Az alagúteffektus

A részecskék kvantummechanikai leírása olyan – kísérletekben megfigyelhető – jelenségek értelmezését és előrejelzését is lehetővé teszi, amelyek a klasszikus mechanika szerint „lehetetlenek”. Ezek egyike az alagúteffektus.

Az alagúteffektus lényege a következő: A teret valamilyen mező által emelt „potenciálgát” két részre osztja. Ha egy részecske teljes energiája kisebb, mint amekkora e részecske potenciális energiája lenne a „gát” belsejében, akkor a klasszikus mechanika szerint a részecske a „gáton” nem haladhat át. Mozgása során mindvégig a tér azon részében marad, ahonnan elindult. A kvantummechanika szerint azonban előfordulhat, hogy a részecske átjut a „gáton”. (Mintegy „alagutat fúr a gátba”, innen a jelenség elnevezése.)

Egyszerű példaként képzeljünk el három párhuzamos fémlemezt, amelyek mindegyikébe kis lyukat fúrtunk! A lyukak egy olyan egyenes mentén helyezkednek el, amely a lemezekre merőleges. Adjunk a két szélső lemez mindegyikének $+Q$ töltést, a középső lemeznek pedig $-2Q$ töltést. Ha a lemezekre merőlegesen, a lyukak irányában egy elektronnyalábot indítunk el, akkor a nyaláb szinte akadálytalanul halad az első lyukik, azon áthaladva viszont egy olyan elektromos mezőbe kerül, amely a nyalábra fékező Coulomb-erőt fejt ki. Ha a nyalábot alkotó elektronok energiája egy kritikus értéknél kisebb, akkor a klasszikus mechanika szerint nem fogják elérni a középső lyukat: a mező lefékezi, majd visszalöki őket. Ha az elektronok energiája elég nagy ahhoz, hogy átlépjék a középső lyukat, akkor egy gyorsító elektromos mezőbe kerülnek, és végül ugyanakkora sebességgel hagyják el a harmadik lyukat, mint amekkorával az első lyukhoz érkeztek. A kvantummechanika jóslatai azonban ettől eltérnek: az elektronok egy része akkor is átjuthat mindhárom lyukon, ha energiájuk a kritikus érték alatt marad. Másrészt az elektronok egy része akkor is visszaverődhet, ha energiájuk a kritikus értéket meghaladja.

Az iménti példában az elektronok potenciális energiája az első lyuktól a második felé haladva a távolsággal lineárisan növekszik, majd a második lyuktól a harmadik felé haladva lineárisan csökken. Az alábbiakban egy egyszerűbb esetet vizsgálunk meg, amely az előbbi példa határesetének is tekinthető: egy elektron egy „nagyon keskeny”, de „nagyon magas” potenciálfalnak ütközik. Azt fogjuk meghatározni, hogy az elektron mekkora eséllyel halad át ezen a potenciálfalon illetve verődik róla vissza.

Az alagúteffektust bizonyos asztrofizikai folyamatok leírásánál fontos figyelembe venni, például akkor, ha a csillagok belsejében zajló fúziós folyamatokat vizsgáljuk. Utóbbi esetben a leküzdendő „potenciálgát” a pozitív töltésű atommagok elektromos taszításából ered.

Feladat: Egy dimenziós térben m tömegű részecske mozog E energiával, majd egy potenciálgátnak ütközik. A részecske potenciális energiája a helykoordináta függvényében a $V(x) = \lambda \cdot \delta(x)$ képlettel adható meg. Itt λ egy pozitív, energia dimenziójú konstans, $\delta(x)$ pedig a Dirac-féle deltafüggvény (illetve „disztribúció”). Mekkora valószínűséggel halad át a részecske a falon?

Megoldás:

Első lépésként az erőmentes térben mozgó részecskét vizsgáljuk. A potenciál konstans, értékét válasszuk nullának! Ekkor a részecske Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

A részecske mozgását leíró Schrödinger-egyenlet:

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Az alábbi alakban felírható megoldásokat keresünk:

$$\Psi_1(x,t) = e^{-i(\omega t - kx)}$$

$$\Psi_2(x,t) = e^{-i(\omega t + kx)}$$

Könnyen ellenőrizhető, hogy mindkét fenti függvény (tetszőleges t pillanatban) sajátfüggvénye a $\hat{H}$ Hamilton-operátornak $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ sajátértékkel. Hozzárendelési szabályuk alapján Ψ_1 egy jobbra (x növekedésének irányában), Ψ_2 egy balra (x csökkenésének irányában) haladó hullámot ír le.

A Schrödinger-egyenlet mindkét esetben a következő algebrai összefüggésre („diszperziós reláció") vezet ω és k között:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{E}{\hbar}$$

Úgy látszik, hogy a Ψ_1 és Ψ_2 függvények az erőmentes térben határozott energiaértékkel rendelkező részecskékhez tartoznak. Azonban felmerül az a probléma, hogy ha a $|\Psi_1(x,t)|^2$ és a $|\Psi_2(x,t)|^2$ függvények bármelyikét x szerint $-\infty$-től $+\infty$-ig integrálni akarjuk, akkor az integrálok divergálni fognak. Azaz a függvények semmilyen pillanatban nem adhatják meg egy végtelen (egydimenziós) térben mozgó részecske állapotát.

A Ψ_1, Ψ_2 megoldások ennek ellenére hasznosak. Ugyan e függvények szigorúan véve nem írhatják le egy részecske dinamikáját, de egyes esetekben jó közelítést jelenthetnek, és kiindulópontot adnak az általános eset vizsgálatához is. Slamposan kifejezve: a részecske kezdőpillanatbeli $\Psi(x)$ állapotfüggvényét (amely négyzetesen integrálható) „összeszuperponálhatjuk" e^{ikx} alakú függvényekből (azaz Fourier-komponensekre bonthatjuk), és az egyes komponensek időfejlődéséből az állapotfüggvény időfejlődése is megkapható.

Most áttérünk a potenciálgátnak ütköző részecske vizsgálatára. A megoldandó Schrödinger-egyenlet:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \lambda\cdot\delta(x)\cdot\Psi$$

Feltesszük, hogy a haladó részecske állapotfüggvényének Fourier-felbontásában valamely k hullámszámhoz közeli értékek dominálnak. Mivel az origón kívül a Schrödinger-egyenlet megegyezik az erőmentes térben mozgó részecske Schrödinger-egyenletével, így az origótól balra és jobbra is kereshető a megoldás a korábban megadott Ψ_1 és Ψ_2 függvények lineárkombinációjának formájában. Vizsgáljuk azt az esetet, amikor a részecske balról jobbra (x növekedésének irányában) haladva érkezik meg az origóban lévő potenciálgáthoz! Ebben az esetben a Schrödinger-egyenlet megoldását az alábbi alakban kereshetjük:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} Ae^{-i(\omega t - kx)} + Be^{-i(\omega t + kx)}, & \text{ha } x < 0 \\ Ce^{-i(\omega t - kx)}, & \text{ha } x > 0 \end{cases}$$

A fenti hozzárendelés értelme a következő: az $Ae^{-i(\omega t - kx)}$ tag írja le a részecske beérkezését, a $Be^{-i(\omega t + kx)}$ tag a potenciálfalról való visszaverődést, a $Ce^{-i(\omega t - kx)}$ tag pedig a potenciálfalon való átkelést (azaz magát az alagúteffektust). A következőkben megvizsgáljuk, hogy milyen megkötések tehetők az A, B, C konstansokra.

A B és C konstansok abszolútértékének négyzete a visszaverődés illetve az áthaladás valószínűségét adják meg. E két valószínűség összege 1-gyel egyenlő:

$$P(\text{visszaverődés}) = |B|^2$$

$$P(\text{áthaladás}) = |C|^2$$

$$P(\text{visszaverődés}) + P(\text{áthaladás}) = |B|^2 + |C|^2 = 1$$

Az állapotfüggvénynek folytonosnak kell lennie, azaz

$$\lim_{x\to 0^+}\Psi(x,t) = \lim_{x\to 0^-}\Psi(x,t) = \Psi(0,t)$$

Ebből a következőt kapjuk:

$$A + B = C$$

Integráljuk a Schrödinger-egyenlet mindkét oldalát x szerint $-\varepsilon$-tól $+\varepsilon$-ig (ε pozitív valós szám)!

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx = -\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \lambda \cdot \delta(x) \cdot \Psi(x,t) dx$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \Psi(x,t) dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\bigg|_{x=\varepsilon} - \frac{\partial \Psi}{\partial x}\bigg|_{x=-\varepsilon} \right) + \lambda \cdot \Psi(0,t)$$

Képezzük mindkét oldal határértékét az $\varepsilon \to 0^+$ esetben! Mivel a $\Psi(x,t)$ függvény korlátos, a bal oldali kifejezés határértéke nulla lesz.

$$0 = -ik \frac{\hbar^2}{2m} (C - A + B) + \lambda \cdot C$$

Az A, B, C konstansokra tehát a következő összefüggéseket kaptuk:

$$\begin{cases} |B|^2 + |C|^2 = 1 \\ A + B = C \\ -ik \dfrac{\hbar^2}{2m} (C - A + B) + \lambda \cdot C = 0 \end{cases}$$

A második és a harmadik egyenlet alapján:

$$B = \frac{1}{ik \frac{\hbar^2}{m\lambda} - 1} \cdot A$$

$$C = \frac{ik \frac{\hbar^2}{m\lambda}}{ik \frac{\hbar^2}{m\lambda} - 1} \cdot A$$

Ezeket a kifejezéseket beírjuk az első egyenletbe:

$$\frac{1}{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2} + 1} \cdot |A|^2 + \frac{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2}}{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2} + 1} \cdot |A|^2 = 1$$

$$|A|^2 = 1$$

$$|A| = 1$$

Most már meg tudjuk adni a visszaverődés és az áthaladás valószínűségét:

$$P(\text{visszaverődés}) = |B|^2 = \frac{1}{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2} + 1} \cdot |A|^2 = \frac{1}{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2} + 1}$$

$$P(\text{áthaladás}) = |C|^2 = \frac{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2}}{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2} + 1} \cdot |A|^2 = \frac{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2}}{k^2 \frac{\hbar^4}{m^2\lambda^2} + 1}$$

A k hullámszám és az E energia között (az erőmentes térben mozgó részecskéhez hasonlóan) fennáll az alábbi összefüggés:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

A visszaverődés és az áthaladás valószínűségét így az energia segítségével is kifejezhetjük:

$$P(\text{visszaverődés}) = \frac{1}{\frac{2\hbar^2}{m\lambda^2} E + 1}$$

$$P(\text{áthaladás}) = \frac{\frac{2\hbar^2}{m\lambda^2}E}{\frac{2\hbar^2}{m\lambda^2}E + 1}$$

Látható, hogy a Dirac-deltaként leírható potenciálgáton való áthaladás valószínűsége a részecske energiájának szigorúan monoton növekvő függvénye, amely $E \to \infty$ esetén 1-hez közelít. Más alakú potenciálgátak esetén az áthaladási valószínűség nem feltétlenül monoton függvénye az energiának.