Kvanttimekaniikka: Luento 9

Martikainen Jani-Petri

Viimeksi

- Harmoninen oskillaattori
- Luomis- ja hävitysoperaattorit

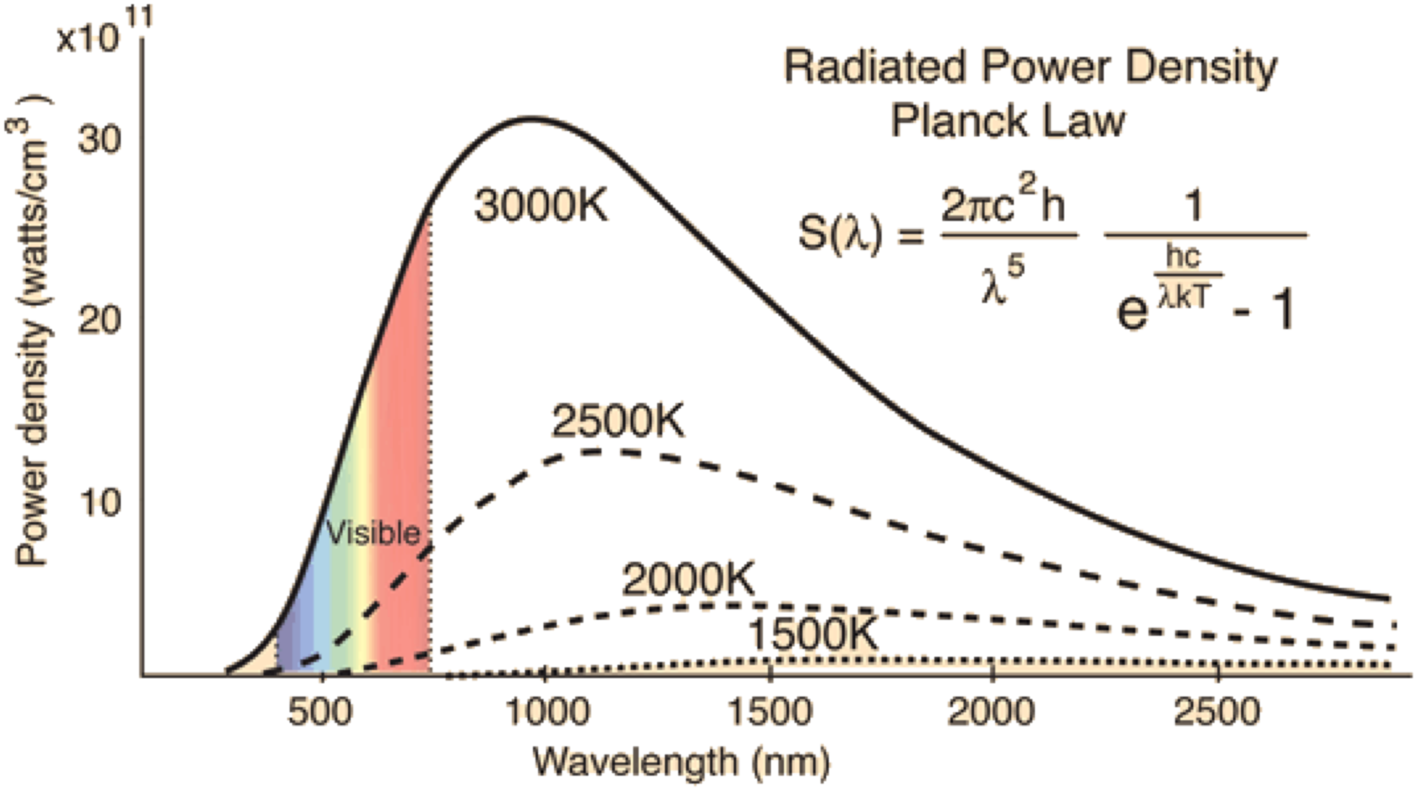
Vihje: Feynman lectures online
http://www.feynmanlectures.caltech.edu/III_toc.html

Tänään

- Sironta potentiaalista
- Tunneloituminen
- Tunnelointi- ja heijastustodennäköisyys

Harmoninen oskillaattori …

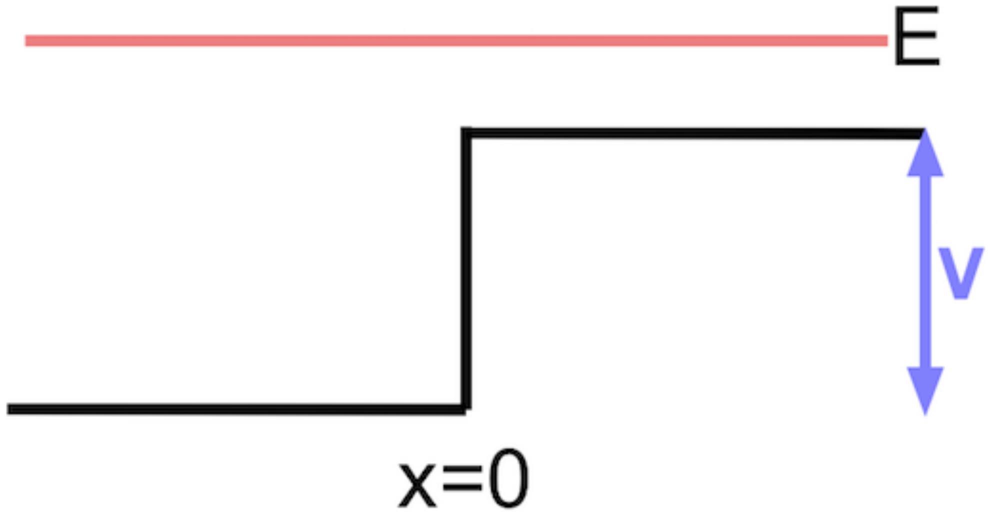
It all makes sense!



Sähkömagneettinen kenttä→ kvantisointi → Planckin hatusta vetämien oletusten perustelut harmonisen oskillaattorin ominaistilojen kautta

Sironta potentiaalista

- Potentiaaliaskel: mitä tapahtuu kun hiukkanen osuu siihen?
- **Tilat eivät välttämättä ole sidottuja eli aaltofunktio ei häviä äärettömyydessä**
- Kuinka tätä pitäisi käsitellä?
- Mikä Schrödingerin yhtälön ratkaisu on?



Jatkuvuus yhtälö/Virrantiheys

- Mikä fysikaalinen tilanne meillä on mielessä?
- Taululla. ks. Muistiinpanot.

Sironta potentiaalista

- Kussakin alueessa missä potentiaali on vakio. Ratkaisun muoto tunnetaan. Joko eksponenttifunktioita tai oskilloivia (eksponentteja toki nekin)
- Oletetaan ensin, että E>V
- Kun x<0:

$$\psi(x) = A_1 \exp(ik_1x - i\omega_1 t) + A_2 \exp(-ik_1 x - i\omega_1 t),$$

$$\text{where } k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2} \text{ and } \hbar\omega_1 = E = \hbar^2 k_1^2/2m$$

- Kun x>0:

$$\psi_+(x) = B_1 \exp(ik_2x - i\omega_2 t) + B_2 \exp(-ik_2 x - i\omega_2 t), \text{ where}$$

$$k_2 = \sqrt{2m(E-V)/\hbar^2} \text{ and } \hbar\omega_2 = \hbar^2 k_2^2/2m$$

ikx-termit oikealle meneviä , -ikx-termit vasemmalle

Sironta potentiaalista

- Aaltofunktion tulee olla jatkuva kaikkialla ja tässä se ongelmakohta on erityisesti x=0
- Samoin ensimmäisen derivaatan oltava jatkuva

$$\psi_-(0) = \psi_+(0) \rightarrow A_1 + A_2 = B_1 + B_2$$

$$\frac{d\psi_-(0)}{dx} = \frac{d\psi_+(0)}{dx} \rightarrow ik_1 A_1 - ik_1 A_2 = ik_2 B_1 - ik_2 B_2$$

- Liikaa tuntemattomia: alkuehdossa hiukkanen tulee vasemmalta → $B_2 = 0$
- 3 tuntematonta ja 2 yhtälöä?
- Huom: derivaatan jatkuvuudelle poikkeus, kun potentiaalin muutos on ääretön.

Virrantiheys

- Kun tunnemme aaltofunktion voimme laskea sitä vastaavan **virrantiheyden** (taululla)

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right]$$

- Sisääntulevalle osalle $J_{inc} = \frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2$
- Aika järkevää: muotoa nopeus*tiheys
- Heijastuneelle osalle $J_{refl} = -\frac{\hbar k_1}{m}|A_2|^2$
- Läpimenneelle osalle $J_{trans} = \frac{\hbar k_2}{m}|B_1|^2$

Sironta potentiaalista

- Yhtälöt rajapinnasta…

$$A_1 + A_2 = B_1$$

$$A_1 k_1 - k_1 A_2 = k_2 B_1$$

- Josta saamme

$$A_2 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1 \text{ ja } B_1 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1$$

- Nyt voimme laskea heijastuvan virrantiheyden suhteen sisääntulevaan (**A_1 putoaa silloin pois**) ja saamme heijastuskertoimen

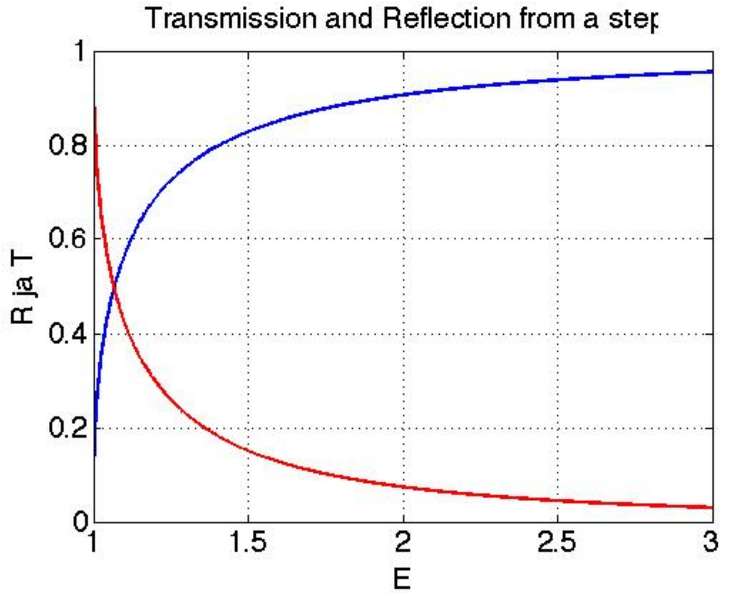
$$R = |\frac{J_{refl}}{J_{inc}}| = |\frac{A_2}{A_1}|^2$$

Sironta potentiaalista

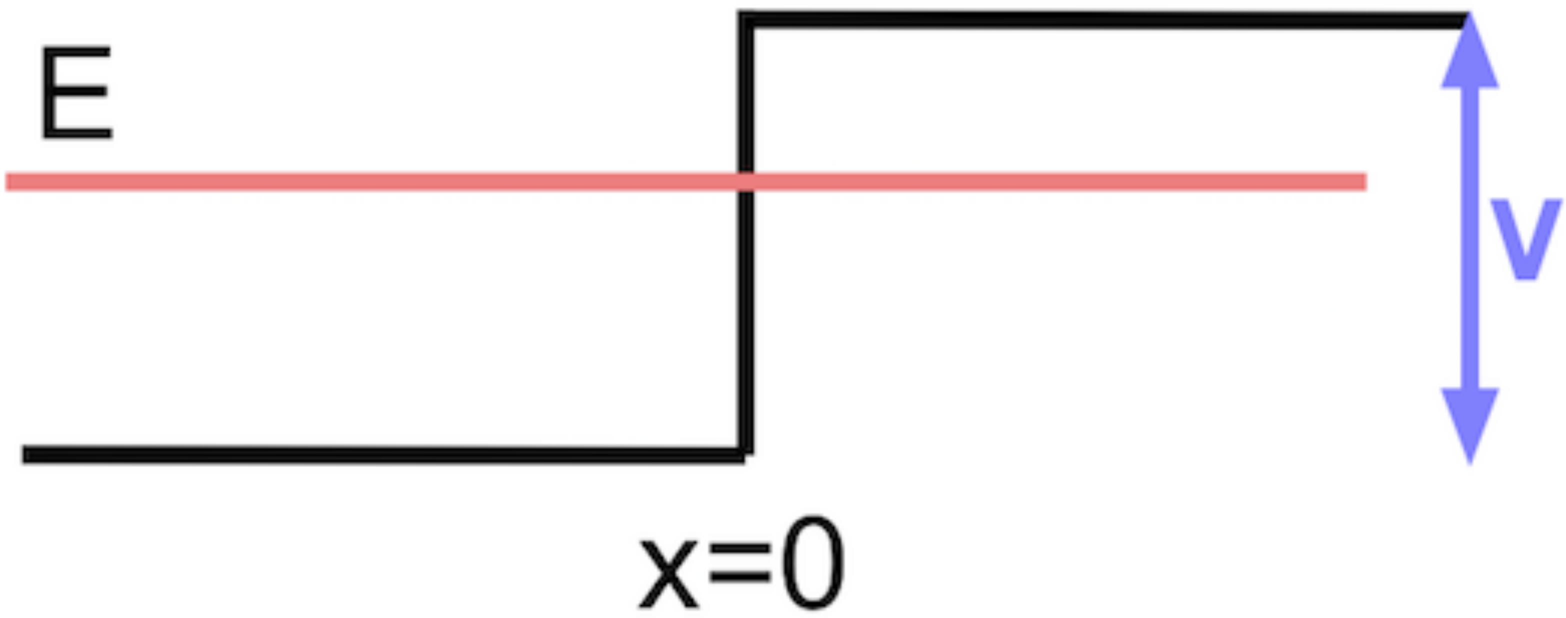
- Samalla tavalla saamme läpäisykertoimeksi

$$T = |\frac{J_{trans}}{J_{inc}}| = |\frac{B_1}{A_1}|^2 \frac{k_2}{k_1}$$

- Huomaa: ei aina läpäise vaikka energia askelta korkeampi! (Läpäisykerroin sinisellä)



Sironta potentiaalista: E<V



Sironta potentiaalista

- Entä jos E<V?
- Tällöin Schrödingerin yhtälön ratkaisu potentiaalin kohdalla antaisi imaginäärisen k-vektorin.
- Toisaalta aaltofunktion täytyy hävitä kaukana oikealla…siispä

$$\psi_+(x) = B_1 e^{-\kappa x}, \text{ where } \kappa = \sqrt{2m(V-E)/\hbar^2}$$

- Jatkuvuus ja derivaatan jatkuvuus x=0:ssa…

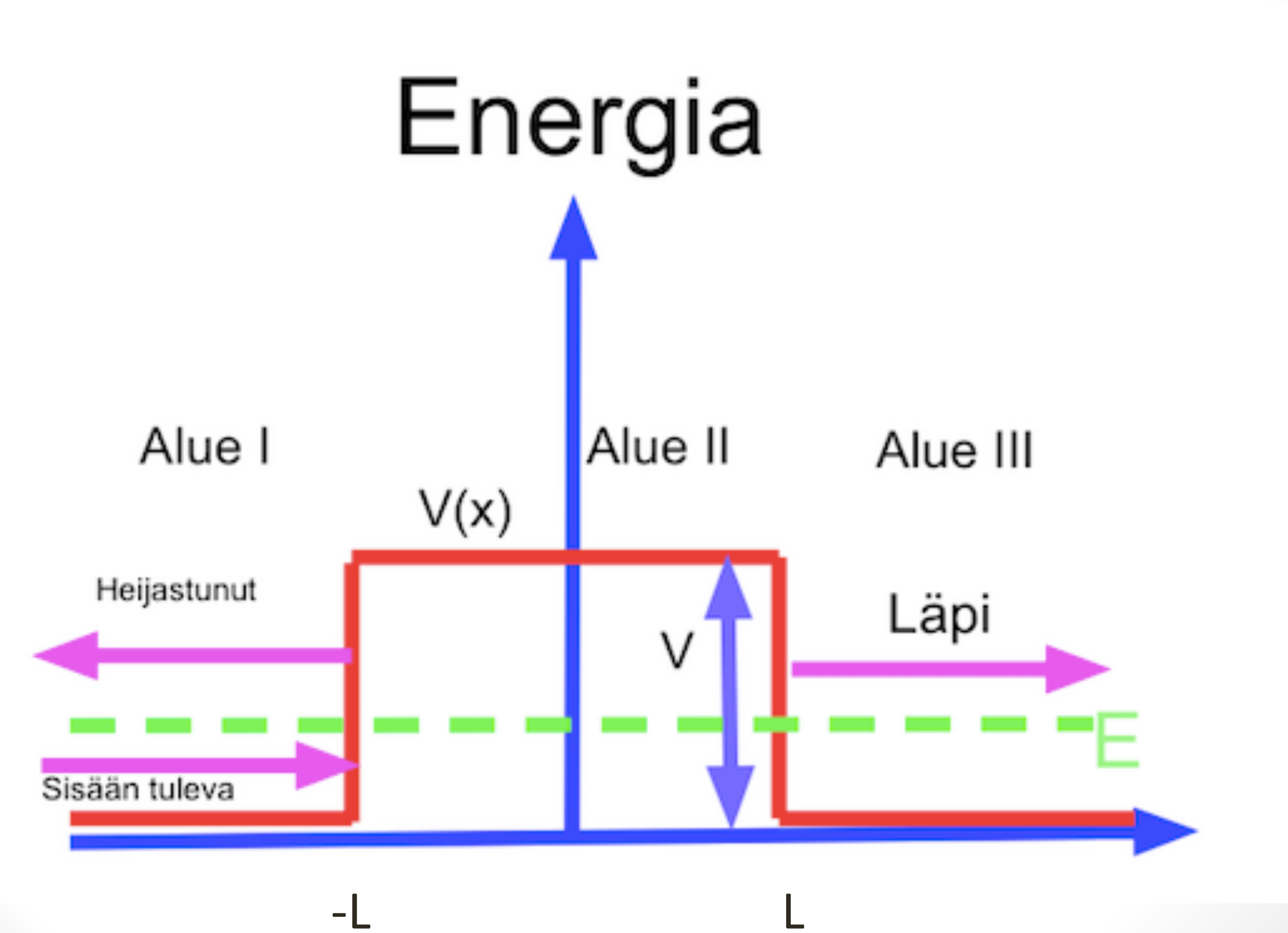
$$B_1/A_1 = \frac{2}{1 + i\kappa/k_1}$$

$$A_2/A_1 = \frac{1 - i\kappa/k_1}{1 + i\kappa/k_1} = \frac{z}{z^*}$$

Reaalinen funktio x>0:ssa
→ virrantiheys häviää

$$R = 1$$

Potentiaalivalli välillä –L…L



Potentiaalivalli

- Alueessa I:

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x}$$

- Alueessa II:

$$\psi_{II}(x) = B_1 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}$$

Huomaa tuo termi!

- Alueessa III:

$$\psi_{III}(x) = C_1 e^{ik_1 x}$$

- Jos voimme laskea etuvakiot, saamme heijastus- ja läpäisykertoimet

$$T = |\frac{C_1}{A_1}|^2 \text{ ja } R = 1 - T$$

Potentiaalivalli

- **Nyt vaaditaan taas jatkuvuutta (ja derivaattojen jatkuvuutta)**
- Kiinnostavat paikat ovat x=L ja x=-L
- Kaiken kaikkiaan neljä yhtälöä ja koska katsomme asioita suhteessa A_1:een saamme ratkaisun (ks. Kirjasta/muistiinpanoista)

$$T = \frac{1}{1+\frac{1}{4}\frac{V^2}{E(V-E)}\sinh^2(2\kappa L)},\ \text{kun } E < V$$

- Jos E>V? lasku menee samalla tavalla paitsi alueessa II on oltava

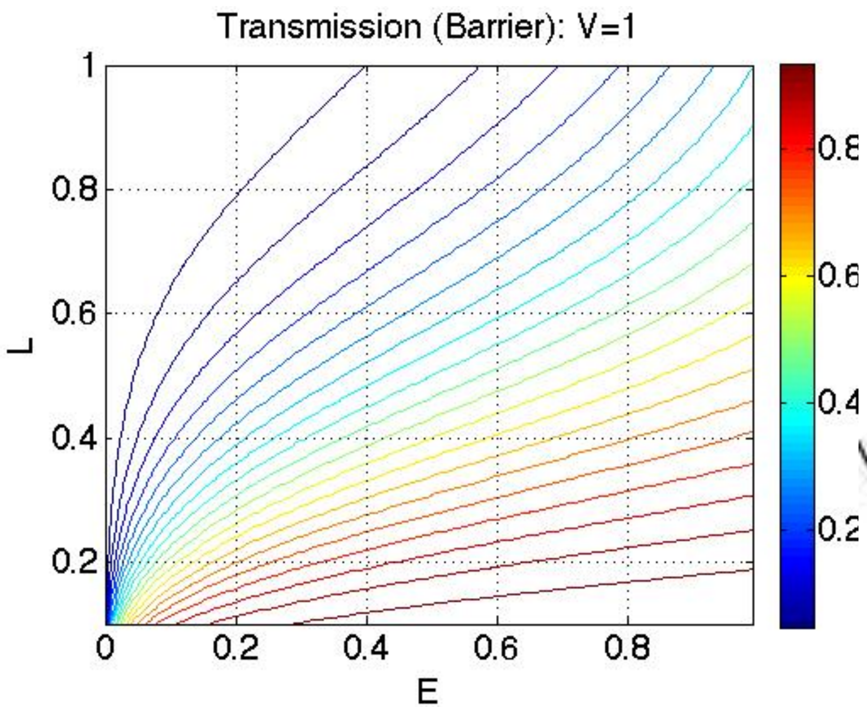
$$\psi_{II}(x) = B_1 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x},\ \text{where } k_2 = \sqrt{2m(E-V)/\hbar^2}$$

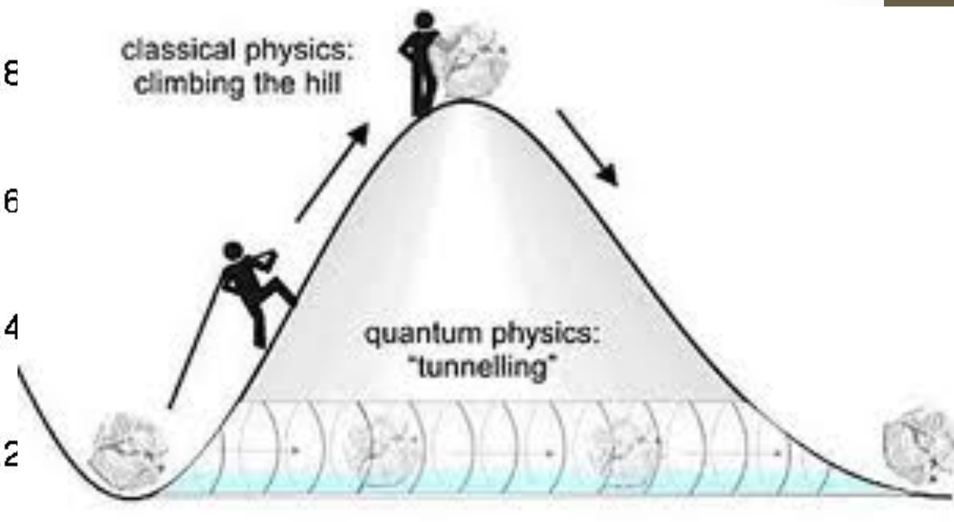
$$T = \frac{1}{1+\frac{1}{4}\frac{V^2}{E(E-V)}\sin^2(2k_2 L)}$$

Tunneloituminen

Kun E/V<<1 ja α>>1 $$T \approx 16\left(\frac{E}{V}\right)e^{-4\alpha}, \quad \alpha = \sqrt{2mVL^2/\hbar^2}$$

- Tässä meillä on **esimerkki tunneloitumisesta**!
- Hiukkasella oli nollasta poikkeava todennäköisyys siirtyä esteen toiselle puolelle olkoonkin, että klassisesti liikeyhtälöt eivät olisi sitä mahdollistaneet.



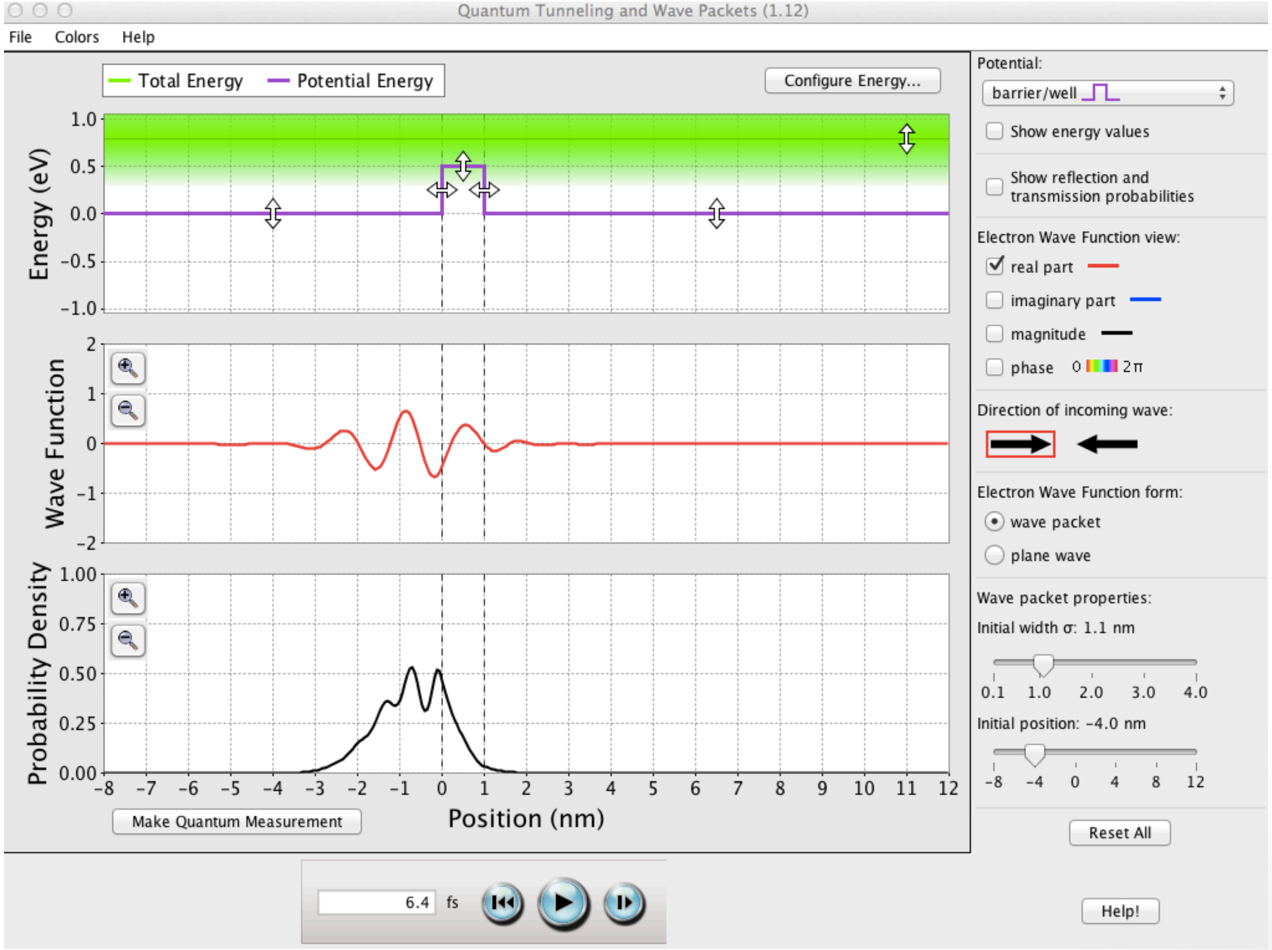


Sironta potentiaalista

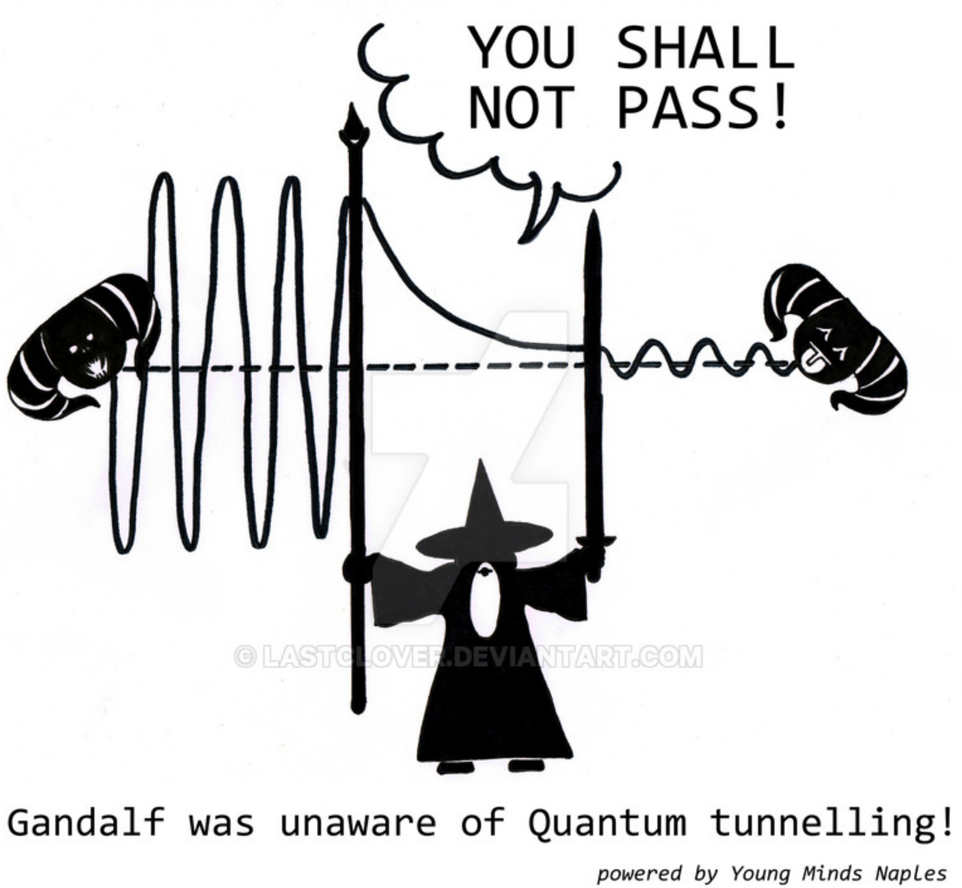
- Perusidea on osattava.
- Kuinka yhälöt muodostetaan, yhteys heijastus- ja läpäisykertoimiin?

Tunneloituminen: demo

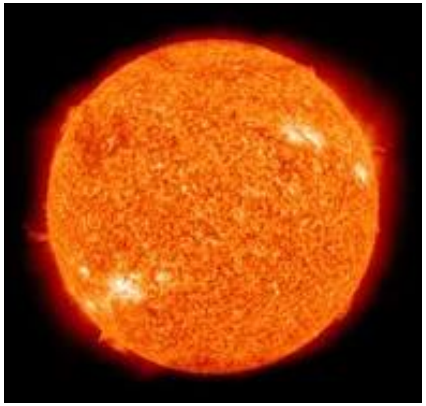
- http://phet.colorado.edu/en/simulation/quantum-tunneling



Tunneloituminen

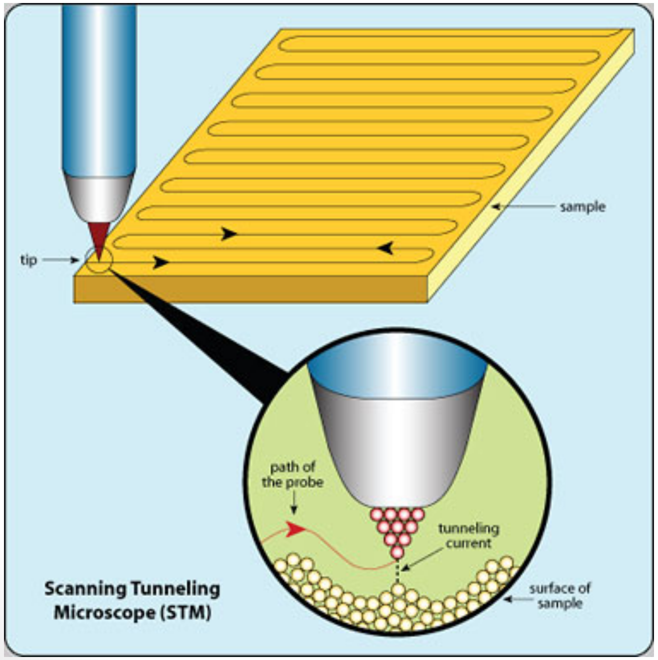


Tunneloituminen: real world

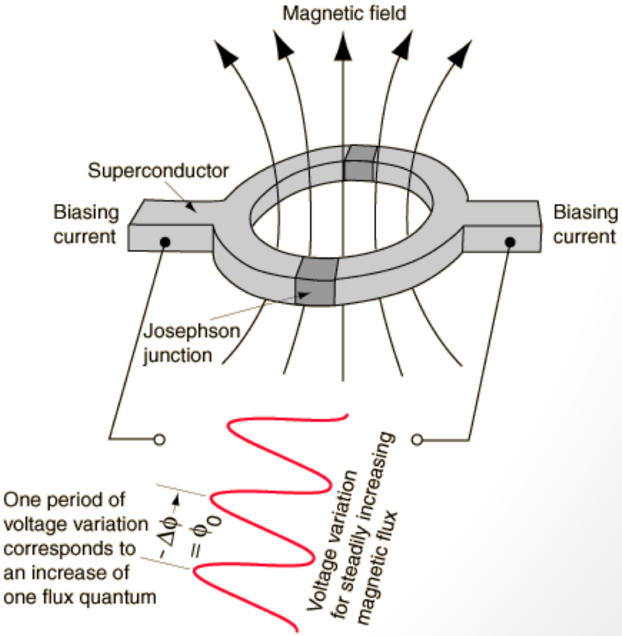


Aurinko: fuusion mahdollisuus

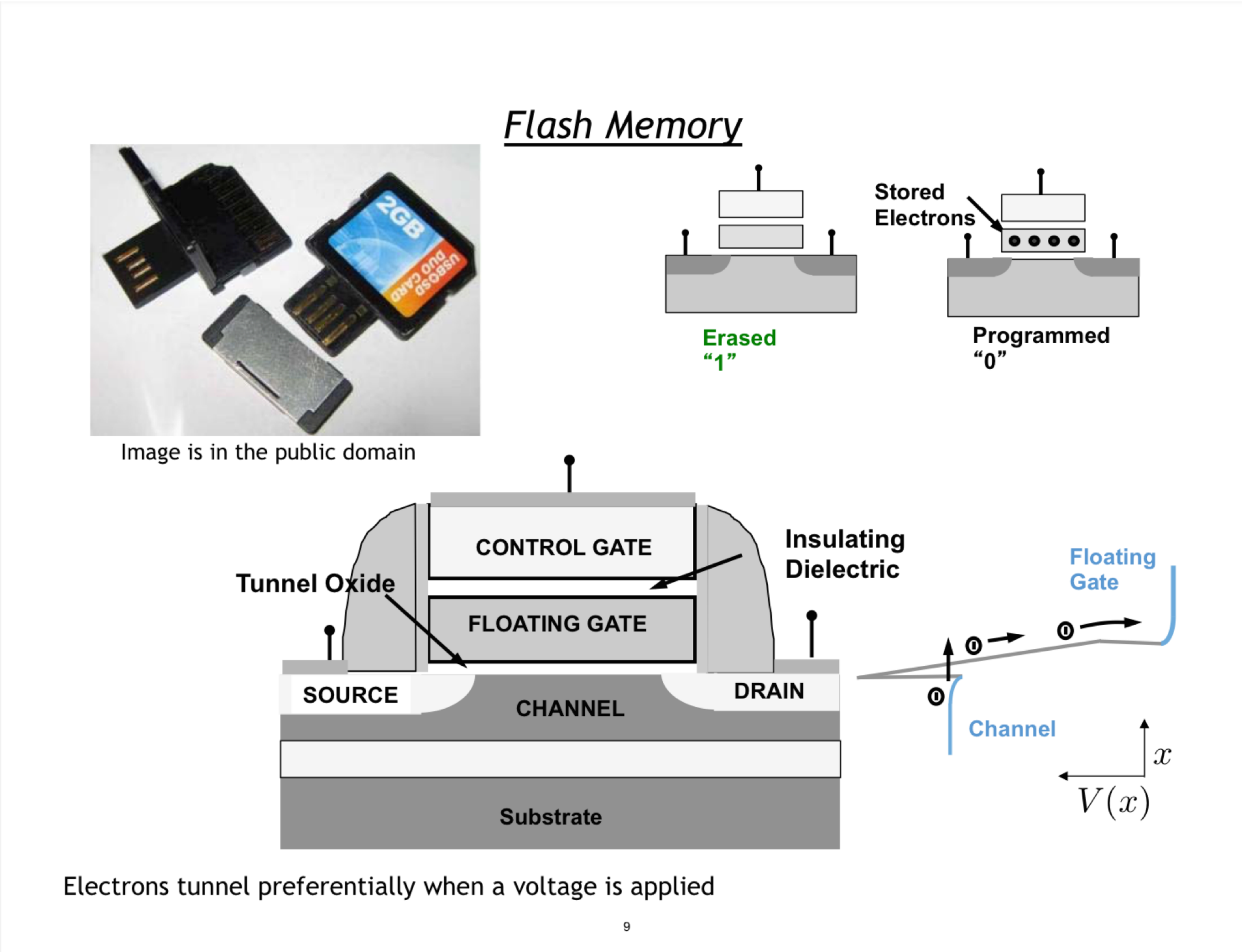
STM



SQUID



Tunneloituminen: flash-muisti



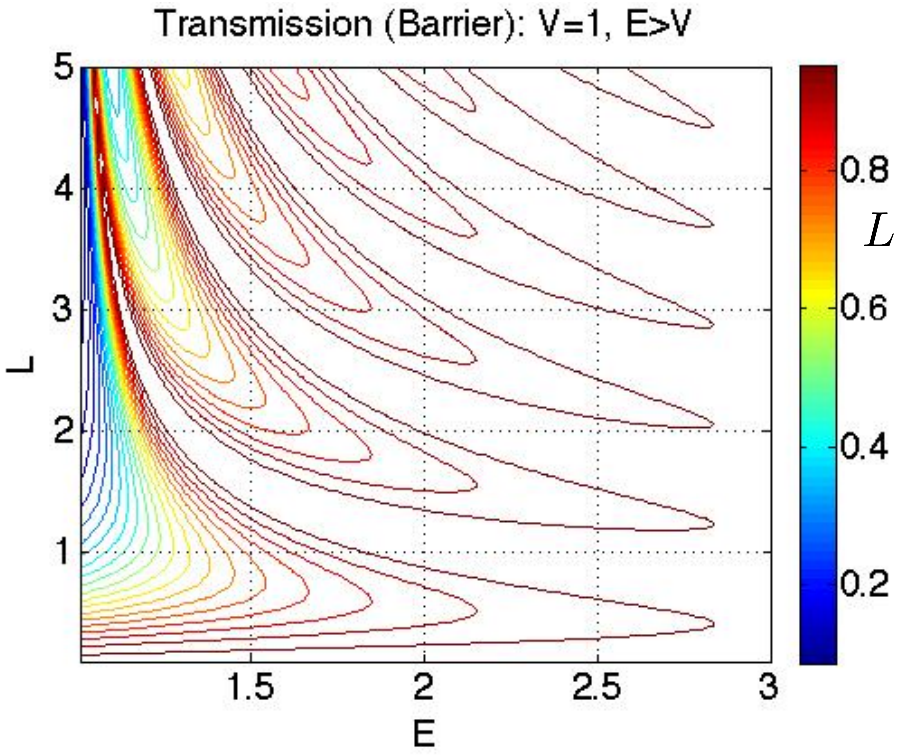
[MIT: OCW]

Yleinen idea

- Huom: tässä esitetyllä tavalla voi ratkoa Schrödingerin yhtälöitä tilanteissa missä potentiaali on vakio eri alueissa.
- Rajapinnoissa sovelletaan reunaehtoja, niistä saadaan yhtälöryhmiä ja ne voidaan ratkaista.
  - Aaltofunktio jatkuva
  - Derivaatat myös jatkuvia
- Ratkaistavien yhtälöiden määrä kasvaa rajapintojen mukana.
- Numeerinen ratkaisu pian helpompi

Potentiaalivalli: E>V ??

Häh? Maksimeja, kun energia kasvaa?



$$L = 3 \rightarrow \quad \lambda_p = \frac{2\pi}{\sqrt{2(E-V)}} \approx \{11.9, 6\}$$

"Seisovat aallot" vaikuttavat läpäisyyn!

Toisaalta potentiaalikaivossa

$$k_{min} = \frac{2\pi}{\lambda_{max}} = \frac{\pi}{2L} \rightarrow \lambda_{max} = 4L = 12$$

Klassisesti btw… hiukan vastaavaa nesteissä

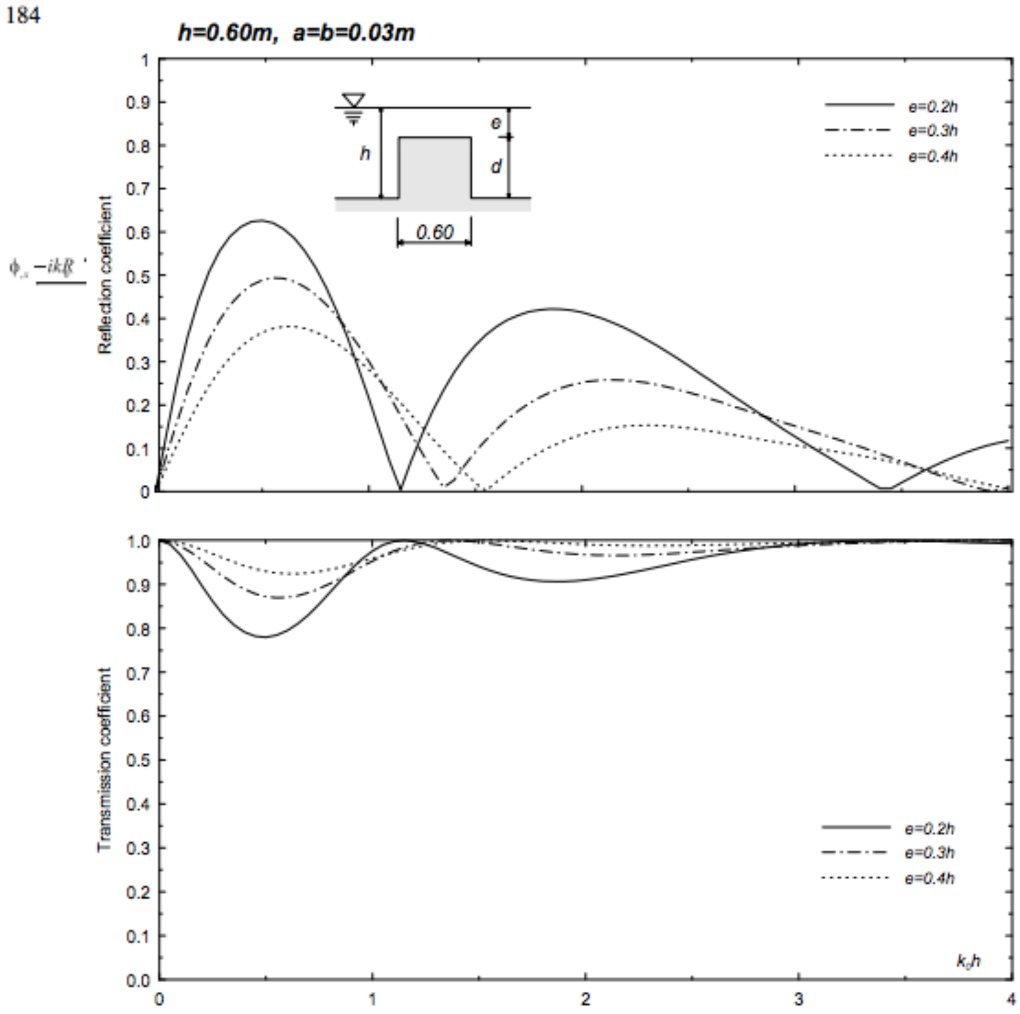
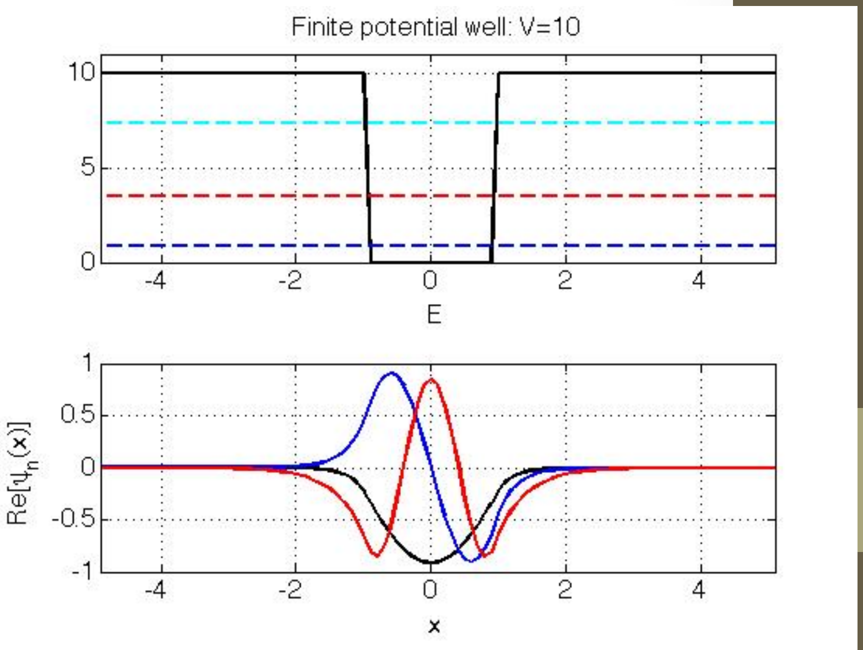


Fig. 3. Distribution of the reflection and transmission coefficients with respect to k_0h

Yleistä: sidotut tilat

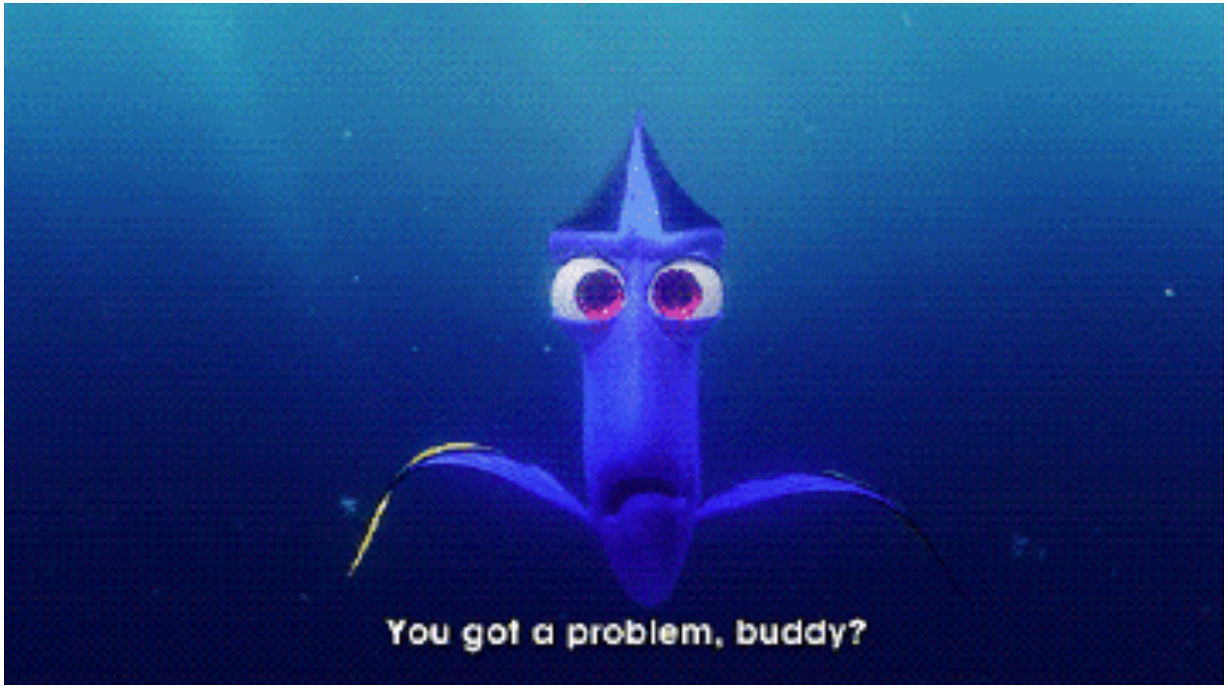
- Esim. äärellinen potentiaalikaivo on suhteellisen helppo ratkaista ominaistiloille. Katso kirjasta tai netistä, jos ei aikaa luennolla.
- Olennainen ero: **kun haemme sidottuja tiloja (aaltofunktio painuu nollaan äärettömyydessä)**, ei energia voi olla mitä tahansa. Energia ei ole input-parametri!
- …esim. yhtälöryhmän determinantin oltava nolla→ tästä saamme **sidotut ominaistilat** ja niiden diskreetit energiat



Numeerinen esimerkki

Tänään

- Sironta potentiaalista
- Tunneloituminen
- Tunnelointi- ja heijastustodennäköisyys



Materiaalia

- Sirontaongelmista ja tunneloitumisesta Liboff osat 7.5-7.9
- Tästä yksinkertaisesta sirontaongelmasta on Griffithsin kirjassa vähemmän. Wikipediassa näyttää olevan perusideat siitä mitä teimme nyt. https://en.wikipedia.org/wiki/Rectangular_potential_barrier
- Äärellisen potentiaalikuopan sidotut tilat Liboff 8.1 ja Griffiths 2.6