Kvantmehhaanika

(Siin vaid ülilühike ülevaade!)

- **Klassikalised osakesed ja lained**
- **Kvantmahhaanika vajalikkus**
- **Kvantmehhaanika alused**

Klassikalised osakesed ja lained

Klassikalised osakesed – Newtoni mehhaanika.
Ta vastab küsimustele nagu:

- Milline on orbiidil liikuva tehiskaaslase orbiit?
- Kui tulistatakse välja rakett siis kuhu ta langeb?
- Kui piljardipalli lüüa teatud nurga all, siis kuidas teised pallid käituvad?

Klassikalist osakest kirjeldab:
Mass (m), laeng (q), asukoht (**r**(t)), kiirus (**v**(t))

Mõjutades osakest jõuga F saame osakese liikumisvõrrandi:

$$m\frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F} \qquad (1)$$

- **Kui jõud ning osakese algne asukoht ning kiirus on teada, siis võime ta tulevase asukoha täpselt välja arvutada.**
- **Osakest iseloomustavad suurused nagu näiteks energia muutuvad pidevalt.**

$$\text{Osakese moment e. impulss}: \vec{p} = m\vec{v} \qquad (2)$$

$$\text{Osakese pöördmoment}: \vec{l} = r \times \vec{p} \qquad (3)$$

$$\text{Kineetiline energia}: KE = \frac{p^2}{2m} \qquad (4)$$

Klassikalised lained

Lainete näited: Ookeani lained, helilained, lained viiulikeeltes, elektromagnetlained (valgus),....
Lainete kirjeldamine: Amplituud, kiirus, sagedus, lainepikkus …, aga mitte mass ja asukoht nagu osakeste puhul oli.
Klassikaline lainevõrrand:

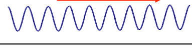
amplituud

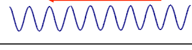
$$\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial t^2} = 0 \qquad (5)$$

kiirus

Lainevõrrandi üldine lahend:

$$\psi(x,t) = A\exp[i(kx - \omega t)] + B\exp[i(kx + \omega t)] \qquad (6)$$



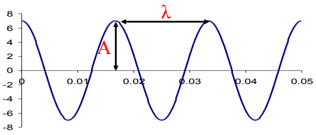


Seal olid A ja B lainete amplituudid, k- lainearv ja ω-ringsagedus.

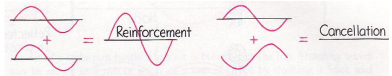
$$Lainepikkus: \lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (7)$$

$$Sagedus: f = \frac{\omega}{2\pi} \quad (8)$$

$$Kiirus: v = \frac{\omega}{k} = \lambda f \quad (9)$$

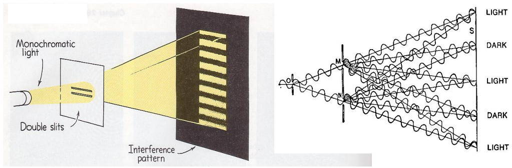


Lainete interferents:



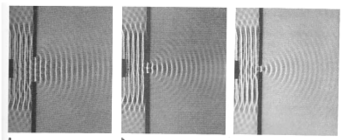
Lainete summeerumine

Lainete kustutamine

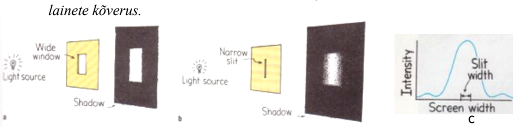


Kui monokromaatiline valgus läbib kahte pilu saab pilude taha asetatud ekraanil jälgida tüüpilist ribadest koosnevat interferentsi pilti.

Lainete difraktsioon:



Tasapinnaline laine läbib erineva suurusega avasid. Mida väiksem on ava, seda rohkem kalduvad lained ava äärtel ja seda suuremaks muutub lainete kõverus.



(a) Suure ava puhul saame terava pildi. (b) Kui ava muutub väikeseks, siis saame uduse e. difrageerunud pildi. (c) Difrageerunud valguse intensiivsuse sõltuvus.

Laine grupid ja dispersioon:

Tasalaine:

Faasi $kiirus: v_p = \frac{\omega}{k} = \lambda f$

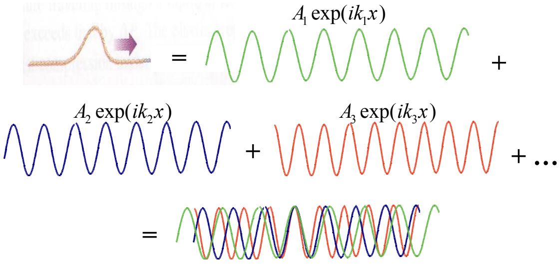
$$\psi(x,t) = A\exp[i(kx - \omega t)]$$

Lainepakett:
või laine grupp

Milline on laine grupikiirus, v_g???

$$Grupikiirus: \boxed{v_g = \frac{d\omega}{dk}} \quad (10)$$

Lainepaketi moodustumine:



Fourier pöördteisendus $f(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\exp[i(kx-\omega t)]dk$ (11)

Lainepaketi moodustamine: näide

Püüame konstrueerida lainepaketi võrdse amplituudiga lainetest, mis on koondunud ümber punkti k_0 ning ulatuvad $\pm$k. Siis lainepakett on selline:

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\exp[i(kx-\omega(k)t)]dk$$
$$= \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \exp[i(kx-\omega(k)t)]dk \qquad (12)$$

Üldiselt ω sõltub k- st:

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \frac{d\omega}{dk}(k-k_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}(k-k_0)^2 + ...$$
$$= \omega(k_0) + v_g(k-k_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}(k-k_0)^2 + ... \qquad (13)$$

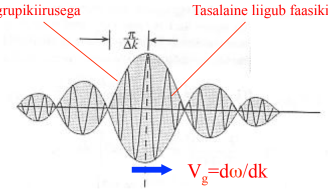
$$Kui\ \frac{d^2\omega}{dk^2} = 0, siis\ \omega(k) = \omega(k_0) + v_g(k-k_0) \qquad (14)$$

Siis võrrand (12) teisendub:

$$f(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \exp[i(kx-\omega(k)t)]dk$$
$$= \exp[i(k_0 x - \omega(k_0)t)] \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \exp[i(k-k_0)(x-v_g t)]dk$$
$$= \underbrace{\frac{2\sin[\Delta k(x - v_g t)]}{x}}_{} \cdot \underbrace{\exp[ik_0(x-v_p t)]}_{} \qquad (15)$$

Pakett liigub grupikiirusega

Tasalaine liigub faasikiirusega.



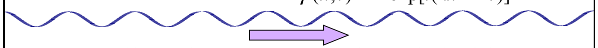
Lainete dispersioon:

Kui $\frac{d^2\omega}{dk^2} \neq 0$, siis faasikiirus sõltub k- st (ka lainepikkusest) ning keskkonda kutsutakse dispergeerivaks.

Dispergeerivas keskkonnas liiguvad individuaalsed tasalained erinevate faasikiirustega ning lainepaketi kuju muutub aja jooksul.

Lainete määramatus:

Tasalaine: $\psi(x,t) = A\exp[i(kx - \omega t)]$

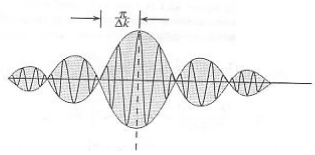


Lainepikkus (või lainearv k) on täpselt teada Δk=0, kuid asukoht on täielikult teadmata,

$\Delta x = \infty$

Lainepaketi, *mis on moodustatud tasalainetest piirkonnas Δk, lainepikkus (või lainearv) on vaid osaliselt kindel. Samamoodi on osaliselt kindel ka asukoht:*

$$\Delta x \sim \frac{\pi}{\Delta k}$$



Klassikalised lained

Üldiselt: $\boxed{\Delta x \cdot \Delta k \sim 1}$ (16)

Sageduste puhul: $\boxed{\Delta t \cdot \Delta \omega \sim 1}$ (17)

Näited

Näide 1. Newton näitas, et lainepikkusega λ merelainete faasikiirus avaldub:

$$v_p = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}}$$

kus g on raskuskiirendus. Näitame, et sel puhul on lainete grupikiirus täpselt pool faasikiirusest.

Lahendus:

Kuna $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, siis v_p jaoks võime kirjutada $v_p = \sqrt{\frac{g}{k}}$ ja $\omega = v_p k = \sqrt{gk}$

Siis saame: $$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{g}{k}} = \frac{1}{2} v_p$$

Kvantmehhaanika

- **Klassikalised osakesed ja lained**
- **Kvantmahhaanika vajalikkus**
- **Kvantmehhaanika alused**

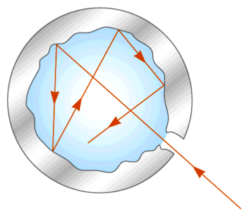
Kvantmehhaanika vajalikkus

Materjalid koosnevad mikroskoopilistest osakestest nagu molekulid, aatomid ja elektronid. Neid pole võimalik kirjeldada lähtudes klassikalisest füüsikast. Kui me tahame materjalide omadusi tundma õppida, peame pöörduma kvantmehhaanika poole.

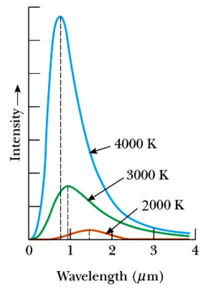
Mõned eksperimendid, mis viisid kvantmehhaanika loomisele.

20. saj. alguses tehti mitmeid katseid, millede tulemusi polnud võimalik seletada klassikalise füüsika teooriate abil. Vaatleme neist mõningaid.

Absoluutselt musta keha kiirgusspekter



Absoluutselt must keha



Eksperimentaalselt mõõdetud kiirgusspekter

Absoluutselt musta keha kiirgus.

Absoluutselt musta keha kiirguse intensiivsus lainepikkuste λ ja λ + dλ vahemikus avaldub:

$$dI = R(\lambda)d\lambda \qquad (18)$$

kus R(λ) on nn. kiirgusvõime.

Mõned eksperimentaalsed tähelepanekud:

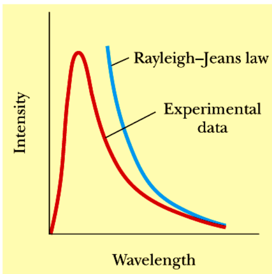
- Koguintensiivsus allub nn. Stefani seadusele:

$$I = \int_0^\infty R(\lambda)d\lambda = \sigma T^4 \qquad (19)$$

kus konstanti $\sigma = 5.67\times10^{-8}$ W m^{-2} K^{-4} kutsutakse Stefan-Boltzmanni konstandiks.

- Kiirgusvõime saavutab maksimumi kindlal lainepikkusel λ_{max}, mis omakorda sõltub temperatuurist (Wieni nihkereegel):

$$\lambda_{max} = \frac{2.898\times10^{-3}\,mK}{T} \qquad (20)$$

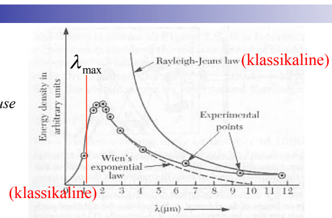


Klassikalise füüsika kohaselt (Rayleigh-Jeans) peaks musta keha kiirguse intensiivsus kasvama lõpmatult ultravioleti suunas:

$I(\lambda,T) = 2\pi c k_B T / \lambda^4$

(k_B - Boltzmanni konstant)

Musta keha kiirguse spekter.



Rayleigh-Jeansi ja Wieni klassikalisel füüsikal põhinevad teooriad ei suutnud kirjeldada musta keha kiirguse spektraalsõltuvust.
Plancki kvantteooria: Elektromagnetlaine sagedusega v vahetab energiat ainega kvantide kaupa, millede energia:

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (21)$$

Siin h on nn. Plancki konstant.

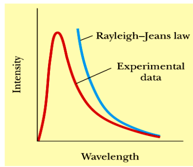
Valguslainetel on seega samuti kindlalt määratud energia nagu osakestelgi.

1900. aastal tuletas Max Planck valemi, mis täielikult kirjeldas eksperimentaalseid tulemusi:

$$I(\lambda,T) = 2\pi h c^2 / \lambda^5 (e^{hc/\lambda k_B T} - 1)$$

h- Plancki konstant

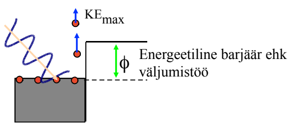
h = 6.626 x 10^{-34} J*s



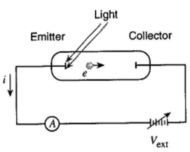
Kvandid olid sündinud!

Lained kui osakesed: Fotoelektriline efekt.

Fotoelektrilises eksperimendis lüüakse valguse mõjul ainest (metallist) välja elektrone.



Fotoelektriline efekt.

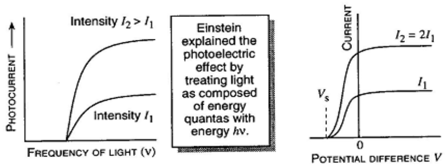


Kui valgus annab elektronile energia E_{em}, siis elektronid väljuvad metallist energiaga E_{em}-eϕ. Väljalöödud elektronide maksimaalne energia on määratud pidurdava pingega V_s ,

$$KE_{max} = \frac{1}{2} m v_{max}^2 = eV_s$$

Klassikalise laineteooria kohaselt peaks:
- KE_{max} peab olema võrdeline pealelangeva valguslaine intensiivsusega
- Elektronid peaksid väljuma metallist valguse suvalise lainepikkuse juures, kui vaid intensiivsus on küllaldane.
- Valguse sisselülitamise ning elektronide väljumise vahel peaks olema teatud ajaline nihe, kuna E=I * area * t.

Tegelikult märgati:
- KE_{max} oli sõltumatu valguse intensiivsusest!
- Eksisteeris kindel sagedus, millest väiksema sagedusega kiirgus ei suutnud intensiivsusest sõltumata elektrone välja lüüa!!
- Elektronid väljusid peaaegu momentaalselt- s.t. puudus oodatud ajaline nihe!!!



Fotoelektrilise efekti eksperimentaalsed tulemused.

Einsteini kvantteooria:

Valgus koosneb pisikestest osakestest (footonitest) millede energia on: $E = h\nu = \hbar\omega$

Energia jäävuse seadus: $KE_{\max} = h\nu - e\phi$ (22)

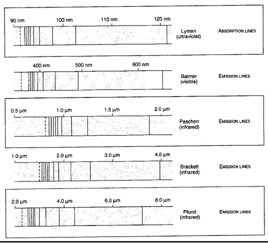
Piirsagedus avaldub siis: $\nu = \dfrac{e\varphi}{h}$

Osakesed kui lained : aatomspektrid

Klassikaline füüsika jäi kapitaalselt hätta aatomspektrite seletamisega. Lihtsaim aatom on teatavasti vesinikuaatom. Vesiniku neeldumisspekter koosneb kitsastest ribadest, millede lainepikkused alluvad seadusele:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^{\,2}} - \frac{1}{n_i^{\,2}}\right) \quad (23)$$

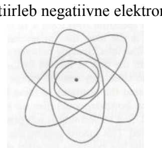
kus R=1.0973732 x 10^7 m^{-1} (Rydbergi konstant), n_f ja n_i on täisarvud.



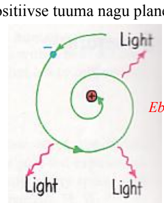
Vesiniku aatomspekter.
Lymani seeria: n_f=1;
Balmeri seeria: n_f=2;
Pascheni seeria: n_f=3;
.....

Kuidas seletada vesiniku spektrit?

Vesiniku aatom koosneb tuumast (prooton) ning elektronist. Rutherfordi järgi tiirleb negatiivne elektron ümber positiivse tuuma nagu planeet.



Rutherfordi aatomimudel.



Ebapüsiv orbiit!!!

Klassikalise füüsika kohaselt peaks selline elektron pidevalt kiirgama energiat ning lõpptulemusena peaks elektron langema tuuma**!**

Kuidas seletada vesiniku spektrit?

Bohri aatomimudel: Nagu ka Rutherfordi mudelis tiirlevad elektronid ümber tuuma, kuid nad saavad olla vaid orbiitidel, kus nende **pöördmoment on võrdne täisarvulise konstandi $\hbar$ kordne** ehk

$$mvr = n\hbar \quad (24)$$

kus n=1, 2, 3, … , m on elektroni mass, v on tema orbitaalne kiirus ja r on orbiidi raadius.
Kasutades seda postulaati sai Bohr vesiniku spektri kirjeldatud ning ühtlasi näitas ta, et **elektron kiirgab või neelab kiirgust vaid siis, kui ta läheb ühelt orbiidilt teisele.**

Bohri mudelist:

$$F = ma_c$$

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r} \quad (25)$$

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} = mv^2 \qquad (25)$$

Kineetiline energia on siis: $$KE = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (26)$$

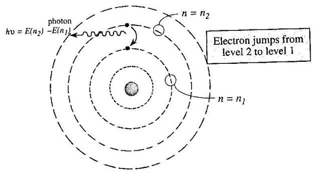
Potentsiaalne energia on elektrostaatiline energia: $$U = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (27)$$

Koguenergia: $$E = KE + U = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (28)$$

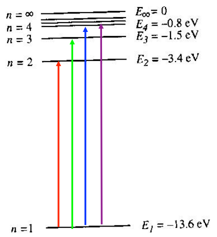
Bohri postulaatide kohaselt: $mvr = n\hbar$

$$\boxed{r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0}{me^2}(n\hbar)^2 = n^2 a_0} \text{ where } a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0}{me^2}\hbar^2 = 0.053\ nm. \qquad (29)$$

$$\boxed{E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{13.6\text{eV}}{n^2}.} \qquad (30)$$



Diskreetsed spektraaljooned on seega põhjustatud elektroni üleminekust ühelt energiatasemelt teisele.



Bohri postulaat $mvr = n\hbar$ töötab üsna hästi vesiniku aatomi korral, kuid tema füüsikaline sisu jääb segaseks.

Kui elektron nüüd läheb tasemelt n_i tasemele n_f neelates energia hv:

$$h\nu = E_{n_f} - E_{n_i} = 13.6\text{eV}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right).$$

$$\frac{hc}{\lambda} = 13.6\text{eV}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right).$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{13.6\text{eV}}{\text{hc}}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right).$$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right).$$

Just seda märgati ka eksperimentaalselt!

$$R = \frac{13.6\text{eV}}{\text{hc}} = 1.0973732 \times 10^7\ \text{m}^{-1}$$

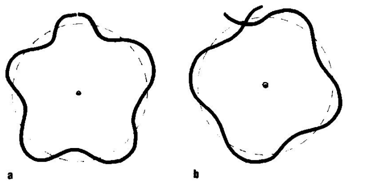
De Broglie osakeste lained

Valgus: laine ja osake!
- Valgus käitub lainena, kui ruumi mõõtmed on valguse lainepikkuse suurusjärgus.
- Valgus käitub osakestena (kiirtena) kui ruumi mõõtmed on palju suuremad kui valguse lainepikkus.

Laine ja osakese duaalsus rakendub ainele nagu aatom, elektron, tellis, ...?
Seega:
Aine käitub teatavates tingimustes nagu laine!

De Broglie hüpotees: **Ainel on lainelised omadused!**

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (30)$$



(a)Oma orbiidil tiirlevad elektronid moodustavad seisvaid laineid vaid siis, kui orbiiti mahub täisarv lainepikkusi.
(b)Laine ei moodusta seisvat lainet.

$$n\lambda = 2\pi r \quad (31)$$

Kuna $\lambda = \dfrac{h}{p}$, siis saame

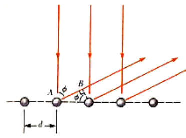
$$mvr = n\hbar$$

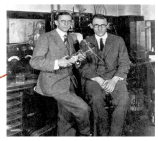
See on täpselt Bohri postulaat!

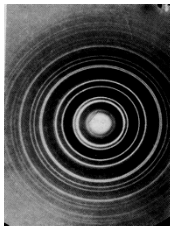
Elektroni lainete otsene tõestus: Davisson-Germeri eksperiment

$$d\sin(\phi)=n\lambda \quad (32)$$

Saadi samasugune sõltuvus nagu ka röntgenikiirte ("valguse") difraktsiooni puhul!







50 keV elektronide difraktsioon Cu_3Au sulami kilelt.

Näiteid

Näide 2. Miks me näiteks pesapallil ei näe häguseid piirjooni?
Lahendus: Pesapall massiga140 g liikudes kiirusega 27 m/s omab lainepikkust

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63x10^{-34}\,J\cdot s}{0.14kg\cdot 27m/s} = 1.75\times10^{-34}m$$

see on väiksem kui tuum!

Näide 3. Milline on elektronide lainepikkus, kui nende kineetiline energia on 13.6 eV ?

Lahendus: $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{\sqrt{2mKE}} = 1.9\times10^{-10}m = 1.9\,\mathring{A}$

Kvantmehhaanika

- **Klassikalised osakesed ja lained**
- **Kvantmahhaanika vajalikkus**
- **Kvantmehhaanika alused**

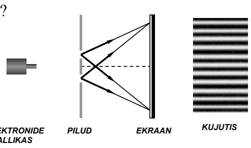
Kvantmehhaanika alused.

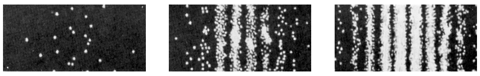
Mis asjad need "aine lained" ikkagi on?

Klassikalised lained: võngub õhu tihedus häälelainetes, võngub keele asukoht viiulikeele lainetes.....

Ainega seotud laine: Mis siin võngub?

Kui me tavaliselt mõtleme elektronist kui punktlaengust, siis nende lainelist loomust näeme me näiteks kaksikpilu eksperimendist.





Pärast 28 elektroni | Pärast 1000 elektroni | Pärast 10,000 elektroni

***Tõenäosus**, et elektronid tabavad heledaid ribu on suurem kui tõenäosus, et nad satuvad tumedatele aladele.*

Lainefunktsioon ψ(x,t) ja selle tähendus

ψ(x,t) ⟺ seotud tõenäosusega.

Tõenäosus osakese leidmiseks koordinaadivahemikus dx kohas x on

$$P(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2\, dx$$

kus $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi(x,t)\cdot\Psi(x,t)^*$ on mõõdetav kui tõenäosuse tihedus. Samal ajal pole ψ(x,t) ise mõõdetav!

ψ(x,t) mõned omadused:

- ψ(x,t) on ühene ja pidev funktsioon koordinaadist x ja ajast t.
- Tõenäosuse summa üle kogu ruumi peab olema 1 ehk

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \qquad (30)$$

Näited

Näide 4. Osakese lainefunktsioon on kujul

$$|\Psi(x,t)| = C\exp(-|x|/x0)$$

kus C ja x0 on konstandid. (a) Leida konstandi C väärtus nii, et lainefunktsioon oleks normeeritud. (b) Milline on osakese leidmise tõenäosus punktide –x0 ja x0 vahel?

Lahendus: (a) $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} C^2 \exp(-2|x|/x0)dx = C^2 x0 = 1$

$$C = \frac{1}{\sqrt{x0}}$$

(b) $P = \int_{-x0}^{+x0} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-x0}^{+x0} C^2 \exp(-2|x|/x0)dx = C^2 x0(1-e^{-2}) = 1-e^{-2} = 86.75\%$

Kvantmehhaanika fundamentaalne probleem on selline:

Kui on teada lainefunktsioon alghetkel t=0, kuidas leida lainefunktsiooni suvalisel ajahetkel t. - Schrödingeri võrrand!

Schrödingeri võrrand

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}} \qquad (31)$$

kus m on osakese mass ja U(x) on potentsiaalne energia.

Seda võrrandit ei saa kuidagi tuletada mingitest muudest valemitest- ta on kvantmehhaanika põhivõrrand!

Kui U võrrandis ei sõltu ajast, siis võib ajast sõltumatu osa ja ajast sõltuva osa võrrandis eraldada:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t) \qquad (32)$$

Asetades võrrandi 32 võrrandisse 31 saame

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\phi(t)+U(x)\psi(x)\phi(t)=i\hbar\psi(x)\frac{d\phi(t)}{dt}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)=i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}=E \quad (33)$$

kus E peab olema konstantne. Siis 33 teisendub

$$i\hbar\frac{d\phi(t)}{dt}=E\phi(t) \quad (34)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x) \quad (35)$$

$$i\hbar\frac{d\phi(t)}{dt}=E\phi(t) \Rightarrow \phi(t)=e^{-i\frac{E}{\hbar}t}=e^{-i\omega t} \text{ where } E=\hbar\omega$$

E on konstantne osakese energia!

$$\text{so } \boxed{\Psi(x,t)=\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}} \quad (36)$$

kus ψ(x) on määratud võrrandiga

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)}$$

- s.o. nn. ajast sõltumatu Schrödingeri võrrand.

$$|\Psi(x,t)|^2=|\psi(x)|^2$$

on ajast sõltumatu. Sel põhjusel selle võrrandi lahendeid nimetatakse STATSIONAARSETEKS olekuteks – tõenäosus on ajas muutumatu ja koguenergia E on jääv.

Operaatorid

Ajast sõltumatu Schrödingeri võrrand:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x) \quad (35)$$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)]\psi(x)=E\psi(x)$$

$$Hamiltoni\ operaator: \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x) \quad (37)$$

$$Kineetilise\ energia\ operaator\ K\hat{E}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \quad (38)$$

$$Momendi\ operaator: \hat{p}=-i\hbar\frac{d}{dx} \quad (39)$$

$$Koordinaadi\ operaator: \hat{x}=x \quad (40)$$

Siis võib ajast sõltumatu Schrödingeri võrrandi kirjutada kujul :

$$\hat{H}\psi(x)=E\psi(x) \quad (41)$$

Tõenäosed väärtused

Klassikalises füüsikas saame osakese omaduste kohta täpseid väärtusi. Kvantmehhaanikas aga saame vaid tõenäosed väärtused igale omadusele, mida me operaatoriga kirjeldame. Näiteks mingi omaduse A kohta saame vaid:

$$<A>=\int_{-\infty}^{+\infty}\hat{A}P(x,t)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,t)^*\hat{A}\Psi(x,t)dx \quad (42)$$

Osakese positsiooni jaoks saame:

$$<x>=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,t)^*x\Psi(x,t)dx \quad (43)$$

Osakese momendi jaoks analoogiliselt:

$$< p >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)^* \hat{p} \Psi(x,t) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)^* \frac{d\Psi(x,t)}{dx} dx \qquad (44)$$

Standardhälve - määramatus

Osakese asukohtadeks mõõdeti korduvate mõõtmistega sellised väätused: $x_1=3.5$, $x_2=3.7$, $x_3=2.5$, $x_4=2.8$, …., $x_N=3.4$,

Osakese keskmine (tõenäoline) positsiooni väärtus on siis

$$< x >= \frac{x_1 + x_2 + \ldots x_N}{N} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i}{N} \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)^* x \Psi(x,t) dx$$

Standardhälve (**määramatus**) on:

$$\Delta x = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N} (x_i - < x >)^2}}{N} = \sqrt{< x^2 > - < x >^2}$$

Näide 4 (jätk)

Näide 4. Osakese lainefunktsioon on selline:

$$\Psi(x,t) |= C \exp(-|x|/x0)$$

kus C ja x0 on konstandid. (c) Milline on koordinaadi x tõenäoline väärtus? (d) Milline on määramatus?

Lahendus: Näite (a) osast saime $C = \frac{1}{\sqrt{x0}}$ **so** $\Psi(x,t) |= \frac{1}{\sqrt{x0}} \exp(-|x|/x0)$

(c) $$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)^* x \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x0} x \exp(-|x|/x0) dx = 0$$

(d) $$< x^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{1}{x0} \exp(-|x|/x0) dx$$

$$= \int_{-\infty}^{0} x^2 \frac{1}{x0} \exp(x/x0) dx + \int_{0}^{\infty} x^2 \frac{1}{x0} \exp(-x/x0) dx$$

$$= 2\int_{0}^{\infty} x^2 \frac{1}{x0} \exp(-x/x0) dx = 4x0^2$$

$$\Delta x = \sqrt{< x^2 > - x^2} = \sqrt{< x^2 >} = 2x0$$

Kvantmehhaanika

- **Määramatuse printsiip**
- **Schrödingeri võrrandi rakendamine**

Vaba osake ruumis

Heisenbergi määramatuse printsiip

Klassikaliste lainete jaoks leidsime, et

$$\Delta x \cdot \Delta k \sim 1$$

Kuna $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ saame $\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar.}$ (45)

Kui osakese asukohta on mõõdetud täpsusega Δx ja samaaegselt on mõõdetud momenti täpsusega Δp, siis kahe täpsuse korrutis ei saa olla väiksem kui $\hbar$

Kolmemõõtmelise juhu jaoks

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2, \Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2 \text{ ja } \Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$$

Samamoodi võrdusest $\Delta t \cdot \Delta\omega \approx 1$ *ja* $E = \hbar\omega$ *saame* $\boxed{\Delta t \cdot \Delta E \approx \hbar}$ (46)

Näited

Näide 5. Elektronile mõõdeti kiiruseks 5.00x10³ m/s täpsusega 0.003 protsenti. Leida elektroni asukoha määramatus.

Lahendus:

$$\Delta p = m\Delta v = 9.1\times10^{-31}kg \times 0.003\% \times 5.00\times10^{3} m/s$$
$$= 1.36\times10^{-31} kg\cdot m/s$$
$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{\Delta p} \approx 7.69\times10^{-4} m$$

Näide 6. Spektraaljoone laius. Kuigi ergastatud aatom võib kiirata suvalisel ajamomendil alates t=0 kuni lõpmatuseni, toimub tõenäoline kiirgamine pärast teatud aega, mida nimetatakse elueaks τ. Kui $\tau=10^{-8}$ s, siis milline oleks määramatuse printsiibi kohaselt sellise kiirguse joone laius $\Delta\nu$?

Lahendus:

$$\Delta t \approx 10^{-8} s$$
$$\Delta\nu \geq \frac{1}{\Delta t} \approx 10^{8} Hz$$

Schrödingeri võrrand vaba osakese jaoks

- **Püüame leida Schrödingeri võrrandi lahendit vaba osakese jaoks:**

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\exp(i\omega t) \quad (36) \text{ kus } \omega = E/\hbar.$$

$\psi(x)$ **võrrandis on määratud ajast sõltumatu Schrödingeri võrrandiga**

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)]\psi(x) = E\psi(x) \qquad (35)$$

Eeldame, et potentsiaalse energia võime võtta nulliks, siis

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \qquad (48)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \qquad (48') \quad \text{kus } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ on lainearv.}$$

Võrrandi 48' lahendiks on $\psi(x) = A\exp[ikx] + B\exp[-ikx]$ (49)

Ajast sõltuv vaba osakese lainefunktsioon on siis

$$\Psi(x,t) = A\exp\left[ik(x-\frac{\omega}{k}t)\right] + B\exp\left[-ik(x+\frac{\omega}{k}t)\right] \qquad (49)$$

*kus esimene liige kujutab endast lainet mis kulgeb **+x** suunas kiirusega ω/k ja teine liige lainet, mis kulgeb sama kiirusega suunas **-x** .*

Integreerimiskonstandid *A* ja *B* lainefunktsioonis on määratud ÄÄRETINGIMUSTEGA , mille mõju saab näha alljärgnevas.

Näiteks kui me TEAME, et osake liikus algselt suunas +*x* , siis me võime konstanti B mitte arvestada

$$\Psi(x,t) = A\exp[i[kx-\omega t]] \qquad (50)$$

Analoogiliselt osakeste jaoks, mis liikusid –*x* suunas, on *A* = 0 ja lainefunktsioon saab kuju

$$\Psi(x,t) = B\exp[-i[kx+\omega t]] \qquad (51)$$

Vaba osakese faasi- ja grupikiirus

• Meie tulemuse oluliseks komponendiks on seos ENERGIA ja LAINEARVU vahel vaba osakese jaoks

$$\boxed{k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \therefore \quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \qquad (52)}$$

*** Me võime seda tulemust kasutada laine GRUPIKIIRUSE leidmiseks**

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar k}{m} \qquad (53)$$

*** deBroglie valemi põhjal on ħk võrdne momendiga, kuna**

$$\boxed{p=\frac{h}{\lambda}=\frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}=\hbar k \qquad (54)}$$

• Kombineerides võrrandeid 53 & 54 saame

$$v_g = \frac{p}{m} \qquad (55)$$

See on normaalne võrrand osakese kiiruse jaoks, millel on mass *m* ja moment *p* ning seega osakese GRUPIKIIRUS on kui osakese kiirus, mida esitab laine.

Kui me aga arvutame laine FAASIKIIRUSE, siis see tuleb täpselt poole väiksem, kui momendi järgi oodata võiks

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{\hbar}\frac{E}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \qquad (56)$$

Antud analüüis näitab, et rääkides lainepaketi liikumisest peame me alati vaatlema grupikiirust ning mitte laine faasikiirust.

Kvantmehhaanika

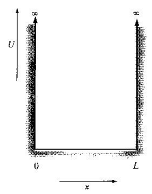
Schrödingeri võrrandi rakendused

Osake kvantkaevus

(Kvantkaevud on kaasajal väga olulised!)

Osake 1D kvantkaevus:

Vastupidiselt vabale osakesele on kvantkaevus osakese lainefunktsioon piiratud teatud ruumiga. Piiratud ruumis asetsev osake on pooljuhtide füüsika jaoks oluline probleem. Vaatleme kõigepealt lõpmatult kõrgete seintega kvantkaevu või kvantauku.



August väljaspool on ψ(x)=0 , kuna osake ei saa august väljaspool eksisteerida. Augu sees on lainefunktsioon ψ (x) määratud Schrödingeri võrrandiga

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \qquad (57)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \qquad (58)$$

$$\text{kus } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ on lainearv.}$$

$$\psi(x) = A\exp[ikx] + B\exp[-ikx] \qquad (59)$$

kus A ja B on määratud ääretingimustega:

$$\psi(x=0)=0 \quad \text{ja} \quad \psi(x=L)=0.$$

Euleri valem:

$$\frac{e^{jx}-e^{-jx}}{2j} = \sin x$$

Esimene ääretingimus nõuab, et

$$\psi(x=0) = A + B = 0 \ \text{ või B = -A}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = 2A\sin(kx).$$

Teine ääretingimus nõuab, et

$$\psi(x=L) = 2A\sin(kL), \text{ mis tähendab, et } kL = n\pi \ (n = 1, 2, 3, ...)$$

$$\text{Seega } \psi(x) = 2A\sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

A võime omakorda määrata normeerimistingimusest:

$$\int_0^L |\psi(x)|^2\, dx = 4A^2\int_0^L \sin^2(\frac{n\pi}{L}x)dx = 1$$

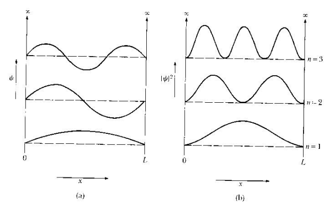
$$\Rightarrow \mathbf{2A} = \sqrt{\frac{\mathbf{1}}{L}}$$

Seega osakese normeeritud lainefunktsioon kvantaugus on

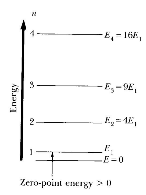
$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x)} \qquad (60)$$

$$\text{Avaldisest } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ saame}$$

$$\boxed{E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}} \qquad (61)$$



Lainefunktsioonid (a) ja tõenäosus (b) osakese kolmele esimesele olekule 1D kvantkaevus.

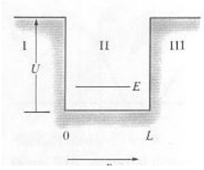


Madalaim energiatase (s.t. n=1 juures) avaldub

$$\mathbf{E_1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

See on nn. PÕHITASE. Kuna $E_n=n^2E_1$, siis ERGASTATUD TASEMED, milledele n=2, 3, .., omavad energiaid $4E_1$, $9E_1$ jne. Seega väikseim energiatase osakesel $E_1 >0$ – kuna aga klassikalise füüsika kohaselt peaks see energia olema null.

1D lõpliku kõrgusega kvantauk



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

$$\text{Ala II:}\quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-k^2\psi(x)\quad\Rightarrow\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}\qquad(62)$$

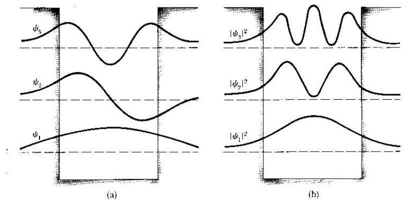
$$\text{Ala I:}\quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\alpha^2\psi(x)\quad \text{kus}\ \alpha=\frac{\sqrt{2\mathrm{m(U-E)}}}{\hbar}\Rightarrow\psi(x)\propto e^{\alpha x}\qquad(63)$$

$$\text{Ala III:}\quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\alpha^2\psi(x)\quad \text{kus}\ \alpha=\frac{\sqrt{2\mathrm{m(U-E)}}}{\hbar}\Rightarrow\psi(x)\propto e^{-\alpha x}\qquad(64)$$

Lõpliku kõrgusega kvantaugu puhul läbivad lainefunktsioonid augu seinu kaugusele:

$$\delta=\frac{1}{\alpha}=\frac{\hbar}{\sqrt{\mathbf{2m(U-E)}}}\qquad(65)$$

Nagu võib oodata, see kaugus läheneb nullile, kui U>>E.



Osake 3-D augus:

Sel juhul tuleb 1D Schrödingeri võrrandi asemel kasutada 3D võrrandit. Selle saame, kui asendame:

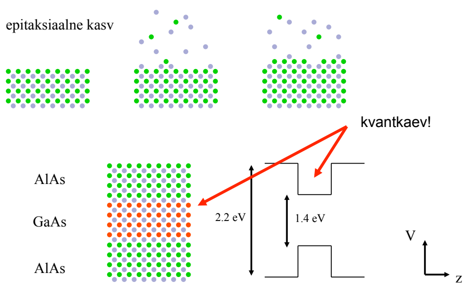
$$\frac{d^2}{dx^2}\Rightarrow\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\qquad(66)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x,y,z)\right)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)\qquad(67)$$

$$\boxed{\psi_{n_xn_yn_z}(\mathrm{x,y,z})=\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\right)^3\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{ny\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right)}\quad \text{kui}\ 0<\mathrm{x,y,z}<\mathrm{L}\qquad(68)$$

$$\boxed{E_{n_xn_yn_z}=(n_x^2+n_y^2+n_z^2)\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}}\qquad(69)$$

Kvantkaevu näide



Samuti InP, InGaAs, InAlAs, InGaAsP …

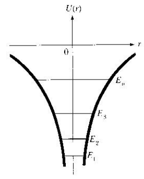
Kvantmehhaanika

Schrödingeri võrrandi rakendused

Elektron vesiniku aatomis

Vesiniku aatom:

Vesiniku aatom on üks vähestest kvantmehhaanika ülesannetest, mida saab lahendada täpselt. Ta on aluseks ka elementide perioodilisuse tabeli mõistmiseks. Ka pooljuhtide eksitonide mõistmisel tuleb vesiniku aatom kasuks.



$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (70)$$

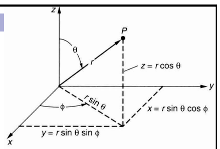
3D Schrödingeri võrrand vesiniku aatomi jaoks:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

(71)

Seda võrrandit on parem lahendada sfääriliste koordinaatidega:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$



$$\text{kus}\,\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Antud võrrandi lahendiks on

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$$

kus R_{nl} ja Y_l^m on sfäärilised harmoonilised funktsioonid ning n, ℓ ja m on kolm kvantarvu, milledel on järgmised lubatud väärtused:
Peakvantarv: n=1, 2, 3, ….
Orbitaalkvantarv: ℓ=0, 1, 2, …. n-1.
Orbitaalmagnetkvantarv: m=-ℓ, -ℓ+1, …, l

Vesiniku aatomi energia jaoks saame:

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{n^2 a_0} = -13.6eV\frac{1}{n^2}$$

kus $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.53\,\mathring{A}$ on nn. Bohri raadius.

Energia on kvantiseeritud (nagu Bohri mudelis).
Kvantiseeritud energia sõltub vaid peakvantarvu väärtusest.

Kihid ja alamkihid: Kõik olekud, milledel on sama põhikvantarvu väärtus, moodustavad nn. kihi. Neid kihte tähistatakse tähtedega K, L, M, …, ja nad vastavad väärtustele n=1, 2, 3, … Samamoodi, kõik olekud, milledel on samad nii n kui ka l, moodustavad alamkihi. Tähed s, p, d, f, … tähistavad olekuid, kus l=0, 1, 2, …

n	Shell Symbol	ℓ	Subshell Symbol
1	*K*	0	*s*
2	*L*	1	*p*
3	*M*	2	*d*
4	*N*	3	*f*
5	*O*	4	*g*
6	*P*	5	*h*
. . .		. . .	

Näide

Näide 8. Loetleda kõik vesiniku aatomi olekud, mis vastavad peakvantarvu väärtusele n=2 ning arvutada nende olekute energiad.

Lahendus: Kui n=2, l saab omada väärtusi 0 ja 1. Kui ℓ=0, m saab olla vaid 0. Kui ℓ=1, saab m olla kas –1, 0 või 1. Seega saame:

Ühe 2s oleku: n=2, ℓ=0 ja m=0

Kolm 2p olekut, n=2, ℓ=1, m=-1

n=2, ℓ=1, m=0

n=2, ℓ=1, m=+1

Kuna kõigil olekutel on sama peakvantarv n, siis on neil ka sama energia:

$$E_2 = -13.6eV\frac{1}{2^2} = -3.4\,eV$$

Kui erinevad olekud omavad sama energiat, siis öeldakse, et see enrgiatase on KÕDUNUD (degenerate). Selles näites toodud energiatase –3.4 eV on neljakordselt kõdunud.

Vesiniku aatom – energia põhitase:

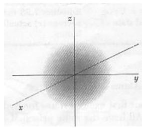
Üheelektronilise aatomi põhitase on tase, kus n=1, l=0 and m=0 ning mis omab energiat

$$E_1 = -13.6eV$$

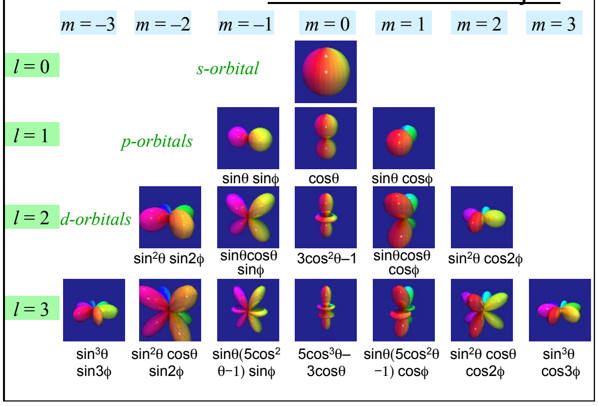
Selle oleku lainefunktsioon on

$$\psi_{100}(r,\theta,\varphi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

Siit on näha, et lainefunktsioon ei sõltu nurgast ja on seega sfääriliselt sümmeetriline. Üldiselt iga olek, kus ℓ=0 on sfäärilise sümmeetriaga ning kannab nime s-olek.



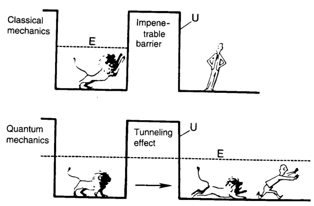
Lainefunktsiooni kujud:

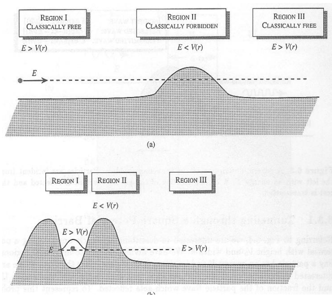


Kvantmehhaanika

Tunnelefekt

(Näit. selline seade nagu tunneldiood!)

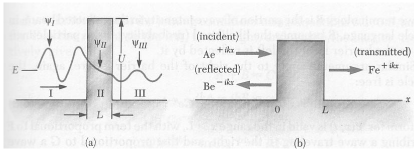




Kaks võimalikku tunnelefekti probleemi: (a) Osake liigub klassikalise füüsika jaoks lubatud tsoonist I ning tunnelleerub läbi keelatud tsooni II jällegi lubatud tsooni III. (b) Osake on algselt seotud kvantaugus ning tunnelleerub läbi keelatud tsooni II lubatud tsooni III.

Tunnelleerumine läbi nelinurkse barjääri:

Nelinurkne barjäär on kõrgusega U ning laiusega L.



Osakestel on algolekus energia E (<U, barjääri kõrgus). Kindel osa osakestest peegeldub barjäärist tagasi ning teine osa tunnelleerub läbi barjääri.

Tsoonides I ja III on osakesed vabad ning nende lainefunktsioon on kujul:

Tsoon I $$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Tsoon III $$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx}$$

$$\text{kus } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Nagu näha, eksisteerib III tsoonis vaid vasakult paremale kulgev laine, mistõttu seal on meil vaid üks liige.

Tsoonis II on Schrödingeri võrrand kujul:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E-U)\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\alpha^2\psi(x)$$

$$\text{kus } \alpha = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}.$$

1/α on nn. barjääri läbimise kaugus

Lahendiks on: $$\psi_{II}(x) = Ce^{-\alpha x} + DCe^{\alpha x}$$

A ja B on esialgse ning peegeldunud lainete amplituudid, seega **peegelduskoefitsient R** avaldub:

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

F on barjääri läbinud laine amplituud, seega **läbilaskvuskoefitsient T** avaldub:

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}.$$

Siin on kasutatud amplituudide ruute, kuna mõlemad koefitsiendid on seotud tõenäosustega, s.o. kvantfüüsika terminitega.

On selge, et $R+T=1$ ja me peame leidma vaid ühe nendest suurustest. Selleks peame kõigepealt leidma amplituudide suhte F/A (või B/A).

Probleemi ääretingimusteks on:

$\psi(x)$ ja $\partial\psi(x)/\partial x$ peavad olema PIDEVAD kohas x = 0 ja x = L.

Ääretingimusi arvestades saame

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

$$\frac{\partial\psi_I(x=0)}{\partial x}=\frac{\partial\psi_{II}(x=0)}{\partial x} \;\Rightarrow\; ikA-ik\,B=-\alpha C+\alpha D$$

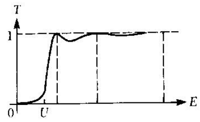
$$\psi_{II}(x=L)=\psi_{III}(x=L) \;\Rightarrow\; Ce^{-\alpha L}+De^{\alpha L}=Fe^{ikL}$$

$$\frac{\partial\psi_I(x=0)}{\partial x}=\frac{\partial\psi_{II}(x=0)}{\partial x} \;\Rightarrow\; -\alpha Ce^{-\alpha L}+\alpha De^{\alpha L}=ikFe^{ikL}$$

Võrrandite lahendamine on natuke keeruline, aga võib näidata, et

$$\frac{F}{A}=\frac{e^{-ikL}}{\cosh(\alpha L)+\dfrac{k^2-\alpha^2}{2ik\alpha}\sinh(\alpha L)}$$

$$T=\left|\frac{F}{A}\right|^2=\frac{1}{1+(\dfrac{k^2+\alpha^2}{2ik\alpha})\sinh^2(\alpha L)}$$



Läbilaskvuskoefitsiendi T(E) kõvera kuju läbi nelinurkse barjääri. Piirkonnas E>U võib märgata T(E) kõvera võnkumisi, mida nimetatakse tunnelleerumise resonantsiks.

Kohtades, kus sinh(αL)=0 on T=1 – s.o. resonantsi kohad!

$$\sinh(\alpha L)=\sinh(\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}L)=0 \text{ on võimalik vaid siis, kui } E>U \text{ ehk}$$

$$\sinh(\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}L)=\sin(\frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}L)=0 \;\Rightarrow\; \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}L=n\pi \;(\mathrm{n}=0,1,...).$$

See on tegelikult lainete interferents, s.t. algse ning peegeldunud lainete vahel.

Kui αL>>1 või L>>1/α siis on barjäär palju paksem, kui läbilaskvuse piir. Siis saame

$$\boxed{T=(\frac{4k}{k^2+\alpha^2})^2e^{-2\alpha L}}$$

$$\text{kus } k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ ja } \alpha=\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}.$$

Näide

Püüame leida isoleeriva CuO kihi läbilaskvuskoefitsienti kahe vasktraadi vahel. Oletame, et see oksiidibarjäär on nelinurkse kujuga ning kõrgusega 10 eV. Oletame, et elektronide energia on 7 eV. Olgu oksiidikihi paksus (a) 5 nm ja (b) 1 nm .

Kasutame eelmisel slaidil olnud valemit:

$$\mathbf{k}=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}=\frac{\sqrt{\mathbf{2\times 9.1\times 10^{-31}}\,kg\times 7\times 1.6\times 10^{-19}J}}{1.05\times 10^{-34}Js}$$

$$\alpha=\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}.=\frac{\sqrt{\mathbf{2\times 9.1\times 10^{-31}}\,kg\times(10-7)\times 1.6\times 10^{-19}J}}{1.05\times 10^{-34}Js}$$

$$T=(\frac{4k}{k^2+\alpha^2})^2e^{-2\alpha L}=3.36e^{-2L/0.113nm}$$

(a) L=5 nm, T=0.979x10^{-38}
(b) L=1 nm, T=0.66x10^{-7}

Oksiidikihi 5 kordne paksuse vähendamine suurendab barjääri läbilaskvust 31 suurusjärku!!!