KVANTTIMEKANIIKKA I A

FYSA 231 Kevät 2010

Luennot: 12.1. – 25.2 = 7 × 2 × 2 = 28 tuntia
(varaa jättää 8 tuntia väliin)
Paikka: FYS1 12:15 – 14:00
Luennoitsija: Veli Kolhinen, FL208

Laskuharjoitukset: 21.1 – 4.3, 7 kertaa
(varaa jättää 2 väliin)
Paikka: YN121 10:15 - 12:00, 14:15 - 16:00, 16:15 - 18:00
ohjaaja: Ville Kotimäki YN251
Palautus: klo 16:00 FYS1 eteen, ke

Suoritus:

kuulustelu	48 p
labrat	12 p
harjoitukset	12 p
	72 p

tai

tentti	48 p
labrat	12 p
	60 p

Laboratoriotyöt:
- e- diffraktio
- spektrometri, hila ja prisma
- pot. kuoppa

Kirjallisuutta: Griffiths: Introduction to Quantum mechanics
Mandl: Quantum mechanics.
Bransden & Joachain: Quantum mechanics

1. Johdantoa

klassinen fysiikka <u>ei</u> onnistu kuvaamaan atomaarisia järjestelmiä.

1) Planck, mustan kappaleen säteily kvantittunut, $E = h\nu n$, missä h = Planckin vakio on luonnonvakio ($\hbar = h/2\pi$, redusoitu Planckin vakio) (1900)

2) Einstein, valosähköinen ilmiö (1905) valokvantit

3) Bohrn atomimalli 1913

4) Franckin - Hertzin koe 1914 (Diskreetit energiatilat)

5) Sternin - Gerlachin koe 1922 pyörimismäärä kvantittunut

6) Comptonin sironta 1923 fotonit siroavat atomista kuin hiukkaset

7) Elektronin diffraktio
   → hiukkasella aaltoluonne
   De Broglie (1923)
   G.P. Thomson (1927)

2. Aaltomekaniikkaa

2.0. Kvanttimekaniikan postulaatit

P1: Kvanttimekaanisen systeemin tilaa hetkellä t kuvaa kompleksiarvoinen aaltofunktio $\psi(t,\vec{x})$. Aaltofunktiot ovat lineaarisen, sisätulolla varustetun, Hilbertin avaruuden alkioita. Aaltofunktiot ψ ja ϕ edustavat samaa tilaa jos $\psi = c\phi$ ja $|c|=1$ (vaihetekijä)

P2: Jokaista observaabelia eli mitattavaa fysikaalista suuretta A vastaa lineaarinen ja hermiittinen operaattori $\hat{A}$, joka operoi aaltofunktioihin $\psi(t,\vec{x})$
[Tällöin $\hat{A}$:lla on ominaisarvoyhtälö $\hat{A}\psi_a = a\psi_a$, reaaliset ominaisarvot a ja ortonormaalit, täydellisen kannan muodostavat ominaisarvofunktiot ψ_a]

P3: Observaabeli A:n mittauksessa mahdollisia arvoja ovat vain operaattori $\hat{A}$:n ominaisarvot a.

P4: Jos systeemi on tilassa, jota kuvaa aaltofunktio ψ, todennäköisyys sille, että A:ta mitattaessa saadaan tulos a on $|c_a|^2 = |\int d^3x\, \psi_a^* \psi|^2$ ts. observaabelin A odotusarvo $\langle A \rangle = \int d^3x\, \psi^* \hat{A} \psi$

P5: Kanoninen kvantisointi: Klassisia paikka ja liikemääräsuureita x_i, p_i vastaa operaattorit $\hat{x}_i$ ja $\hat{p}_i$ ja ne toteuttavat kanoiset kommutaatiosäännöt $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$
$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ $\quad (\hbar = h/2\pi,\ i,j = 1,2,3)$

P6: Systeemin tilaa kuvaavan aaltofunktion aikakehitys noudattaa Schrödingerin yhtälöä

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t,\vec{x})}{\partial t} = \hat{H}\psi(t,\vec{x})$$

missä Hamiltonin operaattori $\hat{H}$ muodostetaan kanonisen kvantisoinnin avulla Hamiltonin funktiosta
$H(t, \vec{x}, \vec{p}) \longrightarrow \hat{H}(t, \vec{x}, \vec{p})$

Välihuomautus:

Hilbertin avaruus on täydellinen sisätuloavaruus eli kyseessä on vektoriavaruus jossa jokainen Cauchyn jono suppenee

vektoriavaruuden V vektoreille $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$ ja skalaareille a ja b pätee

1° $\vec{u} + (\vec{v} + \vec{w}) = (\vec{u} + \vec{v}) + \vec{w}$
2° $\vec{v} + \vec{w} = \vec{w} + \vec{v}$
3° $\vec{0} + \vec{v} = \vec{v}$
4° $\forall \vec{v} \; \exists -\vec{v}$ s.e $\vec{v} - \vec{v} = \vec{0}$
5° $a(\vec{v} + \vec{w}) = a\vec{v} + a\vec{w}$
6° $(a+b)\vec{v} = a\vec{v} + b\vec{v}$
7° $a(b\vec{v}) = (ab)\vec{v}$
8° $1\vec{v} = \vec{v}$ (1 = skalaari)

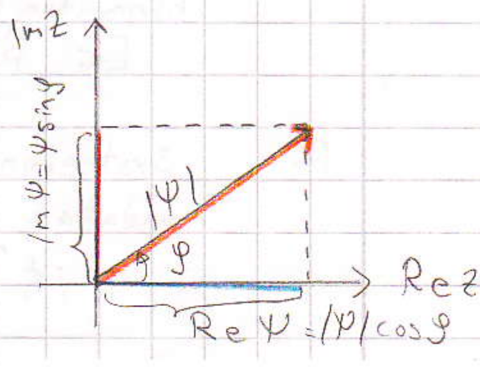
kertaa itse FMPI tai LAG

2.1 Aaltofunktio (P1)

$\boxed{\text{Kvanttimekaniikassa systeemin tilaa kuvaa aaltofunktio } \Psi(t, \vec{x}) \in \mathbb{C}}$

aika, paikka

Ψ sisältää kaiken tiedon järjestelmästä.
Ψ on kompleksinen



$\Psi = Re\,\Psi + i\,Im\,\Psi$
$= |\Psi|\cos\varphi + i|\Psi|\sin\varphi = e^{i\varphi}|\Psi|$

$\mathrm{Re}\,\Psi$ = Ψ:n reaaliosa $\in R$
$\mathrm{Im}\,\Psi$ = Ψ:n imaginaarinen osa $\in R$
i = imaginaariyksikkö
$|\Psi|$ = Ψ:n itseisarvo ; $|\Psi|^2 = (\mathrm{Re}\,\Psi)^2 + (\mathrm{Im}\,\Psi)^2$
φ = Ψ:n vaihekulma , $\varphi = \arctan\left(\frac{\mathrm{Im}\,\Psi}{\mathrm{Re}\,\Psi}\right) \in [0, 2\pi]$
$e^{i\varphi}$ = vaihetekijä , $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi \in \mathbb{C}$; $|e^{i\varphi}| = 1$

Kompleksikonjugointi: $\Psi^* = \mathrm{Re}\,\Psi - i\,\mathrm{Im}\,\Psi$

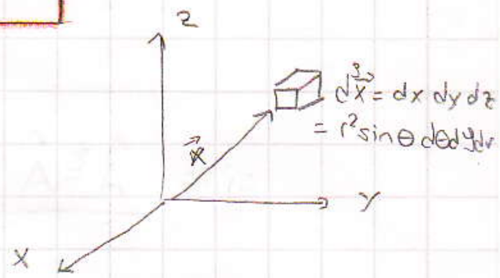
$$\boxed{|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi}$$

vaihetekijä e^{ia} $(a \in R)$ ei vaikuta $|e^{ia}\Psi| = \underbrace{|e^{ia}|}_{=1}|\Psi|$

Määritellään aaltofunktioiden sisätulo

$$\boxed{\underbrace{\langle \phi | \Psi \rangle}_{\text{Diracin merkintä}} = \int d^3\vec{x}\, \phi^*(t,\vec{x})\, \Psi(t,\vec{x})}$$

Diracin merkintä
(lisää tästä myöhemmin).



Todennäköisyys tulkinta

$\Psi^*(t,\vec{x})\,\Psi(t,\vec{x})\,d^3\vec{x}$ = todennäköisyys että hiukkanen on tilav. alk. $d^3\vec{x}$

Todennäköisyys, että hiukkanen on jossain = 1

$$\boxed{\int_{\text{koko avaruus}} d^3\vec{x}\, \Psi^*(t,\vec{x})\, \Psi(t,\vec{x}) = 1}$$

Normitus

2.2 Operaattorit

P2: Jokaista observaabelia vastaa lineaarinen ja hermiittinen operaattori $\hat{A}$

* $\hat{A}$:lla operoidaan aaltofunktioon $\hat{A}\Psi(t,\vec{x}) = \phi(t,\vec{x})$
* lineaarisuus $\hat{A}(\alpha\Psi_1 + \beta\Psi_2) = \alpha\hat{A}\Psi_1 + \beta\hat{A}\Psi_2$
* Määritellään A^{+} (A "miekka")

$$\boxed{\int d^3\vec{x}\, \Psi^* A^{+} \phi = \int d^3\vec{x}\, (A\Psi)^* \phi}$$

eli $\boxed{\langle \Psi | A^{+}\phi \rangle = \langle \hat{A}\Psi | \phi \rangle}$ Dirac

* Hermiittisyys: $\boxed{\int d^3\vec{x}\, \Psi^* A^{+} \phi = \int d^3\vec{x}\, \Psi^* \hat{A} \phi}$

eli $\boxed{\langle \Psi | \hat{A}^{+}\phi \rangle = \langle \hat{A}\Psi | \phi \rangle = \langle \Psi | \hat{A}\phi \rangle}$

siis $\underline{\hat{A}^{+} = \hat{A}}$

Hermiittiselle operaattorille $\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n$ pätee

1° Ominaisarvot ovat reaaliset $a_n \in \mathbb{R}$
2° Eri ominaisarvoihin liittyvät ominaisfunktiot Ψ_n ovat ortonormaalit $\int \Psi_m \Psi_n d^3\bar{x} = \delta_{mn}$
3° Ominaisfunktiot Ψ_n muodostavat täydellisen kannan $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$ missä $c_n = \int d^3x\, \Psi_n \Psi$

1° Olk. $A\Psi_i = a_i\Psi_i$ $\quad \int d^3x\, \Psi_i^* A \Psi_i = a_i \int d^3x\, \Psi_i^* \Psi_i$

toisaalta $\int d^3x\, \Psi_i^* A \Psi_i \overset{\text{Hermiittisyys}}{=} \int d^3x\, \Psi_i^* A^{+} \Psi_i$

$$= \int d^3x\, (A\Psi_i)^* \Psi_i = a_i^* \int d^3x\, \Psi_i^* \Psi_i$$

eli $a_i^* = a_i$ eli on reaalinen.

intuitiivisesti **ok** sillä fysikaaliset suureet on **reaalisia**

2° $(a_n - a_m)\int d^3x\, \psi_n^* \psi_m = \int d^3x\, (A\psi_n)^* \psi_m - \int d^3x\, \psi_n^* A\psi_m$

$$= \int d^3x\, \psi_n^* A^+ \psi_m - \int d^3x\, \psi_n^* A\psi_m \overset{A^+ = A}{=} 0$$

siis $(a_n - a_m)\int d^3x\, \psi_n^* \psi_m = 0$

jos $a_n \neq a_m$ $\int d^3x\, \psi_n^* \psi_m = 0$ eli ortogonaaliset

jos $n = m$ $\int d^3x\, \psi_m^* \psi_m = 1$

eli $\int d^3x\, \psi_m^* \psi_n = \delta_{mn}$

$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$ (Dirac)

3° Jätetään matemaatikkojen huoleksi.

2.2.1 Kommutaattori

Määritellään kommutaattori $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

lisää demoissa.

2.3 Mittaukset (P3 & P4)

Observaabelin mittauksessa mahdollisia arvoja ovat vain operaattorin om. arvot.

Olkoon $\psi = \sum_m c_m \psi_m$, jolle $A\psi_m = a_m \psi_m$

odotusarvo tilassa ψ $\langle \hat{A} \rangle = \int d^3x\, \psi^* \hat{A}\, \psi =$

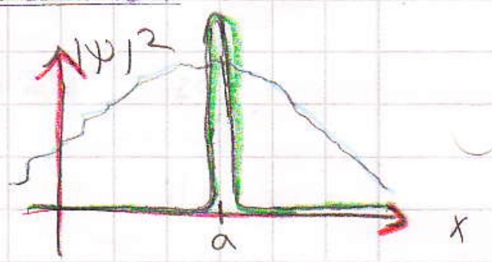
$$= \sum_{n,m} c_n^* c_m \int d^3x\, \psi_n^* \underbrace{A\,\psi_m}_{a_m \psi_m} = \sum_{n,m} \underbrace{c_n^* c_m}\, a_m\, \delta_{nm}$$

"todennäköisyysamplitudi"

$$= \sum_n a_n \left| \int d^3x\, \psi_n^* \psi \right|^2 \qquad \text{"} |c_n|^2$$

tulkinta $|c_n|^2$ on todennäköisyys sille että tilaan ψ kohdistettu observaabelin A mittaus antaa tuloksen a_n.

2.3.1 Aaltofunktion romahtaminen



Jos hiukkasen paikka mitataan ja tulos on a niin tällöin aaltofunktio "piikittyy" tähän kohtaan eli romahtaa. Ennen mittausta tiedettiin vain todennäköisyys että niin käy.

Mitä tämä tarkoittaa? → Eri tulkintoja

Kokeelliselle fyysikolle filosofiaa ja metafysiikka.
Lue itse Griffiths s 2–5.

2.4 Kanoninen kvantisointi

(kreik. κανων = mitta, sääntö)

paikka $\vec{x} \longrightarrow$ operaattori $\hat{\vec{x}} \rightarrow$ ominaisarvo $\hat{\vec{x}}\,\phi(\vec{x}) = \vec{x}\,\phi(\vec{x})$

liikemäärä $\vec{p} \longrightarrow$ operaattori $\hat{\vec{p}} \rightarrow$ ominaisarvo $\hat{\vec{p}}\,\phi(x) = -i\hbar\nabla\phi(x)$

$$\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$$

tutkitaan asiaa

$$\hat{p}_k \hat{x}_\ell \phi = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}\right)\hat{x}_\ell \phi = -i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} x_\ell}_{\delta_{k\ell}} \phi - i\hbar\, x_\ell \frac{\partial \phi}{\partial x_k}$$

$$\hat{x}_\ell \hat{p}_k \phi = -i\hbar\, x_\ell \frac{\partial}{\partial x_k} \phi$$

$$\rightarrow \quad [\hat{x}_\ell, \hat{p}_k]\phi = +i\hbar\, \delta_{k\ell}\, \phi$$

Samoin $[\hat{x}_k, \hat{x}_\ell]\phi = 0$ ja $[\hat{p}_k, \hat{p}_\ell] = 0$

Eli kanoniset kommutaatio relaatiot

$$\boxed{\begin{array}{l} [\hat{x}_k, \hat{x}_l] = 0 \quad , \quad [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0 \\ [x_k, \hat{p}_l] = +i\hbar\,\delta_{kl} \end{array}}$$ P5

2.5 Schrödingerin yhtälö

kvanttimekaniikan liikeyhtälö (vrt. $\vec{F} = m\frac{\partial^2 x}{\partial t^2}$ klassinen mek.)

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,\vec{x}) = \hat{H}\,\Psi(t,\vec{x})}$$ SY

Energia operaattori
= Hamiltonin operaattori

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

vapaalle hiukkaselle: $E \overset{\text{klassisesti}}{=} \frac{\bar{p}^2}{2m} \xrightarrow[\text{kvantisointi}]{\text{kanoninen}} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

Potentiaalienergia mukaan: $E = \frac{\bar{p}^2}{2m} + V(t,\bar{x}) \xrightarrow{QM} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(t,\bar{x})$

P6: $$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\Psi(t,\bar{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(t,\bar{x})\right]\Psi(t,\bar{x})}$$

eli $\hat{H} = \hat{H}(t\,\bar{x},\bar{p})$ yleinen 1-hiukkasen SY

Jatkossa aina $V(t,\bar{x}) = V(\bar{x})$

sijoitetaan yrite $\Psi(t,\bar{x}) = T(t)\,\phi(\bar{x})$

$$\rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[T(t)\phi(\bar{x})\right] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{x})\right]\left(T(t)\,\phi(\bar{x})\right)$$

$\frac{\partial}{\partial t}T(t) = \frac{dT}{dt}$

operoi

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt}\phi(\hat{x}) = T(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}D^2 + V(\bar{x})\right]\phi(\bar{x}) \quad \Big| : T(t)\phi(\hat{x})$$

$$\underbrace{\frac{i\hbar \frac{dT(t)}{dt}}{T(t)}}_{\text{aika riippuvuus}} = \underbrace{\frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}D^2 + V(\bar{x})\right]\phi(\hat{x})}{\phi(\hat{x})}}_{\text{paikkariippuvuus}} = \text{vakio} \overset{\text{Merk.}}{=} E$$

Aika: $$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = E\,T(t)$$ Tavallinen DY

$$i\hbar \int_{T(t_0)}^{T(t)} \frac{dT(t)}{T(t)} = \int_{t_0}^{t} E\,dt$$

$$\ln\left(\frac{T(t)}{T(t_0)}\right) = -\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)$$

eli $$\boxed{T(t) = \underbrace{T(t_0)}_{\substack{\text{vakio} \\ \in \mathbb{C}}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}}_{\text{vaihetekijä}}}$$

Paikalle: $$\boxed{\begin{gathered}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}D^2 + V(\bar{x})\right]\phi(\bar{x}) = E\,\phi(\bar{x}) \\ \text{eli} \quad \hat{H}\,\phi(\bar{x}) = E\,\phi(\bar{x})\end{gathered}}$$

Ajasta riippumaton stationaarinen SY (sSY)

ominaistila

ominaisarvo

eli $\Psi(t,\bar{x})$ yleisesti $$\boxed{\Psi(t,\bar{x}) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\phi_n(\bar{x})}$$

- systeemin $\hat{H}$ määrää millaiset ϕ_n systeemillä on
- tarvitaan alkuehtoja kertointen c_n määräämiseksi

eli SY:n ratkaisut voidaan laskea, kun tunnetaan sSY:n ratkaisut ja ominaisarvot E_n sekä alkuehto

Energian ominaisarvo?

$$\langle E \rangle = \int d^3\bar{x}\, \psi^*(t,\bar{x})\, \hat{H}\, \psi(t,\bar{x}), \qquad \text{siis } \psi(t,\bar{x}) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)}\phi_n(\bar{x})$$

$$= \sum_n E_n \underbrace{\left| c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \right|^2}_{|c_n|^2} \underbrace{\int d^3\bar{x}\, \phi_n^* \phi_n}_{1}$$

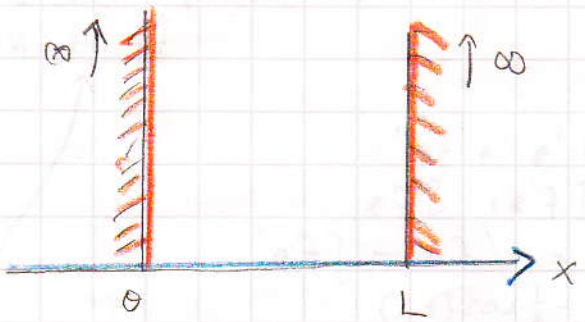
todennäköisyys että E_n

Eli ei ole aikariippuvuutta, siis energia on liikevakio

siis jos mittaat ytimen viritystilojen energioita
ne ovat samoja joka viikonpäivä

3. 1-ul. sovelluksia

3.1 Äärettömän syvä potentiaalikuoppa



(hiukkanen äärettömän syvässä pot. kuopassa)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{kun } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{kun } x < 0 \text{ tai } L < x \end{cases}$$

Etsitään ratkaisuja $E < \infty$, joten $\phi(x) = 0$, kun $x<0$, $L<x$

$0 \leq x \leq L$ SSY $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \underbrace{V(x)}_{=0}\phi(x) = E\,\phi(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) = E\,\phi(x)$$

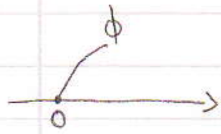
$$\phi'' + \frac{2m}{\hbar^2}E\,\phi(x) = 0 \qquad \text{merk } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (k \geq 0)$$

$$\phi'' + k^2\phi(x) = 0$$

harmoonisen värähtelijän diff. yht!
(kertaa itse!)

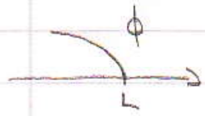
yleinen ratkaisu $\phi = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

Reunaehdot: ϕ on jatkuva



$\underline{x=0}$ $\quad \overset{x<0}{0} = A\sin(k\cdot 0) + B\cos(k\cdot 0) = 0 + B$

$\underline{B = 0}$



$\underline{x=L}$ $\quad A\sin(kL) = \overset{L<x}{0}$

$A \neq 0$ muutoin $\phi = 0$ kaikkialla

$\sin(kL) = 0$ eli $kL = \cancel{0}, \pm\pi, \pm 2\pi, \pm \ldots$

ei käy muutoin $\phi = 0$ kaikkialla

$\sin\left(-\frac{\pi x}{L}\right) = -\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ sama tila eri vakio

→ riittää +

siis fysikaalisesti hyväksyttävät k:n arvot

$k = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \frac{3\pi}{L} \ldots \qquad k_n = \frac{n\pi}{L} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$

Aaltofunktio: $\phi_n(x) = A\sin(k_n x)$

normitusvakio.

Normitus $\quad 1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi^* \phi = \int_0^L dx |A|^2 \sin^2(k_n x) = |A|^2 \frac{1}{2} L$

cos. int (x)

- - - - - -

$\int \sin^2 kx = ?$ $\qquad D fg = f'g + fg'$

$/fg = \int f'g + \int fg'$

$\int f'g = /fg - \int fg'$

nyt $\quad f' = \sin(kx) \quad$ eli $\quad f = -\frac{1}{k}\cos(kx)$

$g = \sin(kx) \quad$ eli $\quad g' = k\cos(kx)$

$$\int_0^L \sin(kx)\sin(kx)dx = \Big/_0^L -\frac{1}{k}\cos(kx)\sin(kx) - \int_0^L -\frac{1}{k}\cos(kx)k\cos(kx)\,dx$$

$$= 0 + \int_0^L \cos(kx)\,dx = \int_0^L (1 - \sin^2(kx))\,dx$$

$$2\int_0^L \sin(kx)\sin(kx) = \Big/_0^L x \qquad \text{eli} \qquad \int_0^L \sin^2(x) = \frac{1}{2} L$$

- - - - - -

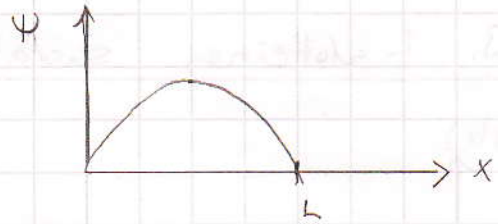
$|A|^2 = \frac{2}{L}$ $\qquad A = \sqrt{\frac{2}{L}}$ (valitaan vaihe: ei vaikuta fysiikkaan)

$$\boxed{\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \qquad n = 1, 2, 3 \ldots}$$

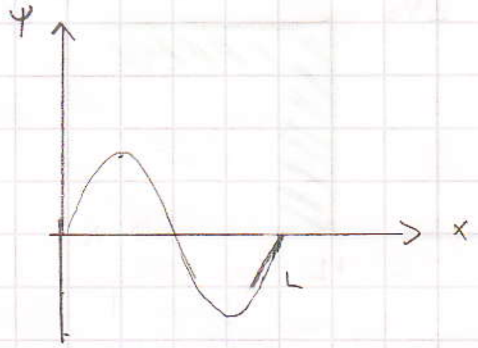
$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad \text{eli} \quad \boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \qquad n = 1, 2, 3}$$

kuvaajat:
ks. kirja
s. 32.

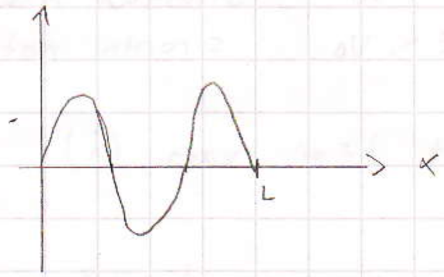
$n = 1$



$n = 2$



$n = 3$



3.2 Pariteetti

Määritellään pariteettioperaattori $\boxed{\hat{P}\phi(\bar{x}) = \phi(-\bar{x})}$
siis $\bar{x} \longrightarrow -\bar{x}$

Aaltofunktion pariteetti on $\hat{P}$:n ominaisarvo

Mahdolliset ominaisarvot ovat ± 1

Parillisille funktioille:

$$\hat{P}\,\phi(\bar{x}) = \phi(-\bar{x}) = \phi(\bar{x})$$

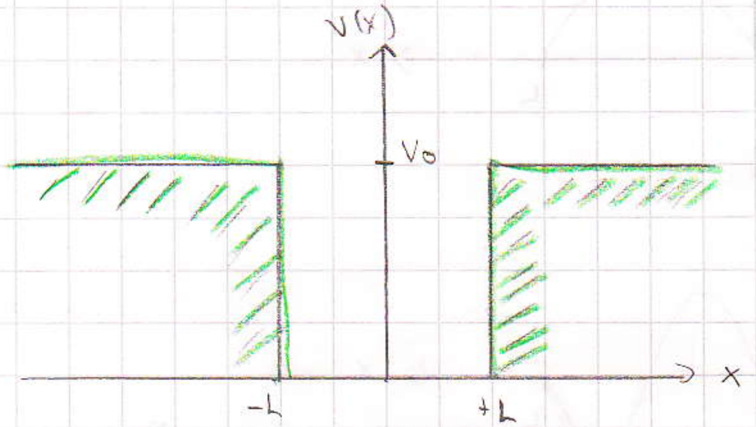
eli o.a. +1 → "positiivinen pariteetti"

Parittomille funktioille

$$\hat{P}\,\phi(\bar{x}) = \phi(-\bar{x}) = -\phi(\bar{x})$$

eli o.a −1 → "negatiivinen pariteetti"

3.3. 1-ulotteinen suorakulmainen kuoppa



$$V(x) = \begin{cases} +V_0 & |x| \geq L \\ 0 & |x| < L \end{cases}$$

i) $E < V_0$ sidotut tilat

ii) $E > V_0$ sironta potentiaalikuopasta, jatkuva spektri

Käydään nyt läpi vain (i) $E < V_0$

$|x| \leq L$ SSY $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) = E\,\phi(x)$

$$\phi''(x) + k^2\phi(x) = 0 \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Yleinen ratkaisu $\quad \phi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

$|x| > L$ SSY $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) + V_0\,\phi(x) = \phi(x)\,E$

$$\phi''(x) - \frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)\,\phi(x) = 0$$

merk. $q^2 = +\frac{2m}{\hbar}(V_0 - E) \qquad \phi'' - q^2\phi = 0$

yleinen ratkaisu $\phi = D e^{qx} + C e^{-qx}$ $(q>0)$.

Reunaehdot: $\begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi|^2 < \infty & \text{(todennäköisyystulkinta)} \\ \text{jatkuvuus } \phi \text{ ja } \phi' \end{cases}$

$x > L$ on $D = 0$ ja $x < -L$ on $C = 0$

eli $\boxed{\phi(x) = \begin{cases} D e^{+qx} & x \leq -L \\ A\sin(kx) + B\cos(kx) & -L < x < L \\ C e^{-qx} & x \geq L \end{cases}}$

ϕ' ja ϕ jatkuvia? ϕ sijoittamalla.

ϕ'? potentiaalissa on epäjatkuvuuskohdat $\pm L$

tarkastella $+L$ (vähän matematiikka :))

SSY $\phi''(x) - \frac{2m}{\hbar}[V(x) - E]\phi(x) = 0$ $/ \cdot \int_{L-\varepsilon}^{L+\varepsilon} dx$

$$\int_{L-\varepsilon}^{L+\varepsilon} dx \frac{d}{dx}\phi'(x) = \frac{2m}{\hbar}\int_{L-\varepsilon}^{L+\varepsilon} dx [V(x) - E]\phi(x) = \frac{2m}{\hbar}\int_{L-\varepsilon}^{L}[\ ]\phi dx + \frac{2m}{\hbar}\int_{L}^{L+\varepsilon}[\ ]\phi dx$$

eli $\phi'(L+\varepsilon) - \phi'(L-\varepsilon) = \frac{2m}{\hbar}\left\{[V(x_\varepsilon^-) - E]\phi(x_\varepsilon^-) + [V(x_\varepsilon^+) - E]\phi(x_\varepsilon^+)\right\}\varepsilon$

int. laskennan väliarvolause

$x_\varepsilon^- \in [L-\varepsilon, L]$ $x_\varepsilon^+ \in [L, L+\varepsilon]$

$\longrightarrow 0$ kun $\varepsilon \longrightarrow 0$

eli $\phi'(x)$ on jatkuva potentiaalin äärellisissä epäjatkuvuuskohdissa

---

int laskennan väliarvolause
f on jatkuva välillä $[a,b]$, niin $\exists\ t \in (a,b)$ s.e.

$$\int_a^b f(x)dx = f(t)(b-a)$$

ϕ:n ja ϕ':n jatkuvuus ehdot

$$\begin{cases} \phi(L) = A\sin(kL) + B\cos(kL) = Ce^{-qL} \\ \phi(-L) = -A\sin(kL) + B\cos(kL) = De^{-qL} \\ \phi'(L) = kA\cos(kL) - kB\sin(kL) = -qCe^{-qL} \\ \phi'(-L) = kA\cos(kL) + kB\sin(kL) = +qDe^{-qL} \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} \cos(-a) = \cos(a) \\ \sin(-a) = -\sin(a) \end{pmatrix}$$

Eli 4 yhtälöä ja 4 tuntematonta.

Seuraa $AB = 0$ eli $A = 0$ (parilliset) tai $B = 0$ (parittomat)

$\rightarrow$ 2 ratkaisuluokkaa

Parilliset ratkaisut: $A = 0$

$$\begin{cases} B\cos(kL) = Ce^{-qL} = De^{-qL} & ① \\ kB\sin(kL) = qCe^{-qL} = qDe^{-qL} & ② \end{cases}$$

① $\longrightarrow$ $C = D = Be^{qL}\cos(kL)$

②:① $\quad k\tan(kL) = q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{(V_0 - E)}_{>0}} \in \mathbb{R}$, $k \in \mathbb{R}$ ja $E > 0$

$$= \underbrace{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}}_{k}\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}$$

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

$$\boxed{\tan(kL) = \sqrt{\frac{V_0}{E} - 1} = \sqrt{\frac{2mV_0}{k^2\hbar^2} - 1}} = \sqrt{\frac{2mV_0L^2}{(kL)^2\hbar^2} - 1}$$

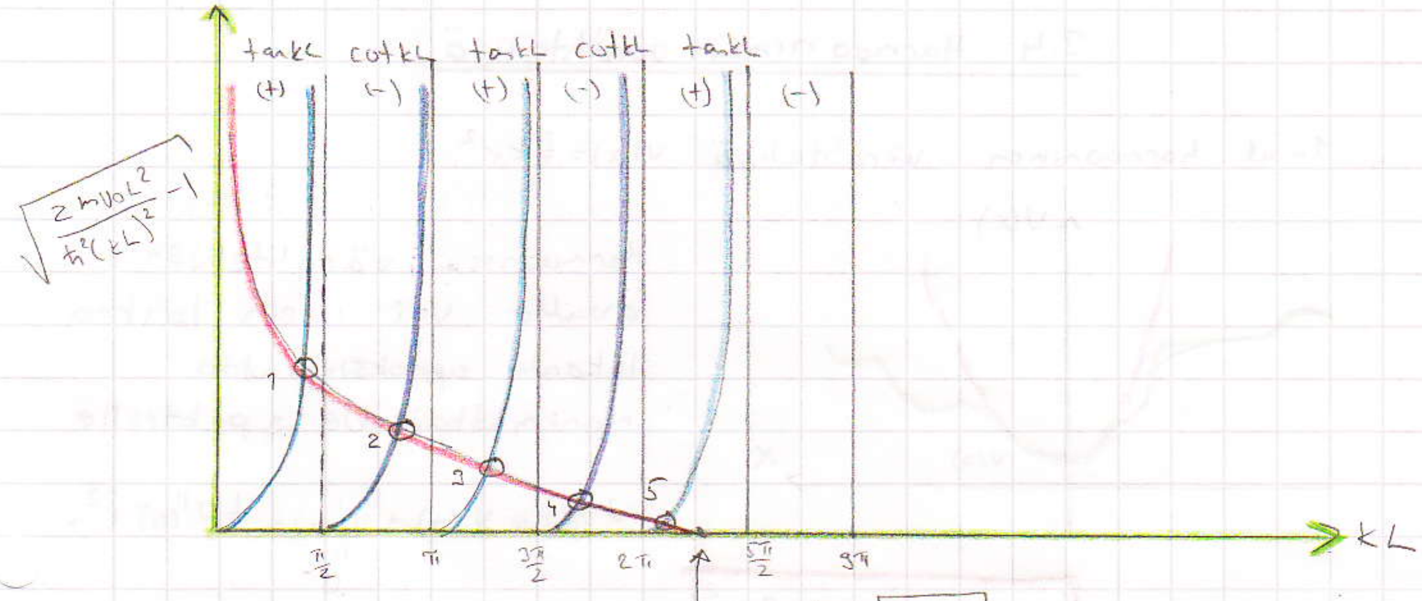
transkendentti yhtälö, k ratkaistava numeerisesti

Parilliset ratkaisut: $B = 0$

$$\begin{cases} A\sin(kL) = Ce^{-qL} = -De^{-qL} \\ kA\cos(kL) = -qCe^{-qL} = qDe^{-qL} \end{cases}$$

$$\begin{cases} C = -D = Ae^{qL}\sin(kL) \\ k\cot(kL) = -q \end{cases}$$

$$\boxed{-\cot(kL) = \sqrt{\frac{V_0}{E} - 1} = \sqrt{\frac{2mV_0}{k^2\hbar^2} - 1}} = \sqrt{\frac{2mV_0L^2}{(kL)^2\hbar^2} - 1}$$



$$kL = \frac{L}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$$

Yo. kuvassa 5 eri ratkaisua. (vain kuva voi olla muutoinkin)
→ 5 kvanttitilaa $\quad E_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m} \quad$ missä k_n = (kL):n numeerinen arvo

diskreetit ja degeneroitumattomat E-tilat.

perustila: $\quad E_1 = \frac{\hbar^2 (k_1 L)^2}{2mL^2} \quad$ (k_1L kuvasta)

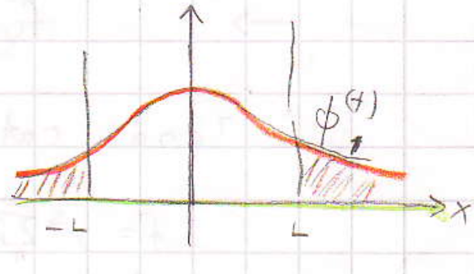
jos $\frac{L}{\hbar}\sqrt{2mV_0} < \pi/2$ eli $L^2 V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$

on vain perustila. Eli L ja V_0 vaikuttavat tilojen määrään. → Mitä isompi kuoppa sitä enemmän tiloja.

1-ul. tapauksessa on aina ainakin perustila!

Hahmotellaan kuvat

$$\phi = \begin{cases} B\cos(k_n x) & |x| \leq 1 \\ B\cos(k_n x)\, e^{qL} e^{-qx} & |x| > 2 \end{cases}$$



$$\phi = \begin{cases} -A\sin(k_n L)\, e^{qL} e^{qx} & x < -L \\ A\sin(k_n L) & -L \leq x \leq L \\ A\sin(k_n L)\, e^{qL} e^{-qx} & x > L \end{cases}$$