|\frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}\right|^2 = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}\frac{k_1 + i\rho_2}{k_1 - i\rho_2} = 1,$$

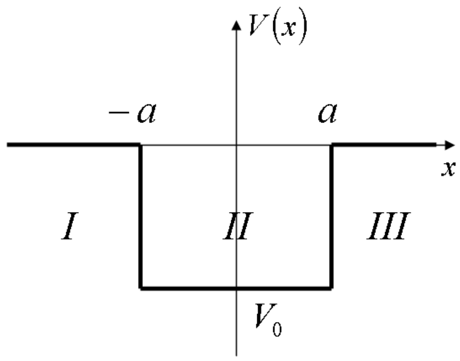
azaz a részecske biztosan visszaverődik. (Az $\frac{A_1'}{A_1}$ hányados komplex, ami azt jelenti, hogy visszaverődéskor fáziseltolódás lép fel).

2.2. Szóródás potenciálgödrön

Tekintsük ismét az 1.3.-ban vizsgált szimmetrikus, véges mélységű potenciálgödröt.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| \geq a \\ V_0 < 0 & \text{ha } |x| < a \end{cases}$$

ahol $a > 0$.



Keressük a részecske **szórt** állapotait, azaz az $E > 0$ energiájú állapotokat. Ehhez ismét meg kell oldanunk az időfüggetlen Schrödiger-egyenletet a az I, II, III tartományokon.

I. **tartomány** ($x < -a$)**:**

Ebben a tartomáyban $V(x) = 0$, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = E\psi_I(x).$$

Átrendezve ezt, az alábbi egyenletet kapjuk:

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I(x) = 0.$$

Bevezetve a $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$ pozitív paramétert (hiszen $E > 0$ energiájú részecskét vizsgálunk), a Schrödinger-egyenlet a következő egyszerű alakot ölti:

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + k^2\psi_I(x) = 0.$$

Ennek az egyenletnek a megoldása

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

ahol A és B konstansok.

II. **tartomány** $(-a < x < a)$**:**

Ebben a tartomáyban $V(x) = V_0$, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + V_0\psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x).$$

Átrendezve:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi_{II}(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{II}(x),\\ \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi_{II}(x) &= 0.\end{aligned}$$

Mivel $V_0 < 0$ és $E > 0$, ezért $E - V_0 > 0$. Vezessük most be a $\rho = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} > 0$ pozitív paramétert, amellyel a Schrödinger-egyenlet az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + \rho^2\psi_{II}(x) = 0.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása

$$\psi_{II}(x) = C\sin(\rho x) + D\cos(\rho x),$$

ahol C és D konstansok.

III. **tartomány** $(x > a)$**:**

Ebben a tartomáyban az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet ugyanolyan alakú, mint az I. tartományban:

$$\frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + k^2\psi_{III}(x) = 0,$$

itt is $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$. Ennek az egyenletnek az általános megoldása (csakúgy, mint az I. tartományban)

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}.$$

A továbbiakban feltesszük, hogy a potenciálgödörre jobbról nem érkezik hullám, azaz

$$G = 0.$$

A megoldás ebben a tartományban tehát:

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx}.$$

Összefoglalva a megoldásokat a három tartományban:

$$\begin{aligned}
\psi_I(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (\text{ha } x < -a) \\
\psi_{II}(x) &= C\sin(\rho x) + D\cos(\rho x), \quad (\text{ha } -a < x < a) \\
\psi_{III}(x) &= Fe^{ikx}, \quad (\text{ha } x > a).
\end{aligned} \tag{19}$$

Illesztés az I. és II. tartományok határán:

Mivel a hullámfüggvénynek folytonosnak és differenciálhatónak kell lennie, az alábbi egyenleteknek kell teljesülniük:

$$\begin{aligned}
\psi_I(-a) &= \psi_{II}(-a) \\
\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=-a} &= \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=-a}
\end{aligned}$$

melyekből:

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C\sin(\rho a) + D\cos(\rho a), \tag{20}$$

$$ik\left(Ae^{-ika} - Be^{ika}\right) = \rho\left(C\cos(\rho a) + D\sin(\rho a)\right). \tag{21}$$

Illesztés a II. és III. tartományok határán:

Itt az alábbi egyenleteknek kell teljesülniük:

$$\begin{aligned}
\psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a) \\
\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=a} &= \left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=a}
\end{aligned}$$

melyekből:

$$Fe^{ika} = C\sin(\rho a) + D\cos(\rho a), \tag{22}$$

$$ikFe^{ika} = \rho\left(C\cos(\rho a) - D\sin(\rho a)\right). \tag{23}$$

Transzmissziós együttható:

A transzmissziós együttható meghatározásához használjuk ismét a bevezetőben leírtakat. Most az áthaladt hullám maga a $\psi_{III}(x)$, hiszen ez csak az x-tengely pozitív irányába haladó hullámot tartalmaz (feltettük, hogy jobbról nem érkezik hullám a potenciálgöddörre). A neki megfelelő valószínűségi áramsűrűség a következő

$$j_t = \frac{\hbar k}{m} |F|^2 .$$

A bejövő hullám nem más, mint $\psi_I(x)$-nek az x-tengely pozitív irányába haladó része, azaz Ae^{ikx}. A hozzá tartozó áramsűrűség:

$$j_i = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 .$$

Megjegyezzük, hogy most a bejövő és kimenő hullámok hullámszáma (a potenciállépcső esetével ellentétben) megegyezik. Így a transzmissziós együttható az alábbi, igen egyszerű alakot ölti:

$$T = \left|\frac{j_t}{j_i}\right| = \left|\frac{F}{A}\right|^2 .$$

Vagyis megegyezik a két hullám amplitúdója hányadosának abszolútérték-négyzetével.

T kiszámításához az (20-23) egyenletekből ki kell fejeznünk F-et, mint A függvényét. Ehhez először fejezzük ki C-t és D-t, mint F függvényét (22) és (23)-ből. C-t megkaphatjuk, ha (22)-et megszorozzuk $\sin(\rho a)$-val, (23)-t pedig $\cos(\rho a)$-val, majd összeadjuk őket, melyből:

$$C = Fe^{ika}\left[\sin(\rho a) + \frac{ik}{\rho}\cos(\rho a)\right] . \tag{24}$$

D-t teljesen hasonlóan, megkaphatjuk, ha (22)-et megszorozzuk $\cos(\rho a)$-val, (23)-t pedig $\sin(\rho a)$-val, majd kivonjuk őket egymásból:

$$D = Fe^{ika}\left[\cos(\rho a) - \frac{ik}{\rho}\sin(\rho a)\right] . \tag{25}$$

Ezután helyettesítsük be (24)-t és (25)-t (20)-be és (21)-be:

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{ika} &= -Fe^{ika}\left[\sin(\rho a) + \frac{ik}{\rho}\cos(\rho a)\right]\sin(\rho a) \\ &\quad +Fe^{ika}\left[\cos(\rho a) - \frac{ik}{\rho}\sin(\rho a)\right]\cos(\rho a) \\ &= Fe^{ika}\left[\cos(2\rho a) - \frac{ik}{\rho}\sin(2\rho a)\right] , \end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} - Be^{ika} &= \frac{\rho}{ik}\Bigg(Fe^{ika}\left[\sin(\rho a) + \frac{ik}{\rho}\cos(\rho a)\right]\cos(\rho a) \\ &\quad +Fe^{ika}\left[\cos(\rho a) - \frac{ik}{\rho}\sin(\rho a)\right]\sin(\rho a)\Bigg) \\ &= \frac{\rho}{ik}Fe^{ika}\left[\sin(2\rho a) + \frac{ik}{\rho}\cos(2\rho a)\right] . \end{aligned} \tag{27}$$

A fenti (26) és (27) egyenletek összeadásával kapjuk:

$$
\begin{aligned}
2Ae^{-ika} &= Fe^{ika}\left[\cos(2\rho a) - \frac{ik}{\rho}\sin(2\rho a)\right. \\
&\quad \left.\frac{\rho}{ik}\sin(2\rho a) + \cos(2\rho a)\right] \\
&= Fe^{ika}\left[2\cos(2\rho a) + \sin(2\rho a)\left(\frac{\rho}{ik} - \frac{ik}{\rho}\right)\right] \\
&= Fe^{ika}\left[2\cos(2\rho a) + \frac{\rho^2+k^2}{ik\rho}\sin(2\rho a)\right] \\
&= Fe^{ika}\left[2\cos(2\rho a) - 2i\frac{\rho^2+k^2}{2k\rho}\sin(2\rho a)\right],
\end{aligned}
$$

melyből kifejezve F-et:

$$
F = \frac{Ae^{-2ika}}{\cos(2\rho a) - i\frac{\rho^2+k^2}{2k\rho}\sin(2\rho a)}.
$$

Ebből pedig a transzmisszió:

$$
T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{\frac{|A|^2}{\cos^2(2\rho a)+\left(\frac{\rho^2+k^2}{2k\rho}\right)^2\sin^2(2\rho a)}}{|A|^2},
$$

azaz

$$
T = \frac{1}{\cos^2(2\rho a) + \left(\frac{\rho^2+k^2}{2k\rho}\right)^2\sin^2(2\rho a)}
$$

Alakítsuk át kissé a nevezőt:

$$
\begin{aligned}
\cos^2(2\rho a) + \left(\frac{\rho^2+k^2}{2k\rho}\right)^2\sin^2(2\rho a) &= 1 - \sin^2(2\rho a) + \left(\frac{\rho^2+k^2}{2k\rho}\right)^2\sin^2(2\rho a) \\
&= 1 + \left(\frac{\rho^4+2k^2\rho^2+k^4}{4k^2\rho^2} - 1\right)\sin^2(2\rho a) \\
&= 1 + \frac{\rho^4-2k^2\rho^2+k^4}{4k^2\rho^2}\sin^2(2\rho a) \\
&= 1 + \frac{\left(\rho^2-k^2\right)^2}{4k^2\rho^2}\sin^2(2\rho a).
\end{aligned}
$$

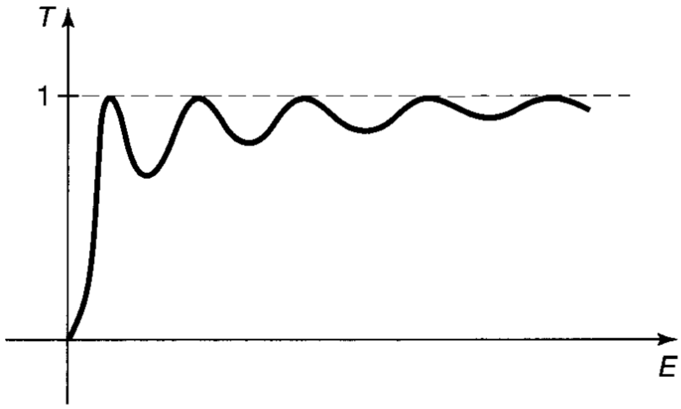
Mivel $\rho^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ és $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, megadhatjuk T-t, mint a, V_0 és E függvényét, ugyanis:

$$
\begin{aligned}
\left(\rho^2-k^2\right)^2 &= \left(-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right) = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4}, \\
4k^2\rho^2 &= \frac{16m^2E(E-V_0)}{\hbar^4},
\end{aligned}
$$

melynek felhasználásával

$$
\begin{aligned}
T &= \frac{1}{1+\frac{\left(\rho^2-k^2\right)^2}{4k^2\rho^2}\sin^2(2\rho a)} \\
&= \frac{1}{1+\frac{V_0^2}{4E(E-V_0)}\sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E-V_0)}\right)}.
\end{aligned}
$$

Az alábbi ábra mutatja a transzmisszió függését a részecske energiájának függvényében.



A transzmisszió tökéletes ($T = 1$), ha

$$\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(E_n - V_0\right)} = n\pi,$$

ahol n tetszőleges valós szám. Ebből

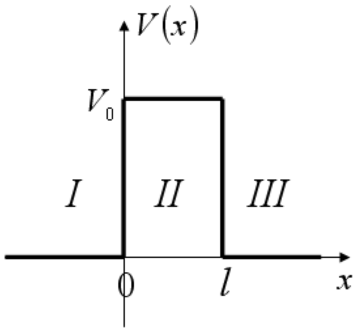
$$E_n - V_0 = E_n + |V_0| = \left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2 \frac{1}{2m}$$

azaz a transzmisszió tökéletes, ha a részecske energiájának és a potenciálgödör mélységének összege pont egybeesik az ugyanolyan szélességű, de végtelenül mély potenciálgödör valamely energiaszintjével.

2.3. Potenciálgáton történő szóródás

Vizsgáljuk a részecske mozgását a következő potenciál esetében

$$V\left(x\right) = \begin{cases} 0 \quad \text{ha } x < 0 \text{ vagy } x > l \\ V_0 > 0 \quad \text{ha } 0 \leq x \leq l \end{cases} .$$



Egy ilyen potenciál esetén a részecskének csak szórt állapotai lehetnek. Keressük az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásait az I, II és III tartományokon. Csak az $E < V_0$ esettel foglalkozunk részletesebben, az $E > V_0$ esetet az olvasóra bízzuk.

$E < V_0$ **(alagúteffektus)**

$I.$ **és** $III.$ **tartomány:**

Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet alakja ($V(x) = 0$):

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

Bevezetve a $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$ jelölést kapjuk:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k_1^2\psi(x) = 0.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása adja a hullámfügvényt az I és III tartományban:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_1 e^{ik_1x} + A_1' e^{-ik_1x} \\ \psi_{III}(x) &= A_3 e^{ik_1x} + A_3' e^{-ik_1x}. \end{aligned}$$

A részecske tehát a potenciálgáton kívül szabad részecskeként viselkedik. Ismét előírjuk, hogy a részecske hullámfüggvnyének ne legyen a potenciálgátra jobbról ($x > l$ felől) érkező összetevője, azaz $A_3' = 0$ legyen, vagyis:

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1x}.$$

$II.$ **tartomány:**

Itt az időfüggetlen Schrödinger egyenlet alakja ($V(x) = V_0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x).$$

Mivel $E < V_0$, a $\rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} > 0$ jelölést vezetjük be, ekkor kapjuk:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \rho_2^2\psi(x) = 0.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása:

$$\psi_{II}(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B_2' e^{-\rho_2 x}.$$

Illesztés $x = 0$**-ban:**

A hullámfüggvénynek és deriváltjának most is folytonosnak kell lennie a potenciál ugrásának helyén:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Longrightarrow A_1 + A_1' = B_2 + B_2' \tag{28}$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_0 = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_0 \Longrightarrow ik_1(A_1 - A_1') = \rho_2(B_2 - B_2') \tag{29}$$

A (28) egyenletet szorozzuk be ik_1-gyel, majd adjuk össze a két egyenletet:

$$2ik_1A_1 = B_2\left(ik_1+\rho_2\right) + B_2'\left(ik_1-\rho_2\right).$$

Ebből A_1-et kifejezve:

$$A_1 = B_2\frac{ik_1+\rho_2}{2ik_1} + B_2'\frac{ik_1-\rho_2}{2ik_1}. \tag{30}$$

Illesztés $x = l$-ben:

$$\begin{aligned} \psi_{II}(l) &= \psi_{III}(l) \Longrightarrow B_2e^{\rho_2 l} + B_2'e^{-\rho_2 l} = A_3e^{ik_1 l} &(31)\\ \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_l &= \left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_l \Longrightarrow \rho_2\left(B_2e^{\rho_2 l} - B_2'e^{-\rho_2 l}\right) = ik_1A_3e^{ik_1 l} &(32)\end{aligned}$$

A (31) egyenletet szorozzuk be ρ_2-vel, majd adjuk össze, illetve vonjuk ki a két egyenletet:

$$\begin{aligned} 2\rho_2B_2e^{\rho_2 l} &= A_3e^{ik_1 l}\left(ik_1+\rho_2\right),\\ 2\rho_2B_2'e^{-\rho_2 l} &= A_3e^{ik_1 l}\left(\rho_2-ik_1\right)\end{aligned}$$

Ebből B_2-t, illetve B_2'-t kifejezve:

$$B_2 = A_3e^{ik_1 l}\frac{ik_1+\rho_2}{2\rho_2}e^{-\rho_2 l}, \tag{33}$$

$$B_2' = A_3e^{ik_1 l}\frac{\rho_2-ik_1}{2\rho_2}e^{\rho_2 l}. \tag{34}$$

Helyettesítsük be ezeket az A_1-re kapott (30) összefüggésbe:

$$\begin{aligned} A_1 &= A_3e^{ik_1 l}\frac{\left(ik_1+\rho_2\right)^2}{4ik_1\rho_2}e^{-\rho_2 l} + A_3e^{ik_1 l}\frac{\left(ik_1-\rho_2\right)\left(\rho_2-ik_1\right)}{4ik_1\rho_2}e^{\rho_2 l}\\ &= A_3e^{ik_1 l}\frac{1}{4ik_1\rho_2}\left[\left(ik_1+\rho_2\right)^2e^{-\rho_2 l} - \left(ik_1-\rho_2\right)^2e^{\rho_2 l}\right]\\ &= A_3e^{ik_1 l}\frac{1}{4ik_1\rho_2}\left[\left(-k_1^2+2ik_1\rho_2+\rho_2^2\right)e^{-\rho_2 l} - \left(-k_1^2-2ik_1\rho_2+\rho_2^2\right)e^{\rho_2 l}\right]\\ &= A_3e^{ik_1 l}\frac{1}{4ik_1\rho_2}\left[\left(-k_1^2+\rho_2^2\right)\left(e^{-\rho_2 l}-e^{\rho_2 l}\right) + 2ik_1\rho_2\left(e^{-\rho_2 l}+e^{\rho_2 l}\right)\right]\\ &= A_3e^{ik_1 l}\frac{1}{4ik_1\rho_2}\left[\left(-k_1^2+\rho_2^2\right)\left(-2\sinh\left(\rho_2 l\right)\right) + 2ik_1\rho_2\left(2\cosh\left(\rho_2 l\right)\right)\right]\\ &= A_3e^{ik_1 l}\left[\cosh\left(\rho_2 l\right) - \frac{-k_1^2+\rho_2^2}{2ik_1\rho_2}\sinh\left(\rho_2 l\right)\right] &(35)\end{aligned}$$

Transzmissziós együttható:

A beeső hullám most is ψ_I azon tagja, mely a potenciállépcső felé haladó hullámot írja le, azaz $A_1e^{ik_1x} = \varphi_i(x)$. A hozzá tartozó valószínűségi áramsűrűség itt is $j_i = \frac{\hbar k_1}{m}\left|A_1\right|^2$. Az áthaladt hullám maga ψ_{III}, hiszen feltettük, hogy nem érkezik hullám jobbról a potenciálgátra. A megfelelő valószínűségi áramsűrűség könnyen ellenőrizhető, hogy $j_t = \frac{\hbar k_1}{m}\left|A_3\right|^2$. A transzmissziós együttható tehát ebben a problémában:

$$T = \left|\frac{j_t}{j_i}\right| = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2,$$

ez annak a valószínűségét mondja meg, hogy a részecske átjut a potenciálgáton. Az (35) egyenletből kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} T &= \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \left|\frac{1}{e^{ik_1 l}\left[\cosh\left(\rho_2 l\right) - \frac{-k_1^2+\rho_2^2}{2ik_1\rho_2}\sinh\left(\rho_2 l\right)\right]}\right|^2 \\ &= \frac{1}{\cosh^2\left(\rho_2 l\right) + \frac{\left(-k_1^2+\rho_2^2\right)^2}{4k_1^2\rho_2^2}\sinh^2\left(\rho_2 l\right)} \\ &= \frac{4k_1^2\rho_2^2}{4k_1^2\rho_2^2\cosh^2\left(\rho_2 l\right) + \left(-k_1^2+\rho_2^2\right)^2\sinh^2\left(\rho_2 l\right)}. \end{aligned}$$

Felhasználva, hogy $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$ kapjuk:

$$\begin{aligned} T &= \frac{4k_1^2\rho_2^2}{4k_1^2\rho_2^2\left(1+\sinh^2\left(\rho_2 l\right)\right) + \left(-k_1^2+\rho_2^2\right)^2\sinh^2\left(\rho_2 l\right)} \\ &= \frac{4k_1^2\rho_2^2}{4k_1^2\rho_2^2 + \left(k_1^2+\rho_2^2\right)^2\sinh^2\left(\rho_2 l\right)} \end{aligned}$$

Ha behelyettesítjük ebbe a kifejezésbe k_1 és ρ_2 értékét:

$$T = \frac{4E\left(V_0 - E\right)}{4E\left(V_0 - E\right) + V_0^2\sinh^2\left(\sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}\frac{l}{\hbar}\right)}.$$

A részecske tehát nullától különböző valószínűséggel áthalad a potenciálgáton, ezt a jelenséget nevezzük *alagúteffektusnak*. Ez az effektus akkor jelentős, ha $\sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}\frac{l}{\hbar} \sim 1$. Ha $\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}} \ll l$ akkor az átjutás valószínűsége, és ezzel az alagúteffektus is nagyon kicsinnyé válik, ekkor ugyanis az alábbi közelítő formula adja T-t:

$$T \simeq \frac{16E\left(V_0 - E\right)}{V_0^2} e^{-\frac{2l}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}.$$

(**Megjegyzés: Transzmissziós együttható az $E > V_0$ esetben:**

Leellenőrizhető, hogy a transzmissziós együttható az $E > V_0$ esetben:

$$T = \frac{4E\left(E - V_0\right)}{4E\left(E - V_0\right) + V_0^2\sin^2\left(\sqrt{2m\left(E - V_0\right)}\frac{l}{\hbar}\right)}$$

)