# Výpočty k tunelovému javu

Boris Tomášik* a Ľuboš Krišťák
Katedra fyziky, Fakulta prírodných vied,
Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 97401 Banská Bystrica

21. februára 2009

Tunelovanie je jeden z typicky kvantovomechanických javov. V klasickej fyzike je vylúčené, aby objekt prekonal potenciálovú bariéru vyššiu ako je jeho energia. Kvantová mechanika takýto prechod povoľuje a ponúka spôsob ako určiť jeho pravdepodobnosť. Tunelový jav má bohaté technologické využitie (napríklad tunelová dióda). Pritom jeho popis v kvantovej mechanike je koncepčne jednoduchý. Na druhej strane, tento koncepčne jednoduchý výpočet ponúka bohaté šance urobiť jednu alebo viacero algebraických chýb.

Z pedagogických dôvodov preto uvádzame podrobný výpočet tu, aby si čitateľ mohol overiť nielen koncept postupu, ale aj celú techniku výpočtu. Čitateľom, ktorí sa kvantovú mechaniku chcú naučiť, odporúčame, aby problém najskôr skúsili rozriešiť sami a až potom riešenie kontrolovali s týmto textom.

## 1 Jednostranne nekonečne dlhá bariéra

Technicky jednoduchšia je situácia načrtnutá na obrázku 1. V celom článku sa budeme venovať výlučne problémom v jednom rozmere. Bezčasová Schrödingerova rovnica znie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\,\psi + (U(x) - E)\,\psi = 0\,. \tag{1}$$

V našom prípade máme do činenia s potenciálom

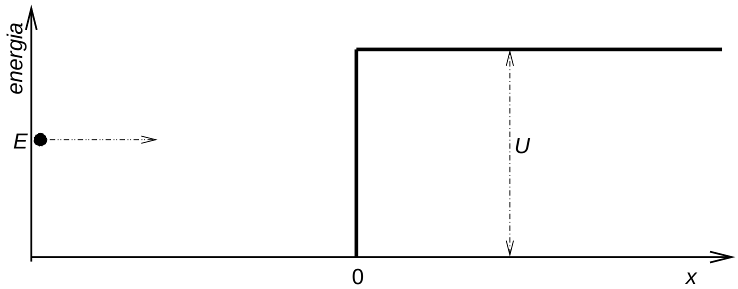
$$U(x) = \left\{ \begin{array}{ccc} 0 & : & x < 0 \\ U & : & x \geq 0 \end{array} \right. \tag{2}$$

pričom je dobré si uvedomiť, že si môžeme *zvoliť* súradnicovú sústavu tak, že nenulový potenciál začína pri $x = 0$.

Na intervale $x < 0$ potom máme Schrödingerovu rovnicu

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2\,m\,E}{\hbar^2}\psi\,, \tag{3}$$

*tomasik@fpv.umb.sk




Obrázok 1: Častica s energiou $E$ dopadajúca na energetickú bariéru s výškou $U$, pričom $U > E$. Bariéra začína na pozícii $x = 0$ a pokračuje do nekonečna.

ktorá má všeobecné riešenie

$$\psi = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx} \tag{4}$$

kde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{5}$$

Amplitúdy $A$ a $B$ treba určiť.

V oblasti $x > 0$ vyzerá Schrödingerova rovnica

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m(U-E)}{\hbar^2}\psi \tag{6}$$

Všeobecné riešenie je

$$\psi = C\,e^{\kappa x} + D\,e^{-\kappa x} \tag{7}$$

pričom

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} > 0\,. \tag{8}$$

Časť riešenia (7) s exponenciálnou funkciou $e^{\kappa x}dx$ diverguje ak vypočítame integrál $\int_0^\infty e^{\kappa x}$. Teda pre $C \neq 0$ nie je táto časť normovateľná a treba položiť $C = 0$.

Riešenia (4) a (7) treba prepojiť tak, aby vlnová funkcia aj jej prvá derivácia boli všade spojité. Z týchto podmienok dostávame

$$A + B = D \tag{9a}$$
$$ik(A-B) = -\kappa D \tag{9b}$$

Chceme nájsť pravdepodobnosť, že časticu nájdeme v oblasti nenulového potenciálu, teda zaujíma nás $D$. Z rovnice (9a) vyjadríme

$$B = D - A \tag{10}$$

Dosadením do rovnice (9b) dostávame

$$D = \frac{2ik}{ik - \kappa} A\,. \tag{11}$$

Po dosadení zo vzťahov (5) a (8)

$$D = \frac{-2i\sqrt{E}}{\sqrt{U-E} - i\sqrt{E}} A \tag{12}$$

Vlnová funkcia v oblasti s nenulovým potenciálom je teda

$$\psi(x) = -A\,\frac{2i\sqrt{E}}{\sqrt{U-E} - i\sqrt{E}} e^{-\kappa x} \tag{13}$$

Pritom $A$ je amplitúda vlny dopadajúcej zľava na bariéru. To znamená, že hustota pravdepodobnosti nájsť časticu v oblasti s nenulovým potenciálom, ktorá musí byť normovaná na kvadrát amplitúdy vlny dopadajúcej na bariéru, bude

$$\mathcal{P}(x) = \frac{4E}{U}\,e^{-2\kappa x}\,. \tag{14}$$

Z rovnice (10) určíme tiež amplitúdu $B$

$$B = -\frac{\sqrt{U-E} + i\sqrt{E}}{\sqrt{U-E} - i\sqrt{E}} A\,. \tag{15}$$

Z toho môžeme odvodiť pravdepodobnosť odrazu od bariéry

$$\mathcal{R} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1\,. \tag{16}$$

Tento výsledok je triviálny, pretože od nekonečne dlhej bariéry sa častica v konečnom dôsledku určite musí odraziť. Napriek tomu môže preniknúť do hĺbky $x$ s pravdepodobnosťou $\mathcal{P}(x)$ danou vzťahom (14).

Je poučné tiež si všimnúť, že pravdepodobnosť nájsť časticu v oblasti nenulového potenciálu rastie s energiou $E$.

## 2 Bariéra s konečným rozmerom

Technicky mierne zložitejším problémom je tunelovanie popod bariéru s konečným rozmerom (Obr. 2). Potenciál je v tomto prípade popísaný vzťahom

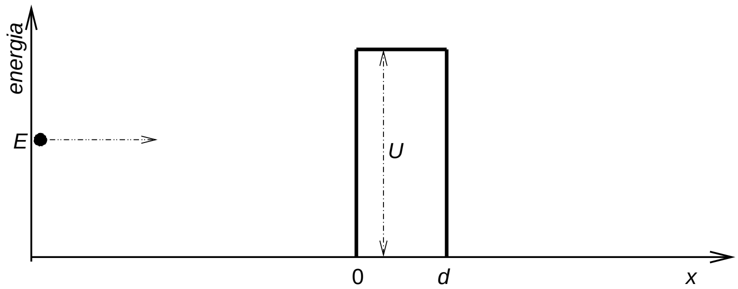
$$U(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < 0 \\ U & : \quad 0 \le x \le d \\ 0 & : \quad x > d \end{cases}\,. \tag{17}$$

Riešenia bezčasovej Schrödingerovej rovnice v jednotlivých oblastiach sú

$$\text{pre} \quad x < 0 \quad : \qquad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{18a}$$

$$\text{pre} \quad 0 \le x \le d \quad : \qquad \psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \tag{18b}$$

$$\text{pre} \quad x > d \quad : \qquad \psi(x) = Ge^{ikx} + He^{-ikx} \tag{18c}$$




Obrázok 2: Častica s energiou $E$ dopadá na bariéru s výškou $U$ a konečnou šírkou $d$, pričom $U > E$.

pričom $A$, $B$, $C$, $D$, $G$ a $H$ sú amplitúdy, ktoré je potrebé určiť z podmienok, aby vlnová funkcia aj jej prvá derivácia boli spojité na oboch rozhraniach. Ešte predtým sa ale obmedzíme na situáciu, kedy častice dopadajú na bariéru zľava. Nemáme teda žiaden prúd častíc dopadajúcich sprava a $H = 0$. V konečnom dôsledku chceme vypočítať koeficienty prechodu $\mathcal{T} = |G|^2/|A|^2$ a odrazu $\mathcal{R} = |B|^2/|A|^2$.

Z podmienok spojitosti vlnovej funkcie a jej prvej derivácie dostávame sústavu rovníc

$$
\begin{aligned}
A + B &= C + D && \text{(19a)}\\
ikA - ikB &= \kappa C - \kappa D && \text{(19b)}\\
e^{\kappa d}C + e^{-\kappa d}D &= e^{ikd}G && \text{(19c)}\\
\kappa\, e^{\kappa d}C - \kappa\, e^{-\kappa d}D &= ik\, e^{ikd}G\,. && \text{(19d)}
\end{aligned}
$$

Tento systém rovníc možno riešiť mnohými spôsobmi. Výpočtovo asi najjednoduchšie je vyjadriť $B$ z rovnice (19a)

$$B = C + D - A\,, \tag{20}$$

dosadiť do (19b) a riešiť takto vzniknutú sústavu troch rovníc (predpokladajúc, že $A$ poznáme, pretože všetky ostatné koeficienty vyjadríme cez $A$):

$$
\begin{aligned}
(ik+\kappa)C + (ik-\kappa)D &= 2ik\,A && \text{(21a)}\\
e^{\kappa d}C + e^{-\kappa d}D - e^{ikd}G &= 0 && \text{(21b)}\\
\kappa\, e^{\kappa d}C - \kappa\, e^{-\kappa d}D - ik\, e^{ikd}G &= 0 && \text{(21c)}
\end{aligned}
$$

Sústavu riešime metódou determinantov. Determinant hlavnej matice je

$$\Delta = \begin{vmatrix} (ik+\kappa) & (ik-\kappa) & 0 \\ e^{\kappa d} & e^{-\kappa d} & -e^{ikd} \\ \kappa e^{\kappa d} & -\kappa e^{-\kappa d} & -ike^{ikd} \end{vmatrix} = e^{ikd}\left[e^{\kappa d}(ik+\kappa)^2 - e^{-\kappa d}(ik-\kappa)^2\right]\,. \tag{22}$$

Pre koeficient prechodu potrebujeme poznať amplitúdu $G$, preto vypočítame

$$\Delta_G = \begin{vmatrix} (ik+\kappa) & (ik-\kappa) & 2ikA \\ e^{\kappa d} & e^{-\kappa d} & 0 \\ \kappa e^{\kappa d} & -\kappa e^{-\kappa d} & 0 \end{vmatrix} = -4iAk\kappa \tag{23}$$

teda

$$G = \frac{\Delta_G}{\Delta} = \frac{-4iAk\kappa}{e^{ikd}\left[e^{\kappa d}(ik+\kappa)^2 - e^{-\kappa d}(ik-\kappa)^2\right]} \,. \tag{24}$$

Koeficient prechodu teraz môžeme určiť ako

$$\mathcal{T} = \frac{|G|^2}{|A|^2} \,. \tag{25}$$

V literatúre sa občas vyskytuje *približné* riešenie pre $\mathcal{T}$ [1, 2]. V takom prípade sa predpokladá, že

$$\kappa d \gg 1 \,, \tag{26}$$

a preto môžeme v rovnici (22) zanedbať člen obsahujúci $e^{-\kappa d}$ oproti členu, v ktorom vystupuje $e^{\kappa d}$. Teda

$$\Delta \approx e^{ikd} e^{\kappa d}(ik+\kappa)^2 \,. \tag{27}$$

Potom

$$G \approx \frac{-4iAk\kappa}{e^{ikd}e^{\kappa d}(ik+\kappa)^2} \tag{28}$$

A koeficient prechodu dostaneme ľahko zo vzťahu (25)

$$\mathcal{T} \approx \frac{(4k\kappa)^2}{(k^2+\kappa^2)^2}\, e^{-2\kappa d} \,. \tag{29}$$

Pri ochote k trochu náročnejším algebraickým úpravám však možno $\mathcal{T}$ vyjadriť aj v kompaktnom, ale napriek tomu presnom tvare. Vo vzťahu (22) roznásobíme zátvorky a preskupíme členy nasledovne

$$\Delta = e^{ikd}\left[2ik\kappa\left(e^{\kappa d} + e^{-\kappa d}\right) - (k^2-\kappa^2)\left(e^{\kappa d} - e^{-\kappa d}\right)\right] \,. \tag{30}$$

Dôvodom pre túto operáciu bolo, že teraz máme v oblých zátvorkách definičné vzťahy pre hyperbolický kosínus a sínus

$$\begin{aligned} \cosh x &= \frac{e^x + e^{-x}}{2} \\ \sinh x &= \frac{e^x - e^{-x}}{2} \end{aligned}$$

pomocou ktorých môžeme písať

$$\Delta = e^{ikd}\left[4ik\kappa\cosh(\kappa d) - 2(k^2-\kappa^2)\sinh(\kappa d)\right] \,. \tag{31}$$

Amplitúdu $G$, danú vzťahom (24) potom môžeme (po jednoduchej úprave) vyjadriť ako

$$G = \frac{e^{-ik\kappa}A}{\cosh(\kappa d) - \frac{i(k^2-\kappa^2)}{2k\kappa}\sinh(\kappa d)} \,. \tag{32}$$

Koeficient prechodu je

$$\mathcal{T} = \frac{1}{\cosh^2(\kappa d) + \frac{(k^2-\kappa^2)^2}{4k^2\kappa^2}\sinh^2(\kappa d)} \tag{33}$$

Vzťah upravíme využijúc štandardný vzorec

$$\cosh^2 x = 1 + \sinh^2 x \,, \tag{34}$$

do tvaru

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + \frac{(k^2+\kappa^2)^2}{4k^2\kappa^2}\sinh^2(\kappa d)} \,. \tag{35}$$

Teraz dosadíme za $k$ a $\kappa$ zo vzťahov (5) a (8). Po úpravách dostaneme konečnú formulku pre koeficient prechodu

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + \frac{U^2}{4E(U-E)}\sinh^2(\kappa d)} \,. \tag{36}$$

Túto formulku možno nájsť napríklad v literatúre [3].

Koeficient odrazu možno počítať ako

$$\mathcal{R} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \,, \tag{37}$$

ale oveľa jednoduchšie je určiť ho ako

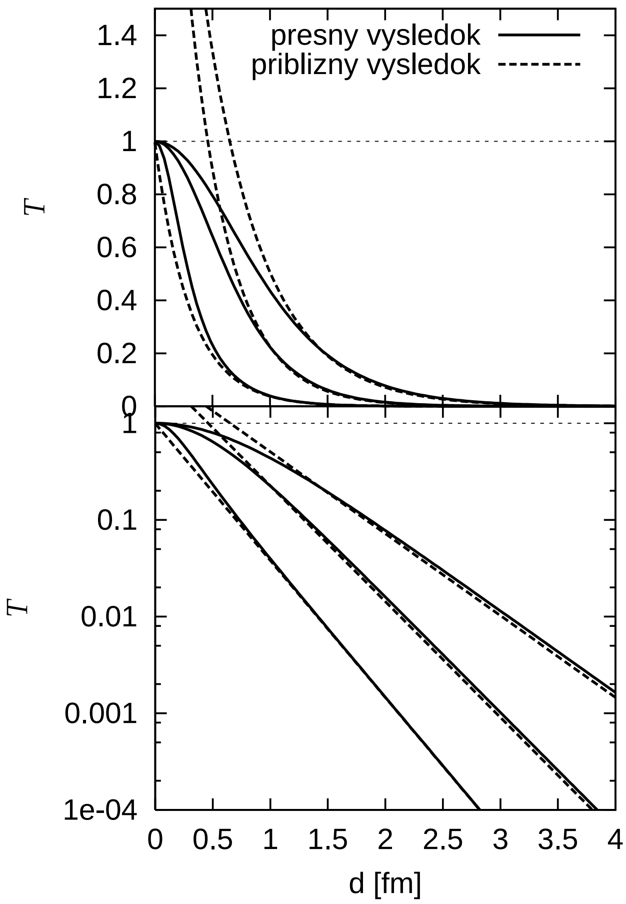
$$\mathcal{R} = 1 - \mathcal{T} \,. \tag{38}$$

**Platnosť zjednodušujúceho priblíženia.** Na záver analyzujeme, do akej miery a v akých situáciách je približný výsledok (29) dobrou aproximáciou presného výsledku (36). Ak si pripomenieme definičný vzťah pre $\kappa$ (8), tak pomerne ľahko nahliadneme, že pri zjednodušujúcej podmienke (26) predpokladáme aspoň jednu z nasledovných situácií:

- Bariéra je veľmi široká, t.j. $d$ je veľké.
- Tunelujúca častica je veľmi ťažká.
- Výška potenciálovej bariéry je oveľa väčšia ako energia častice.

V týchto situáciách, kde očakávame platnosť priblíženia (29), je pravdepodobnosť prechodu nízka.

Na obrázku 3 porovnávame koeficient prechodu určený z presného vzťahu (36) s približným výsledkom (29). Pri výpočte sme použili hodnoty parametrov




Obrázok 3: Porovnanie koeficientu prechodu $\mathcal{T}$ ako funkcie šírky bariéry (meranej vo femtometroch) určeného zo vzťahu (36) (neprerušované krivky) s približným vzorcom (29) (prerušované krivky). Koeficient je počítaný pre tunelovanie $\alpha$ častice ($m = 6,646 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg} = 3728\,\mathrm{MeV}/c^2$) popod bariéru s výškou $U = 15\,\mathrm{MeV}$. Energie $\alpha$ častice pre dvojice kriviek sú (zľava): 1 MeV, 5 MeV, 10 MeV.

typické pre $\alpha$ rozpad jadier. Pozorujeme, že priblíženie (29) je v našom prípade uspokojivé pre bariéry zhruba širšie ako 1 fm. Motiváciou pre toto priblíženie v literatúre [1] je neskoršie využitie na popis $\alpha$ rozpadu jadier a pre túto aplikáciu je to v poriadku. Pozorujeme však tiež, že pre malé šírky bariéry, kde je porušená podmienka $\kappa d \gg 1$, približný výsledok vedie ku koeficientu prechodu väčšiemu ako 1, teda k zjavne nefyzikálnemu výsledku. Toto si musí študent uvedomiť, ak sa tento vzťah použije pri učení kvantovej mechaniky: nejde tu o žiadne porušenie princípov, ale o jednoduché zlyhanie priblíženia v oblasti, kde už nie je aplikovateľné.

## Referencie


[1] A. Beiser, *Perspectives of Modern Physics*, McGraw-Hill, New York, 1969 (český preklad *Úvod do moderní fyziky*, Academia, Praha, 1978).

[2] J. Krajčo, *Kvantová mechanika*, skriptum, Univerzita Mateja Bela, Banská Bystrica, 1993.

[3] J. Pišút, L. Gomolčák, V. Černý, *Úvod do kvantovej mechaniky*, Alfa, Bratislava, 1975.