

# KVANTMEHAANIKA ALUSED

## 1. Schrödingeri võrrand

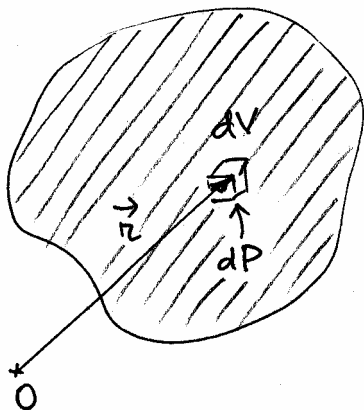
### Lainefunktsioon, osakese leidmise tõenäosus, tõenäosustihedus, Schrödingeri võrrandi üldkuju, tingimused lainefunktsioonile

Eelmises peatükis me vaatasime füüsikanähtusi, mille seletamisel klassikaline füüsika ei olnud rakendatav. Nende nähtuste seletamiseks tuli füüsikasse tuua uued põhimõtted ja nii jõuti järk-järgult mikromaailmas toimuvaid nähtusi kirjeldava teooria – kvantmehaanika - loomisele. Kvantmehaanika – loodi aastatel 1925-1927 W. Heisenbergi, E. Schrödingeri ja P.A.M. Diraci poolt.

Kvantmehaanikas on mikroosakest iseloomustavaks põhisuuruseks lainefunktsioon (kasutatakse veel nimetusi olekufunktsioon ja tõenäosusamplituud)

$$\psi = \psi(\vec{r}, t) ,$$

mis üldjuhul on kompleksarvuline, st tema väärtused erinevate  $\vec{r}$  ja  $t$  korral on kompleksarvud.



Lainefunktsiooni füüsikalise tähenduse andis M. Born, mille järgi lainefunktsioon aja ja asukoha funktsioonina annab osakese leidmise tõenäosuse. Vaatame mingi ruumipunkti  $\vec{r}$  ümbruses olevat ruumielementi  $dV$ . Osakese leidmise tõenäosus vaadeldavas ruumielemendis ajahetkel  $t$  avaldub valemiga

$$dP = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \psi^* \psi dV .$$

Nagu näha, annab lainefunktsiooni mooduli ruut ( $|\psi|^2 = \psi^* \psi$ ) osakese leidmise tõenäosustiheduse

$$\rho = \frac{dP}{dV} = |\psi|^2 ,$$

st ruumiühiku kohta tuleva tõenäosuse.

Lainefunktsioon arvutatakse kvantmehaanika põhivõrrandist -Schrödingeri võrrandist, mille üldkuju on järgmine

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial z^2} \right) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) ,$$

kus  $M$  on vaadeldava osakese mass ja  $U = U(\vec{r}, t)$  tema potentsiaalne energia ( $i$  on imaginaarühik:  $i^2 = -1$ ).

Sulgudes olev teist järku tuletistega avaldis kirjutatakse lühidalt kujul

$$\Delta \psi \equiv \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} ,$$

kus suurust  $\Delta$  nimetatakse Laplace'i operaatoriks. Seda kasutades oleks Schrödingeri võrrandi üldkuju

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) .$$

Nagu näha, on mikroosakese lainefunktsioon ühe kindla diferentsiaalvõrrandi, mille konkreetne kuju sõltub osakese massist ja tema potentsiaalsest energiast, lahendiks. Kuna võrrand sisaldab imaginaarühikut, siis on tema lahend üldiselt kompleksarvuliste väärtustega.

Mis puutub Schrödingeri võrrandi lahendamisse, siis see, nagu diferentsiaalvõrrandi lahendamine ikka, pole enamasti lihtne. Sama probleem on ka mehaanikas, kus osakese liikumise arvutamiseks tuleb lahendada Newtoni II seadusest tulenev diferentsiaalvõrrand ( $\vec{F} = d\vec{p} / dt$ ). Kui mehaanikas on osakese liikumine tema algolekut teades üheselt määratud, siis sama kehtib põhimõtteliselt ka kvantmehaanikas. Erinevus on selles, et nüüd on algoleku andmise korral üheselt määratud suuruseks osakese lainefunktsioon  $\psi(\vec{r}, t)$ , mis määrab ära mikroosakese edaspidise käitumise.

On selge, et kõik Schrödingeri võrrandi lahendid ei ole füüsikaliselt kõlbulikud. Lahendi leidmisel tuleb arvestada nii lainefunktsiooni füüsikalist tähendust kui ka diferentsiaalvõrrandist endast tulenevaid matemaatilisi tingimusi. Võrrandi lahend ehk osakest kirjeldav lainefunktsioon  $\psi(\vec{r}, t)$  peab rahuldama järgmisi tingimusi:

1.  $\psi(\vec{r}, t)$  on ühene ja lõplik,
2.  $\psi(\vec{r}, t)$  ja tema esimesed ruumilised tuletised on pidevad.

Esimene tingimus tuleb lainefunktsiooni tõenäosuslikust tõlgendusest, sest tõenäosustihedus peab igas punktis olema lõplik ja ühene. Teine tingimus on aga tavaline matemaatiline tingimus diferentsiaalvõrrandi, milles on teist järku ruumilised tuletised, lahendile. Nagu me järgnevas näeme, on need tingimused osakese füüsikaliste olekute kindlakstegemisel väga olulised.

Lainefunktsiooni tõenäosuslikust tõlgendusest saame veel ühe tingimuse, mida nimetatakse lainefunktsiooni normeerimistingimuseks. Juhul kui integraal  $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV$  üle kogu ruumi on lõplik, võime nõuda, et

$$\int_{\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 .$$

See tingimus on saadud järgmisest kaalutlusest: kuna tõenäosus osakese leidmiseks ruumielemendis  $dV$  on  $dP = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV$ , siis integreerimine üle kogu ruumi annab ilmselt tõese sündmuse, mille tõenäosus on 1.

Lahendite superpositsioon. Schrödingeri võrrand on lainefunktsiooni suhtes lineaarne. Kõige olulisem järeldus võrrandi lineaarsusest on see, et võrrandi lahendite mistahes superpositsioon on samuti võrrandi lahendiks. Kui näiteks antud võrrandi üheks lahendiks on lainefunktsioon

$$\psi_1(\vec{r}, t)$$

ja sama võrrandi mingiks teiseks lahendiks lainefunktsioon

$$\psi_2(\vec{r}, t) ,$$

siis on selle võrrandi lahendiks ka nende lahendite mistahes lineaarne kombinatsioon

$$\psi(\vec{r}, t) = c_1 \psi_1(\vec{r}, t) + c_2 \psi_2(\vec{r}, t) ,$$

kus  $c_1$  ja  $c_2$  on mingid suvalised, üldiselt kompleksarvulised kordajad.

Tõepoolest, mistahes otsitava funktsiooni suhtes lineaarse võrrandi võime kirjutada sümboliliselt kujul

$$A\psi = 0 ,$$

kus  $A$  on mingi tuletisi ja antud suurusi sisaldav avaldis (Schrödingeri võrrandi korral näiteks  $A = i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M}\Delta - U$ ). Kui nüüd  $A\psi_1 = 0$  ja  $A\psi_2 = 0$ , siis ka

$$A\psi = c_1 A\psi_1 + c_2 A\psi_2 = 0 .$$

Nagu me järgnevas näeme, on sellel asjaolul mikromaailmas väga oluline füüsikaline tähendus. Oletame, et kui näiteks osake on olekus energiaga, siis seda olekut kirjeldab lainefunktsioon  $\psi_1(\vec{r}, t)$  ja kui osake on olekus energiaga  $E_2$ , siis seda olekut kirjeldab lainefunktsioon  $\psi_2(\vec{r}, t)$ . Äsja me näitasime, et sel juhul võib osake olla ka olekus

$$\psi(\vec{r}, t) = c_1 \psi_1(\vec{r}, t) + c_2 \psi_2(\vec{r}, t) .$$

Tekib küsimus, mida selline lahend end füüsikaliselt kujutab? Osutub, et selline kahe lahendi superpositsioon (füüsikas kasutatakse lineaarse kombinatsiooni mõiste asemel enamasti superpositsiooni mõistet) on füüsikaliselt lubatud olek, kus aga osakese energia ei ole enam üheselt määratud suurus, energia mõõtmisel saame teatud tõenäosusega tulemuseks  $E_1$  ja teatud tõenäosusega tulemuseks  $E_2$ . Siin on oluline erinevus klassikalise füüsika

superpositsiooniprintsiibiga, kus vastavad füüsikalised suurused reeglina liituvad. Nii näiteks saame kahe samas faasis oleva laine liitumisel laine, kus amplituudid liituvad. Kvantmehaanikas aga kujutavad näiteks  $\psi_1(\vec{r}, t)$  ja  $c_1\psi_1(\vec{r}, t)$  ühte ja sama füüsikalist olekut energiaga  $E_1$ . Kui aga sama suurus  $\psi_1$  oleks näiteks mingi klassikalise laine amplituud, siis laine  $c_1\psi_1$  amplituud oleks  $c_1$  korda suurem. Selliste superpositsioonide füüsikalist tähendust käsitleme edaspidi põhjalikumalt.

#### Kommentaariid:

1. Nii nagu Newtoni II seadus on klassikalise mehaanika põhivõrrandiks, kujutab Schrödingeri võrrand endast kvantmehaanika põhivõrrandit. Põhivõrrandeid ei saa teatavasti tuletada ja need on saadud nende autorite õnneliku oletuse tulemusena. Kui mitmes õpikus võib leida Schrödingeri võrrandi ühe või teise „tuletuse”, siis seda ei maksa võtta tõsiselt. Tegemist on enamasti mingi sellise retseptiga, mis võimaldab Schrödingeri võrrandit lihtsamalt meeles pidada või üles kirjutada.

2. Lainefunktsioon otseselt mõõdetav füüsikaline suurus ei ole, mõõta saab ainult tõenäosust. Kuna aga lainefunktsioon annab tõenäosuse, nimetatakse teda tihti ka tõenäosusamplituudiks (meie koolifüüsikas kasutatakse ka leiufunktsiooni mõistet, mis ehk kõige parem väljend ei ole). Viimane nimetus on isegi korrektsem, sest eelneva põhjal annab lainefunktsiooni mooduli ruut tõenäosustiheduse. Lainefunktsiooni nimetatakse mõnikord ka olekufunktsiooniks. See nimetus on samuti õigustatud, sest sellega on tõepoolest määratud vaadeldava osakese olek ja tema edaspidine käitumine.

3. Lainefunktsioon ei ole määratud üheselt, vaid konstantse faasiteisenduse täpsuseni. Kui me varem väitsime, et antud algtingimustel on Schrödingeri võrrandi lahend üheselt määratud, siis see on õige. Teades aga mingit lahendit

$$\psi = \psi(\vec{r}, t) ,$$

on lihtne veenduda, et funktsioon

$$\psi'(\vec{r}, t) = e^{i\alpha}\psi(\vec{r}, t) ,$$

kus  $\alpha$  on mingi suvaline reaalarv, on samuti sama Schrödingeri võrrandi lahendiks ja annab ka sama tõenäosustiheduse. Tõepoolest,

$$|\psi'|^2 = (\psi')^* \psi' = e^{-i\alpha}\psi^* e^{i\alpha}\psi = \psi^* \psi = |\psi|^2 .$$

Sellist teisendust nimetatakse analoogiliselt võnkumiste juures kasutatavale terminoloogiale faasiteisenduseks. Võib järelikult öelda, et Schrödingeri võrrandi lahend on määratud konstantse faasiteisenduste täpsuseni.

3. Kuna Schrödingeri võrrand on lainefunktsiooni  $\psi$  suhtes lineaarne, siis on lahend määratud suvalise konstantse kordaja täpsuseni. Seda asjaolu kasutatakse tõenäosuslikust tõlgendusest lähtudes lainefunktsiooni normeerimiseks, et summaarne tõenäosus oleks võrdne ühega. Oletame, et meie poolt leitud lahend  $\psi$  on integreeruva mooduli ruuduga

$$\int_{\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = A ,$$

st integraali väärtuseks on mingi lõplik arv  $A$ . Otsides nüüd lahendit, mis oleks normeeritud ühele, vaatame funktsiooni

$$\psi'(\vec{r}, t) = N\psi(\vec{r}, t) ,$$

kus  $N$  on mingi konstant (nn normeerimistegur). Nõudes, et

$$\int_{\infty} |\psi'(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 = |N|^2 \int_{\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = |N|^2 A ,$$

Saame seosest  $|N|^2 A = 1$  leida normeerimisteguri  $N$ . Nagu juba eelmises kommentaaris rääkisime, on lainefunktsiooni leidmisel teatud vabadusi. Neid võib kasutada näiteks selleks, et valida  $N$  reaalarvuline. Sel juhul

$$N = \frac{1}{\sqrt{A}} .$$

Siin kirjeldatud protseduuri järgi käib ka praktiline arvutus. Kõigepealt leitakse võrrandi mingi üldine lahend ja seda kasutades sobiv normeerimistegur.

Siin toodud arutlustest tasub veel meeles pidada seda, et lainefunktsioonid  $\psi(\vec{r}, t)$  ja  $N\psi(\vec{r}, t)$  kirjeldavad ühte ja sama füüsikalist olekut.

4. Kvantmehaanikas me puutume kokku ka selliste lainefunktsioonidega, mis on küll pidevad ja lõplikud, aga pole eespooltoodud viisil normeeritavad. Selliste lainefunktsioonide korral pole integraal  $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV$  lõplik

$$\int_{\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV \rightarrow \infty .$$

Nende lainefunktsioonide korral kehtib sama tõenäosuslik tõlgendus, et  $|\psi|^2 dV$  on võrdeline osakese leidmise tõenäosusega vastavas ruumielemendis  $dV$

$$dP \sim |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV .$$

See seos võimaldab tõenäosusi erinevates ruumipunktides omavahel võrrelda.

Kuna selliste lainefunktsioonide normeerimine on matemaatiliselt keerulisem, siis seda me antud kursuses ei käsitle. Olgu aga öeldud, et vaadeldavate lainefunktsioonide korral on tegemist olukorraga, kus mikroosakese liikumine ruumis pole tõkestatud (näiteks vaba osakese liikumine).

## 2. Statsionaarsete olekute Schrödingeri võrrand

**Ajast sõltumatu potentsiaalne energia, statsionaarne liikumine, statsionaarsete olekute Schrödingeri võrrand, ühedimensionaalne liikumine, vaba osakese võrrandi lahendamine, osakeste voo tihedus**

Paljudel juhtudel on meil tegemist olukorraga, kus potentsiaalne energia ei sõltu ajast  $U = U(\vec{r})$ . Klassikalises füüsikas tähendab see liikumist ajas muutumatu jõu mõjul ( $\vec{F} = -\text{grad } U$ ) ja sellist liikumist nimetatakse statsionaarseks liikumiseks, sest trajektoori kuju ajas ei muutu.

Statsionaarse liikumise korral Schrödingeri võrrand oluliselt lihtsustub, sest lainefunktsiooni ajalise sõltuvuse saab eraldada. Puht matemaatiliselt tähendab see seda, et juhul kui potentsiaalne energia  $U(\vec{r})$  ajast ei sõltu, saab Schrödingeri võrrandis muutujad eraldada ja otsida selle lahendit kujul  $\psi(\vec{r}, t) = f(t)\varphi(\vec{r})$ , st ajast sõltuva funktsiooni ja ruumikoordinaatidest sõltuva funktsiooni korrutisena. Jättes üksikasjalise tuletuse momendil esitamata (vaata kommentaari 1), otsime lahendit kujul

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \varphi(\vec{r}) ,$$

kus  $E$  on osakese koguenergia. Arvutades nüüd Schrödingeri võrrandis vajaminevad tuletised, saame

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \varphi(\vec{r}) , \quad \Delta \psi = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Delta \varphi(\vec{r}) .$$

Peale tuletiste asendamist üldisesse Schrödingeri võrrandisse ning eksponendi taandamist saame järgmise võrrandi, mis enam aega ei sisalda

$$E\varphi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \varphi(\vec{r}) + U(\vec{r})\varphi(\vec{r}) .$$

Saadud võrrandit nimetataksegi statsionaarsete olekute Schrödingeri võrrandiks. Nimetatud võrrand kirjutatakse enamasti kujul

$$\Delta \varphi(\vec{r}) + \frac{2M}{\hbar^2} (E - U(\vec{r}))\varphi(\vec{r}) = 0 .$$

Nagu võrrandist on näha, saame me võrrandile lahendid, mis vastavad kindlale koguenergiale  $E$ . Seetõttu kirjeldab statsionaarsete olekute lainefunktsioon  $\varphi(\vec{r})$  olekut, milles vaadeldaval osakesel on kindel koguenergia  $E$ . Nagu me edaspidi näeme, ei oma Schrödingeri võrrand üldjuhul füüsikaliselt mõistlikke lahendeid mitte iga  $E$  väärtuse korral, vaid ainult teatud kindlate, fikseeritud koguenergia väärtuste korral. Sel juhul annab võrrandi lahendamine meile lisaks lainefunktsioonile ka vaadeldava osakese võimalikud energia väärtused.

Funktsiooni  $\varphi(\vec{r})$ , mis kirjeldab statsionaarsete olekute korral üldise ajast sõltuva lainefunktsiooni  $\psi(\vec{r}, t)$  ruumikoordinaatidest sõltuvat osa, nimetatakse samuti lainefunktsiooniks ja ta annab antud juhul osakese leidmise tõenäosustiheduse. Tõepoolest, kuna

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = e^{\frac{iEt}{\hbar}} \varphi^*(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \varphi(\vec{r}) = |\varphi(\vec{r})|^2 ,$$

siis saame osakese leidmise tõenäosustiheduse arvutada ainult  $\varphi(\vec{r})$  kaudu

$$\rho(\vec{r}) = \frac{dP}{dV} = |\varphi(\vec{r})|^2 .$$

Nagu näha, ei sõltu statsionaarsete olekute korral tõenäosus ega tõenäosustihedus ajast. Sellest ka nimetus statsionaarne olek.

Olgu veel öeldud, et statsionaarsed olekud on osakese (süsteemi) kindla energiaga olekud. Kuna nende olekute ajaline sõltuvus on üheselt määratud, siis saime olekute energia ja ruumilise sõltuvuse arutamiseks eraldi võrrandi. Olekute füüsikaliseks analüüsiks tuleb meil aga enamasti vaadata ajast sõltuvaid lahendeid, teisisõnu, üldise Schrödingeri võrrandi lahendeid (vaata selle § lõpus olevat kommentaari 2).

Ühedimensionaalne liikumine. Järgnevates punktides vaatame Schrödingeri võrrandi lahendamist mõnel lihtsamal erijuhul, käsitledes kõigepealt ühedimensionaalset liikumist. Olgu ühedimensionaalsel liikumisel liikumissihiliseks koordinaatteljeks x-telg. Sel juhul  $U = U(x)$ ,  $\varphi = \varphi(x)$  ja Schrödingeri võrrand on kujul

$$\varphi''(x) + \frac{2M}{\hbar^2} (E - U(x))\varphi(x) = 0 ,$$

kus me tähistasime  $\varphi'' = d^2\varphi / dx^2$  .

Vaba osakese lainefunktsioon. Esimese ja kõige lihtsama näitena vaatame vaba osakest, mille liikumine x-teljel ei ole kitsendatud. Näitame, et vaba osakese energia saab olla ainult positiivne ja leiame vaba osakest kirjeldava lainefunktsiooni.

Vaba osakese korral  $U(x) = 0$  ja meil tuleb analüüsida võrrandit

$$\varphi''(x) + \frac{2ME}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 .$$

Kuna me ei tea, milline võib olla vaba osakese energia  $E$  mikromaailmas, siis kõigepealt oletame, et osakese energia on positiivne

$$E > 0 .$$

Antud oletuse tegemisel me arvestasime asjaoluga, et klassikalises füüsikas omab vaba osake ainult kineetilist energiat  $E \equiv T = Mv^2 / 2$ , mis on alati, kui osake liigub, positiivne suurus.

Seetõttu eeldame, et ka kvantmehaanikas on vaba mikroosakese koguenergia positiivne. Peale seda aga vaatame, mis juhtub siis, kui oletada, et vaba osakese energia on negatiivne.

Defineerides nüüd positiivse suuruse

$$k^2 = \frac{2ME}{\hbar^2} > 0 ,$$

saame vaba osakese jaoks võrrandi

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

Saadud võrrand on tuntud mehaanikas vaadatud harmooniliste võnkumiste juurest. Lihtne on kontrollida, et võrrandi üldlahendi võib kirjutada kujul

$$\varphi(x) = C \cos kx + D \sin kx ,$$

või arvestades kompleksarvulist esitust, kujul

$$\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} .$$

Kordajad A ja B või C ja D on üldiselt kompleksarvulised, võrrand nende väärtusi ei määra.

Nagu öeldud, on mõlemad lahendid on ekvivalentsed. See järeldeb kompleksse eksponendi avaldisest

$$e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \sin kx ,$$

mis võimaldab soovi korral teisendada ühe lahendit teiseks.

Eksponentkujul antud lahend on aga tihti otstarbekam, sest sellel on otsene füüsikaline tähendus. Lahend

$$e^{ikx}$$

kirjeldab nimelt x-telje positiivses suunas liikuvat osakest (või osakeste voogu) ja

$$e^{-ikx}$$

kirjeldab x-telje negatiivses suunas liikuvat osakest (või osakeste voogu).

Nende väidete tõestuseks vaatame üldist, ajast sõltuvat lahendit. Esimesel juhul saaksime

$$\psi_1(x, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{ikx} ,$$

mis veidi teisel kujul ümber kirjutatuna annab eelmise peatüki §8 vaadatud x-telje sihis liikuva siinuselise de'Broglie laine

$$\psi_1(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} ,$$

kus  $p = \hbar k$  on vaba osakese impulss.



Suurust

$$p = \hbar k$$

võime tõesti vaadata vaba osakese impulsina. Avaldades  $k^2$  definitsioonvalemist  $k^2 = 2ME / \hbar^2$  energia, saame

$$E = \frac{(\hbar k)^2}{2M} = \frac{p^2}{2M} ,$$

mis tõepoolest kujutab endast juba klassikalises füüsikas tuntud seost vaba osakese energia ja impulsi vahel (nagu varem öeldud, on vaba osakese energia kineetiline energia).

Teisel juhul saaksime analoogiliselt x-telje negatiivses suunas liikuva laine

$$\psi_2(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et + px)} .$$

Osakeste lainelisi omadusi silmas pidades võime väita, et saadud lahendid kirjeldavad tõepoolest x-telje positiivses ja negatiivses suunas liikuvaid osakesi (või osakeste voogu).

Kui de'Broglie lainete korral oli nende füüsikaline tähendus lahtine, siis siin saame selle anda, kasutades lainefunktsiooni tõenäosuslikku tõlgendust. Vaatame erilahendit

$$\varphi_1(x) = A e^{ikx} ,$$

mis kirjeldab x-telje sihis liikuvat kindla energia ja impulsiga osakest. Arvutame selle mooduli ruudu

$$|\varphi_1(x)|^2 = A^* e^{-ikx} A e^{ikx} = |A|^2 .$$

Kuna lainefunktsiooni mooduli ruut on seotud osakese leidmise tõenäosusega, siis eelneva põhjal võime väita, et antud juhul on osakese leidmise tõenäosus kõikjal ühesugune ja seetõttu osakese asukoht x-teljel määramata. See peabki ilmselt nii olema, sest kindla impulsiga osakese korral on tema impulsi määramatus võrdne nulliga ( $\Delta p = 0$ ) ja seetõttu määramatuse seoste tõttu tema asukoht x-teljel määramata ( $\Delta x = \infty$ ). Osakest võib võrdse tõenäosusega leida x-telje mistahes punktis.

Kuna osakese leidmise tõenäosus on kõikjal ühesugune, siis on lihtne on veenduda, et  $|\varphi_1|^2$  ei ole normeeritav ühele. Tõepoolest

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_1|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = \infty .$$

Analoogiliselt on teise lahendi

$$\varphi_2(x) = B e^{-ikx}$$

korral tegemist kindla impulsiga liikuva osakesega, mis liigub x-telje negatiivses suunas ja mis võib samuti võrdse tõenäosusega olla x-telje mistahes punktis.

Järgnevas me vaatame lisaks ühe osakese liikumisele ka mitme osakese liikumist. Seda iseloomustab osakeste voo tiheduse mõiste. Osakeste voo tihedus on ilmselt võrdeline tõenäosusega, st lainefunktsiooni mooduli ruuduga, kuid lisaks sellele veel võrdeline osakeste liikumise kiirusega ( $v = p/M = \hbar k/M$ ). Lahendile  $\varphi_1(x)$  vastav osakeste voo tihedus  $j_1$  avaldub kujul

$$j_1 = \frac{\hbar k}{M} |A|^2,$$

mis tähendab, et x-telje positiivses suunas liikuvate osakeste voo korral iseloomustab  $|A|^2$  osakeste voo tihedust.

Nüüd analüüsime võimalust, et vaba osakese, mis liigub kogu x-teljel, energia oleks negatiivne ja näitame, et x-teljel vabalt liikuva osakese energia negatiivne olla ei saa. Selleks oletame vastupidist, et

$$E < 0.$$

Defineerime nüüd uue positiivse suuruse

$$\kappa^2 = -\frac{2ME}{\hbar^2} > 0$$

ja kirjutame Schrödingeri võrrandi kujul

$$\varphi''(x) - \kappa^2 \varphi(x) = 0.$$

Selle võrrandi üldlahendiks on

$$\varphi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}.$$

Nagu me näeme, on Schrödingeri võrrand ka nüüd lahenduv, ainult et saadud lahend füüsikalise osakese kirjeldamiseks ei sobi, sest ta ei ole x-teljel lõplik. Nii  $x \rightarrow +\infty$  kui ka  $x \rightarrow -\infty$  korral  $\varphi(x) \rightarrow \infty$  ja seega ei saa lahend kirjeldada x-teljel liikuvat vaba osakest. Seetõttu ei saa ka kogu x-teljel liikuva vaba osakese energia olla negatiivne.

Siin võib tekkida küsimus: miks me sellist juhtu üldse vaatame? Vaba osakese energia on teatavasti kineetiline energia ja kuna klassikalises füüsikas on kineetiline energia alati mittenegatiivne, siis tundub negatiivse kineetilise energia vaatamine ülearune. Nagu me aga edaspidi näeme, on kvantmehaanikas ka viimati vaadatud juhtum mõningates olukordades võimalik, viies huvitavatele füüsikanähtustele.

### Kommentaar:

1. Näitame, et statsionaarsete olekute korral saab Schrödingeri võrrandis

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t)$$

muutujad eraldada. Otsime lahendit kujul

$$\psi(\vec{r}, t) = f(t) \varphi(\vec{r}) .$$

Arvutame tuletised

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{d f(t)}{d t} \varphi(\vec{r}) , \quad \Delta \psi(\vec{r}, t) = f(t) \Delta \varphi(\vec{r}) .$$

Peale asendamist ja  $f(t)\varphi(\vec{r})$  -ga läbi jagamist saame võrrandi

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{d f(t)}{d t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\varphi(\vec{r})} \Delta \varphi(\vec{r}) + U(\vec{r}) ,$$

mille vasak pool sõltub ainult ajast ja parem pool ainult ruumikoordinaatidest. Niisugune võrdus saab kehtida juhul kui mõlemad pooled on võrdsed mingi konstandiga. Tähistades seda konstanti  $E$ , saame kaks uut võrrandit

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{d f(t)}{d t} = E , \quad -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\varphi(\vec{r})} \Delta \varphi(\vec{r}) + U(\vec{r}) = E .$$

Vasakpoolse võrrandi integreerimine annab meile tuntud sõltuvuse ajast

$$f(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} ,$$

parempoolne võrrand aga statsionaarsete olekute Schrödingeri võrrandi.

2. Nagu me eelmises § väitsime, on kvantmehaanika põhivõrrandiks Schrödingeri võrrand ehk üldine Schrödingeri võrrand. Siin vaadatud statsionaarsete olekute võrrand on aga erijuht, mis võimaldab lihtsamalt arvutada osakese kindla energiaga olekuid. Arvutades aga statsionaarsete olekute võrrandist osakese kindla energiaga olekud, ei tähenda see seda, et statsionaarsed olekud on ainukesed võimalikud olekud ja osake mingis muus olekus olla ei saa. Selleks, et analüüsida osakese võimalikke olekuid üldse, tuleb vaadata üldise Schrödingeri võrrandi, mis on kvantmehaanika põhivõrrandiks, lahendeid.

Olgu meil teada osakese mingid kaks statsionaarset olekut: olek  $\varphi_1(\vec{r})$  energiaga  $E_1$  ja olek  $\varphi_2(\vec{r})$  energiaga  $E_2$ . Neist esimene rahuldab võrrandit

$$E_1 \varphi_1(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \varphi_1(\vec{r}) + U(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r})$$

ja teine võrrandit

$$E_2 \varphi_2(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \varphi_2(\vec{r}) + U(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) .$$

Statsionaarsete olekute korral lahendite superpositsiooniprintsiip üldjuhul ei kehti. Pealtnäha on küll tegemist lainefunktsiooni suhtes lineaarse võrrandiga, kuid igale olekule vastav võrrand on tegelikult erinev, sest võrrandis lahendile vastav energia on üldiselt erinev. Seega, kui  $E_1 \neq E_2$ , ei ole olek

$$\varphi(\vec{r}) = c_1 \varphi_1(\vec{r}) + c_2 \varphi_2(\vec{r})$$

enam osakese statsionaarne olek, sest see ei rahulda statsionaarsete olekute võrrandit. Ainult erijuhul kui samale energiale vastab mitu erinevat olekut, on nende superpositsioon samale energiale vastav statsionaarne olek.

Vaadates aga üldist Schrödingeri võrrandit, oleks selle lahendiks energiaga  $E_1$  lainefunktsioon

$$\psi_1(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} \varphi_1(\vec{r})$$

ja energiaga  $E_2$  lainefunktsioon

$$\psi_2(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \varphi_2(\vec{r}) .$$

Nagu me eelmises § näitasime, on lahendiks ka mistahes superpositsioon

$$\psi(\vec{r}, t) = c_1 \psi_1(\vec{r}, t) + c_2 \psi_2(\vec{r}, t) .$$

Sellise oleku füüsikalist tähendust analüüsime hiljem, siin aga ütleme seda, et saadud olek enam statsionaarne olek ei ole. Seetõttu ei ole antud superpositsiooni korral osakese energia kindlalt fikseeritud suurus ja eri aegadel võime osakese leida erineva energiaga olekus (kas  $E_1$  või siis  $E_2$ ).

Üldisemalt sõnastades võime väita, et kui energiatele  $E_1, E_2, \dots$  vastavad statsionaarsed olekud on vastavalt  $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ , siis on Schrödingeri võrrandi üldlahend esitatav kujul

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_j c_j e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \varphi_j(\vec{r}) .$$

3. Vaadates vaba osakese võrrandit ruumis, saaksime ilmselt lainevektori  $\vec{k}$  suunas liikuva vaba osakese jaoks lainefunktsiooni

$$\varphi(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} .$$

Et vaba osake rahuldab võrrandit

$$\Delta\varphi(\vec{r}) + \frac{2ME}{\hbar^2} \varphi(\vec{r}) = 0 ,$$

siis saame ülaltoodud lainefunktsiooni kasutades seose

$$E = \frac{(\hbar\vec{k})^2}{2M} = \frac{\vec{p}^2}{2M} ,$$

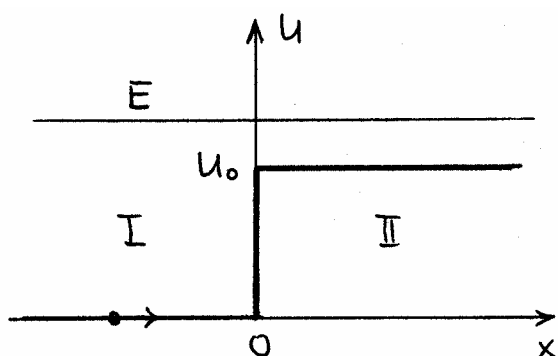
millest vaba osakese impulss

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} .$$

### 3. Potentsiaalbarjäär ( $E > U$ )

**Klassikaliste osakeste liikumine, mikroosakeste liikumine, tagasipeegeldumine barjäärilt, peegeldunud osakeste voog, optiline analoog**

Järgnevates punktides vaatame lihtsamaid ühedimensionaalse liikumise ülesandeid, et harjuda kvantmehaanika formalismi rakendamise ja tõlgendamisega.



Olgu meil antud järgmise kujuga potentsiaalne energia

$$U = \begin{cases} U_0, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Vaatame vasakult barjäärile langevat osakeste voogu ja leiame nende käitumise kui osakeste koguenergia  $E$  on kõrgem barjääri kõrgusest  $U_0$ .

Klassikaliste osakeste liikumine. Kui oleks tegemist klassikaliste osakestega, siis liiguksid kõik I piirkonnast tulevad osakesed edasi II piirkonda. 0-punktis osakesed pidurduvad ja seetõttu on nende kiirus II piirkonnas väiksem. Tõepoolest, kui I piirkonnas on osakeste kineetiline energia võrdne kogue energiaga  $T_1 = E = Mv_1^2/2$ , siis II piirkonnas on osakeste kineetiline energia  $T_2 = E - U_0 = Mv_2^2/2$  kogue energiast potentsiaalse energia võrra väiksem, mistõttu  $v_2 < v_1$ .

Mikroosakeste liikumine. Nüüd vaatame sama ülesannet kvantmehaanikas ja näitame, et osa osakesi peegeldub barjäärilt tagasi. Ülesande lahendamiseks tuleb meil leida Schrödingeri võrrandi üldine lahend, mis oleks kõikjal lõplik ja pidev ning mille tuletis oleks samuti pidev. Potentsiaalne energia jaotab meil ruumi kaheks piirkonnaks, esimeses  $U = 0$ , teises  $U = U_0$ . Seepärast on otstarbekas leida lahendid nendes kahes piirkonnas eraldi ja siis rakendada pidevuse tingimusi üleminekul ühest piirkonnast teise.

I piirkond. Kuna  $U = 0$ , siis saame eelmises punktis vaadatud vaba osakese võrrandi

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

kus

$$k^2 = \frac{2ME}{\hbar^2} > 0 .$$

Kirjutame selle üldlahendi kujul

$$\varphi_I(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx} .$$

Siin me võtsime  $e^{ikx}$  ees oleva kordaja lihtsuse mõttes võrdseks ühega. Me eeldame, et barjäärile vasakult langevate osakeste voog on antud (võttes  $A = 1$ , saame pealangevate osakeste vooks  $j_1 = \hbar k / M$ ) ja võrdleme selle suhtes nii peegeldunud kui ka edasiliikuvate osakeste voogu. Teine liidetav  $Be^{-ikx}$  kirjeldab barjäärilt tagasipeegeldunud osakesi. Peegeldunud osakeste voo tihedus on võrdne suurusega  $j_p = \hbar k |B|^2 / M$ . Esialgu me veel ei tea, kas barjäärilt peegeldub osakesi tagasi või mitte, seepärast tuleb meil seda võimalust arvestada. Leides üleande üldlahendi, saame teada, kas  $B = 0$  või  $B \neq 0$ . Esimesel juhul peegeldumist ei ole, teisel juhul on.

II piirkond. Kuna  $U = U_0$ , saame selle piirkonna jaoks Schrödingeri võrrandi kujul

$$\varphi''(x) + \frac{2M}{\hbar^2} (E - U_0) \varphi(x) = 0 .$$

Defineerides nüüd suuruse

$$(k')^2 = \frac{2M(E - U_0)}{\hbar^2} > 0 ,$$

võime kirjutada

$$\varphi'' + (k')^2 \varphi = 0 .$$

Nagu näha, saame ka teises piirkonnas vaba osakese võrrandi, ainult et endise lainearvu  $k$  asemel on väiksem lainearv  $k'$ . Võrrandi erilahendid on

$$e^{ik'x} \quad \text{ja} \quad e^{-ik'x} .$$

Kuna meie poolt vaadeldavas ülesandes saab teises piirkonnas olla ainult  $x$ -telje positiivses suunas liikuv osakeste voog, on üldlahendiks

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{ik'x} .$$

Et saada antud ülesande üldist lahendit tuleb nõuda lainefunktsiooni ja tema tuletise pidevust nullpunktis

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) , \quad \varphi'_I(0) = \varphi'_{II}(0) .$$

Arvestades meie poolt leitud lahendeid, saame siit võrrandisüsteemi kordajate  $B$  ja  $C$  arvutamiseks

$$1 + B = C , \quad ik(1 - B) = ik' C .$$

Süsteemi lahendamine annab tulemuseks

$$B = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad C = \frac{2k}{k + k'}.$$

Veidi pika, kuid elementaarse arvutuse tulemusena jõudsimme antud probleemi lahendini

$$\varphi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \frac{k - k'}{k + k'} e^{-ikx}, & x < 0, \\ \frac{2k}{k + k'} e^{ik'x}, & x \geq 0. \end{cases}$$

Kõige olulisem tulemus on siin see, et  $B \neq 0$  tõttu peegeldub osa osakesi barjäärilt tagasi. Tagasipeegeldunud osakeste voo tihedus on võrdeline suurusega

$$k|B|^2 = k \left( \frac{k - k'}{k + k'} \right)^2.$$

Siit on näha, et mida väiksem on  $k'$  (vahe  $E - U_0$ ), seda suurem on peegeldunud osakeste voog.

Lisaks  $k|B|^2$ -le, mis kirjeldab peegeldunud osakeste voogu vaatame edasiliikuvate osakeste voogu, mida kirjeldab  $k'|C|^2$ . Kuna pealangevate osakeste voog oli meil  $k \cdot 1$ , siis on lihtne kontrollida, et

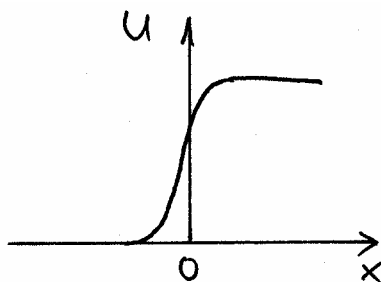
$$|B|^2 + \frac{k'}{k}|C|^2 = 1.$$

Viimane võrdus kinnitab asjaolu, et barjäärilt peegeldunud ja edasiliikuvate osakeste voog on võrdne barjäärile langevate osakeste vooga.

Saadud tulemus erineb oluliselt klassikalisest, milles tagasipeegeldumist ei ole ja näitab veelkord, et mikromaailmas valitsevad seaduspärasused on teistsugused.

#### Kommentaariid:

1. See, et barjäärile langevate osakeste korral tekib peegeldunud osakeste voog, on jälle arusaadav laineteooriast lähtudes. Kahe keskkonna lahutuspinnale langeva laine korral tekib lisaks murdunud lainele alati ka suurema või väiksema intensiivsusega peegeldunud laine.

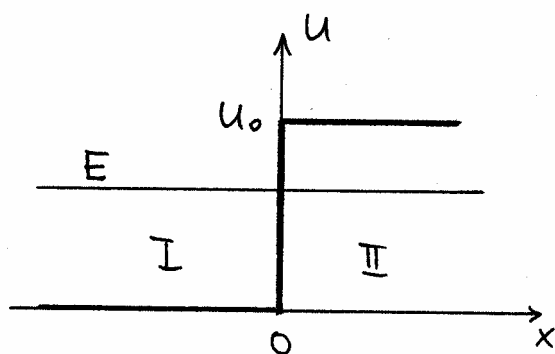


2. Siin me vaatasime nn astmelist potentsiaali, mis on tegelikult teatav idealisatsioon. Reaalsed potentsiaalid muutuvad sujuvalt, nagu näiteks kõrvaloleval joonisel toodu. Sellise potentsiaali korral on aga arvutused tunduvalt keerulisemad, lõpptulemus aga sama. Seepärast on alati mõttekas analüüsida idealiseeritud, kuid lihtsamini käsitletavaid juhtumeid.

## 4. Potentsiaalbarjäär ( $E < U$ )

### Klassikaline osakeste voo liikumine, mikroosakeste voo liikumine, mikroosakeste tungimine potentsiaalbarjääri sisse, optiline analoog

Järgnevalt vaatame samasugust potentsiaalbarjääri nagu eelmises punktis. Nüüd aga oletame, et barjäärile langevate osakeste energia on barjääri kõrgusest väiksem  $E < U_0$ .



Vaatame jällegi enne klassikaliste osakeste käitumist. Kuna klassikalised osakesed saavad liikuda ainult seal, kus  $E \geq U_0$  (muidu oleks kineetiline energia negatiivne), siis klassikalised osakesed II piirkonda edasi liikuda ei saa ja kõik barjäärile langevad osakesed pörkuvad 0-punktist tagasi.

Edasi analüüsime mikroosakeste käitumist ja näitame, et osakesed tungivad barjääri sisse ja alles siis peegelduvad tagasi.

Jällegi tuleb meil leida füüsikalisi ja matemaatilisi tingimusi rahuldav lahend. Lahendamise üldprotseduur on sama, nagu eelmises punktis.

I piirkond. Siin saame täpselt sama lahendi üldkuju, nagu eelmises §

$$\varphi_1(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx} ,$$

kus esimene liidetav kirjeldab barjäärile langevaid osakesi ja teine barjäärilt peegeldunud osakesi.

II piirkond. Schrödingeri võrrand on kujul

$$\varphi'' + \frac{2M}{\hbar^2}(E - U_0)\varphi = 0 .$$

Kuna nüüd  $E < U_0$ , siis defineerime uue positiivse suuruse

$$\kappa^2 = \frac{2M(U_0 - E)}{\hbar^2} > 0 .$$

ja kirjutame Schrödingeri võrrandi järgmiselt

$$\varphi'' - \kappa^2\varphi = 0 .$$



Nagu me §2 lõpus nägime, on selle võrrandi erilahendid  $e^{kx}$  ja  $e^{-kx}$ . Kuna me otsime nüüd lahendit piirkonnas  $0 \leq x < \infty$ , siis esimene erilahend ei sobi, sest  $x \rightarrow \infty$  korral  $e^{kx} \rightarrow \infty$ , teine aga sobib. Seetõttu anname II piirkonna üldlahendi kujul

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{-kx}.$$

Rakendades jälle pidevuse tingimusi

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0), \quad \varphi'_I(0) = \varphi'_{II}(0),$$

saame kordajate B ja C arvutamiseks süsteemi

$$1 + B = C, \quad ik(1 - B) = -\kappa C.$$

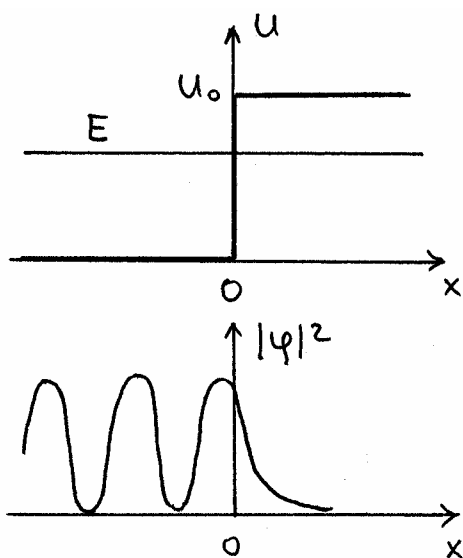
Süsteemi lahendamine annab

$$B = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, \quad C = \frac{2k}{k + i\kappa}$$

ja antud probleemi üldlahend tuleb kujul

$$\varphi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} e^{-ikx}, & x < 0, \\ \frac{2k}{k + i\kappa} e^{-kx}, & x \geq 0. \end{cases}$$

Saadud tulemus on huvitav. See, et osakesed tagasi peegelduvad ( $B \neq 0$ ), on arusaadav. Kuna aga  $C \neq 0$ , siis osakesed saavad tungida ka barjääri sisse (osakeste leidmise tõenäosus barjääri sees on nullist erinev). Osakeste leidmise tõenäosust barjääri sees iseloomustab vastav tõenäosustihedus



$$|\varphi_{II}(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \kappa^2} e^{-2kx}.$$

Kuna tõenäosustihedus kahaneb eksponentsiaalselt, siis näiteks kaugusel  $x_0 = 1/2\kappa$  barjäärist on  $|\varphi_{II}|^2$  väärtus e korda väiksem kui nullpunktis. Mida suurem on  $\kappa$ , seda kiiremini osakeste leidmise tõenäosus barjääri sees kahaneb.

Joonestame veel välja ka  $|\varphi|^2$  graafiku. II piirkonnas on eelöeldu põhjal  $|\varphi|^2$  graafik arusaadav (eksponentsiaalselt kahanev tõenäosus), I piirkonnas aga tundub graafik mõnevõrra iseäralik. Selle seletus on aga lihtne. Kuna I piirkonnas on tegemist

nii pealelangevate kui peegeldunud osakeste vooga, siis  $|\varphi|^2$  kujutab nende liitumisel tekkinud interferentsipilti.

Kuidas siis osakesed antud juhul ikkagi liiguvad? Näitame kõigepealt, et kõik osakesed peegelduvad lõppkokkuvõttes esimesse piirkonda tagasi. Selleks arvutame  $|B|^2$

$$|B|^2 = B * B = \frac{(k - i\kappa)(k + i\kappa)}{(k + i\kappa)(k - i\kappa)} = 1 .$$

Kuna nii pealelangevate kui peegeldunud osakeste eksponenttegurite ees olevate kordajate moodulite ruudud on võrdsed ühega (pealelangevate osakeste voog on võrdne peegeldunud osakeste vooga), peegelduvad kõik osakesed tõepoolest tagasi. Seejuures tungivad osakesed enne tagasipeegeldumist barjääri sisse. See, kui kaugele barjääri sisse üks või teine osake tungib, ei ole mingil viisil ette määratud, kogu katsetulemus on aga kooskõlas  $|\varphi_{II}|^2$  poolt antud jaotusega.

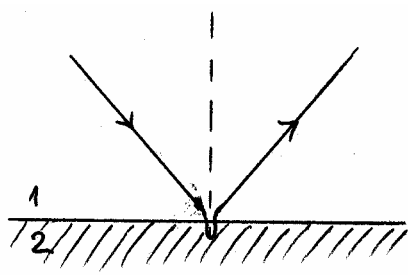
Veendume veel selles, et kui  $U_0 \rightarrow \infty$ , siis osakesed barjääri sisse tungida ei saa ja nad peegelduvad tagasi barjääri pinnalt, nii nagu klassikalised osakesed. Kuna  $U_0 \rightarrow \infty$ , korral  $\kappa \rightarrow \infty$  siis saame  $C = 0$  ja  $B = -1$  ning lahend on nüüd kujul

$$\varphi(x) = \begin{cases} e^{ikx} - e^{-ikx} = 2i \sin(kx), & x < 0, \\ 0, & x \geq 0. \end{cases}$$

Et teise piirkonna lainefunktsioon on siin võrdne nulliga, siis ükski osake barjääri sisse tungida ei saa.

#### Kommentaariid:

1. Klassikaline osake ei sa tungida potentsiaalbarjääri sisse, sest seal oleks kineetiline energia  $T = E - U_0$  negatiivne. Kuna aga  $T = Mv^2/2$ , siis tähendaks see omakorda imaginaarset kiirust, mis teatavasti pole võimalik, sest kõik füüsikaliselt mõõdetavad suurused on reaalarvulised. Mikroosakeste korral on aga teatud ajavahemiku jaoks teatav energia määramatus lubatud -  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$ . Nagu me eelnevas nägime, peegelduvad kõik osakesed lõppkokkuvõttes barjäärilt tagasi. Seega viibivad osakesed barjääri sees teatud lõpliku aja  $\Delta t$  ja see lubab energia määramatust  $\Delta E \geq \hbar/2\Delta t$ . Viimane aga ei välista kineetilise energia lühiajalist muutumist negatiivseks.



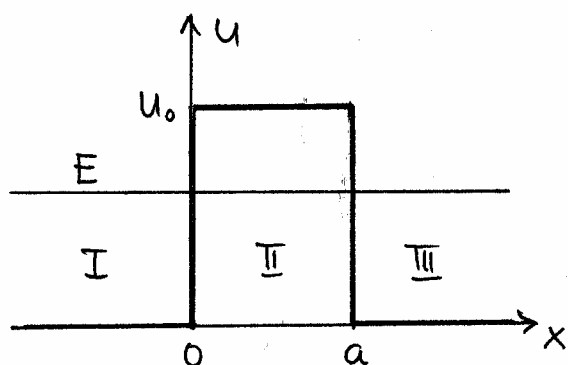
osaliselt teise keskkonda.

2. Siin on jällegi olemas analoog laineteoorias. Optikas võib esineda hõredama keskkonna lahus-pinnalt peegeldumisel täielik sisepeegeldus. Geomeetrilises optikas näidatakse, et täielik sisepeegeldus tekib siis kui kiire langemisnurk  $\alpha$  on suurem täieliku sisepeegelduse piirnurgast  $\alpha_0$ , mis arvutatakse seosest  $\sin \alpha_0 = n_{21}$ . Täpsem analüüs laineteoorias aga näitab, et ka täielikul sisepeegeldusel tungib laine enne tagasipeegeldumist

## 5. Tunneleffekt

### Tunneleffekt, barjääri läbilaskvuskoeffitsient, barjääri peegelduskoeffitsient, optiline analoog, $\alpha$ -lagunemine, elektronide külmemissioon

Eelmises punktis me nägime, et mikroosake võib tungida potentsiaalbarjääri sisse. On ilmne, et kui barjäär oleks lõpliku ulatusega, siis on ka võimalus, et osake läbib potentsiaalbarjääri. Sellist nähtust, mida nimetatakse tunneleffektiks, me järgnevalt vaatamegi.



Vaatame järgmist, lõpliku laiusega potentsiaalbarjääri

$$U = \begin{cases} U_0, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x < 0, x > a. \end{cases}$$

Vaatame jälle barjäärile vasakult langevat osakeste voogu. Olgu osakeste energia E väiksem barjääri kõrgusest  $U_0$ .

Arvestades eelmistes punktides kirja pandud lahendeid, võime üldlahendid kõigi kolme piirkonna jaoks kohe välja kirjutada.

I piirkonnas on meil barjäärile langevate ja peegeldunud osakeste voog, seega

$$\varphi_I(x) = e^{ikx} + B e^{-ikx}.$$

II piirkonnas saame üldlahendiks

$$\varphi_{II}(x) = C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}.$$

Nüüd tuleb meil arvestada mõlemat erilahendit, sest  $0 \leq x \leq a$  korral on nad mõlemad lõplikud.

III piirkonnas saab olla ainult barjääri läbinud osakeste voog, seega

$$\varphi_{III}(x) = F e^{ikx}.$$

Leiame nüüd pidevuse tingimusi rahuldava lahendi ja tõestame tunneleffekti olemasolu.

Pidevuse tingimused on järgmised

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0), \quad \varphi_{II}(a) = \varphi_{III}(a),$$

$$\varphi'_I(0) = \varphi'_{II}(0), \quad \varphi'_{II}(a) = \varphi'_{III}(a).$$

Nendest tingimustest saame kordajate B, C, D ja F leidmiseks järgmise võrrandisüsteemi

$$1 + B = C + D, \quad C e^{\kappa a} + D e^{-\kappa a} = F e^{ika},$$

$$ik(1 - B) = \kappa(C - D), \quad \kappa(C e^{\kappa a} - D e^{-\kappa a}) = ikF e^{ika}.$$

Saadud võrrandisüsteem määrab ära kõik kordajad B, C, D ja F. Meid huvitavad antud juhul ainult B ja F, sest esimene neist määrab ära peegeldunud osakeste voo ja teine barjääri läbinud osakeste voo. Tunnerefekti tõestamiseks tuleb näidata, et  $F \neq 0$ .

Avaldades kahest parempoolsest võrrandist C ja D, saame

$$2C e^{\kappa a} = \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{ika} F, \quad 2D e^{-\kappa a} = \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{ika} F.$$

Analoogiliselt avaldame kahest vasakpoolsest võrrandist C ja D

$$2C = \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) B + \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) B, \quad 2D = \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) B + \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) B.$$

Asendades 2C ja 2D viimastest võrranditest eelmistesse, saame süsteemi B ja F arvutamiseks

$$\left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{\kappa a} + \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{\kappa a} B = \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{ika} F,$$

$$\left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{-\kappa a} + \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{-\kappa a} B = \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{ika} F.$$

Viimase süsteemi lahendamine annabki B ja F

$$B = \frac{(k^2 + \kappa^2) sh(\kappa a)}{(k^2 - \kappa^2) sh(\kappa a) - 2ik\kappa ch(\kappa a)},$$

$$F = \frac{2ik\kappa e^{-ika}}{(k^2 - \kappa^2) sh(\kappa a) + 2ik\kappa ch(\kappa a)}.$$

Viimaste avaldiste väljakirjutamisel me arvestasime hüperboolsete funktsioonide definitsioone:  $2shx = e^x - e^{-x}$ ,  $2chx = e^x + e^{-x}$ .

Kuna  $F \neq 0$ , siis lõpliku laiusega barjääri korral esineb tõepoolest tunneleffekt, st. osake võib läbida potentsiaalbarjääri. Leiame barjääri läbinud osakeste voo  $|F|^2$ . Seda suurust nimetatakse barjääri läbilaskvuskoeffitsiendiks

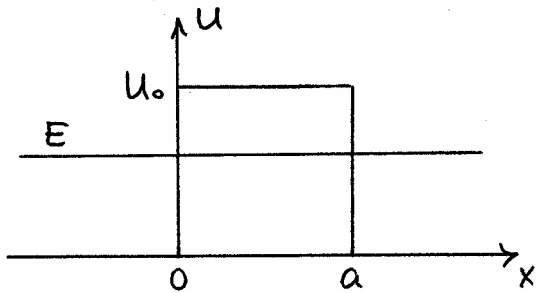
$$L = |F|^2 = F * F = \frac{4k^2 \kappa^2}{(k^2 - \kappa^2)^2 sh^2(\kappa a) + 4k^2 \kappa^2 ch^2(\kappa a)}.$$

Barjääri läbilaskvuskoeffitsient sõltub üldiselt nii barjääri kõrgusest, mida iseloomustab kordaja

$$\kappa = \frac{\sqrt{2M(U_0 - E)}}{\hbar}$$

kui ka barjääri laiuses  $a$ . Et barjääri läbilaskvust lihtsamalt analüüsida, vaatame juhtu, kus  $\kappa a \gg 1$  (barjäär on piisavalt kõrge ja lai). Sel juhul  $\hbar^2 \kappa a \approx \hbar^2 \kappa^2 a \approx e^{2\kappa a}/4$  ja saame

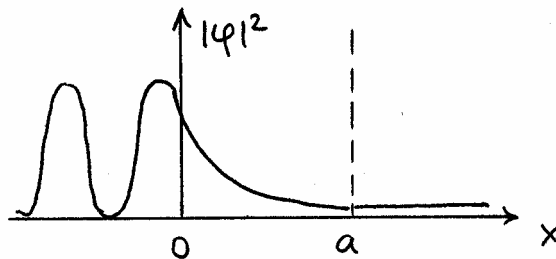
$$L = |F|^2 = \frac{16k^2 \kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a}$$



Antud juhul määrab barjääri läbilaskvuse põhiliselt eksponentsiaaltegur, st

$$L \approx e^{-2\kappa a},$$

millest nähtub, et mida kõrgem ja laiem barjäär on seda väiksem on selle läbilaskvuskoeffitsient.



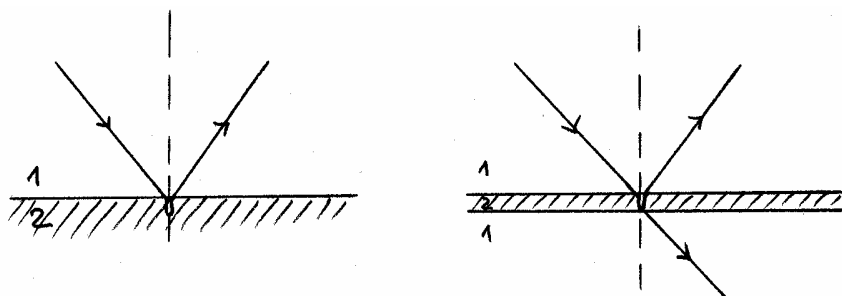
Arvutades ka barjääri peegelduskoeffitsiendi  $R = |B|^2$ , on võimalik veenduda, et alati

$$R + L = 1.$$

Saadud seos on loogiline, sest osakesed kas peegelduvad tagasi (tungides osaliselt barjääri sisse), või läbivad barjääri.  $|\phi|^2$  graafikult on näha, et barjääri läbinud voog on väike, kuna barjääri sees  $|\phi|^2$  kahaneb.

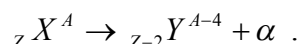
### Kommentaariid:

1. Nagu me juba varem mainisime, ei saa klassikalised osakesed  $E < U_0$  korral barjääri läbida, mistõttu klassikalises füüsikas tunneleffekt puudub. Mikroosakeste korral on see aga võimalik, olgugi, et barjääri läbimise tõenäosus on üldiselt väike. Sellist efekti hakati nimetama tunneleffektiks, kuna piltlikult kujutati barjääri läbimist selliselt, et osake nagu läheks läbi barjääri sees oleva tunneli. See ettekujutus muidugi õige ei ole, sest mingit "tunnelit" barjääri ei teki, aga nagu me varem juba mitmed korrad oleme maininud, ei saa kõiki mikromaailmas toimuvaid protsesse piltlikult ette kujutada, nii ka tunneleffekti. Arvestades, et mikroosakesed on samaaegselt ka lained, ei ole tulemus üllatav ja tunneleffektil on olemas analoog optikas.

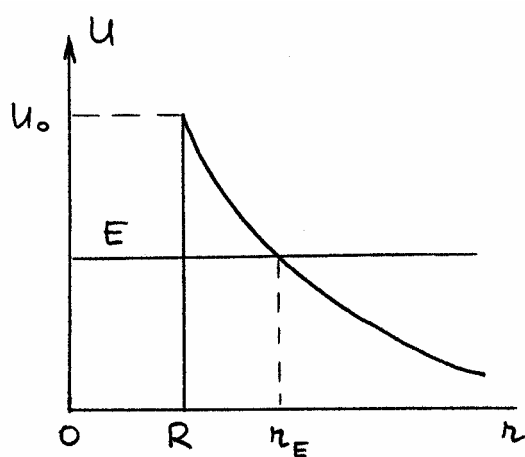


Peegeldumisel optiliselt hõredama keskkonna pinnalt, tekib langemisnurkade  $\alpha$  korral, mis on täieliku sisepeegelduse piirnurgast  $\alpha_0$  suuremad, täielik sisepeegeldus. See on kujutatud vasakpoolisel joonisel klaasi ja õhu lahutuspinna peegeldumise korral. Võttes aga kaks paralleelset klaasplaati, mille vahel on õhuke õhukiht, tekib sõltuvalt kihi paksusest väikese intensiivsusega kiir ka teises klaasplaadis.

2.  $\alpha$ -lagunemine. Tänu tunneleefektile toimub rida nähtusi, mis klassikalise teooria järgi oleks võimatud. Üheks selliseks nähtuseks on tuumade  $\alpha$ -lagunemine. Tuuma  ${}_Z X^A$   $\alpha$ -lagunemisel tekib tuum  ${}_{Z-2} Y^{A-4}$  ja  $\alpha$ -osake



$\alpha$ -radioaktiivsed tuumad kiirgavad enamasti kindla energiaga  $\alpha$ -osakesi. Nende energia on vahemikus  $4 \div 10$  MeV. Kõikidel rasketel tuumadel on see energia väiksem potentsiaalbarjääri kõrgusest.

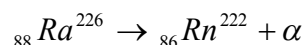


Antud probleemi potentsiaalse energia graafik on kujutatud joonisel. Kuna tuumajõudude potentsiaalne energia ei ole täpselt teada, võtame potentsiaalse energia tuuma sees võrdseks nulliga. Väljaspool tuuma on meil tegemist tekkinud tuuma, mille laeng on  $(Z - 2)e$  ja  $\alpha$ -osakese, mille laeng on  $2e$ , elektrilise potentsiaalse energiaga

$$U(r) = \frac{b(Z-2)2e^2}{r}, \quad r \geq R .$$

Potentsiaalbarjääri kõrguseks loeme saadud kulonilise potentsiaalse energia väärtust lähtetuuma raadiuse kaugusel, st  $U_0 = U(R)$ . Juhul kui  $E < U_0$ , toimub  $\alpha$ -lagunemine tänu tunneleefektile.

Näitena vaatame siin tuuma  ${}_{88}\text{Ra}^{226}$ , mis laguneb järgmiselt



ja mille  $\alpha$ -osakese energia on  $E = 4,78$  MeV. Lähtetuuma raadiuse arvutame valemist

$$R = 1,2 \cdot 10^{-15} (A)^{1/3} \text{ m} .$$

Võttes  $A = 226$ , saame  $R = 7,3 \cdot 10^{-15}$  m. Võttes nüüd  $Z = 88$  ja  $r = R$ , arvutame potentsiaalbarjääri kõrguse

$$U_0 = U(R) = \frac{9 \cdot 10^9 \cdot 86 \cdot 2 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^2}{7,3 \cdot 10^{-15}} = 5,4 \cdot 10^{-12} \text{ J} \approx 34 \text{ MeV} .$$

Olgugi, et tegelik tuuma potentsiaalne energia võib  $r = R$  korral sellest mõnevõrra erineda, on ikkagi ilmne, et  $E < U_0$  ja  $\alpha$ -lagunemine toimub tänu tunneleefektile.

Et viimases väites veenduda, arvutame veel kauguse  $r_E$ , mille korral  $U = E$

$$r_E = \frac{b(Z-2)2e^2}{E}$$

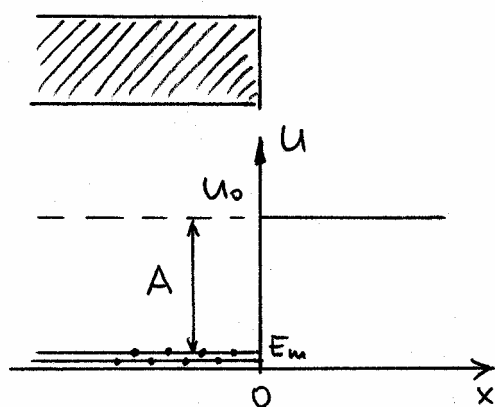
Raadiumi tuuma jaoks saaksime siit

$$r_E \approx 5,2 \cdot 10^{-14} \text{ m} \approx 7R$$

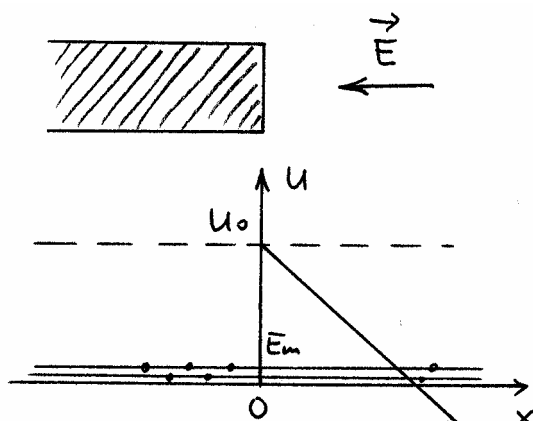
Kuna  $\alpha$ -osakese energia saab võrdseks potentsiaalse energiaga alles seitsme tuuma raadiuse kaugusel, on tegemist piisavalt laia potentsiaalbarjääriga.

Olgugi, et siin ei ole tegemist astmelise barjääriga ja eespool tuletatud valemid barjääri läbilaskvuskoeffitsiendi jaoks pole otseselt rakendatavad, võib ikkagi väita, et antud näite korral on tegemist küllalt kõrge ja laia barjääriga. Seetõttu on ka barjääri läbimise tõenäosus üsna väike. Viimasele asjaolule viitab ka raadiumi pikk poolestusaeg 1622 aastat. On ilmne, et mida väikesem on barjääri läbilaskvuskoeffitsient, seda suurem on tuuma poolestusaeg.

2. Elektronide külmemissioon. Teise näitena vaatame "vabu" ehk juhtivuselektrone metallis. Mõiste "vaba" elektron tähendab seda, et osa elektrone on metallis tuumadega väga nõrgalt seotud ja nad võivad metalli sees praktiliselt vabalt liikuda. See põhjendabki metallide hea elektrijuhtivuse.



nulliga. Oletades, et elektronide maksimaalne energia metallis on  $E_m$ , oleks elektronide väljumistöö  $A = U_0 - E_m$ .



Metalli pinnast aga ei saa elektronid vabalt väljuda. Nagu me fotoefekti analüüsil nägime, on elektroni väljalöömiseks vaja kulutada energiat, mida me nimetaksime väljumistööks.

Lihtsustatult võime "vabu" elektrone metallis kujutada järgmise potentsiaalse energia diagrammiga. Elektronide väljumist takistab potentsiaalbarjäär kõrgusega  $U_0$  (lihtsuse mõttes oletame, et  $U_0 = \text{const}$ ). Vaadates ainult "vabu" juhtivuselektrone, võime metalli sees oleva potentsiaalse energia võtta võrdseks

Elektronid saavad metallist väljuda näiteks termoemissioonil, kus metalli kuumutamisel saadud soojusliikumise energia ületab väljumistöö.

Siin vaatame ühte teist võimalust, mida nimetatakse elektronide külmemissiooniks. Asetame metalli välisesse elektrivälja, nii et elektronidele metallis mõjuks tõmbejõud. Sel juhul saavad aga elektronid metallist väljuda ainult tänu tunneleffektile.

Oletades, et elektriväli on homogeenne, on potentsiaal

$$\varphi(x) = Ex$$

ja elektroni potentsiaalne energia

$$U(x) = -eEx .$$

Väljaspool metalli oleks potentsiaalne energia nüüd

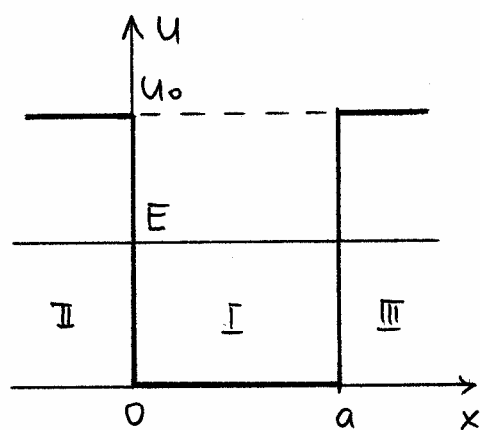
$$U = U_0 - eEx .$$

Mida suurem on elektriväli E, seda suurem on barjääri läbilaskvuskoeffitsient.

## 6. Potentsiaalauk

**Klassikaline osakeste liikumine, mikroosakeste liikumine, energia diskreetsus, minimaalne energia, tõenäosusjaotus potentsiaalaugus, ortonormeeritud lainefunktsioonid, 3-mõõtmeline potentsiaalauk**

Järgnevalt vaatame osakest potentsiaalaugus. Olgu potentsiaalne energia kujul



$$U = \begin{cases} 0 & , 0 \leq x \leq a , \\ U_0 & , x < 0 , x > a . \end{cases}$$

ja osakese energia  $E < U_0$  .

Kui meil oleks tegemist klassikalise osakesega, siis antud koguenergia  $E$  korral võnguks osake potentsiaalaugu seinte vahel edasi tagasi, liikudes jääva kiirusega  $v = \sqrt{2E/M}$  . Osakese energia võib omada kõiki väärtusi vahemikus  $0 \leq E \leq U_0$  .  $E = 0$  korral on osake paigal ja võib asetseda mistahes punktis 0 ja a vahel.

Näitame, et mikroosakese käitumine on teistsugune. Osake ei saa olla suvalise energiaga, vaid võib omada ainult teatud kindla väärtusega energiad. Seega on osakese energia potentsiaalaugus diskreetne. Ülejäänud iseärasusi vaatame peale ülesande lahendamist.

Osutub, et algul formuleeritud ülesanne ei ole lihtsalt lahenduv ja seetõttu teeme ühe olulise lihtsustuse, oletades, et  $U_0 \rightarrow \infty$  (lõpmata kõrgete seintega potentsiaalauk).  $U_0 \rightarrow \infty$  korral ei saa osake II ega III piirkonda tungida, seetõttu  $\varphi_{II} = \varphi_{III} = 0$  ja meil tuleb vaadata



Schrödingeri võrrandi lahendit ainult potentsiaalaugus. Kuna seal  $U = 0$ , siis on meil tegemist vaba osakese Schrödingeri võrrandiga, mille üldlahend oleks järgmine

$$\varphi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} ,$$

kus

$$k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} .$$

Kuna osake barjääri tungida ei saa, tuleb meil rakendada ääretingimusi

$$\varphi_I(0) = \varphi_I(a) = 0 .$$

Need annavad järgmised võrrandid

$$A + B = 0 , \quad A e^{ika} + B e^{-ika} = 0 .$$

Esimesest saame  $B = -A$ , mis teise asendatuna annab

$$A(e^{ika} - e^{-ika}) \equiv 2iA \sin(ka) = 0 .$$

Ilmselt  $A \neq 0$ , sest muidu oleks  $\varphi_I = 0$  ja see lahend ei saaks osakest kirjeldada, sest osakese leidmise tõenäosus võrduks nulliga. Järelikult

$$\sin(ka) = 0 .$$

See tingimus on rahuldatud kui

$$ka = n\pi , \quad n = 1, 2, 3, \dots .$$

( $n = 0$  ei sobi, sest siis on  $k = 0$  ja seega ka  $\varphi_I = 0$ ). Viimasest tingimusest saamegi energia diskreetsuse

$$E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2M} \equiv \frac{(\pi \hbar)^2}{2Ma^2} \cdot n^2 , \quad n = 1, 2, \dots$$

Igale  $n$  väärtusele vastab kindel lubatud energia väärtus  $E_n$ , ülejäänud energia väärtusi ei saa aga osake potentsiaalaugus omada.

Kirjutame välja ka nende energiatega vastavad lainefunktsioonid. Kuna  $B = -A$ , siis saame

$$\varphi_n(x) = 2iA \sin(kx) \equiv 2iA \sin \frac{n\pi x}{a} .$$

Kuna antud juhul on tegemist lainefunktsioonidega, mis vajavad normeerimist, siis leiame kordaja  $A$ , mille korral

$$\int_0^a |\varphi_n(x)|^2 dx = 1 .$$

Arvestades  $\varphi_n(x)$  kuju, tuleb meil leida selline A, et

$$4|A|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = 1 .$$

Tehes muutuja vahetuse  $u = n\pi x/a$ , saame integraali

$$\int \sin^2 u du = \frac{u}{2} - \frac{\sin 2u}{4}$$

kasutades, et

$$\int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{a}{2} .$$

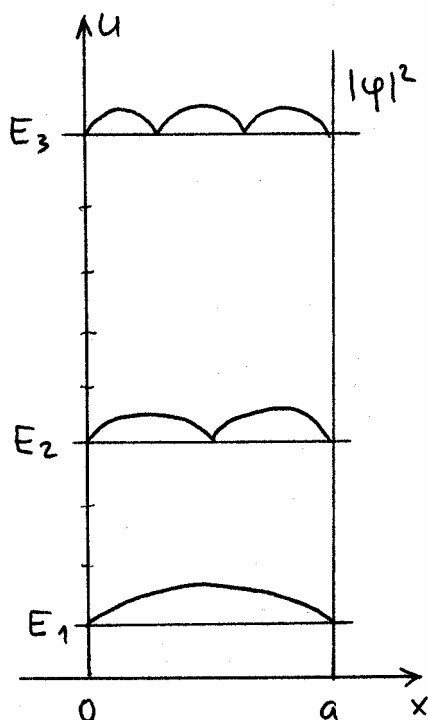
A tuleb meil nüüd leida võrdusest

$$4|A|^2 \frac{a}{2} = 1 .$$

See võrdus jätab A valikul mõningaid vabadusi ja seepärast valime sellise A, et lainefunktsioon tuleks reaalne

$$A = -\frac{i}{\sqrt{2a}} .$$

Kirjutame nüüd veelkord välja energiad ja lainefunktsioonid



$$E_n = \frac{(\pi \hbar)^2}{2Ma^2} n^2, \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Et selgitada osakeste käitumist potentsiaalaugus, joonestame kolme madalama energianivoo jaoks välja energiad ja tõenäosustihedused  $|\varphi_n|^2$  vastavalt valemitele

$$E_1 = \frac{(\pi \hbar)^2}{2Ma^2}, \quad |\varphi_1|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi x}{a},$$

$$E_2 = 4E_1, \quad |\varphi_2|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{2\pi x}{a},$$

$$E_3 = 9E_1, \quad |\varphi_3|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{3\pi x}{a}.$$

Joonis on tehtud selliselt, et iga  $|\varphi_n|^2$  joonestamisel on x-teljeks võetud vastav energianivoo  $E_n$ . Esitatud jooniselt selgub lisaks energia diskreetsusele veel kaks olulist erinevust klassikalise osakese käitumisega. Esiteks ei liigu mikroosake potentsiaalaugus ühtlaselt. Olekus energiaga  $E_1$  on näiteks osakese leidmise tõenäosus kõige suurem augu keskel, olekus energiaga  $E_2$  on aga osakese leidmise tõenäosus augu keskel võrdne nulliga jne. Teiseks on osakese minimaalne energia  $E_1$  nullist erinev. Nullenergia ehk klassikalises mõttes paigalolek ei ole mikroosakese korral lubatud. See asjaolu järeldub juba määramatuse seostest: kuna koordinaadi maksimaalne määramatus  $\Delta x_m = a$  on lõplik, ei saa impulsi määramatus kunagi võrduda nulliga. Vähim impulsi määramatus  $\Delta p = \hbar/2a$  annaks vastava impulsi korral energia  $E = \hbar^2/8Ma^2 > 0$ . Seetõttu ei saa minimaalne energia võrduda nulliga.

### Kommentaariid:

1. Lõpmatu kõrge potentsiaalaugu korral oleks me võinud üldlahendi

$$\varphi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

asemel võtta ka

$$\varphi_I(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx) .$$

Viimase lahendiga viib arvutamine isegi veidi kiiremini sihile. Esimene pidevuse tingimus annab

$$\varphi_I(0) = C \cdot 0 + D \cdot 1 = 0 ,$$

millest saame  $D = 0$ . Rakendades edasi teist pidevuse tingimust

$$\varphi_I(a) = C \sin(ka) = 0 ,$$

saame juba eespool toodud kitsenduse  $ka = n\pi$  .

Tegelikult on mõlemad lahendite kujud kasulikud. Esimese järgi saime lahendiks

$$\varphi_I(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin(kx) ,$$

mis järeldus loomulikult ka teisest üldlahendist. Esimese järgi on meil tegemist x-telje positiivses ja negatiivses suunas levivate võrdne amplituudiga lainetega. Nende lainete liitumisel tekib nn seisev laine. Teine lahend kirjeldab üldjuhul kahe seisva laine superpositsiooni ja annab samuti lõpplahendiks seisva laine.

Sellest, et osakestel on lainelised omadused, on statsionaarsete olekute tekkimine potentsiaalaugus lihtsalt arusaadav. Statsionaarsed olekud vastavad seisvatele lainetele ja need tekivad ainult selliste lainete liitumisel, mille korral augu laiusele  $a$  mahub täisarv poollainepikusi. Nii ka antud juhul: ühelt poolt  $k = 2\pi/\lambda$ , teiselt poolt aga  $k = n\pi/a$ , millest  $a = n\lambda/2$ .

2. Näitame ühe potentsiaalaugu lainefunktsioonide huvitava omaduse, nimelt on erinevate lainefunktsioonide  $\varphi_n(x)$  ja  $\varphi_r(x)$  korral integraal

$$\int_0^a \varphi_n^*(x) \varphi_r(x) dx = 0 .$$

Sama lainefunktsiooni korral aga

$$\int_0^a \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) dx = 1 ,$$

mis oli teatavasti lainefunktsioonide normeerimistingimus.

Tõestame nüüd ülemise seose. Selleks arvutame integraali

$$\int_0^a \varphi_n^*(x) \varphi_r(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{r\pi x}{a} dx .$$

Integraali arvutamiseks teisendamine siinuste korrutise koosinuste vaheks

$$2 \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{r\pi x}{a} = \cos \frac{(n-r)\pi x}{a} - \cos \frac{(n+r)\pi x}{a} .$$

Seega tuleb meil arvutada integraalid

$$\int_0^a \cos \frac{(n-r)\pi x}{a} dx \quad \text{ja} \quad \int_0^a \cos \frac{(n+r)\pi x}{a} dx .$$

Lihtne on veenduda, et  $n \neq r$  korral on mõlemad integraalid võrdsed nulliga, mis tõestabki  $n \neq r$  korral seose

$$\int_0^a \varphi_n^*(x) \varphi_r(x) dx = 0 .$$

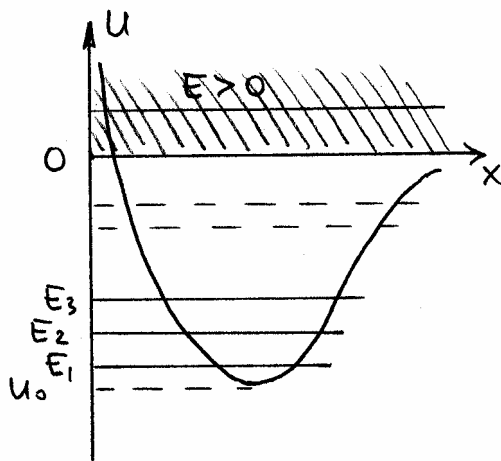
Antud juhu kohta öeldakse, et lainefunktsioonid  $\varphi_n(x)$  ja  $\varphi_r(x)$  on ortogonaalsed. Võttes nüüd tulemused kokku kõikide lainefunktsioonide jaoks, võime kirjutada

$$\int_0^a \varphi_n^*(x) \varphi_r(x) dx = \delta_{nr} .$$

Niisugusel juhul öeldakse, et lainefunktsioonid moodustavad ortonormeeritud süsteemi.

3. Lõpliku kõrgusega potentsiaalaugu korral oleksid põhitulemused samad, ainult et nüüd tuleb lahendamisel arvestada ka osakese lainefunktsioone august väljaspool. Osutub, et see lihtne ülesanne ei ole algebraliselt lahendatav ja lubatud energianivood tuleb leida kas graafiliselt või lähendusmeetodil. Tulemuseks on jälle energia diskreetsus, kusjuures energianivoode arv barjääri sees on lõplik.

Huvitav on siin märkida, et mistahes potentsiaalaugus on energia alati diskreetne. Osakese minimaalne energia potentsiaalaugus  $E_1$  erineb alati potentsiaalse energia minimaalsest



väärtusest  $U_0$ . Lõpliku potentsiaalauku korral me peame vaatama ka olekuid väljaspool potentsiaalauku (koguenergia on suurem augu kõrgusest). Osutub, et väljaspool potentsiaalauku on energia pidev. Punkti algul vaadatud potentsiaalauku korral on  $E \geq U_0$  jaoks energia pidev, ülaltoodud joonisel on aga  $E \geq 0$  jaoks energia pidev.

4. 3-mõõtmeline potentsiaalauk. Leiame vaba osakese energia ja olekud 3-mõõtmelises potentsiaalaukus. Nagu me näeme, saab ülesande taandada eespool vaadatud ühemõõtmelise potentsiaalauku juhule. Vaadeldav lihtne mudel on vajalik näiteks ideaalse gaasi kirjeldamisel, kus gaas asetseb kinnises anumal. Sellist kinnist anumal võime vaadata kui kolmemõõtmelist potentsiaalauku, kus anuma sees on potentsiaalenergia võrdne nulliga, väljaspool aga lõpmata suur.

Olgu meil kuubiline potentsiaalauk. Kuubi sees olgu  $U = 0$ , väljaspool aga lõpmatu. Ristkoordinaadistikus olgu potentsiaalenergia järgmine

$$U = 0, \text{ kui } 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq a, 0 \leq z \leq a,$$

ülejäätunud ruumis aga lõpmatu.

Arvestades, et väljaspool kuubi osake liikuda ei saa, tuleb meil lahendada vaba osakese Schrödingeri võrrand

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \frac{2ME}{\hbar^2} \varphi = 0$$

kuubi sees. Otsitav lahend peab olema selline, mis kuubi pinnal oleks võrdne nulliga.

Kuna meil kõik muutujad esinevad võrrandis samaväärselt, on otstarbekas otsida lahendit kujul

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z).$$

Näitame, et nüüd saame võrrandi lahendada muutujate eraldamise meetodil, kusjuures iga muutuja jaoks saame juba varem lahendatud ülesande.

Asendades ülaltoodud lahendi võrrandisse, võttes tuletised ja jagades  $\varphi$ -ga, saame

$$\frac{1}{\varphi_1} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} + \frac{1}{\varphi_2} \frac{d^2 \varphi_2}{dy^2} + \frac{1}{\varphi_3} \frac{d^2 \varphi_3}{dz^2} + k^2 = 0,$$

kus me kasutasime tähistust

$$k^2 = \frac{2ME}{\hbar^2} .$$

Saadud võrrand on ekvivalentne kolme järgmise võrrandiga

$$\frac{1}{\varphi_1} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} + k_1^2 = 0, \quad \frac{1}{\varphi_2} \frac{d^2 \varphi_2}{dy^2} + k_2^2 = 0, \quad \frac{1}{\varphi_3} \frac{d^2 \varphi_3}{dz^2} + k_3^2 = 0 ,$$

kus

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2 .$$

Tõepoolest, kirjutades näiteks võrrandi kujul

$$\frac{1}{\varphi_1} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} = -\frac{1}{\varphi_2} \frac{d^2 \varphi_2}{dy^2} - \frac{1}{\varphi_3} \frac{d^2 \varphi_3}{dz^2} - k^2 ,$$

näeme, et vasak pool sõltub ainult x-koordinaadist, parem pool y- ja z-koordinaadist. Selline võrdus saab kehtida ainult siis kui mõlemad pooled on võrdsed mingi konstandiga. Tähistades seda  $-k_1^2$ , saame ülaltoodud võrrandi  $\varphi_1$  jaoks. Samamoodi edasi toimides saame ka ülejäänud võrrandid.

Nende võrrandite lahendid, mis rahuldavad ääritingimusi  $\varphi_i(0) = \varphi_i(a) = 0$ ,  $i = 1, 2, 3$ , on juba varem leitud ja meie poolt kasutatavates tähistustes oleks nad järgmised

$$\varphi_1(x) = A \sin(k_1 x), \quad k_1 a = n_1 \pi ,$$

$$\varphi_2(y) = B \sin(k_2 y), \quad k_2 a = n_2 \pi ,$$

$$\varphi_3(z) = C \sin(k_3 z), \quad k_3 a = n_3 \pi ,$$

kus  $n_1, n_2, n_3$  on sõltumatud täisarvud väärtustega 1,2,3, ...

Osakese energia avaldub kujul

$$E = \frac{\hbar^2}{2M} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) \equiv \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) .$$

Tavaliselt kirjutatakse see järgmiselt

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ma^2} n^2 ,$$

kus

$$n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2, \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \dots .$$

Sellisel kirjutades on valem formaalselt sama, nagu ühedimensioonaaalsel juhul, ainult et nüüd pole  $n$  üldiselt täisarv.

Kirjutame ilma tõestuseta välja normeeritud lainefunktsiooni

$$\varphi_n(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \sin \frac{n_1\pi x}{a} \sin \frac{n_2\pi y}{a} \sin \frac{n_3\pi z}{a} .$$

Nagu näeme, on ka 3-mõõtmelises potentsiaalaugus energia diskreetne. Erinevus on selles, et nüüd võib ühele energia väärtusele vastata mitu erinevat olekut (ja erinevat lainefunktsiooni). Põhiolekule  $n_1 = 1, n_2 = 1, n_3 = 1$  ehk lühidalt (1,1,1) vastab energia

$$E = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2Ma^2}$$

ja üks olek. Järgmisele energianivoole energiaga

$$E = \frac{3\hbar^2\pi^2}{Ma^2} ,$$

mille saame (2,1,1), (1,2,1) või (1,1,2) korral, vastab aga juba 3 olekut.

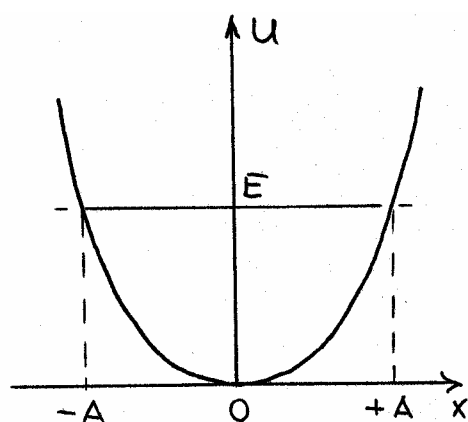
Selliseid olukordi, kus ühele energiale vastab mitu erinevat olekut, tuleb kvantteoorias sageli ette. Sel juhul öeldakse, et vastav energianivoo on kõdunud.

5. Punktides 3 - 6 vaadatud lihtsad ülesanded on näited kvantmehaanikas ette tulevatest põhiülesannetest. Mitmesuguste osakeste hajumisprobleemide lahendamisel me puutume kokku ülesannetega, mis on analoogilised punktides 3 - 5 vaadatud barjääriülesannetega. Erinevate seotud süsteemide (aatomid, molekulid) statsionaarsete olekute arvutamisel puutume me kokku erinevat tüüpi potentsiaalaukudega. Kõikide reaalsete füüsikaliste süsteemide korral on vastavate ülesannete lahendamine muidugi märksa keerukam. Seetõttu jätame me oma kursuse järgnevas osas lahenduskäigud enamasti esitamata ja anname ainult lõpptulemused.

## 7. Harmooniline ostsillaator

### Klassikaline ostsillaator, kvantostsillaator, energia diskreetsus, nullenergia, lahendi üldkuju, Hermite'i polünoomid, tõenäosusjaotus

Antud punktis vaatame harmoonilist ostsillaatorit, mis nii klassikalises kui ka kvantteoorias etendab väga olulist rolli. Seejuures sisaldab ostsillaatori ülesande lahendamine kõiki põhietappe, mida tuleb järgida ka teiste tõsisemate ülesannete lahendamisel. Järgnevas teeme need põhiosas läbi, leides harmoonilise ostsillaatori energia.



Klassikaline ostsillaator. Klassikalises mehaanikas näidatakse, et elastsusjõu  $F = -kx$  mõjul tekivad harmoonilised võnkumised

$$x = A \cos(\omega t + \alpha) .$$

Kui võnkuv osake on massiga  $M$ , siis on võnkumiste sagedus

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{M}} .$$

Elastsusjõu korral on meil tegemist paraboolse potentsiaalse energiaga

$$U = \frac{kx^2}{2} \equiv \frac{M\omega^2 x^2}{2} .$$

Ostsillaatori koguenergia

$$E = \frac{Mv^2}{2} + \frac{M\omega^2 x^2}{2} = \frac{M\omega^2 A^2}{2}$$

on seotud võnkumiste amplituudiga. Energia on pidev  $0 \leq E < \infty$ .

Kvantostsillaator. Järgnevalt vaatame harmoonilist ostsillaatorit kvantteoorias ja näitame, et ostsillaatori energia on diskreetne. Selleks tuleb meil lahendada Schrödingeri võrrand ülaltoodud paraboolse potentsiaalse energiaga

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2M}{\hbar^2} \left( E - \frac{M\omega^2 x^2}{2} \right) \varphi = 0 .$$

Põhitulemus, mille me järgnevalt tuletame, on selles, et kvantmehaanilise ostsillaatori energia on diskreetne ja avaldub kujul



$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Esimene etapp ülesande lahendamisel seisneb selles, et teisendame võrrandi muutuja vahetuse ja uue parameetri defineerimisega kujule, kus on üks dimensioonitu parameeter. Võtame uue muutuja

$$\xi = \alpha x,$$

kus

$$\alpha^2 = \frac{M\omega}{\hbar}$$

ja parameetri

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar}.$$

Peale lihtsaid teisendusi saame võrrandi

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\varphi = 0.$$

Selle pealtnäha lihtsa võrrandi lahendamine ei ole lihtne, sisaldades mitu olulist vaheetappi. Kuna lainefunktsioon (võrrandi lahend) peab olema lõplik, tuleb kõigepealt analüüsida lahendi käitumist suurte muutuja väärtuste korral (muudel väärtustel probleeme ei teki).

Vaatame võrrandit suurte  $|\xi|$  korral ja leime lahendi, mis oleks  $|\xi| \rightarrow \infty$  korral lõplik.

Oletades, et  $\xi^2 \gg \lambda$ , saame võrrandi

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} - \xi^2\varphi = 0.$$

Selle võrrandi lahend on võrdeline suurusega  $\exp(-\xi^2/2)$  (või suurusega  $\exp(\xi^2/2)$ ).

Võtame

$$\varphi(\xi) \sim e^{-\frac{\xi^2}{2}}.$$

Arvutades tuletised

$$\frac{d\varphi}{d\xi} \sim -\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad \frac{d^2\varphi}{d\xi^2} \sim \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} - e^{-\frac{\xi^2}{2}} \approx \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

näeme, et antud lahend sobib suurte  $|\xi|$  korral ja läheneb  $|\xi| \rightarrow \infty$  korral nullile. Suurus  $\exp(\xi^2/2)$  rahuldab samuti võrrandit, kuid ei ole  $|\xi| \rightarrow \infty$  korral lõplik.

Teades lahendi asümptootilist kuju, on otstarbekas otsida ostsillaatori võrrandi lahendit kujul

$$\varphi(\xi) = H(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

kus  $H(\xi)$  on mingi funktsioon, mida me järgnevalt hakkame otsima. Selleks tuleb leida, millist diferentsiaalvõrrandit  $H(\xi)$  rahuldab. Arvutades tuletised

$$\frac{d\varphi}{d\xi} = H'(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} - \xi H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} = H''(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} - 2\xi H'(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \xi^2 H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} - H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

saame me peale teise tuletise asendamist võrrandisse ja eksponentsiaalteguriga taandamist diferentsiaalvõrrandi

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0.$$

Esitame otsitava funktsiooni  $H(\xi)$  astmereana

$$H(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots = \sum_{n=0} a_n \xi^n.$$

Siin võime piirduda ainult positiivsete astmetega, sest negatiivsed astmed viivad võrrandis  $\xi \rightarrow 0$  korral singulaarsetele liikmetele. On põhjust arvata, et  $\xi \rightarrow 0$  korral on lahend pidev.

Arvutades tuletised ja asendades võrrandisse, saame me uued võrrandid (nüüd juba algebralised) kordajate  $a_n$  määramiseks. Arvutame kõigepealt  $H'$  ja  $H''$

$$H'(\xi) = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \dots$$

$$H''(\xi) = 2a_2 + 2 \cdot 3a_3\xi + 3 \cdot 4a_4\xi^2 + \dots = \sum_{n=0} (n+1)(n+2)a_{n+2}\xi^n.$$

Kuna võrrandis esineb  $2\xi H'$ , siis kirjutame selle järgmiselt

$$2\xi H'(\xi) = 2(a_1\xi + 2a_2\xi^2 + \dots) = 2\sum_{n=0} na_n\xi^n.$$

Võrrandisse asendades saame, et järgmine astmerida peab olema samaselt võrdne nulliga

$$\sum_{n=0} [(n+1)(n+2)a_{n+2} + (\lambda - 1 - 2n)a_n] \xi^n = 0.$$

Selline võrdus saab kehtida ainult siis kui kõikide  $\xi$  astmete ees olevad kordajad on võrdsed nulliga. Võttes  $\xi^n$  ees oleva liikme võrdseks nulliga, saame me järgmise seose kordaja  $a_{n+2}$  ja  $a_n$  vahel

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)} a_n.$$

Saadud rekurrentne seos võimaldab arvutada reaksarenduse kõrgema astme kordajaid madalamate kaudu. Ilmselt on kõik paarisarvulise astmega liikmed määratud kordajaga  $a_0$  ja paaritu arvulise astmega liikmed kordajaga  $a_1$ .

Lihtne on veenduda selles, et kordajatele  $a_0$  ja  $a_1$  mingeid kitsendusi pole. Seetõttu saame  $H(\xi)$  võrrandi lahendiks kaks sõltumatut rida: üks on paarisastmete rida, mis määratud kordajaga  $a_0$  ja teine paaritute astmete rida, mis on määratud kordajaga  $a_1$ .

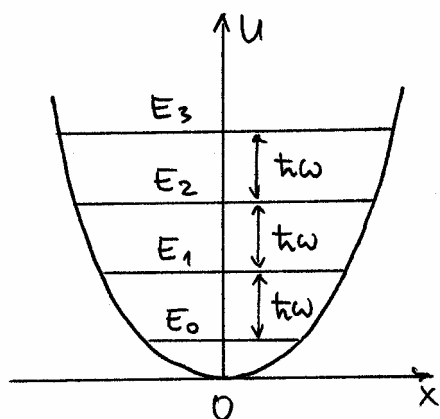
Osutub, et antud probleemi lahendiks lõputu astmerida ei sobi ja seetõttu peab astmerida olema lõplik. Saab näidata, et lõputu rida, mille kordajad on antud eelneva rekurrentse seosega, käitub asümptootiliselt nagu  $\exp(\xi^2)$ . Sel juhul aga ei ole meie lahend  $\varphi(\xi)$  enam  $|\xi| \rightarrow \infty$  korral lõplik.

Nõudes, et astmerida katkeks liikmel  $\xi^n$ , st  $a_n \neq 0$ , aga  $a_{n+2} = 0$ , tuleb nõuda, et parameeter  $\lambda$  rahuldaks tingimust

$$\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Arvestades nüüd parameetri  $\lambda$  seost energiaga, saame, et harmoonilise ostsillaatori energia on diskreetne

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Ostsillaatori energianivood lähevad alates minimaalsest energiast  $E_0$  ülespoole võrdse vahemaa  $\hbar\omega$  kaupa. Nagu me jällegi näeme, on ostsillaatori minimaalne energia ehk nullenergia

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

nullist erinev. See, et minimaalne energia ei võrdu nulliga, on jällegi arusaadav määramatuse seostest. Harmooniline ostsillaator ei saa seega olla kunagi paigal. Liikumist  $E_0$  korral nimetatakse ostsillaatori nullvõnkumiseks.

Osutub, et nullvõnkumised on olemas ja nad avalduvad mitmete füüsikanähtuste juures. Kristallvõre soojusliikumist saab näiteks vaadata kristallvõre võnkumistena. Kui klassikalise teooria järgi peaks  $T \rightarrow 0$  korral soojusliikumine lakkama, siis kvantteooria järgi jäävad ka absoluutse nulli korral alles kristallvõre nullvõnkumised. Neid võnkumisi saab katseliselt kontrollida valguse hajumiskatsetes kristallilt. Valguse hajumine on tingitud kristallvõre võnkumistest. Katse näitab, et  $T \rightarrow 0$  korral hajumine ei kao, vaid läheneb teatud piirile. See asjaolu kinnitabki nullvõnkumiste olemasolu.

Vaatame veel lühidalt ka lainefunktsioone, mis kirjeldavad energiatele  $E_n$  vastavaid ostsillaatori olekuid. Nagu me nägime, sõltuvad nad iga  $n$  väärtuse korral  $n$ -astme polünoomidest

$$H_n(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k .$$

Neid nimetatakse Hermite'i polünoomideks ning on sõltuvalt  $n$ -väärtusest, kas paaris- või paarituastmelised. Kirjutame siin mõned neist välja

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi ,$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \dots .$$

Tavaliselt valitakse  $a_0$  või  $a_1$  selliselt, et  $H_n(\xi)$  kõrgema astme kordaja oleks  $2^n$ . Sel juhul osutub, et Hermite'i polünoomid saab arvutada järgmisest lihtsast valemist

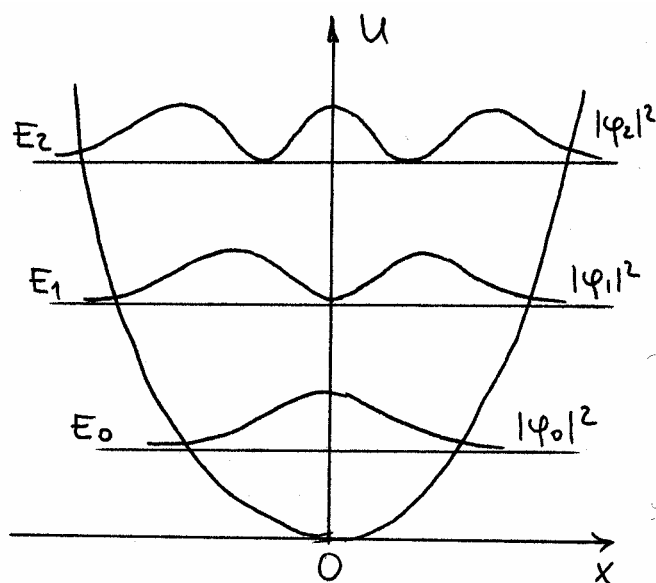
$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} .$$

Energiale  $E_n$  vastav lainefunktsioon avaldub kujul

$$\varphi_n(\xi) = N_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) ,$$

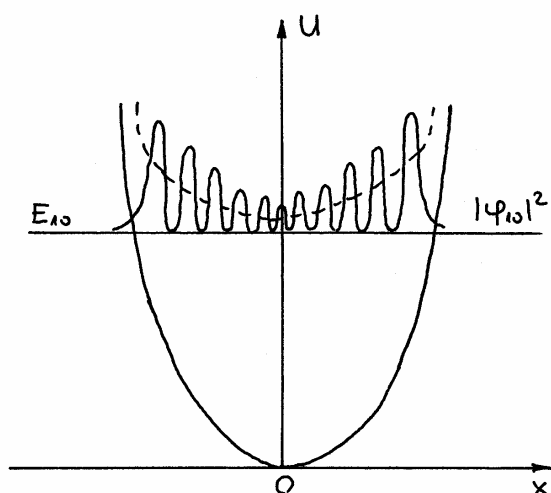
kus  $N_n$  on normeerimistegur. Minnes tagasi esialgsele muutujale, oleks  $\varphi_n(x)$  kuju

$$\varphi_n(x) = N_n e^{-\frac{M\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} x\right) .$$



Et saada ettekujutust harmoonilise ostsillaatori käitumisest, joonestame nii nagu potentsiaalaugu korral välja mõnede madalamate energianivoode tõenäosustihedused. Nagu jooniselt on näha, erineb mikroosakese käitumine oluliselt klassikalise ostsillaatori omast. Klassikalise ostsillaatori korral on osakese kiirus nullpunktis suurim ja seetõttu on osakese leidmise tõenäosus  $x=0$  korral väikseim. See kasvab maksimaalsele hälbele lähenemisel ja  $x = \pm A$  (klassikaline hälve) korral on tõenäosus suurim. Mikroosakese leidmise tõenäosus põhiolekus on kõige suurem potentsiaalaugu keskel

(nullpunktis), järgnevas olekus energiaga  $E_1$  on aga tõenäosus keskel võrdne nulliga.



Suurte energiatega  $E_n$  korral muutub erinevus klassikalise ja kvantliikumise vahel väiksemaks ning mõlemad tõenäosustihedused on põhimõtteliselt sarnased.

Kõrvaloleval joonisel on kujutatud vastavad kõverad  $n = 10$  korral. Nagu näha, langeb keskmistatud tõenäosustihedus küllalt hästi kokku ostsillaatori klassikalise liikumise tõenäosustihedusega (katkendlik joon).

### Kommentaari:

Kõikide senivaadatud probleemide juures me oleme vaadanud osakese käitumist ka klassikalise teooria seisukohalt ja näidanud, millised erinevused ilmnevad mikromaailmas. Seda me teeme kahel põhjusel.

Esiteks, et näidata mikromaailmas toimivate nähtuste olulist erinevust makromaailmas toimivatest. Teiseks seetõttu, et piirjuhul  $\hbar \rightarrow 0$  läheb kvantmehaanika üle klassikaliseks mehaanikaks.  $\hbar \rightarrow 0$  tähendab ka seda, et kui energiad on suured, siis on kvantmehaanikast saadud tulemused sarnased klassikalistega. Nii on ka ostsillaatori korral, kus suurte  $n$  korral on tõenäosustihedus sarnane klassikalise ostsillaatori võnkumise tõenäosustihedusega. Nagu ka eespool toodud jooniselt on näha, on juba  $n = 10$  korral erinevus väike ja kvanttõenäosuse keskmistamisel saaksime klassikalise tõenäosuse.

Olgugi, et ostsillaatori energianivood on diskreetsed, on suurte  $n$  korral energia praktiliselt pidev. Arvutades naabernivoode energia suhtelise erinevuse

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{2}{2n+1},$$

on lihtne veenduda, et  $n \rightarrow \infty$  korral

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} \approx \frac{1}{n} \rightarrow 0.$$