

Valószínűségi-hullámcsomagok transzmissziója
és reflexiója potenciálgáton való áthaladás során

Gurzó József
ELTE Fizika BSc
I. éves hallgató

Témavezető: Fejős Gergely
ELTE-TTK Fizikai Intézet, Atomfizikai tanszék

1. Bevezetés

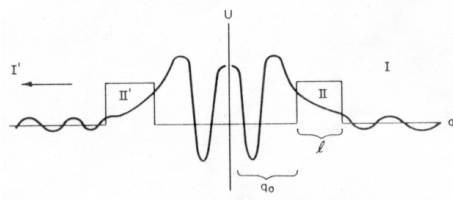
Ebben a dolgozatban egydimenziós kvantummechanikai problémákkal foglalkozunk. Az idevonatkozó fizikai jelenségek jelentős részében, tipikusan ahol tartományként konstans potenciálban mozgó részecskéket vizsgálunk, elegendő síkhullám közelítést használni. Utóbbi helyessége mérési eredményekből leellenőrizhető és a legtöbb esetben az elmélet hibahatáron belül közelíti a valóságot. Általában azonban, ha realisztikusabb vizsgálatot szeretnénk folytatni az idevonatkozó fizikai rendszerekről, akkor várakozásaink szerint a síkhullám közelítések helyett hullámcsomagokat kell használnunk. Utóbbi egy jóval összetettebb megoldást igénylő feladat.

A szóban forgó problémák modellezéséhez különböző (általában valamilyen közelítésen alapuló) potenciálfüggvény(ek)re kell megoldanunk a Schrödinger-egyenletet. Utóbbi néhány kivételtől eltekintve analitikusan nem elvégezhető, így a továbbiakban felmerülő problémák megoldása során első közelítésben olyan potenciálokkal modellezzük a rendszert, amelyekre ismert az analitikus megoldás. Ennek megfelelően a dolgozatban különböző egydimenziós potenciálokhoz tartozó problémákat fogunk vizsgálni. Célunk az, hogy a levezetendő közelítések segítségével számos fizikai rendszer leírásához állítsunk elő egy könnyen alkalmazható "eszköztárat". A dolgozat további célja az, hogy különböző közelítő magpotenciálok alkalmazásával modelleket készítsunk az alfa-bomlás leírására.

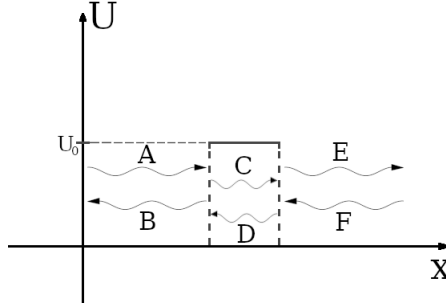
Az alfa-bomlást először Ernest Rutherford figyelte meg 1899-ben. Nem sokkal ezután, 1928-ban George Gamow, az épp kialakulóban lévő kvantummechanika segítségével az emissziós energia és a bomlás felezési ideje közötti összefüggést tudott levezetni. Az emissziós energia és a felezési idő közötti kapcsolat valójában már 1911 óta ismert volt (Geiger-Nuttall törvény), Gamow eredménye tehát kísérletileg már korábban alá volt támasztva. Gamow eredményei vitathatatlanul sikeresen visszaadták a bomlási törvényt is, azonban a dolgozatban felhívjuk a figyelmet arra, hogy levezetésének matematikai helyessége megkérdőjelezhető, amit bővebben a következő fejezetben tárgyalunk. Ennek megfelelően a dolgozat további célja egy, a Gamowéhoz hasonló modell matematikailag korrekt tárgyalása, majd interpretációja, illetve a szóban forgó egyenletek közelítő numerikus megoldása.

2. A Gamow-közelítés

Gamow az atommag potenciálját két azonos magasságú gáttal közelítette.



Az elrendezés szimmetriája miatt az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásaként előálló hullámfüggvényt is szimmetrikus alakban kereste, így először egy gátra oldotta meg a problémát, majd a megoldást tükrözve kívánta megkapni a teljes rendszerre vonatkozó megoldást.



A Schrödinger-egyenlet megoldása az egyes térrészekben egy pozitív és egy negatív irányba haladó síkhullám szuperpozíciója. A megoldásnak emellett ki kell elégítenie a következő két feltételt:

- A hullámfüggvény folytonosan kell átmenjen a határon
- A hullámfüggvény deriváltja folytonosan kell átmenjen a határon

Ez összesen négy egyenletet jelent, hat ismeretlenre. Ha a problémát úgy tekintjük, hogy az A adott amplitúdójú síkhullám érkezik neki a potenciálgátnak, akkor feltehetjük, hogy $F = 0$, így minden amplitúdót ki lehet fejezni A -val.

A tükrözés után a két potenciálgáthoz tartozó hullámfüggvényeket is illeszteni kell, azonban a szimmetria megkövetelése miatt $A = 0$ adódna, így minden amplitúdó 0 lenne. Gamow megoldása erre az volt, hogy a síkhullámok energiájának adott egy képzetes tagot, így kapott még egy szabad paramétert, amely illesztésével elkerülte, hogy minden amplitúdót 0-nak kelljen választania. Ha $E = E_R + iE_I$, akkor a stacionárius megoldások időfüggése

$$e^{i\frac{Et}{\hbar}} = e^{i\frac{E_R t}{\hbar}} e^{-\frac{E_I t}{\hbar}}, \quad (1)$$

tartalmaz egy exponenciális lecsengést, amely a bomlási-törvényre igen hasonlít.

Gamow ezek után kiterjesztette modelljét három dimenzióra és a potenciálra is pontosabb modellt használt, amely végül 30%-os relatív hibával visszaadta a kísérleti eredményeket.

A Gamow-közelítés akármilyen elegáns is, feltételezi, hogy a rendszer Hamilton-operátorának van nem valós sajátértéke, tehát $\hat{H}$ nem önadjungált. Ez az időfüggő Schrödinger-egyenlet alapján megsértené a valószínűség-megmaradás axiomáját (az időfejlesztő-operátor nem lenne unitér). Vegyük azonban észre, hogy valós energia mellett is van az időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek $\psi(x, t) \equiv 0$ -tól különböző megoldása. Gamow azért kellett bevezessen komplex energiát, mert nem az összes megoldások halmazát vizsgálta, hanem az összes megoldások halmazának azt a részhalmazát, amiben

- (1) a hullámfüggvény szimmetrikus
- (2) nincs "kívülről bejövő" hullám ($F = 0$).

Kiderül, hogy, ha csak (2)-t tesszük fel, akkor is $\psi(x, t) \equiv 0$ -t kapunk eredményül, azonban, ha (2)-t nem tesszük fel, akkor kapunk $\psi(x, t) \equiv 0$ -tól különböző megoldást is, ld. a későbbi 4. fejezetet.

Gamow eredeti dolgozata *ezen* a linken érhető el.

3. Potenciállépcső

3.1. Síkhullámok vizsgálata

Tekintsünk egy adott k hullámszámú síkhullámot, amely $x = 0$ pontban egy potenciálgátnak ütközik. Az $U(x)$ függvény a következő képpen néz ki:

$$\begin{aligned} x < 0 &\implies U(x) = 0 \\ x \geq 0 &\implies U(x) = U . \end{aligned} \quad (2)$$

Ezt a fajta potenciálfüggvényt fogjuk potenciállépcsőnek nevezni.

Adott E energia mellett az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldása:

$$\begin{aligned} x < 0 &\implies \psi_E(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ x \geq 0 &\implies \psi_E(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} , \end{aligned} \quad (3)$$

ahol k és k' hullámszámok kifejezhetőek E függvényeként a következő képpen:

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k' &= \sqrt{\frac{2m(E - U)}{\hbar^2}} . \end{aligned} \quad (4)$$

Tehát az időfüggő Schrödinger-egyenlet stacionárius megoldásai a következő alakban írhatók fel:

$$\begin{aligned} x < 0 &\implies \psi_E(x, t) = Ae^{i(kx - \omega(k)t)} + Be^{-i(kx + \omega(k)t)} \\ x \geq 0 &\implies \psi_E(x, t) = Ce^{i(k'x - \omega(k)t)} + De^{-i(k'x + \omega(k)t)} , \end{aligned} \quad (5)$$

ahol $\hbar\omega = E$, így a diszperziós reláció pedig a következő alakot ölti:

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} . \quad (6)$$

Látható mind a baloldalon ($x < 0$) mind a jobboldalon ($x \geq 0$) egy jobbra és egy balra haladó hullám szuperpozícióját kaptuk eredményül. Tekintsünk most egy balról érkező részecskét. Egy része a potenciálgátról visszaverődik, másik része pedig áthalad rajta. Így tehát a jobb oldalon csak jobbra haladó hullám lesz, vagyis $D = 0$. Belátható, hogy véges U esetén mind $\psi_E(x, t)$, mind $\partial_x \psi_E(x, t)$ folytonos, csak $\partial_x^2 \psi_E(x, t)$ -ben lesz szakadás. Ezeket felhasználva:

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ Aik - Bik &= Cik' . \end{aligned} \quad (7)$$

Ebből következik, hogy

$$B = A \frac{k - k'}{k + k'} \quad (8)$$

$$C = A \frac{2k}{k + k'} . \quad (9)$$

Defináljuk a "bejövő": ψ_i , "visszavert": ψ_r és "áthaladt": ψ_t hullámokat:

$$\begin{aligned}\psi_i(x, t) &= Ae^{i(kx - \omega(k)t)} \\ \psi_r(x, t) &= Be^{-i(kx + \omega(k)t)} \\ \psi_t(x, t) &= Ce^{i(k'x - \omega(k)t)} .\end{aligned}\tag{10}$$

A transzmissziós $\tau(k)$ és reflexiós $\rho(k)$ (mekkora eséllyel halad át/verődik vissza a potenciálgátról a bejövő hullám) tényezők pedig kifejezhetők az egyes hullámok valószínűségi áramának segítségével:

$$\begin{aligned}\rho(k) &= \frac{j_r}{j_i} = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \\ \tau(k) &= \frac{j_t}{j_i} = \frac{4kk'}{(k + k')^2} .\end{aligned}\tag{11}$$

Ha $k' \notin \mathbb{R}$, vagyis a részecske mozgási energiája kisebb a potenciál értékénél, akkor a képletek nem helyesek, azonban ez korrigálható a következő módosításokkal:

$$\rho(k) = \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2 \tag{12}$$

$$\tau(k) = 1 - \rho(k) . \tag{13}$$

Ezek a képletek általános esetben helyesek és fel is fogjuk használni a következő fejezetben.

3.2. Hullámcsomagok vizsgálata

Egy általános hullámcsomag a következő alakban írható fel:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk . \tag{14}$$

Mivel egy balról érkező hullámcsomagot vizsgálunk, ezért az integrált elég 0-tól ∞ -ig végrehajtani, vagy, ha $k < 0$, akkor $r(k) \equiv 0$ kell teljesülnön. Az előzőekben levezetettek alapján a bejövő, a visszavert és az áthaladó hullám:

$$\psi_i(x, t) = \int_0^{\infty} \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \tag{15}$$

$$\psi_r(x, t) = \int_0^{\infty} \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} \frac{k - k'}{k + k'} e^{-i(kx + \omega(k)t)} dk \tag{16}$$

$$\psi_t(x, t) = \int_0^{\infty} \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} \frac{2k}{k + k'} e^{i(k'x - \omega(k)t)} dk . \tag{17}$$

Az egyes függvényeknek fizikailag csak az $x < 0$, illetve az $x \geq 0$ intervallumon van értelme, azonban matematikailag minden x esetén értelmes lehet a kifejezés. Ennek hasznát később láthatjuk. Az integrálok általános alakban nem elvégezhetőek, az alábbiakban közelítő megoldásokat fogunk tekinteni.

3.2.1. Hullámfüggvények közelítése

Először pontosítsuk az alacsony illetve magas potenciál jelentését. A potenciál nagyságát célszerű a bejövő hullámcsomag átlagenergiájához viszonyítani. Érdemes tehát bevezetni egy nagyságot jellemző α paramétert a következő módon:

$$\alpha = \frac{U}{\langle E_i \rangle} = \frac{U}{\frac{\hbar^2 \langle k^2 \rangle}{2m}} = \frac{2mU}{\hbar^2 \langle k^2 \rangle} . \quad (18)$$

A praktikusabb jelölés érdekében vezessük be a $\sqrt{\langle k^2 \rangle} = k_0$, illetve az $\omega(k) = \omega$ jelölést. Szükséges bevezetnünk a bejövő hullámcsomagra jellemző σ_k szórást, amely a

$$\sigma_k^2 = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2 , \quad (19)$$

egyenlettel definiált ($\sigma_k \geq 0$). Korlátot kell szabnunk σ_k -nak. Megfelelő korlát választásával elérhetjük, hogy a hullámcsomag minden jellemzőbb módusához tartozó energia nagyjából meg fog egyezni, ami szükséges ahhoz, hogy a hullámcsomag minden módusát egységesen kezelhessük. Így az alábbi relációt érdemes feltennünk:

$$\begin{aligned} \sigma_k &\ll \left| k_0 - \sqrt{\frac{2m|U|}{\hbar^2}} \right| \\ \sigma_k &\ll k_0 \left| 1 - \sqrt{|\alpha|} \right| . \end{aligned} \quad (20)$$

Az integrálok közelítéséhez k -ban lineárisan kell közelítenünk a reflexiós és transzmissziós hullámot leíró integrálban szereplő együtthatókat. Elsősorban a $k = \sqrt{k_0^2 - \sigma_k^2}$ környezetében fontos közelítenünk a kifejezést, hiszen $|r(k)|^2$ -nek itt van maximuma és itt kihasználjuk (20)-t. Vezessük be a $\lambda = \frac{k}{k_0}$ és a $\lambda_0 = \frac{\langle k \rangle}{k_0} = \frac{\sqrt{k_0^2 - \sigma_k^2}}{k_0}$ jelöléseket.

$$\begin{aligned} \frac{k - k'}{k + k'} &= \frac{k - \sqrt{k^2 - \frac{2mU}{\hbar^2}}}{k + \sqrt{k^2 - \frac{2mU}{\hbar^2}}} = \frac{\frac{k}{k_0} - \sqrt{\frac{k^2}{k_0^2} - \alpha}}{\frac{k}{k_0} + \sqrt{\frac{k^2}{k_0^2} - \alpha}} = \frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 - \alpha}}{\lambda + \sqrt{\lambda^2 - \alpha}} = \\ &= \frac{\lambda_0 - \sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}}{\lambda_0 + \sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} + \frac{2 \left(\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} - \lambda_0 \right)}{\lambda_0 \left(\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} + \lambda_0 \right) - \alpha} (\lambda - \lambda_0) + O \left((\lambda - \lambda_0)^2 \right) \end{aligned} \quad (21)$$

$$\frac{k - k'}{k + k'} \approx \beta_0 - \beta_1 \frac{k}{k_0} \quad (22)$$

$$\beta_0 = \frac{\lambda_0 - \sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}}{\lambda_0 + \sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} + \frac{2 \left(\lambda_0 - \sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} \right) \lambda_0}{\lambda_0 \left(\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} + \lambda_0 \right) - \alpha} \quad (23)$$

$$\beta_1 = \frac{2 \left(\lambda_0 - \sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} \right)}{\lambda_0 \left(\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} + \lambda_0 \right) - \alpha} . \quad (24)$$

Ezt a ψ_r -t kifejező integrálba behelyettesítve

$$\begin{aligned}\psi_r(x, t) &= \int_0^\infty \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} \frac{k - k'}{k + k'} e^{-i(kx + \omega t)} dk \\ &\approx \int_0^\infty \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} \left(\beta_0 - \beta_1 \frac{k}{k_0} \right) e^{-i(kx + \omega t)} dk .\end{aligned}\quad (25)$$

Ez az integrál már kifejezhető ψ_i -ből, illetve annak deriváltjából.

$$\begin{aligned}\psi_r(x, t) &\approx \beta_0 \psi_i(-x, t) - \frac{\beta_1}{k_0} \int_0^\infty \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} k e^{-i(kx + \omega t)} dk = \\ &= \beta_0 \psi_i(-x, t) + \frac{i\beta_1}{k_0} \int_0^\infty \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} i k e^{-i(kx + \omega t)} dk = \\ &= \beta_0 \psi_i(-x, t) + \frac{i\beta_1}{k_0} \partial_x \psi_i(-x, t) .\end{aligned}\quad (26)$$

Ezért fontos tehát, hogy matematikailag a teljes számegyenesen értelmes ψ_i , ψ_r és ψ_t .

Hasonló módon kaphatunk kifejezést ψ_t -re is.

$$\frac{2k}{k + k'} = 1 + \frac{k - k'}{k + k'} \approx 1 + \beta_0 - \frac{\beta_1}{k_0} k .\quad (27)$$

Ebben az esetben azonban még egy dologra figyelni kell, ugyanis ebben az integrálban k helyett k' található az exponensben.

$$\begin{aligned}k' &= \sqrt{k^2 - \frac{2mU}{\hbar^2}} = k_0 \sqrt{\lambda^2 - \alpha} = \\ &= k_0 \left(\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} - \frac{\lambda_0 (\lambda - \lambda_0)}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} \right) + O((\lambda - \lambda_0)^2) \approx \\ &\approx k_0 \left(\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} - \frac{\lambda_0^2}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} \right) + \frac{\lambda_0}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} k = k_1 + \frac{\lambda_0}{\sqrt{1 - \alpha}} k \\ k_1 &= k_0 \left(\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha} - \frac{\lambda_0^2}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} \right) \\ &\implies e^{ik'x} \approx e^{ik_1x} e^{ikx \frac{\lambda_0}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}}} .\end{aligned}\quad (28)$$

$$\begin{aligned}\psi_t(x, t) &= \int_0^\infty \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} \frac{2k}{k + k'} e^{i(k'x - \omega t)} dk \approx \\ &\approx \int_0^\infty \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} \left(1 + \beta_0 - \frac{\beta_1}{k_0} k \right) e^{ik_1x} e^{i \left(kx \frac{\lambda_0}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} - \omega t \right)} dk = \\ &= e^{ik_1x} \left((1 + \beta_0) \psi_i \left(\frac{\lambda_0}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} x, t \right) + \frac{i\beta_1}{k_0} \partial_x \psi_i \left(\frac{\lambda_0}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} x, t \right) \right) .\end{aligned}\quad (29)$$

Tehát a következő három egyenlet írja le a hullámfüggvény potenciállépcsővel történő ütközését:

$$\psi_i(x, t) = \int_0^\infty \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega t)} dk , \quad (30)$$

$$\psi_r(x, t) = \beta_0 \psi_i(-x, t) + \frac{i\beta_1}{k_0} \partial_x \psi_i(-x, t) , \quad (31)$$

$$\psi_t(x, t) = e^{ik_1 x} \left((1 + \beta_0) \psi_i \left(\frac{\lambda_0}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} x, t \right) + \frac{i\beta_1}{k_0} \partial_x \psi_i \left(\frac{\lambda_0}{\sqrt{\lambda_0^2 - \alpha}} x, t \right) \right) . \quad (32)$$

3.2.2. Reflexió és Transzmisszió tényezők

Miután az "ütközés" megtörtént. Két hullámcsomagra válik szét a hullámfüggvény. Ezen két hullámcsomag térben és időben történő változását hivatott leírni a fenti három egyenlet. Fontos kérdés, hogy mennyi valószínűség haladt át (transzmisszió tényező, T) a potenciálgáton az ütközést követően, illetve mennyi verődött vissza (reflexió tényező, R).

A valószínűség időbeli átáramlását nyomonkövetve eljuthatunk a kívánt eredményhez, azonban egy sokkal egyszerűbb úton is célbaérhetünk. Tétélezzük fel, hogy sok idő eltelte után a két hullámcsomag igen távol kerül az $x = 0$ ponttól. Ebben az esetben meghatározhatjuk az egyes hullámcsomagok által hordozott valószínűséget, ha integráljuk őket a teljes térre. Pontosabban ψ_r -t $-\infty$ -tól 0-ig, ψ_t -t pedig 0-tól ∞ -ig, de sok idő elteltével ez nem ad számottevő különbséget.

$$R = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^0 |\psi_r(x, t)|^2 dx \quad (33)$$

$$T = 1 - R . \quad (34)$$

$\alpha \ll 1$ esetben a fentebb levezetett egyenletek segítségével igen jó közelítést tudunk adni, azonban általános esetben fizikailag értelmetlen eredményekre is juthatunk. Ennek okát kicsit később látni fogjuk. Egyelőre fogadjuk el, hogy a (30), (31) és (32) nem érdemes használni ennél a számolásnál. R meghatározásához a következő egyenlőséget fogjuk alkalmazni:

$$R = \int_0^\infty |r(k)|^2 \rho(k) dk , \quad (35)$$

ennek bizonyítása a következő:

$$\begin{aligned}
R &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_r(x, t)|^2 dx = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_r(x, t) \psi_r^*(x, t) dx = \\
&= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r(k) r^*(\tilde{k})}{2\pi} \frac{k - k'}{k + k'} \left(\frac{\tilde{k} - k'}{\tilde{k} + k'} \right)^* e^{-i(kx - \omega t)} e^{i(\tilde{k}x - \tilde{\omega} t)} dk d\tilde{k} dx ,
\end{aligned} \tag{36}$$

ahol $\tilde{\omega} = \omega(\tilde{k})$. Belátható, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\tilde{k} - k)x} dx = 2\pi \delta(\tilde{k} - k) , \tag{37}$$

ahol $\delta(\tilde{k} - k)$ a Dirac-delta. Az integrálokat felcserélve és (37)-et kihasználva

$$R = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} r(k) r^*(\tilde{k}) \frac{k - k'}{k + k'} \left(\frac{\tilde{k} - k'}{\tilde{k} + k'} \right)^* e^{i\omega t} e^{-i\tilde{\omega} t} \delta(\tilde{k} - k) d\tilde{k} dk . \tag{38}$$

Mivel k és $\tilde{k}$ is ugyanazon az intervallumon fut végig, ezért a Dirac-delta azon tulajdonsága, mi szerint

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x') dx = f(x') , \tag{39}$$

kihasználható, majd (12) felhasználásával

$$\begin{aligned}
R &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} |r(k)|^2 \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2 dk = \int_0^{\infty} |r(k)|^2 \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2 dk = \\
&= \int_0^{\infty} |r(k)|^2 \rho(k) dk .
\end{aligned} \tag{40}$$

Vizsgáljuk meg tehát a $\rho(k) : \mathbb{R}_0^+ \Rightarrow (0, 1]$ függvényt. Ha $\alpha \leq 0$, akkor $\rho(k)$ egy végtelenszer differenciálható, szigorúan monoton csökkenő függvény. Azonban, ha $\alpha > 0$, akkor $\rho(k)$ -ban lesz egy "töréspont". Ez azt jelenti, hogy létezik egy k_c érték, amire minden $k \leq k_c$, $\rho(k) = 1$, viszont, ha $k > k_c$, akkor $\rho(k)$ ismét egy könnyen kezelhető függvény lesz. A (31) képlet levezetésénél $\frac{k - k'}{k + k'}$ -t közelítük sorfejtéssel, azonban ez az eljárás, $\rho(k)$ közelítésére nem alkalmazható a töréspont miatt.

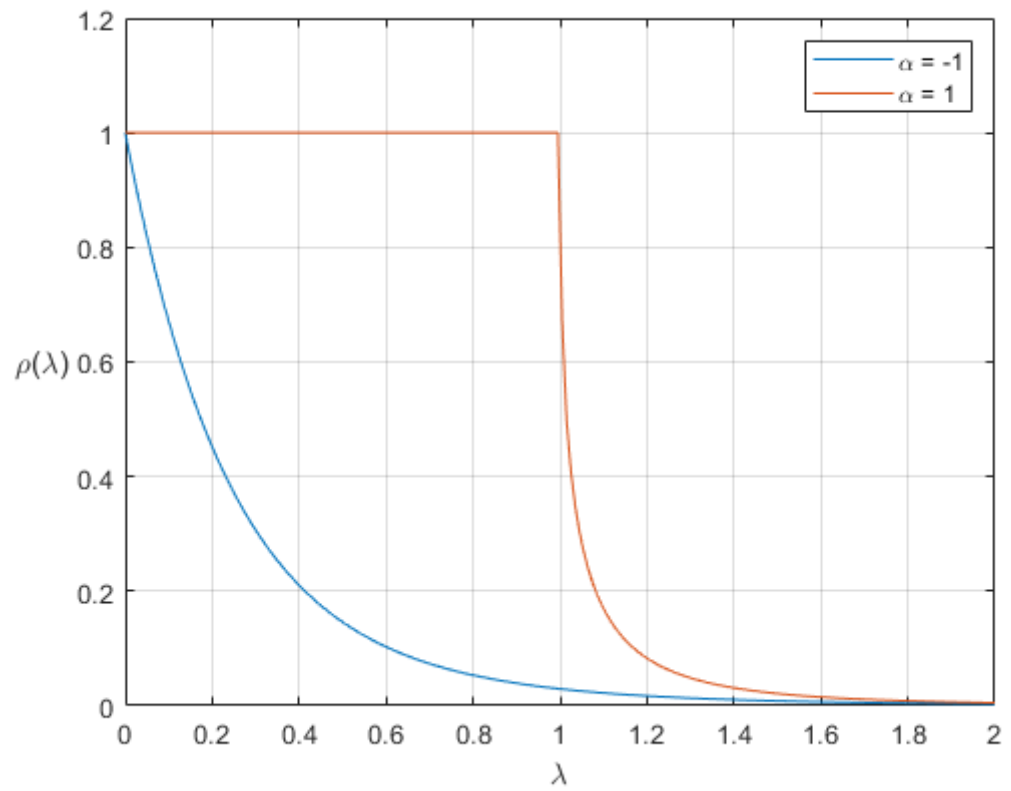
Egészen addig, amíg $k' \notin \mathbb{R}$, $\rho(k) = 1$, mivel ekkor k' tisztán képzetes, így $k'^* = -k'$, tehát:

$$\rho(k) = \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2 = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right) \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^* = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right) \left(\frac{k + k'}{k - k'} \right) = 1 . \tag{41}$$

$$k' = \sqrt{k^2 - k_0^2 \alpha} \Rightarrow k_c^2 - k_0^2 \alpha = 0 \Rightarrow k_c = k_0 \sqrt{\alpha} . \tag{42}$$

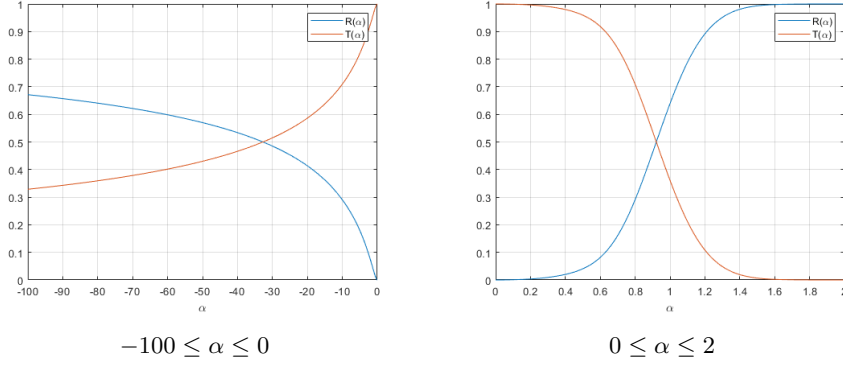
Amennyiben pedig $\alpha < 0$, $k_c = 0$ a legkézenfekvőbb választás.

Ezt láthatjuk a következő ábrán:



$\rho(k)$ az $\alpha > 0$ és az $\alpha < 0$ esetben

Számítógépes szimulációval bármely esetre igen pontos közelítés adható a (40) és (34) képletek segítségével.



*Reflexiós és Transzmissziós tényezők α függvényében,
Gauss-eloszlás mellett, $k_0 = 10\sigma_k$*

3.3. Animáció

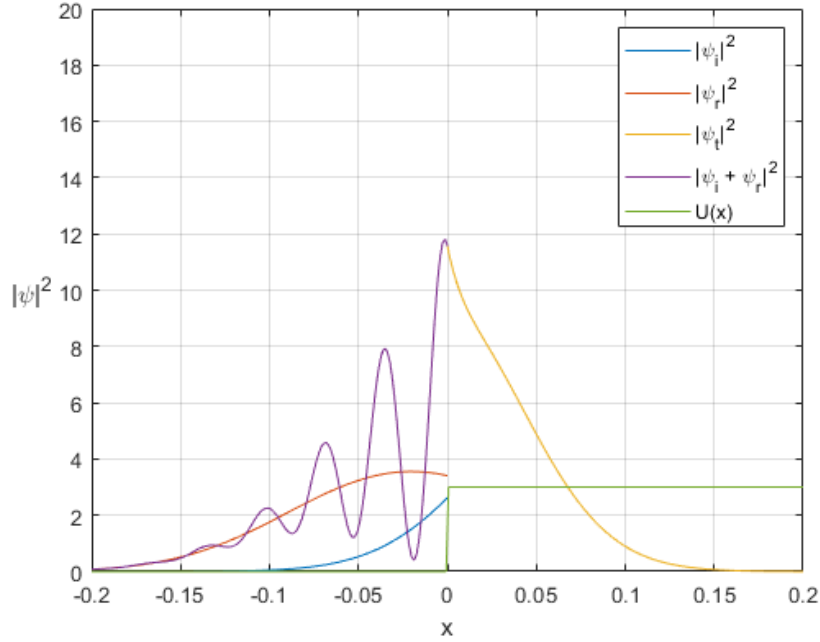
A számítástechnikának köszönhetően a problémával kapcsolatos intuitív megértésünket nagyban elő tudják segíteni animációk, ezzel a céllal készítettem az *ezen* a linken elérhető videót. Mint az látható a videóból, az ütközés közben $|\psi_i + \psi_r|^2$ -en egy hullám keletkezik, ami lényegében ψ_i és ψ_r interferenciájából származik. Érdekes emellett azt is megfigyelni, hogy ugyan ψ_i szimmetrikus, ψ_r és ψ_t nem az. Ez a (31) és (32) képletekből is látszik, hiszen, ha ψ_i szimmetrikus, akkor létezik olyan $x_0(t)$, amire minden δ esetén

$$\psi_i(x, t) = \psi_i(x_0(t) + \delta, t) = \psi_i(x_0(t) - \delta, t) = \psi_i(x', t) . \quad (43)$$

$\partial_x \psi_i$ ezért antiszimmetrikus lesz, hiszen

$$\partial_x \psi_i(x, t) = \partial_\delta \psi_i(x_0(t) + \delta, t) = \partial_\delta \psi_i(x_0(t) - \delta, t) = -\partial_{x'} \psi_i(x', t) . \quad (44)$$

Mivel ψ_r és ψ_t , ψ_i és $\partial_x \psi_i$ egy-egy lineáris kombinációjaként közelíthető, így általában nem várható el, hogy ψ_r és ψ_t szimmetrikus legyen.



*Pillanatkép a fentebb említett szimulációból.
Gauss-eloszlás, $k_0 = 10\sigma_k$, $\alpha = 1$*

3.4. Alfa-bomlás közelítő modellje potenciállépcsőkkel

Ebben a fejezetben azt a kérdést vizsgálom, hogy tudjuk-e az alfa-bomlást potenciállépcsők segítségével tárgyalni. Egy nagy tömegszámú atom alfa-bomlását modellezzük most úgy, hogy a nukleonok adott potenciáltérben pattogó hullámcsomagok. Ezen sok nukleonból egy atommagon belüli alfa-részecske kialakulhat, amely szintén oda-vissza pattog. Az atommag potenciálsíkját tekintjük egy potenciál-gödörnek, amely potenciál-gödör két fala igen távol van egymástól, így a lényegében két potenciállépcsőként tekinthetünk rá. Egy szabad alfa-részecske mozgási energiája a bomlást követően $E \approx 5 \text{ MeV}$. Az potenciál-gödör pedig nagyjából $U \approx 50 \text{ MeV}$ mély. σ_k közelítésére pedig az atommag (így a potenciál-gödör) karakterisztikus szélességét ($l \approx 10^{-15} \text{ m}$) lehet használni. Fontos adat továbbá az alfa-részecske tömege, $m \approx 3.73 \frac{\text{GeV}}{c^2}$. Ha feltesszük, hogy a reflexiós tényező állandó, valamint azt, hogy nagyságrendileg 5 MeV az atommagban pattogó alfa-részecske energiája, akkor az alfa-részecske csoportsebességéből és az atommag méretéből, valamint az alfa-bomlás karakterisztikus idejére vonatkozó irodalmi adatok alapján kiszámolható, hogy mekkora kell legyen a reflexiós tényező az ütközéseknél. Ehhez először számítsuk ki k_0 -t az alfa-részecske energiájából, majd ebből fejezzük ki az alfa-részecske csoportsebességét.

$$E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \implies k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \gg \sigma_k \approx \frac{1}{l}$$

$$v_{cs} \approx \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}} . \quad (45)$$

Két ütközés eltelt idő tehát

$$T = \frac{l}{v_{cs}} \approx \sqrt{\frac{ml^2}{2E}} . \quad (46)$$

Minden ütközésnél annak az esélye, hogy az alfarészecske bent van az atommagban R -szeresére változik, N darab ütközés után tehát

$$P(N) = R^N , \quad N(t) = \frac{t}{T} \implies P(N(t)) = \exp\left(-\ln\left(\frac{1}{R}\right) \frac{t}{T}\right) = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) . \quad (47)$$

$$\tau \approx \frac{1}{\ln\left(\frac{1}{R}\right)} \sqrt{\frac{ml^2}{2E}} \implies R \approx \exp\left(-\sqrt{\frac{ml^2}{2E\tau^2}}\right), \text{ Rádium esetében. } \tau \approx 10^6 \text{ s}$$

$$R \approx 1 - 10^{-29} , \quad (48)$$

melynek 1-től való eltérése bármilyen szimuláció vonatkozásában gyakorlatilag reprodukálhatatlan. A kapott eredmény abszurd volta miatt felmerül a kérdés, hogy nem hibás e a modell és amennyiben igen, tudunk e esetleg jobb modellt készíteni potenciállépcsőkkel.

A reflexiós tényező változatlan volta valójában abból a közelítésből származik, hogy a visszavert hullámcsomag hullámszám-eloszlása megegyezik az eredeti hullámcsomagével. Ez nyilvánvalóan nem igaz, így most ezt ne hagyjuk figyelmen kívül. Ennek következtében minden paraméter időfüggő lesz.

$$\psi(x, t) = \int_0^\infty \frac{r(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i(kx \mp \omega(k)t)} dk$$

$$\implies \int_{-\infty}^\infty |\psi(x, t)|^2 dx = \int_0^\infty |r(k)|^2 dk . \quad (49)$$

Legyen az n -edik ütközés utáni állapotot leíró hullámfüggvény ψ_n . Ha feltesszük, hogy az atommagon kívül $\psi_n \approx 0$, akkor annak a valószínűsége, hogy az alfarészecske az atommagon belül van n ütközés után

$$P_n \approx \int_{-\infty}^\infty |\psi_n(x, t)|^2 dx = \int_0^\infty |r_n(k)|^2 dk . \quad (50)$$

Ugyanazt a gondolatmenetet követve, mint a 3.2.-es fejezetben, belátható, hogy

$$r_n(k) = r_0(k) \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^n \implies |r_n(k)|^2 = |r_0(k)|^2 \rho(k)^n . \quad (51)$$

Megjegyzendő, hogy ezzel nem tettük fel, hogy α , vagy k_0 nem függ az időtől, hiszen k' -t csak k és U definiálja, U pedig nem függ az időtől. Definíáljuk α -t

és k_0 -t csak a ψ_0 állapothoz. Mivel $0 < \rho(k) < 1$, ha $k > k_0\sqrt{\alpha}$ és $\rho(k) = 1$, ha $k \leq k_0\sqrt{\alpha}$, ezért

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \rho(k)^n = 1 - H(k - k_0\sqrt{\alpha}) . \quad (52)$$

Ahol $H(x)$ a Heaviside-függvény. Ez tehát azt jelenti, hogy végtelen sok ütközés után, azaz végtelen sok idő után $|r_n(k)|^2 \approx |r_0(k)|^2$, ha $k \leq k_0\sqrt{\alpha}$ és $|r_n(k)|^2 \approx 0$, ha $k > k_0\sqrt{\alpha}$. Tehát amennyiben az adott alfa-részecskére $\alpha \gg 1$, a részecske nagyjából 0 eséllyel fog kijutni az atommagból, azonban végtelen sok ütközés után sem egészen 0 a valószínűsége. Amennyiben $\alpha \ll 1$, az adott atommag nagyjából biztosan el fog bomlani, azonban ennek sem pontosan 1 a valószínűsége. Az alfa-bomlás feltétele tehát, hogy a kialakuló pattogó alfa-részecske energiája jóval nagyobb legyen a potenciállépcső magasságánál. Kísérletileg bizonyított, hogy a valóságban ez nem pontosan így történik az alagúthatás miatt, azonban valóban nagyban függ a bomlásiállandó a kialakuló alfa-részecske energiájától.

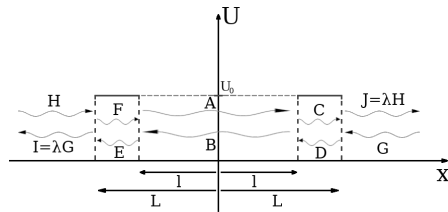
Potenciállépcsőkkel tehát nem érdemes alfa-bomlást modellezni, azonban figyelemre méltó, hogy a jelenség kvalitatív leírására nem teljesen alkalmatlan annak ellenére, hogy mennyire kezdetleges.

4. Szimmetrikus kettős-potenciálgát

Gamow az atommag körüli potenciált egy szimmetrikus kettős-potenciálgáttal modellezte. Ez egy lényegesen jobb közelítése a valóságnak, mint a 3.4.-es fejezetben használt. Ebben a részben előkészítem az alfa-bomlásról szóló fejezethez szükséges matematikai eszközöket és megmutatom, hogyan lehet valós energia mellett is fizikailag releváns (nem $\psi \equiv 0$) sajátfüggvényeket találni a modell Hamilton-operátorához.

4.1. Síkhullámok vizsgálata

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet általános megoldása a problémára



$$\begin{aligned} x \leq -L & : Ie^{ikx} + He^{-ikx} \\ -L \leq x \leq -l & : Fe^{ik'x} + Ee^{-ik'x} \\ -l \leq x \leq l & : Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ l \leq x \leq L & : Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \\ L \leq x & : Ge^{ikx} + Je^{-ikx} . \end{aligned} \quad (53)$$

A négy határon fel kell írunk összesen nyolc határfeltételt, ami így nyolc egyenletet jelent tíz ismeretlenre. Tehát a Hamilton-operátor minden energiához tartozó sajátaltère maximum kétdimenziós. Több módon is meg lehet mutatni, hogy $E = 0$ kivételével mindig pontosan kétdimenziós, azaz két szabad paramétere lesz a sajátfüggvényeknek. Tegyük fel, hogy $I = \lambda G$ és $J = \lambda H$. Ekkor a határfeltételek a következő egyenletrendszert adják

$$\begin{aligned}
\lambda G e^{-ikL} + H e^{ikL} &= F e^{-ik'L} + E e^{ik'L} \\
k (\lambda G e^{-ikL} - H e^{ikL}) &= k' (F e^{-ik'L} - E e^{ik'L}) \\
F e^{-ik'l} + E e^{ik'l} &= A e^{-ikl} + B e^{ikl} \\
k' (F e^{-ik'l} - E e^{ik'l}) &= k (A e^{-ikl} - B e^{ikl}) \\
A e^{ikl} + B e^{-ikl} &= C e^{ik'l} + D e^{-ik'l} \\
k (A e^{ikl} - B e^{-ikl}) &= k' (C e^{ik'l} - D e^{-ik'l}) \\
C e^{ik'L} + D e^{-ik'L} &= G e^{ikL} + \lambda H e^{-ikL} \\
k' (C e^{ik'L} - D e^{-ik'L}) &= k (G e^{ikL} - \lambda H e^{-ikL}) , \tag{54}
\end{aligned}$$

ahol $k' = \sqrt{k^2 - 2mU/\hbar^2}$. Az egyenletrendszer megoldható akár kézzel, vagy matematikai programok segítségével. Két megoldást kapunk. Az egyik szimmetrikus, a másik pedig antiszimmetrikus az origó körüli középpontos tükrözésre. Mindkét esetben $|\lambda| = 1$, az egyes együtthatók pedig mindkét esetben A -nak valamilyen számszorosa, azaz mindkét esetben egy szabad paraméterünk van, így összesen valóban két szabad paraméterünk lesz. Adott energiához tartozó sajátfüggvény általánosan tehát a szimmetrikus és az antiszimmetrikus sajátfüggvény lineáris kombinációja. Vezessük be a szimmetrikus és az antiszimmetrikus együtthatókra a következő jelöléseket

$$\begin{aligned}
A_1 &= A_+ & A_2 &= A_- \\
B_1 &= A_+ & B_2 &= -A_- \\
C_1 &= \gamma_{11} A_+ & C_2 &= \gamma_{21} A_- \\
D_1 &= \gamma_{12} A_+ & D_2 &= \gamma_{22} A_- \\
G_1 &= \gamma_{13} A_+ & G_2 &= \gamma_{23} A_- \\
E_1 &= \gamma_{11} A_+ & E_2 &= -\gamma_{21} A_- \\
F_1 &= \gamma_{12} A_+ & F_2 &= -\gamma_{22} A_- \\
H_1 &= \gamma_{13} A_+ & H_2 &= -\gamma_{23} A_- \\
\lambda_1 &= \lambda_+ & \lambda_2 &= \lambda_- , \tag{55}
\end{aligned}$$

ahol minden együttható függ k -tól, k' -től, tehát U -tól, l -től és L -től. Az együtthatók segítségével kifejezhető, hogy mekkora a gátak szélénél a valószínűségiáram.

Írjuk fel egy általános síkhullám valószínűségi áramát

$$\begin{aligned}
\phi(x, t) &= Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)} \\
j(x, t) &= \frac{\hbar}{2mi} (\phi^*(x, t) \partial_x \phi(x, t) - \phi(x, t) \partial_x \phi^*(x, t)) = \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \left(A^* e^{-i(kx-\omega t)} + B^* e^{i(kx+\omega t)} \right) ik \left(Ae^{i(kx-\omega t)} - Be^{-i(kx+\omega t)} \right) \\
&\quad - \frac{\hbar}{2mi} \left(Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)} \right) ik \left(B^* e^{i(kx+\omega t)} - A^* e^{-i(kx-\omega t)} \right) = \\
&= \frac{\hbar k}{2m} \left(|A|^2 + AB^* e^{2ikx} - A^* B e^{-2ikx} - |B|^2 \right. \\
&\quad \left. - AB^* e^{2ikx} - |B|^2 + |A|^2 + A^* B e^{-2ikx} \right) = \\
&= \frac{\hbar k}{m} \left(|A|^2 - |B|^2 \right) . \tag{56}
\end{aligned}$$

Ezt felhasználva ki tudjuk fejezni, hogy mennyi nettó valószínűség hagyja el időegységenként a potenciálgátakat és az általuk közre zárt területet.

$$\begin{aligned}
j_{jobb} &= \frac{\hbar k}{m} \left(|G_1 + G_2|^2 - |\lambda_1 H_1 + \lambda_2 H_2|^2 \right) \\
j_{bal} &= \frac{\hbar k}{m} \left(|\lambda_1 G_1 + \lambda_2 G_2|^2 - |H_1 + H_2|^2 \right) \\
j &= j_{jobb} - j_{bal} . \tag{57}
\end{aligned}$$

j -ről, az együtthatókra kapható kifejezések segítségével belátható, hogy minden esetben 0. Ugyanannyi valószínűség folyik be időegységenként, mint amennyi kifolyik időegységenként.

4.2. Hullámcsomagok vizsgálata

Hasonló módon, mint a 3.2.-es fejezetben, most is előállíthatjuk a hullámfüggvényt az egyes tartományokon.

$$\text{A két potenciálgát között: } \psi_c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} r_c(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk, \quad (58)$$

ahol $\omega(k)$ megkapható a következő egyenletből

$$\hbar\omega(k) = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \implies \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (59)$$

Továbbiakban ismét használjuk az $\omega = \omega(k)$, valamint a $k' = k'(k) = \sqrt{k^2 - 2mU/\hbar^2}$ jelölést.

$r_c(k)$ segítségével meg tudjuk határozni a szimmetrikus: $A_1(k)$ -t és az antiszimmetrikus: $A_2(k)$ együtthatófüggvényeket adott k hullámszámhoz. Legyen $k \geq 0$! Ekkor az előző fejezetben elmondottak szerint $e^{i(kx - \omega t)}$ együtthatója $A_1(k) + A_2(k)$, $e^{-i(kx + \omega t)}$ együtthatója pedig $B_1(k) + B_2(k)$

$$\begin{aligned} r_c(k) &= A_1(k) + A_2(k) \\ r_c(-k) &= B_1(k) + B_2(k) = A_1(k) - A_2(k) \\ A_1(k) &= \frac{r_c(k) + r_c(-k)}{2} \\ A_2(k) &= \frac{r_c(k) - r_c(-k)}{2}. \end{aligned} \quad (60)$$

Ezek segítségével és a fentebb bevezetett együtthatókkal ki tudjuk fejezni az összes többi térrészben a hullámfüggvényt, azonban a kifejezések nem egyszerűsödnek, így egy új jelölést vezetünk be.

A baloldali potenciálgátban:

$$\begin{aligned} \psi_{l,i}(x, t) &= \int_0^{\infty} (F_1(k) + F_2(k)) e^{i(k'x - \omega t)} + (E_1(k) + E_2(k)) e^{-i(k'x + \omega t)} dk = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} r_{l,i}(k) e^{i(k'x - \omega t)} dk, \end{aligned} \quad (61)$$

a jobboldali potenciálgátban:

$$\begin{aligned} \psi_{r,i}(x, t) &= \int_0^{\infty} (C_1(k) + C_2(k)) e^{i(k'x - \omega t)} + (D_1(k) + D_2(k)) e^{-i(k'x + \omega t)} dk = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} r_{r,i}(k) e^{i(k'x - \omega t)} dk, \end{aligned} \quad (62)$$

a baloldali potenciálgáttól balra:

$$\begin{aligned} \psi_{l,o}(x, t) &= \int_0^{\infty} (\lambda_1(k)G_1(k) + \lambda_2(k)G_2(k)) e^{i(kx - \omega t)} + (H_1(k) + H_2(k)) e^{-i(kx + \omega t)} dk = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} r_{l,o}(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \end{aligned} \quad (63)$$

A jobboldali potenciálgáttól jobbra:

$$\begin{aligned}\psi_{r,o}(x,t) &= \int_0^\infty (G_1(k) + G_2(k)) e^{i(kx-\omega t)} + (\lambda_1(k)H_1(k) + \lambda_2(k)H_2(k)) e^{-i(kx+\omega t)} dk = \\ &= \int_{-\infty}^\infty r_{r,o}(k) e^{i(kx-\omega t)} dk ,\end{aligned}\quad (64)$$

ahol $r_{l,i}(k)$, $r_{r,i}(k)$, $r_{l,o}(k)$, $r_{r,o}(k)$, mind kifejezhető $r_c(k)$ -ből. $r_c(k)$ -ra vonatkozó egyetlen implicit megkötés, hogy

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{-L} |\psi_{l,o}(x,t)|^2 dx + \int_{-L}^{-l} |\psi_{l,i}(x,t)|^2 dx + \int_{-l}^l |\psi_c(x,t)|^2 dx \\ &+ \int_l^L |\psi_{r,i}(x,t)|^2 dx + \int_L^\infty |\psi_{r,o}(x,t)|^2 dx = 1 .\end{aligned}\quad (65)$$

Ezek felhasználásával teljes mértékben leírható a hullámcsomag időfejlődése.

5. Alfa-bomlás

Ha alfa-bomlást szeretnénk modellezni szimmetrikus kettős-potenciálgáttal, akkor az előző fejezetben elmondottak szerint nem használhatunk síkhullám közelítést, hiszen az atommagba zárt valószínűség ebben az esetben időben állandó kéne legyen. A valószínűségi áramot kifejező képlet nem lineáris ψ -ben, így annak ellenére, hogy síkhullámok esetében 0 a nettó kiáramló valószínűség, hullámcsomagok esetében nem ez lesz a helyzet. Így nem szükséges képzetes energiát bevezetni az alfa-bomlás leírásához (ahogy Gamow tette), hiszen, ha az atommagban lévő alfa-részecskét egy hullámcsomaggal modellezzük, akkor egy matematikailag korrekt leírást kaphatunk a jelenségre.

5.1. Szimuláció

Számítógépes szimuláció segítségével vizsgálhatjuk a hullámcsomag időfejlődését. A szimuláció elkészítéshez használjuk a következő módszert:

Kezdetben legyen $\psi(x,0) = \psi_0(x)$ az alfa-részecskét leíró hullámfüggvény. Ekkor a Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\psi(x,t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \psi_0(x) ,\quad (66)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x)\hat{I} .\quad (67)$$

Adott I zárt intervallumon egy $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ folytonos függvény jól közelíthető egy véges dimenziójú vektorral

$$\psi(x,t)|_I \implies \underline{\psi}(t) .\quad (68)$$

Ezt többek között megtehetjük úgy, hogy N_x darab pontot kijelölünk I -ben, amelyek egyforma távolságra vannak. Az egyik pont $\inf(I)$ és egy másik pont $\sup(I)$. Az n -edik ilyen pontra

$$\begin{aligned} x_n &= \inf(I) + (n-1)dx, \quad 1 \leq n \leq N_x \\ dx &= \frac{\sup(I) - \inf(I)}{N_x - 1}. \end{aligned} \quad (69)$$

A hullámfüggvényt reprezentáló vektor n -edik komponense a hullámfüggvény x_n pontban kiértékelve

$$\underline{\psi}_n(t) = \psi(x_n, t). \quad (70)$$

Ugyanezen a bázison közelítve a Δ -t és $\hat{I}$ -t reprezentáló mátrixot, megkaphatjuk a Hamilton-operátor megfelelő közelítését.

$$\Delta f(x) \approx \frac{\frac{f(x_{n+1}) - f(x_n)}{dx} - \frac{f(x_n) - f(x_{n-1}))}{dx}}{dx} = \frac{f(x_{n+1}) + f(x_{n-1}) - 2f(x_n)}{dx^2}, \quad (71)$$

amiből leolvasható, hogy a Δ -t reprezentáló $N_x \times N_x$ -es mátrix közelítésére

$$\underline{\underline{\Delta}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{dx^2} \quad (72)$$

használható. A mátrix minden sora teljesíti a (71) képletet, kivéve az első és az utolsót. Ez a két sor az intervallum két szélének felel meg. $n > N_x$, vagy $n < 1$ esetén $x_n \notin I$. Következésképpen a hiba N_x véges voltából adódik. A (72) képlet másik fontos tulajdonsága, hogy nem eredményez önadjungált Hamilton-operátort. Ez elkerülhető lenne úgy, ha

$$\Delta_{12} = \Delta_{N_x, N_x-1} = 1, \quad (73)$$

teljesülne. Ebben az esetben viszont $\underline{\underline{\Delta}} \underline{\psi}(t)$ szorzatnak az $n = 1$ és az $n = N_x$ komponense nem lenne véges, ha vesszük a $\lim_{N_x \rightarrow \infty}$ határértéket. Előbbi a Schrödinger-egyenlet nem engedné meg, végtelen potenciálok mellett sem. Egyelőre tehát fogadjuk el a (72) képletet és azt, hogy a Hamilton-operátor az I intervallumon nem lesz önadjungált. A problémára a fejezet során később visszatérünk.

Az előzőekhez hasonló módon eljuthatunk az $U(x)\hat{I}$ operátort reprezentáló $N_x \times N_x$ -es mátrixhoz. Szerencsére a határokon itt nem fog az előzőekhez hasonló probléma felmerülni.

$$\underline{\underline{U}} = \begin{pmatrix} U(x_1) & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & U(x_2) & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & U(x_3) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U(x_4) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & U(x_{N_x-1}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & U(x_{N_x}) \end{pmatrix}. \quad (74)$$

(72) és (74) képletek segítségével megkapható a $\hat{H}$ -t reprezentáló $\underline{\underline{H}}$ mátrix

$$\underline{\underline{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\underline{\Delta}} + \underline{\underline{U}} . \quad (75)$$

A hullámfüggvény időfejlődésére a Schrödinger-egyenlet alapján a következő képlet adódik

$$\underline{\psi}(t) = \exp\left(-\frac{it\underline{\underline{H}}}{\hbar}\right)\underline{\psi}_0 . \quad (76)$$

Most térjünk vissza az (72) képlet vizsgálatára. Belátható, hogy az I intervallumban lévő teljes valószínűség $P_{in}(t) = \underline{\psi}^\dagger(t) \cdot \underline{\psi}(t)dx = \sum_{i=1}^{N_x} \psi_i^* \psi_i dx$. Ha a Hamilton-operátort egy önadjungált mátrixal közelíténénk I -n, akkor (76) alapján

$$\begin{aligned} P_{in}(t) &= \underline{\psi}^\dagger(t) \cdot \underline{\psi}(t)dx = \left(\exp\left(-\frac{it\underline{\underline{H}}}{\hbar}\right)\underline{\psi}_0\right)^\dagger \cdot \left(\exp\left(-\frac{it\underline{\underline{H}}}{\hbar}\right)\underline{\psi}_0\right)dx = \\ &= \left(\exp\left(-\frac{it\underline{\underline{H}}}{\hbar}\right)^\dagger \exp\left(-\frac{it\underline{\underline{H}}}{\hbar}\right)\underline{\psi}_0\right)^\dagger \cdot \underline{\psi}_0 dx = \\ &= \left(\exp\left(\frac{it\underline{\underline{H}}^\dagger}{\hbar} - \frac{it\underline{\underline{H}}}{\hbar}\right)\underline{\psi}_0\right)^\dagger \cdot \underline{\psi}_0 dx = \\ &= \left(\exp(\underline{0})\underline{\psi}_0\right)^\dagger \cdot \underline{\psi}_0 dx = \underline{\psi}_0^\dagger \cdot \underline{\psi}_0 dx = P_0 , \end{aligned} \quad (77)$$

kéne teljesüljön, vagyis időben nem változhatna az I -ben lévő teljes valószínűség, tetszőleges $\underline{\psi}_0$ esetén. Ez csak stacionárius időfejlődést tenne lehetővé. Következésképpen az a közelítés, melyben $\hat{H}$ továbbra is önadjungált marad, csak $\hat{H}$ sajátfüggvényeinek tárgyalása során lehetne helyes (ezeknek stacionárius az időfejlődése), általános hullámcsomag esetén nem. Ellentmondásra jutottunk, tehát $\hat{H}$ közelítésére nem használhatunk önadjungált mátrixot.

(76) képlet alapján készíthető egy szimuláció az időfejlődésről. Megfelelő egységrendszerben a számolást nagyobb nehézségek nélkül el tudja végezni a legtöbb matematikai programcsomag. Egy ilyen egységrendszer lehet például a $\hbar' = 1$, $2m' = 1$, $U' = 200$ (ez látható a szimulációban is, ld. 5.2.-es fejezet). Továbbiakban a fizikai mennyiségek mérőszámát az új egységrendszerben vesszős betűkkel jelölöm. Dimenzióanalízissel belátható, hogy ezen paraméterek variálásával az időegységet ($\Delta t' = 1$) a

$$\Delta t = \frac{\hbar}{\hbar'} \cdot \frac{U'}{U} , \quad (78)$$

képlet adja meg. A mostani példában $U \approx 50 \text{ MeV}$ -tal számolva $\Delta t \approx 10^{-21} \text{ s}$. Ez természetesen nem azt mondja meg, hogy a szimulálni kívánt időintervallumot mekkora részekre osszuk fel, hanem azt, hogy a szimulációban mért eltelt időt hogyan tudjuk másodpercre váltani. Az időfejllesztő-operátor ezzel a módszerrel csak bizonyos t'_{max} -ig számolható ki számítógép segítségével. Nagyobb értékek esetén a számítógép nem tudja végrehajtani a műveletet. $dx' = 0.01$ és $\hbar' = 1$ esetében $t'_{max} \approx 10^9$, ami $t = t' \cdot \Delta t \approx 10^{-12} \text{ s}$ -nak felel meg. Az alfa-bomlás ennél sok nagyságrenddel hosszabb folyamat. Ha ilyen hosszú időre szeretnénk szimulációt készíteni, akkor minden egységrendszerben lesz olyan

paraméter ami irreálisan nagy, vagy kicsi lesz. Ennek következményeképpen a számolás során a szimuláció valahol el fog akadni.

Alternatív megoldásként feloszthatjuk a szimulálni kívánt időintervallumot N_t darab egyforma távolságra lévő időpontra, úgy, hogy a kezdőpont és a végpont is az időpontok között legyen. Ha $0 \leq t \leq T$ intervallumon szereténk szimulációt készíteni, akkor az n -edik időpontra

$$\begin{aligned} t_n &= (n-1) \delta t \\ \delta t &= \frac{T}{N_t - 1} . \end{aligned} \quad (79)$$

(76) képletet felhasználva

$$\underline{\psi}(t_n) = \exp\left(-\frac{it_n H}{\hbar}\right) \underline{\psi}_0 = \exp\left(-\frac{i(n-1)\delta t H}{\hbar}\right) \underline{\psi}_0 . \quad (80)$$

Legyen

$$\underline{u} = \exp\left(-\frac{i\delta t H}{\hbar}\right) . \quad (81)$$

(80) és (81) képletekből következik, hogy

$$\underline{\psi}(t_{n+1}) = \underline{u}^n \underline{\psi}_0 = \underline{u} \underline{\psi}(t_n) . \quad (82)$$

A szimuláció elején tehát elég egyszer meghatározni $\underline{u}$ -t és $\underline{\psi}_0$ -t, az időfejlődést pedig (82) képlet segítségével valósíthatjuk meg.

Ennek a módszernek nagy előnye, hogy ebben az esetben t'_{max} értéke több nagyságrendet nő és a szimuláció lefutási ideje is sokkal alacsonyabb, mint az előző módszernél. Azonban a rekurziós képletből adódó hibaterjedés miatt N_t növelésével egyre pontatlanabb eredmény adódik $t' = T'$ környékén. Ez azt jelenti, hogy adott T' mellett, $\delta t'$ növelésével nő a szimuláció pontossága. A fentebb részletezett okok miatt $\delta t'_{max} \approx 10^9$. N_t maximális értékére nehéz pontos becslést adni. Azt azonban meg tudjuk mondani, hogy az $t = 1$ *nap* hosszúságú szimulációhoz minimum

$$N_{t,min} = \frac{t}{\Delta t' \delta t'_{max}} \approx 10^{17} , \quad (83)$$

darab időpontot kell kijelölnünk. A hiba nagysága is jó közelítéssel ennyiszeresére nő. Ennek következtében, ha az atommagba zárt valószínűség időbeli változását szeretnénk vizsgálni, akkor kezdetben kisebb, mint 10^{-18} -es pontossággal kellett, hogy a számítógép kiszámolja $\underline{u}$ minden elemét ahhoz, hogy a valószínűség-idő grafikont maximum 10%-os relatív hibával ábrázolhassa. Ez bizonyos programok segítségével megvalósítható, azonban ez a szimuláció lefutásiidejének ugrás szerű növekedését eredményezné.

5.2. Mikroszkopikus időfejlődés

Az előző alfejezetben tárgyalt módszerek segítségével a hullámcsomag mikroszkopikus időfejlődésének szimulálása már elvégezhető. Az előző alfejezetben azt is beláttuk, hogy a mikroszkopikus időskálán nem ütközünk komolyabb számítási problémába. *Ezen* a linken elérhető egy dinamikus skálázódó animáció a mikroszkopikus időfejlődésről, *ezen* a linken ugyanaz a szimuláció látható, fix skálázással.

Az animációkban használt paraméterek és kezdeti hullámfüggvény

$$\begin{aligned}\psi_0(x') &= \sqrt{\frac{2\sigma'_k}{\sqrt{2\pi}}} \exp(i k'_0 x' - \sigma'^2_k x'^2) \\ \hbar' &= 1, \quad 2m' = 1, \quad U' = 200, \quad k'_0 = 10, \quad \sigma'_k = 2, \quad l' = 5, \quad L' = 6 \\ I' &= [-10, 10], \quad N_x = 3000, \quad T' = 2, \quad N_t = 200,\end{aligned}\tag{84}$$

ahol $2l$ a két gát közötti térrész hossza, $L - l$ az egyes gátak szélessége, m az alfa-részecske tömege, $k_0 = \langle k \rangle$ és $\sigma_k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2}$.

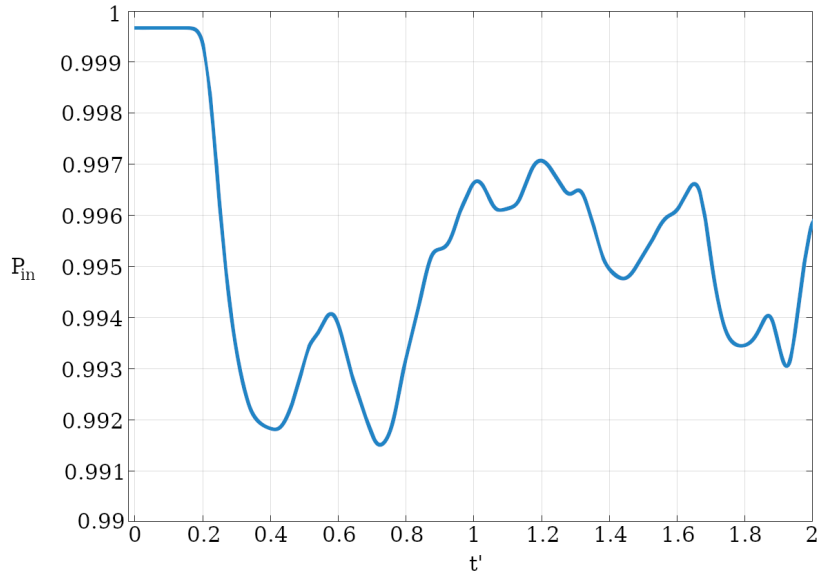
Dimenzióanalízissel megállapítható a távolságegység és időegység.

$$\Delta l = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU}} \sqrt{\frac{2m'U'}{\hbar'^2}} \approx 10^{-15} \text{ m}, \quad \Delta t = \frac{\hbar}{U} \cdot \frac{U'}{\hbar'} \approx 10^{-21} \text{ s}.\tag{85}$$

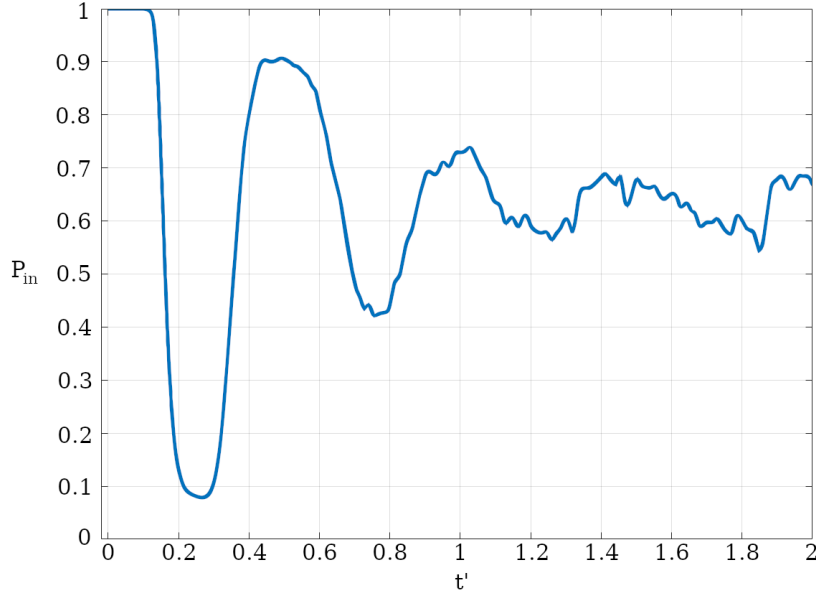
Látható, hogy $L = L' \Delta l$, az atom karakterisztikus mérete nagyságrendileg egyezik egy valódi atommag méretével.

A szimulációkban megfigyelhető, ahogy a hullámcsomag potenciálgátak között pattog és folyik szét. Néhány pattanás után a hullámfüggvény annyira szétfolyik, hogy az betelíti a két gát közötti teljes teret. Innentől kezdve nem beszélhetünk pattogásról. Ebből levonhatjuk a konklúziót, hogy makroszkopikus időfejlődésre (és így az alfa-bomlásra) nem pontos modell a pattogás, hiszen makroszkopikus skálán "azonnal szétfolyik" a hullámcsomag.

Ábrázoljuk az atommagba zárt valószínűséget t' függvényében $k'_0 = 10$ és $k'_0 = 20$ esetében is

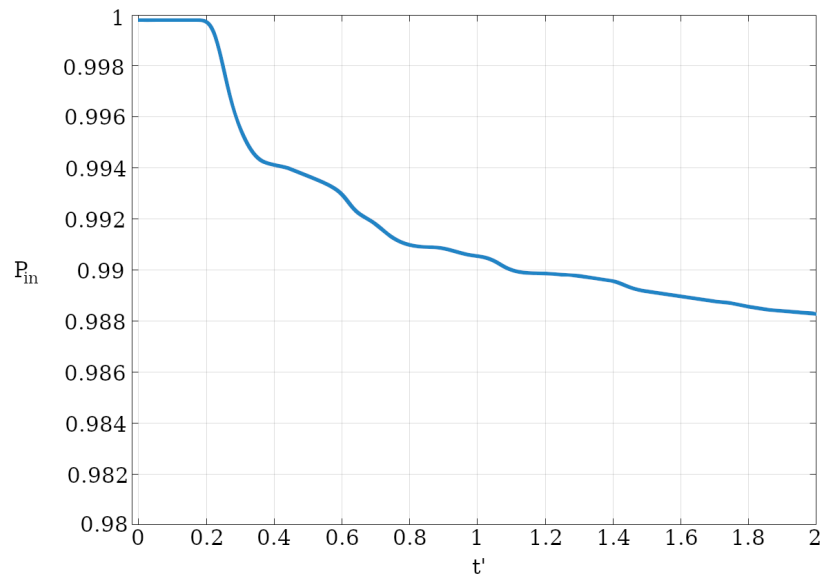


$$k'_0 = 10$$

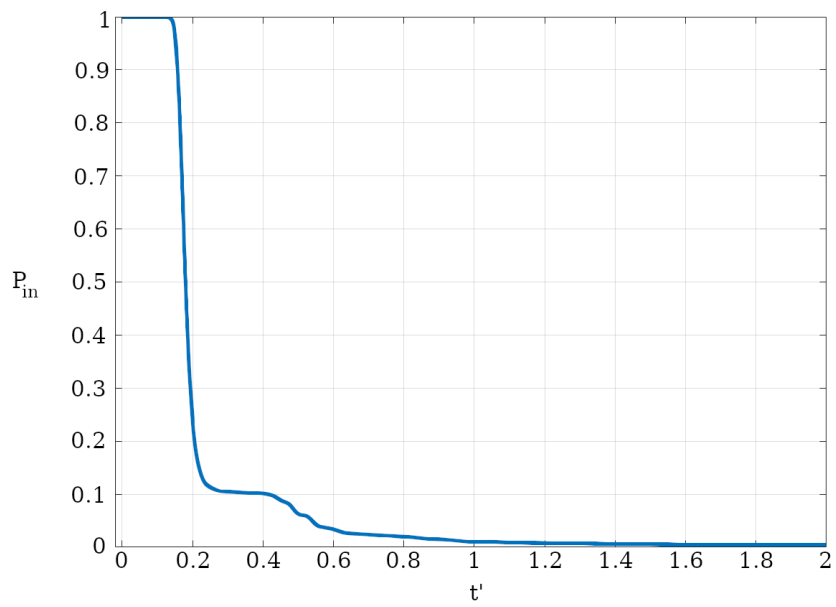


$$k'_0 = 20$$

Mindkét ábrán jól látszik, hogy az időfejlődés legelején relatíve nagy mértékű valószínűség távozik az atommagból. A jelenség magyarázata, hogy az egyes hullámcsomagok tartalmaznak U -nál magasabb és alacsonyabb energiájú módusokat. A nagy-energiájú módusok könnyedén kijutnak az atommagból, míg az alacsonyabb energiájúak nem. A hirtelen csökkenés annak felel meg, amikor a nagy energiájú módusok elhagyják az atommagot. Ehhez hasonló következtetéseket vonhattunk le az alfa-bomlás 3.4.-es alfejezetben tárgyalt modelljéből is, ahol pattogással próbáltuk modellezni a jelenséget. Figyeljük meg továbbá a szintén mindkét ábrán látható oszcillálást. Ez – ahogy a dinamikusán skálázódó animációban is megfigyelhető – annak a következménye, hogy az intervallum széleiről a hullámcsomag egy része visszaverődik, így egy része vissza fog kerülni az atommagba. Ezt kiküszöbölhetjük azzal, ha I' határait megnöveljük és vele együtt N_x értékét is. Várakozásaink szerint ez kisebb amplitudójú oszcillációt fog eredményezni és az oszcilláció kezdetét is eltolja időben. Ennek érdekében vizsgáljuk meg az $I' = [-100, 100]$, $N_x = 5000$ esetet.



$$k'_0 = 10$$



$$k'_0 = 20$$

Várákosainknak megfelelően az oszcilláció most nem jelent meg. Mindkét ábrán látható egy lépcsőzetes csökkenés. Ennek ismét a pattogó alfa-részecske modell a magyarázata. Két ütközés között alig áramlik ki valószínűség, tehát a bezárt valószínűség lényegében állandó, ezért alakul ki a lépcsőzetes görbe. Megfigyelhető, ahogy az idő múlásával egyre kevesebb idő telik el két ütközés között és ütközésenként egyre kevesebb valószínűség távozik az atommagból, egészen addig, amíg egy lassú "folytonos" csökkenés ki nem alakul. Ez a hullámcsomag szétfolyásával indokolható meg.

Mikroszkopikus skálán általánosságban nem lehet megfigyelni a tradicionálisan alfa-bomlásnak gondolt jelenségből származó valószínűségcsökkenést, ezért tűnik úgy, mintha $k'_0 = 10$ -es hullámszámú alfa-részecske $P_{in}(t)$ függvénye egy 0-tól különböző valós számhoz konvergálna. A modell szerint azonban létezhet olyan atommag, amely mikroszkopikus időskálán mérhető idő alatt képes alfa-bomlásra. Ilyen atommagokra $\langle E \rangle \gg U$. Ez látható a $k'_0 = 20$ -as ábrán ($E' \approx k_0'^2 = 400 > 200 = U$). Meg kell jegyeznünk, hogy valójában igen nehéz lenne ilyen atomot találni, tekintetbe véve, hogy rendkívül gyorsan elbomlik.

5.3. Makroszkopikus időfejlődés

Ahogy az 5.1.-es alfejezetben részleteztük, makroszkopikus időfejlődésről igen nehéz pontos szimulációt készíteni. Az 5.2.-es fejezetben megfigyeltük, hogy az intervallum széleiről visszaverődik a hullámcsomag egy része, ami egy újabb komoly nehézséget jelent. Ez bizonyos mértékben kiküszöbölhető nagyobb intervallum és ezzel együtt nagyobb N_x választásával. Ebben a dolgozatban nem kísérünk meg makroszkopikus időfejlődést pontosan modellező szimulációt készíteni, azonban a jelenséggel kapcsolatban két, a mikroszkopikus időfejlődésen alapuló megfigyelést tehetünk.

- Az atommagban lévő alfa-részecskére helyes feltevés, hogy $\langle E \rangle \ll U$.
- A pattogó alfa-részecske modellje helyett érdemes feltenni, hogy a hullámcsomag szétfolyt annyira, hogy az egész atommagot szinte egyenletesen betéríti.

6. Összefoglalás

A dolgozatban egydimenziós kvantummechanikai rendszerekkel foglalkoztunk, melyet különböző részecskék adott potenciálokkal történő kölcsönhatásának leírása motivált. Első lépésben hullámcsomagok potenciállépcsőkkel történő ütközésére vonatkozó közelítő képleteket vezettünk le, majd a képletek segítségével megvizsgáltuk az alfa-bomlás potenciállépcsőkkel megvalósítható modelljét. Beláttuk, hogy a modell a jelenség leírására kevésbé alkalmas, ugyanis a modell szerint az atommagban keletkező alfa-részecske energiájától függően vannak olyan esetek, melyek során az tetszőlegesen hosszú idő után sem képes teljes bizonyossággal kijutni a magból. Ez természetesen ellentmond a Geiger-Nuttall törvénynek, mert utóbbi szerint a bomlási állandó szigorúan véve sosem lehet nulla.

Ezt követően alternatív megoldást vetettünk fel az alfa-bomlás kvantummechanikai leírására és megvizsgáltuk, hogy reprodukálható-e szimulációval a bomlási törvény, illetve a Gamow-közelítés. Ezen rész során lényegében arra a

kérdésre kerestük a választ, hogy a kvantummechanika mikroszkopikus időfejlődését "egzaktul" (numerikusan) megoldva leírható-e egy makroszkopikus időskálán bekövetkező jelenség (az alfa-bomlás). Azt láttuk, hogy számítógéppel nehezen szimulálható ilyen hosszúságú folyamat, ugyanis az időfejlesztő operátor kiértékelése makroszkopikus időkre numerikusan instabil. A kapott eredmény nem feltétlenül meglepő, ugyanis tapasztalataink szerint a mikroszkopikus törvények ismerete ellenére sokszor nagyon nehéz pusztán ezek alkalmazásával makroszkopikus jelenségeket megmagyarázni. Példának okáért, nem vagyunk képesek a makroszkopikus hidrodinamika egyenleteit az elemi alkotóelemek mikroszkopikus (akár kvantumos) mozgásegyenletéből levezetni, de gondolhatunk akár kémiai reakciókra, melynek leírásához sem használunk kvantumos mozgásegyenleteket.

Érdemes volna látni, hogy a numerikus módszerek fejlesztésével a fenti problémakör feloldhatóvá válik-e. Ezzel a dolgozatban nem foglalkoztunk, de jövőbeli kutatási témát képvisel.

7. Köszönetnyilvánítás

A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-6 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

