1

- viime luennolla: Harmoninen oskillaattori, luomis- ja hävitysoperaattorit

- tällä luennolla: sironta potentiaalista, tunnelointi- ja heijastustodennäköisyys, Schrödingerin yhtälö k-avaruudessa

2.

Harmoninen oskillaattori liikemäärä-avaruudessa:

Tilafunktio voidaan esittää myös $\hat{p} = \hbar \hat{k}$:n ominaistilojen avulla

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} b(k)\varphi_k \, dk \,, \text{ missä } \varphi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \text{ ja}$$

$$b(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\varphi_k^* \, dx$$

Liikemäärälle jakauma $P(k) = |b(k)|^2$
Jos tunnemme $\psi(x)$:n tunnemme $b(k)$:n ja päinvastoin. Molemmat sisältävät saman informaation.

$\psi(x)$ yhtälöstä: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\kappa x^2}{2}\right)\psi(x) = E\psi(x)$

sijoita $\psi(x)$ F-muunnoksen avulla lausuttuna ja huomaa

$$x\varphi_k = -i\frac{\partial \varphi_k}{\partial k}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dk\, b(k)\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\kappa}{2}\frac{\partial^2}{\partial k^2}\right)\varphi_k = E\int_{-\infty}^{\infty} dk\, b(k)\varphi_k$$

Integroi vasen puoli kahdesti osin ja käytä $b(k)\big|_{k=\pm\infty} = b'(k)\big|_{k=\pm\infty} = 0$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \varphi_k\left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\kappa}{2}\frac{\partial^2}{\partial k^2} - E\right)b(k)\right] = 0$$

$\Rightarrow$ k:sta riippuva Schrödingerin yhtälö

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\kappa}{2}\frac{\partial^2}{\partial k^2}\right)b(k) = E\, b(k)$$

Paikka-avaruudessa: $\hat{H}(x,p) \longrightarrow \hat{H}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$

k-avaruudessa: $\hat{H}(x,p) \longrightarrow \hat{H}\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k}, \hbar k\right)$, $i\hbar\frac{\partial b}{\partial t} = \hat{H}(k)\, b(k,t)$

Sama idea kuin ennen! $b(k,t) = e^{-itH/\hbar}\, b(k,0)$

3. Ei-sidotut tilat:

Sidotulle tilalle ψ: $|\psi|^2 \to 0$, kun $|x| \to \infty$

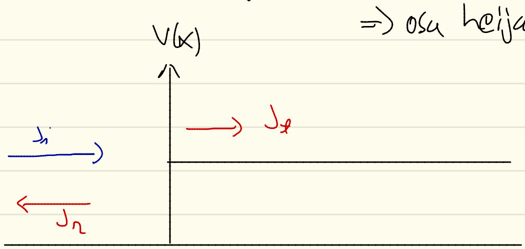
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx < \infty$$

esim. harmonisen oskillaattorin ominaistilat

Ei-sidotulle tilalle: $\int_a^b |\psi|^2 dx < \infty$, $|b-a| < \infty$

esim: $\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ (tasoaalto)

Tarvitaan sironta-ongelmissa: hiukkanen törmää potentiaaliin
$\Rightarrow$ osa heijastuu, osa menee läpi



J_i = tuleva virrantiheys
J_r = heijastunut
J_t = läpi mennyt

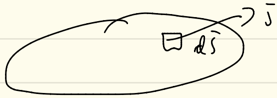
$|\psi|^2 dx = \rho dx = dN$ = hiukkasten määrä välillä dx

$\int_a^b |\psi|^2 dx = N$ = hiukkasten määrä välillä $x \in [a,b]$

esim. $10^5 \frac{\text{neutronia}}{m}$ liikkuvat nopeudella $v = p/m = \hbar k_0/m$

$$\Rightarrow \psi = 10^{5/2} e^{i(k_0 x - \omega t)}, \quad \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$$

Jatkuvuusyhtälö: Tilavuuden V sisällä olevien hiukkasten määrä voi muuttua vain, jos jos sen pinnan S läpi virtaa hiukkasia.



4.

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\int_S \bar{J} \cdot d\bar{s}$$ toisaalta $N = \int_V \rho \, d\bar{r}$

$$\Rightarrow \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d\bar{r} = -\int_S \bar{J} \cdot d\bar{s} \overset{\text{Gauss}}{=} -\int_V \nabla \cdot \bar{J} \, d\bar{r}$$

$$\boxed{\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{J} = 0}$$ jatkuvuusyhtälö

1D: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = +\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi^*$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \psi^* \left(-\frac{iH}{\hbar}\right) \psi + \psi \left(\frac{iH}{\hbar} \psi^*\right)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \Rightarrow \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0, \text{ kun } \rho = |\psi|^2, \; J = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$

3D: $\Rightarrow \boxed{\bar{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)}$

Hydrodynamiikassa muuten myös yhtälö nopeudelle ($J = \rho \bar{v}$)

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\bar{v} \cdot \nabla)\bar{v} = -\frac{1}{m\rho} \nabla P, \quad P = \text{paine} \quad \text{(Euler yhtälö)}$$

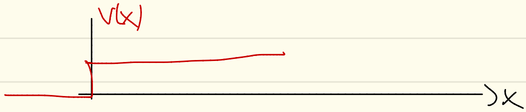
Kvanttimekaniikassa voimme kirjoittaa $\psi = \sqrt{\rho}\, e^{iS}$ $\overset{\text{Sch.}}{\Rightarrow}$ yhtälöt ρ:lle ja S:lle

$$\bar{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla S \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(m\rho\bar{v}) + \nabla \cdot (m\rho\bar{v}\bar{v}) = -\rho \nabla \left(V(\bar{x}) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right)$$

$\Rightarrow$ muodollisesti hyvin lähellä paitsi termi $\propto \hbar^2$, "kvanttipaine"

5. Läpäisy- ja heijastus kertoimet:

$T = \frac{|J_t|}{|J_i|}$, $R = \frac{|J_r|}{|J_i|}$, kun haemme näitä ei ψ:n normituksella ole niin suurta merkitystä.



- sisään tulee $\bar{p}_{inc} = \hbar k_1$
- heijastunut $p_{refl} = -\hbar k_1$
- läpi mennyt $p_{trans} = \hbar k_2$ ($k_2 \neq k_1$ mahdollinen, koska potentiaali sirottajan toisella puolella voi olla eri)

Aaltofunktion eri komponentit:

$$\begin{cases} \psi_{inc} = Ae^{i(k_1 x - \omega_1 t)}, & \hbar\omega_1 = E_{inc} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \\ \psi_{refl} = Be^{-i(k_1 x + \omega_1 t)}, & \hbar\omega_1 = E_{refl} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \\ \psi_{trans} = Ce^{i(k_2 x - \omega_2 t)}, & \hbar\omega_2 = E_{trans} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V = E_{inc} = \hbar\omega_1 \end{cases}$$

(kirjassa voi olla typo!)

Lasketaan virrantiheydet: $J_i = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_{inc}^* \frac{\partial \psi_{inc}}{\partial x} - \psi_{inc}\frac{\partial \psi_{inc}^*}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{2mi} 2ik_1|A|^2$

$$= \frac{\hbar}{m} k_1 |A|^2$$

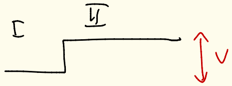
$$J_{refl} = -\frac{\hbar}{m} k_1 |B|^2$$ (kirjassa voi olla typo!)

$$J_{trans} = \frac{\hbar}{m} k_2 |C|^2$$

Joten $T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 \frac{k_2}{k_1}$

$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$

Jotta saamme parametrit A, B, C (ja k_2), tarvitaan S-yhtälön ratkaisu.

6. Potentiaaliporras: 

$E > V$ oletus

alueessa I: pelkkä liike-energia $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi$, $\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = E$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k_1^2\psi$$

alueessa II: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = (E-V)\psi$, $\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k_2^2\psi$$

Ratkaisut molemmissa alueissa <u>yleisesti</u>:

$$\psi_I = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\psi_{II} = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

tämä termi kuvaa oikealta tulevaa tasoaaltoa $\Rightarrow D = 0$

läpi mennyt osa

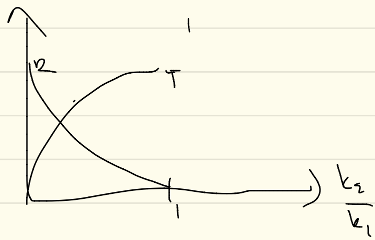
Aaltofunktio ja sen derivaatta jatkuvia $x=0$:ssa

$$\Rightarrow \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Leftrightarrow A + B = C$$

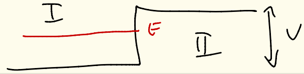
$$\Rightarrow \frac{\partial\psi_I}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial\psi_{II}}{\partial x}\Big|_{x=0} \Leftrightarrow (A-B)k_1 = k_2 C$$

$$\Rightarrow \frac{C}{A} = \frac{2}{1 + k_2/k_1}, \quad \frac{B}{A} = \frac{1 - k_2/k_1}{1 + k_2/k_1} \Rightarrow \boxed{T = \frac{4k_2/k_1}{(1 + k_2/k_1)^2}, \quad R = \left(\frac{1 - k_2/k_1}{1 + k_2/k_1}\right)^2}$$

Esim. $k_2 = 0 \Rightarrow E = V \Rightarrow \underline{T = 0}$



7. Porras, kun $E<V$



Alueessa I ratkaisu sama kuin aikaisemmin

Alueessa II: $\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = \kappa^2\varphi$, $\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = V-E > 0$

$$\Rightarrow \varphi_{II} = Ce^{-\kappa x}$$

Vaaditaan taas jatkuvuutta 0:ssa

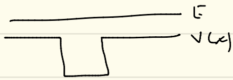
$$\Rightarrow \begin{aligned} A+B &= C \\ ik_1A - ik_1B &= -\kappa C \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} 1+\frac{B}{A} &= \frac{C}{A} \\ 1-\frac{B}{A} &= i\frac{\kappa}{k_1}\frac{C}{A} \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} \frac{C}{A} &= \frac{2}{1+i\kappa/k_1} \\ \frac{B}{A} &= \frac{1-i\kappa/k_1}{1+i\kappa/k_1} = \frac{z}{z^*} \end{aligned}$$

eli $\left|\frac{B}{A}\right|^2 = R = 1$, $T=0$

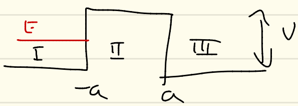
$T=0$ seuraa virrantiheyden häviämisestä

$$j_t = \frac{\hbar}{2mi}|C|^2\left(e^{-\kappa x}\frac{\partial}{\partial x}e^{-\kappa x} - e^{-\kappa x}\frac{\partial}{\partial x}e^{-i\kappa x}\right) = 0$$

(jotta "nopeus" voisi olla nollasta poikkeava tarvitsemme vaihegradientin)

Laskarissa: 

tapaus.

Tapaus 

$E<V$ Demo applet.

Alueessa I: $\varphi_I = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$, $E = \hbar^2k_1^2/2m$

II: $\varphi_{II} = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$, $\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = V-E$ (Huom. $e^{\kappa x}$ myös mahdollinen)

III: $\varphi_{III} = Fe^{ik_1x}$, $E = \hbar^2k_1^2/2m$

8. $T = \left|\frac{F}{A}\right|^2$ ja $R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$

Jatkuva ja jatkuva derivaatta $x=-a$:ssa JA $x=a$:ssa

$$\Rightarrow e^{-ik_1 a} + \frac{B}{A}e^{ik_1 a} = \frac{C}{A}e^{-\kappa a} + \frac{D}{A}e^{\kappa a}$$

$$ik_1\left[e^{-ik_1 a} - \frac{B}{A}e^{ik_1 a}\right] = \kappa\left[\frac{C}{A}e^{-\kappa a} - \frac{D}{A}e^{\kappa a}\right]$$

$$\frac{C}{A}e^{\kappa a} + \frac{D}{A}e^{-\kappa a} = \frac{F}{A}e^{ik_1 a}$$

$$\kappa\left[\frac{C}{A}e^{\kappa a} - \frac{D}{A}e^{-\kappa a}\right] = ik_1\frac{F}{A}e^{ik_1 a}$$

$\Rightarrow$ 4 yhtälöä, $\frac{B}{A}, \frac{C}{A}, \frac{D}{A}, \frac{F}{A}$ $\Rightarrow$ ratkaise

$$\Rightarrow \frac{1}{T} = \left|\frac{A}{F}\right|^2 = 1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_1^2 - \kappa^2}{k_1 \kappa}\right)^2 \sinh^2(2\kappa a) \Rightarrow \boxed{T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\frac{V^2}{E(V-E)}\sinh^2(2\kappa a)}, \quad E < V}$$

Kun $V \to 0$ tai $a \to 0$, este katoaa

$\Rightarrow T = 1$ OK!

Muuten kun a kasvaa tai V kasvaa, T putoaa nopeasti sinh tämän vuoksi. T on kuitenkin nollasta poikkeava

$\Rightarrow$ tunnelointi todennäköisyys > 0!

Jos $E > V$: (katso kirja) $\Rightarrow T = \dfrac{1}{1 + \frac{1}{4}\frac{V^2}{E(E-V)}\sin^2(2k_2 a)}$, $\dfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V$

- Matlab demo: $T < 1$ vaikka $E > V$

  $T \neq 0$ kun $E < V \to$ tunnelointi

  T:ssä voi olla resonansseja!

Vetyatomien fuusio & tunnelointi

+ ⟷ + Coulombin repulsio $E_c \sim \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$ $r \approx 2\,\mathrm{fm}$ esim.

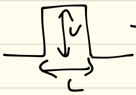
$\Rightarrow$ $E_c \sim 1\,\mathrm{MeV}$ eli näin suuri kineettinen energia tarvitaan jotta ytimet voivat päästä toistensa lähelle

$E_c = k_B T \Rightarrow T \approx 12\cdot 10^9\,\mathrm{K}$ oikeasti $T_{sun} \approx 16\cdot 10^6\,\mathrm{K}$.

$\Rightarrow$ Klassisesti ytimien ei pitäisi päästä riittävän lähelle fuusioituakseen.

$k_B T_{sun} = 1400\,\mathrm{eV} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$ $\Rightarrow$ ytimet voivat päästä noin 10^{-12} metrin päähän.

Eivät riittävän lähellä vahvalle ydinvoimalle.



$\rightarrow$ $T = 16\left(\frac{E}{V}\right) e^{-4\sqrt{2mVL^2/\hbar^2}}$ very roughly

$\Rightarrow$ Pitää auringon käynnissä.

$\frac{2mVL^2}{\hbar^2} \sim \frac{\text{Vallin korkeus}}{\text{perustilan energia montussa}}$