

# **Kvanttipisteiden elektronien energiaspektrin tulkinta klassisten rotaatioiden ja värähtelyjen avulla**

**Juha-Pekka Nikkarila**

Pro gradu -tutkielma  
Jyväskylän yliopisto  
Fysiikan laitos  
28. helmikuuta 2006



# Esipuhe

Pro-Gradu -työni on tehty Jyväskylän yliopiston fysiikan laitoksella teoreettisen materiaalfysiikan tutkimusryhmässä. Työn parissa on kulunut tunti jos toinenkin väärien ja oikeiden ratkaisuyritysten merkeissä.

Haluan kiittää ohjaajaani professori Matti Mannista erittäin asiantuntevasta ja innostavasta ohjauksesta. Haluan kiittää myös opiskelutovereitani Tomi Paanasta ja Sami Malolaa antoisista keskusteluista.

Kiitokset lisäksi aviopuolisolleni Lauralle hänen tuestaan vaikeinakin hetkinä. Erityisesti tahdon vielä kiittää pientä poikaani Juusoa, joka on tuonut valoa niin päiviin kuin öihinkin.



# Tiivistelmä

Työssä johdetaan kahden, kolmen ja neljän klassisen hiukkasen muodostaman järjestelmän ominaisenergiat ja -moodit. Alimmilla taajuuksilla värähtelevien moodien energiat kvantisoidaan ja niistä muodostetaan semiklassisen kvanttipisteen energiaspektri. Konstruoitu energiaspektri sopii sekä kvalitatiivisesti, että kvantitatiivisesti vastaavien kvanttipisteiden energiaspektreihin. Tapaa voi mahdollisesti käyttää myös suuremmissa järjestelmissä. Hiukkaset todella värähtelevät klassisten moodien tapaisesti, mikä näkyy niiden parikorraatiofunktioista. Lopuksi todetaan, että konstruointitapaa voi testata myös silloin, jos kahden alhaisella taajuudella värähtelevän klassisen moodin energiat leikkaavat jollakin pyörimismäärän arvolla. Kahden moodin energioiden leikkaaminen todettiin neljän hiukkasen järjestelmässä, mutta se oli kahden suurella taajuudella värähtelevän moodin välillä.

# Sisältö

<b>1 Johdanto</b>	<b>7</b>
<b>2 Kvanttipisteet ja kvantittuneet Hallin ilmiöt</b>	<b>11</b>
2.1 Kvanttipisteen ominaisuuksia . . . . .	11
2.1.1 Hamiltonin matriisin tarkka diagonalisoiminen . . . . .	12
2.2 Tiheysfunktionaaliteoria . . . . .	15
2.3 Kvantittuneet Hallin ilmiöt ja niiden teoriamallit . . . . .	17
2.3.1 Kokonaisluvuilla kvantittunut Hallin ilmiö . . . . .	17
2.3.2 Murtoluvuilla kvantittunut Hallin ilmiö . . . . .	17
2.4 Klassisten tulosten simulointi . . . . .	22
2.5 Klassisten rotaatioiden ja värähtelyiden kvantisointi ja niistä konstruoitava kvanttipisteen energiaspektri . . . . .	23
2.6 Atomiyksikköjärjestelmä . . . . .	25
<b>3 Varattujen hiukkasten liikeyhtälöt ja ominaismoodit</b>	<b>27</b>
3.1 Kytettyjen klassisten liikeyhtälöiden ratkaisumenetelmiä . . . . .	27
3.2 Yksi hiukkanen harmonisessa potentiaalissa . . . . .	29
3.3 Kaksi klassista hiukkasta harmonisessa potentiaalissa . . . . .	32
3.4 Kolme klassista hiukkasta harmonisessa potentiaalissa . . . . .	37
3.5 Neljä klassista hiukkasta harmonisessa potentiaalissa . . . . .	46
3.6 “Hengitysmoodin” ominaistaajuuden lauseke rengasmaisessa systeemissä . . . . .	53
<b>4 Kvantisoidut klassiset energiat ja CI -menetelmällä saadut energiat</b>	<b>57</b>
<b>5 Päätelmät</b>	<b>65</b>
<b>6 Liitteet</b>	<b>v</b>

# Luku 1

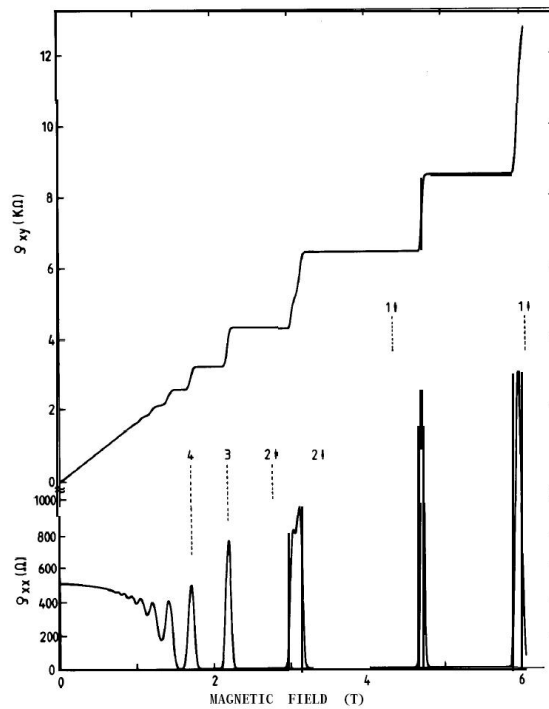
## Johdanto

Elektronit ovat hiukkasia, jotka hylkivät toisiaan kahdesta eri fysikaalisesta syystä. Koska ne ovat varaukseltaan identtisiä, ne kokevat Coulombin poistovoiman. Toisaalta Paulin kieltosäännön mukaan kaksi elektronia ei voi olla täsmälleen samassa kvanttillassa. Vaikka elektronit hylkivät toisiaan peräti kahdella eri tavalla, ne ovat luonnossa erittäin tiiviisti tekemisissä toistensa kanssa. Ne muodostavat yhdessä protonien ja neutronien, eli ydinhiukkasten, kanssa kaikki maailmankaikkeuden atomit.

Elektroneja yritettiin 1980-luvulla vangita ihmisen toimesta tarkoituksella kahteen ulottuvuuteen, ja vieläpä rajoittaa niiden liikkuminen tasossa pieneen alueeseen. Ensimmäistä kertaa saatiin pienelle alueelle vangittujen elektronien ominaisuuksia mitattua liki samaan aikaan kahdessa eri laboratoriossa. Venäläiset fyysikot Alex Ekimov ja Alexander Efros vangitsivat elektroneja lyijyä ja rikkiä sisältävään lasiin Ioffen instituutissa Pietarissa 1980-luvun alkupuolella.[1, 2, 3]

Hieman Ioffen kokeiden aloittamisen jälkeen Bell Laboratories'in yhdysvaltalainen tutkija Louis Brus kollegoineen tutki elektronien ominaisuuksia puolijohdeilla ja sai niinkään elektroneja kahlittua pieneen tilaan. Pieneen tilaan vangittujen elektronien on havaittu käyttäytyvän esimerkiksi siten, että elektronijoukon energiaspektri on epäjatkua. Systeemin käyttäytyminen muistuttaa siltä osin atomin elektroniverhon käytöstä. Pienelle alueelle kahlittua elektronijoukkoa kutsutaan nykyään kvanttipisteeksi. Kvanttipisteiden rooli tulevaisuuden nanoelektronikassa voi olla hyvin merkittävä ja niiden ominaisuuksia tutkitaan useissa eri yliopistoissa.[3, 4]

1980 -luvun alku oli muutenkin mielenkiintoista aikaa materiaalfysiikassa. Vuonna 1980 saksalainen fyysikko Klaus von Klitzing löysi uuden luonnonilmiön tutkiessaan Hallin ilmiötä puolijohteilla. Hän tutki Hallin ilmiötä hyvin kylmässä lämpötilassa ja erittäin voimakkaassa magneettikentässä. Mittaukset liittyivät transistorin ominaisuuksien tutkimiseen. Niiden tarkkuus oli hyvin korkea: noin kymmenesmiljoonasosa mittauservoista. Kokeen tulos oli aivan ennalta arvaamaton, sillä havaintona oli kvantittunut Hallin ilmiö. Kuvassa 1.1 on esitetty Klitzingin kokeessa ilmennyt resistanssin käyttäytyminen magneettikentän funktiona. [5, 6]



**Kuva 1.1:** Klaus von Klitzingin suorittaman kokeen tulokset. Koe on suoritettu noin 8 mK lämpötilassa ja Hallin resistanssia  $R_H \cong \rho_{xy}$  kuvaa ylempi jatkuva käyrä ja resistiivisyyden diagonaaliosaa  $\rho_{xx}$  alempi käyrä. Kuva on otettu von Klitzingin pitämästä Nobel-palkinnon vastaanottoluennosta. [5]

Hallin resistanssi ei kasvanutkaan lineaarisesti, kuten normaalissa Hallin ilmiössä, vaan se kasvoi portaittain tietyillä magneettikentän arvoilla. Osoittautui, että Hallin resistanssin vakioarvot pystyttiin lausumaan seuraavan yhtälön mukaisesti



$$R_H = \frac{h}{\nu e^2}, \quad (1.1)$$

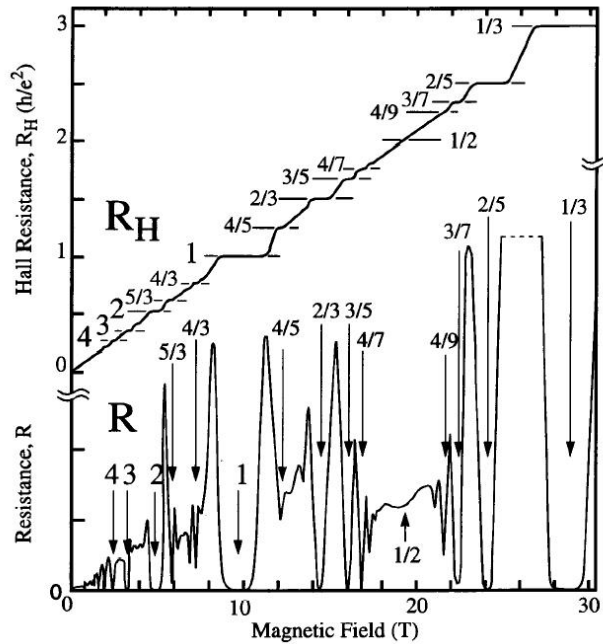
missä  $h$  = Planckin vakio ja  $e$  = alkeisvaraus ja  $\nu$  = jokin kokonaisluku. Tulokset yllättivät täysin tiedeyhteisön, sillä aiheesta ei oletettu löytyvän enää mitään tieteellisesti näin mielenkiintoista. Ensimmäistä kertaa havaittiin makroskooppisen suureen, eli tässä tapauksessa resistanssin, kvantittuvan. [5]

Klitzingin tekemää löytöä pidettiin hyvin merkittävänä ja ilmiötä alettiin tutkia tarkemmin. Löydön merkittävyydestä kertoo myös se, että Klaus von Klitzing palkittiin fysiikan Nobelilla vuonna 1985. Kuva 1.1 on otettu von Klitzingin pitämästä Nobel -palkinnon vastaanottoluennosta. Siitä nähdään Hallin resistiivisyydessä  $\rho_{xy}$  ilmenevän tasanteita tietyillä magneettikentän arvoilla. Samoilla magneettikentän arvoilla esiintyy diagonaali-resistiivisyydessä  $\rho_{xx}$  minimikohtia. Von Klitzingin havaitsema ilmiö tunnetaan nykyisin nimellä kokonaisluvuilla kvantittunut Hallin ilmiö (Integer Quantum Hall Effect). Ilmiötä käytetään muun muassa hienorakennevakion  $\alpha = \frac{e^2}{hc}$  tarkkaan mittaamiseen. Lisäksi sen avulla voidaan asettaa resistanssille standardi eli yksi ohmi saadaan mitattua sitä käyttäen hyvin tarkasti. [5, 7]

Vuonna 1982 saksalainen fyysikko Horst L. Störmer tutki yhdessä kiinalaisen fyysikon Daniel C. Tsuin kanssa samaa ilmiötä. He käyttivät vieläkin suurempaa magneettikenttää ja pienempää lämpötilaa. Mitatessaan Hallin resistanssia magneettikentän funktiona hekin totesivat, ettei se käyttäydy lineaarisesti, kuten Hallin ilmiössä klassisesti ajateltuna pitäisi käydä. [5, 9]

Hallin resistanssi kasvoi pääsääntöisesti magneettikentän kasvaessa, mutta kasvu tapahtui edelleen portaittain. Yllätyksekseen he löysivät uuden tason Hallin resistanssille aikaisemmin löydettyjen yläpuolelta. He havaitsivat, että se vastaa kaavan (1.1) resistanssin arvoa murtoluvulla  $\frac{1}{3}$ . Myöhemmin he havaitsivat lisää Hallin resistanssille vastaavantyyppisiä vakioarvoja ja totesivat, että jokaisen arvo voitiin lausua kyseisen kaavan mukaisesti, jos sallitaan kertoimelle  $\nu$  myös murtolukuarvoja, kuva 1.2. Tsui ja Störmer palkittiin fysiikan Nobel -palkinnolla vuonna 1998 ja heidän löytämänsä luonnonilmiötä kutsutaan nykyään murtoluvuilla kvantittuneeksi Hallin ilmiöksi (Fractional Quantum Hall Effect). [5, 9]

Yhdysvaltalainen fyysikko Robert B. Laughlin kehitti ensimmäisen teoriamaallin kuvaamaan kvantittuneita Hallin ilmiöitä. Intialainen fyysikko J. K. Jain puolestaan keksi teorian kvanttipisteille 1980 -luvun lopussa. Nämä molemmat pie-



**Kuva 1.2:** Horst L. Störmerin ja Daniel C. Tsuin tekemässä kokeessa havaittiin myös resistanssin arvoja  $R_H = \frac{h}{\nu e^2}$ , kun  $\nu$  ei ole kokonaisluku vaan murtoluku. Suurimman arvon Hallin resistanssille he saivat murtoluvulla  $\nu = \frac{1}{3}$ . He havaitsivat resistanssin diagonaaliosassa  $R$  minimikohtia Hallin resistanssin  $R_H$  vakioarvojen yhteydessä. [8]

nen mittaluokan ilmiöt, kvanttunut Hallin ilmiö ja kvanttipisteet, yhdisti saman teorian alle Jain 1990 -luvun puolivälissä. Aikaisemmin Laughlin oli jo käyttänyt kvanttipisteitä oman teoriansa testaamisessa. [10, 11, 12, 13, 14]

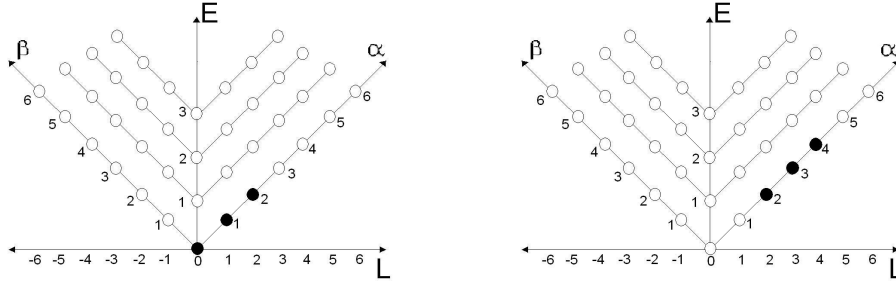
# Luku 2

## Kvanttipisteet ja kvantittuneet Hallin ilmiöt

### 2.1 Kvanttipisteen ominaisuuksia

Kvanttipisteeksi kutsutaan monen elektronin muodostamaa joukkoa, jossa elektronit saadaan keinotekoisesti pysymään koossa. Yleensä kvanttipisteen elektronit saadaan pysymään koossa vahvan magneettikentän avulla. Pieneen tilaan vangittujen elektronien monet ominaisuudet muistuttavat atomin ominaisuuksia, joten usein kvanttipisteitä kutsutaan myös keinotekoisiksi atomeiksi. Käytännössä kvanttipiste tehdään siten, että elektronien liike rajoitetaan kahteen ulottuvuuteen ja niissäkin ne kokevat magneettikentän aiheuttaman harmonisen potentiaalin. Suuri osa keinotekoisien atomien ominaisuuksista tiedetään puolijohdeiden johdavuusmittausten pohjalta. [15]

Kvanttipisteen  $N$  elektronia voidaan saada pyörimään magneettikentän avulla. Magneettikentän vaikutuksesta jokainen elektroni asettuu tiettyä pyörimismäärää vastaavaan tilaan  $l_j$  kuvan 2.1 mukaisesti siten, että joukon kokonaispyörimismäärä on  $\sum_{j=1}^N l_j = L$ . Kvanttipisteen hiukkaset voivat olla saman pyörimismäärän ominaistilassa ainoastaan, jos niiden spinit ovat vastakkaisuuntaiset. Kuvan 2.1 tapauksessa magneettikenttä on niin voimakas, että spinit ovat polarisoituneet. Kuvassa vinosti kulkevat energiatasot ovat nimeltään Landaun tasoja, joten nyt kaikki hiukkaset ovat kyseistä pyörimismäärää vastaavalla alimmalla Landaun tasolla.



**Kuva 2.1:** Vasemmalla: kolmen hiukkasen systeemi pyörimismäärää  $L = 3$  vastaavassa energian perustilassa. Oikealla: kolmen hiukkasen systeemi pyörimismäärää  $L = 9$  vastaavassa energian perustilassa.

Yleensä kvanttipisteen energian ominaisarvot ja aaltofunktio lasketaan diagonalisoimalla systeemin Hamiltonin matriisi. Menetelmä käy vain pienen hiukkasluvun kvanttipisteiden energioiden ratkaisemiseen. Vaihtoehtoisesti kvanttipisteen fysikaalisten suureiden selvittämiseen voidaan käyttää tiheysfunktioaliteoriaa.[15]

Tämän työn kannalta olennaisen kvanttipisteen ominaisuus on sen energian perustilan jaksollisuus. Sen on havaittu noudattavan  $N$  pyörimismäärän arvon jaksollisuutta, missä  $N$  on kvanttipisteen hiukkasten lukumäärä. [15, 16]

### 2.1.1 Hamiltonin matriisin tarkka diagonalisoiminen

Usean hiukkasen muodostaman kvanttipisteen Hamiltonin funktio on

$$H = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (2.1)$$

missä  $V(\mathbf{r}_i)$  tarkoittaa ulkoista potentiaalia eli käytännössä kaksiulotteista harmonista potentiaalia. Liike-energia- sekä potentiaalitermit ovat tuttuja, mutta massan  $m$  paikalla on efektiivinen massa  $m^*$ , jonka avulla huomioidaan kyseisen puolijohdemateriaalin muiden kuin kvanttipisteeseen kuuluvien elektronien vaikutukset.

Hamiltonin matriisin tarkka ratkaiseminen voidaan suorittaa konfiguraatiovuorovaikutus -menetelmällä (Configuration-Interaction, CI). Sen idea on kirjoit-

taa ominaisarvo-ongelma

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.2)$$

ja ratkaista se kirjoittamalla aaltofunktio  $N$  -elektronikannan  $\psi$  avulla. Aaltofunktion ratkaisu on

$$\begin{aligned} \Psi &=: \Psi_{CI} = \sum_m C_m \psi_m \\ &= C_{\text{Ref}} \Psi_{\text{Ref}} + \sum_i \sum_a C^{ia} \psi^{ia} + \sum_{i,j < i} \sum_{a,b < a} C^{ia,jb} \psi^{ia,jb} + \dots, \end{aligned} \quad (2.3)$$

missä kertoimet  $C$  on ratkaistava. Ensimmäinen termi  $\Psi_{\text{Ref}}$  on jollakin muulla tavalla saatava vertailutila ja se toimii ensimmäisenä approksimaationa. CI-menetelmän suurimpina etuina voidaan mainita se, että sen avulla voidaan ratkaista perustilan ohella myös alimpien viritystilojen energiat. Viritysenergioiden avulla voidaan saada tietoa perustilan elektronijakaumasta. Menetelmän ehdoton haittapuoli on se, että sitä ei voida helposti soveltaa suuremmille, yli kymmenen hiukkasta, käsittävälle järjestelmille.[15, 17]

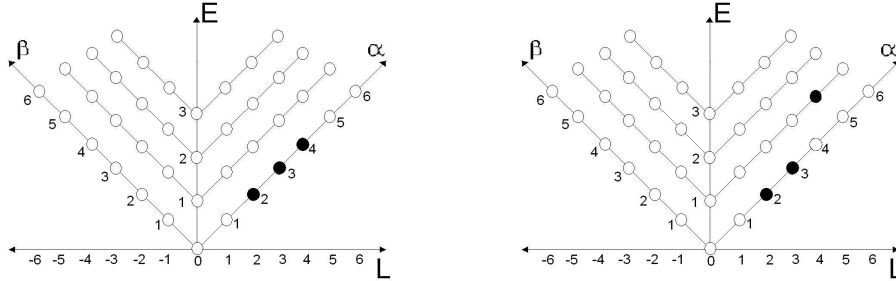
Käytännössä yhtälön (2.3) oikealla puolella olevat aaltofunktiot saadaan, kun tiedetään kokonaispyörimismäärä. Aaltofunktiot ovat silloin eri hiukkaskonfiguraatioita vastaavia Slaterin determinantteja. Tässä vaiheessa on syytä ottaa käyttöön Slaterin determinantille lyhyempi merkintä. Se on miehityslukuesitys, jossa tiettyä hiukkaskonfiguraatiota vastaava tila kirjoitetaan muotoon [18]

$$\psi = |010101000\dots\rangle. \quad (2.4)$$

Tilan paikalle laitetaan luku yksi sen ollessa miehitetty ja vastaavasti nolla sen ollessa miehittämätön. Idea käy paremmin selville kirjoittamalla kolmen hiukkasen systeemin kuvan 2.1 oikeanpuoleisen tilanteen aaltofunktio

$$\psi = |001110000\dots\rangle. \quad (2.5)$$

Esityksestä (2.5) nähdään suoraan, että tila vastaa kokonaispyörimismäärän  $L = 2 + 3 + 4 = 9$  tilannetta. Tällä merkintätavalla aaltofunktio (2.4) vastaa myös



**Kuva 2.2:** Vasemmalla: kolmen hiukkasen systeemi pyörimismäärää  $L = 9$  vastaavassa energian perustilassa. Oikealla: kolmen hiukkasen systeemi pyörimismäärää  $L = 9$  vastaavassa energian viritystilassa.

kokonaispyörimismäärän  $L = 9$  tilannetta, mutta eri hiukkaskonfiguraatiolla. Se vastaa tapausta, jossa yksi hiukkanen on edelleen samassa pyörimismäärän tilassa, mutta muut kaksi ovatkin ensimmäinen yhtä alemmassa ja toinen yhtä ylempässä pyörimismäärän tilassa. Kokonaispyörimismäärä on silloin  $L = 1 + 3 + 5 = 9$ .

Tässä vaiheessa voidaan miettiä, kuinka merkintätavalla saadaan erotettua toisistaan esimerkiksi kuvan 2.2 pyörimismäärää  $L = 9$  vastaavat hiukkaskonfiguraatiot. Vastaus on, että ei mitenkään, mutta se ei ole tarkoituskaan. Yleensä rajoitetaan tarkastelemaan alimman Landaun vyön tilanteita, koska sellaiset hiukkaskonfiguraatiot ovat energialtaan kaikkein pienimpiä. Ylempien Landaun tasojen merkitys on usein hyvin vähäinen. [15]

Konfiguraatio-vuorovaikutus -menetelmän nimen alkuosuuden merkitys lieenee nyt jo selvinyt. Loppuosan merkitys pyritään selvittämään seuraavaksi. Aaltofunktion (2.3) mukainen perustilan aaltofunktio ratkaistaan minimoimalla energian odotusarvo kaikkien normalisoitujen ja antisymmetristen aaltofunktioiden  $|\Psi_i\rangle$  suhteen. Ensin kirjoitetaan matriisi

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} \langle \Psi_1 | H | \Psi_1 \rangle & \langle \Psi_1 | H | \Psi_2 \rangle & \langle \Psi_1 | H | \Psi_3 \rangle & \dots \\ \langle \Psi_2 | H | \Psi_1 \rangle & \langle \Psi_2 | H | \Psi_2 \rangle & \langle \Psi_2 | H | \Psi_3 \rangle & \dots \\ \langle \Psi_3 | H | \Psi_1 \rangle & \langle \Psi_3 | H | \Psi_2 \rangle & \langle \Psi_3 | H | \Psi_3 \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

Jotta ominaisarvoytälö olisi ratkeava, on vaadittava sen determinantin häviämi-

nen

$$\text{Det}[\mathbb{H} - \varepsilon \mathbb{1}] = 0, \quad (2.7)$$

missä  $H_{i,j} = \langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle$  ja  $\varepsilon_i$  on tilan  $|\Psi_i\rangle$  ominaisenergia. Kun yhtälö (2.7) ratkaistaan, saadaan ominaisarvojen joukko  $\{\varepsilon_i\}$ . Perustilan energia on silloin

$$E_0 = \min\{\varepsilon_i\}, \quad (2.8)$$

ja itse perustila on suoraan minimienergian indeksinä  $k$  vastaava aaltofunktio  $|\Psi_k\rangle$ . Vaihtoehto CI -menetelmälle on kvanttimekaaninen Monte Carlo -menetelmä, johon ei tässä tarkastelussa sen enempää perehdytä. Tässä työssä käytetään CI -menetelmään pohjautuvaa tietokoneohjelmaa.<sup>1</sup> [15]

Monen hiukkasen muodostaman kvanttimekaanisen järjestelmän aaltofunktiot menevät jo kahden hiukkasen tapauksessa yli kolmeulotteisiksi. Siksi todennäköisyystiheyttä ei voida esittää kuvassa. Hiukkasten jakaumasta saadaan kuitenkin jonkin verran tietoa parikorrelaatiofunktion avulla. Matemaattisesti esitettynä se on [19]

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 \dots d\mathbf{r}_N |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2. \quad (2.9)$$

Se antaa todennäköisyystiheyden sille, missä mikä tahansa toinen hiukkanen on, kun ensimmäinen on kiinnitetty paikkaan  $\mathbf{r}_1$ .

## 2.2 Tiheysfunktionaaliteoria

Tiheysfunktionaaliteoria (Density Functional Theory) perustuu Hohenbergin ja Kohnin teoreemaan [20], jonka mukaan monihiukkasjärjestelmän energian perustila on elektronitiheyden funktionaali. Tarkka perustila saadaan minimoimalla se elektronitiheyden suhteen. Funktionaaliteoriaa varten on syytä perehtyä hieman funktionaalin ja funktionaaliderivaatan käsitteisiin.

<sup>1</sup>Ohjelman on kirjoittanut Fil. Tri. Matti Koskinen

Funktionaali  $F$  on reaaliarvoinen funktio, joka riippuu toisesta funktiosta  $f$  eli

$$F = F[f] . \quad (2.10)$$

Esimerkiksi integraali on funktionaali, joka riippuu funktiosta eli integrandista. Funktionaaliderivaatta on normaalin derivaatan yleistys eli derivoidaan funktiota vektorin suunnan asemesta jonkin toisen funktion suuntaan. Matemaattisesti funktionaaliderivaatta formuloidaan raja-arvona

$$\frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(y)} := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(x) + \epsilon \delta(x - y)] - F[f(x)]}{\epsilon} , \quad (2.11)$$

missä  $\delta(x - y)$  on Diracin deltafunktio.

Alunperin tiheysfunktionaaliteoriassa ei otettu huomioon spinin vaikutusta. Vuonna 1972 von Barthen ja Hedin sisällyttivät spinin polarisaation tiheysfunktionaaliteoriaan. Nykyään spinillä laajennettu funktionaaliteoria tunnetaan nimellä spinillinen tiheysfunktionaaliteoria (Spin Density Functional Theory). [21, 15]

Kokonaisenergia on ylös- ja alaspäin suuntautuneiden spinien tiheyksien funktionaali, eli  $n_\sigma(\mathbf{r})$ , missä  $\sigma = \uparrow$  tai  $\downarrow$ . Yleensä siirrytään käyttämään kokonaistheyttä ja spinpolarisaatiota funktionaalin argumentteina, eli funktioita

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}) &= n_\uparrow(\mathbf{r}) + n_\downarrow(\mathbf{r}) \\ \zeta(\mathbf{r}) &= \frac{n_\uparrow(\mathbf{r}) - n_\downarrow(\mathbf{r})}{2} . \end{aligned} \quad (2.12)$$

Minimoimalla energian funktionaali saadaan johdettua Kohn-Sham -yhtälöt [22]

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{KS,\sigma}[n, \zeta] \right) \psi_{i,\sigma}(\mathbf{r}) = \epsilon_{i,\sigma} \psi_{i,\sigma}(\mathbf{r}) , \quad (2.13)$$

missä efektiivinen potentiaali on muotoa

$$V_{KS,\sigma}[n, \zeta] = V(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + V_{XC}[n, \zeta] . \quad (2.14)$$



Efekttiivisen potentiaalin lausekkeessa (2.14)  $V(\mathbf{r})$  on ulkoinen potentiaali, joka on kvanttipisteille yleensä kaksiulotteinen harmoninen potentiaali. Kaikki termit, joita ei joko tiedetä tai ei osata laskea, on piilotettu vuorovaikutus-korrelaatio (Exchange-Correlation) -potentiaaliin  $V_{XC}[n, \zeta]$ . Se sisältää Paulin kieltoäännön matemaattisen muodon. Yhtälöä (2.13) johdettaessa ei tarvitse tehdä yhtään approksimaatiota, mutta käytännön laskuja suoritettaessa termi  $V_{XC}[n, \zeta]$  joudutaan arvioimaan, koska sen tarkkaa muotoa ei tiedetä.

## 2.3 Kvantittuneet Hallin ilmiöt ja niiden teoriamallit

### 2.3.1 Kokonaisluvuilla kvantittunut Hallin ilmiö

Klaus von Klitzingin havaitsemalle kokonaisluvuilla kvantittuneelle Hallin ilmiölle saatiin selitys jo vuonna 1981. Silloin yhdysvaltalainen fyysikko Robert B. Laughlin esitti, että voimakkaassa magneettikentässä hiukkasten energijakamaan muodostuu Landaun tasoja. Landaun tasot kuvaavat tietyn pyörimismäärän ( $k$  -vektorin) eri energiatasoja. Pyörimismäärän alin Landaun taso vastaa kyseisen pyörimismäärän omaavan tilan alinta energiaa, seuraava Landaun taso vastaa toiseksi alinta energiatilaa, ja niin edelleen. Kokonaisluvuilla kvantittuneen Hallin ilmiön voitiin ajatella olevan yksittäisten vuorovaikutuksettomien hiukkasten ilmiö eli varauksenkuljettajina toimivat elektronit. [7]

### 2.3.2 Murtoluvuilla kvantittunut Hallin ilmiö

Tsuin ja Störmerin löytö oli ehkä vieläkin merkittävämpi kuin Klitzingin kokonaisluvuilla kvantittunut Hallin ilmiö. Kokonaisluvuilla kvantittuneen Hallin ilmiön ajateltiin olevan vapaiden hiukkasten ilmiö, jossa varauksenkuljettajien varaus on  $e$ . Jos vastaavaa ajattelutapaa käytettäisiin Tsuin ja Störmerin löytämälle ilmiölle, olisi yksittäisen varauksenkuljettajan varaus väistämättä murtolukuosa alkeisvarauksesta  $e$ , esimerkiksi  $\frac{1}{3}e$ . Aikaisemmin tunnetuista hiukkasista ainoastaan kvarkeilla tiedettiin olevan varauksena murtolukuosa alkeisvarauksesta, mutta ne eivät voisi esiintyä koskaan vapaina hiukkasina. Tämän seurauksena oli

joko muutettava ajattelutapaa tai käsitystä hiukkasfysiikasta. Useimmat suosivat ensimmäistä vaihtoehtoa. [7, 10]

### Laughlinin teoria

Vuosi Störmerin ja Tsuin mittausten jälkeen myös murtoluvuilla kvantittuneelle Hallin ilmiölle saatiin ensimmäinen teoreettinen selitys. Selityksen takana oli jälleen Laughlin, jonka mukaan toimivan teorian täytyi selittää muun muassa se, miksi varauksenkuljettajan varaus näytti olevan murtolukuosa alkeisvarauksesta. Hän ehdotti, että Coulombin repulsion kokevat elektronit muodostavat yhdessä uuden monihiukkastilan, joka käyttäytyy kuten hiukkanen. Elektronien muodostamaa tilaa kutsutaan kvasihiukkaseksi tai kvasielektroniksi, ja sen varaus voi olla esimerkiksi  $\frac{1}{3}e$ . Kvasihiukkaset noudattavat uutta statistiikkaa, eivät Fermi- eikä Bose-Einsteinin statistiikkaa. Uusi statistiikka on nimeltään murtolukustatistiikka (fractional statistics) ja siinä aaltofunktio muuttuu kompleksisella vaihetekijällä hiukkasten vaihdossa. [7]

Tiedettiin, että puolijohteiden rajapinnalla elektronit ovat vangittuja kahteen ulottuvuuteen, joten  $j$ . hiukkasen koordinaattia tasossa voitiin valita edustamaan kompleksiluku  $z_j = x_j + iy_j$ . Laughlin ehdotti, että suuressa magneettikentässä elektronien spin-vapausasteiden lukumäärä kutistuisi yhteen. Koska elektronit ovat fermioneja, Paulin kieltoäännön nojalla ne vastustavat voimakkaasti puristusta. Ne muodostavat kollektiivisen tilan, eräänlaisen kvanttinesteen, jota voidaan kuvata yhdellä aaltofunktiolla. Paulin kieltoäännön vuoksi kyseinen kvanttineeste on kokoonpuristumatonta. Kvanttineeste on myös voimakkaasti korreloitunutta, mikä johtuu Coulombin repulsiosta ja Paulin kieltoäännöstä. [7]

Aaltofunktiolta vaaditaan muun muassa antisymmetrisyys hiukkasten vaihdon suhteen ja lisäksi, että se on sisäisen pyörimismäärän ominaistila. Sisäisellä pyörimismäärällä tarkoitetaan sitä, että massakeskipisteen liike jätetään huomiotta. Koska kokonaispyörimismäärän  $L$  on säilyttävä, on aaltofunktion oltava  $L$ . asteen polynomi paikkakoordinaattien  $z_1, z_2, \dots, z_N$  suhteen, kun  $N$  on hiukkasten kokonaislukumäärä. Laughlin [10] totesi, että yksinkertaisin vaaditut ominaisuudet täyttävä aaltofunktio on muotoa

$$\Psi = \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^m e^{-\sum_{k=1}^N |z_k|^2}, \quad (2.15)$$

ja se on pyörimismäärän ominaistila ominaisarvolla  $L = \frac{N(N-1)}{2}m$ . Yhtälön (2.15) aaltofunktiota kutsutaan nykyään nimellä Laughlinin aaltofunktio. Se on lineaarikombinaatio alimman Landaun tason Slaterin determinanteista.

Yhtälössä (2.15) esiintyvä  $m$  on jokin pariton luku ja Laughlin osoitti, että aaltofunktio kuvaa tilaa, jossa Hallin resistanssi (1.1) saa kerrointa  $\nu = \frac{1}{m}$  vastaavan arvon. Laughlinin teoria ei kuitenkaan pysty selittämään myöhemmin havaittuja Hallin resistanssin arvoja kertoimilla  $\nu = \frac{2}{3}$  tai  $\nu = \frac{2}{5}$ . Vaillinaisuudesta huolimatta Laughlinin teoria ja erityisesti aaltofunktion (2.15) kirjoittaminen on parantanut murtoluvuilla kvantittuneen Hallin ilmiön ymmärtämistä. Laughlin jakoi fysiikan Nobel -palkinnon Tsuin ja Störmerin kanssa vuonna 1998. [7]

### Hierarkiateoria

Laughlinin teoria on laajennettu jälkeensä niin sanotuksi hierarkiateoriaksi, jossa tietyn tilan muodostavat kvasihiukkaset muodostavat uuden kvasihiukkasen. Uutta tilaa kuvaa uusi aaltofunktio ja syntynyt uusi tila on tavallaan vanhan tilan "tytärtila". Hierarkiateorian mukaan esimerkiksi kertoimen  $\nu = \frac{3}{7}$  tila on kertoimen  $\nu = \frac{2}{5}$  tilan "tytärtila", ja tämä puolestaan on kertoimen  $\nu = \frac{1}{3}$  tilan tytärtila. [7]

### Yhdistettyjen fermionien teoria

Nykyisin paljon käytetty teoria murtoluvuilla kvantittuneelle Hallin ilmiölle on yhdistettyjen fermionien teoria (Composite Fermion Theory), jonka intialainen fyysikko J. K. Jain julkaisi vuosina 1989-1990. Jainin mielestä silloin yleisesti hyväksytty hierarkiateoria ei ollut riittävä. Kvasielektrooneilla oli hänen mukaan paljon omituisia ominaisuuksia, kuten diskreetisti jakautunut statistiikka. Lisäksi niitä tarvittiin epäilyttävän paljon suhteessa normaaleihin elektroneihin. Hänen mielestään erityisesti nämä asiat vaativat joko muutosta tai parempia perusteluja. Esimerkiksi kerrointa  $\nu = \frac{2}{5}$  vastaava tila syntyisi tilasta  $\nu = \frac{1}{3}$ , kun kvasielektroonien lukumäärä lähenisi puolta normaalien elektronien lukumäärästä. Jainin mukaan hierarkiateoria ei antanut ymmärrystä ilmiön mikroskopiasta, joskin sen avulla saatiin hyvä tilojen luokitus. [13]

Hierarkiateoria ei pystynyt selittämään sellaisia kokeellisesti havaittuja tiloja, joissa kerroin oli muotoa  $\nu = \frac{p}{q}$ , kun  $q$  on parillinen, esimerkiksi  $\nu = \frac{5}{2}$ . Jai-

nin kehittämän teorian mukaan tilat ovat mahdollisia periaatteessa kaikilla murtolukukertoimilla  $\nu$ , mutta samalla se antaa selityksen sille, miksi jotkin tilat ovat vakaampia kuin toiset. Jain halusi löytää yhtäläisyyksiä kokonaisluvulla kvantittuneeseen Hallin ilmiöön, sillä näiden kahden hyvin samanlaisen ilmiön syntymekanismien ero tuntui hänestä keinotekoiselta. Jain halusi saada molemmat kvantittuneet Hallin ilmiöt selitettyä yhdellä teorialla. [13]

Aikaisemmissa teorioissa kaikkien hiukkasten ajateltiin olevan alimmalla Landaun tasolla. Jainin mielestä oli järkevää sallia tilojen yriteaaltofunktioiden olevan myös korkeammilla Landaun tasoilla. Jainin teorian mukaan elektronit muodostavat kollektiivisen tilan eli ne käyttäytyvät yhtenä hiukkasena. Tilan aaltofunktio voidaan ilmoittaa elektronien paikkakoordinaattien avulla eli samalla tavalla kuin Laughlinin aaltofunktio, mutta se kirjoitetaan kokonaislukukerrointa vastaavan kokonaislukukertoimisen Hallin ilmiön aaltofunktion avulla. Esimerkiksi kerrointa  $\frac{1}{m}$  vastaava tila [13]

$$\Psi_{\frac{1}{m}} = \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^m e^{-\sum_{k=1}^N |z_k|^2} \quad (2.16)$$

on kokoonpuristumaton tila, mikä voidaan nähdä kirjoittamalla aaltofunktio  $\Psi_{\frac{1}{m}}$  kerrointa 1 vastaavan kokoonpuristumattoman tilan aaltofunktion  $\Psi_1$  avulla [13]

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{1}{m}} &= \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^m e^{-\sum_{k=1}^N |z_k|^2} = \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^{m-1} \underbrace{\prod_{i < j}^N (z_i - z_j) e^{-\sum_{k=1}^N |z_k|^2}}_{=\Psi_1} \\ &= \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^{m-1} \Psi_1 . \end{aligned} \quad (2.17)$$

Jainin idea oli, että yhtälö (2.17) voidaan tulkita siten, että jokainen elektroni yhdistyy  $m - 1$  magneettikentän vuokvantin  $\phi_0$  kanssa ja siten kuljettaa vuota  $(m - 1)\phi_0$  mukanaan. Vuokvanttien yhdistäminen elektroneihin ei tuhoa alkuperäisen tilan kokoonpuristumattomuutta, sillä keskeiskenttäapproksimaatiossa voidaan yhdistämisen ajatella tapahtuvan liittämällä jokaiseen elektroniin vuota  $(m - 1)\phi_0$  kuljettava vuoputki. Vuoputket eivät ole observaabeleita, joten niiden

liittäminen ei tuhoa tilan  $\Psi_1$  korrelaatioita ja kyseinen tila säilyy kokoonpuristumattomana. [12]

Tulos (2.17) voidaan yleistää muotoilemalla jokainen murtoluvuilla kvantittuneen Hallin ilmiön tilan yriteaaltofunktio  $\Psi_\nu$  kokonaisluvuilla kvantittuneen Hallin ilmiön tilan aaltofunktion  $\Psi_{\nu_1}$  avulla liittämällä jokaiseen elektroniin samalla tavalla vuota  $(m-1)\phi_0$  kantava vuoputki. Koska alkuperäinen tila on kokoonpuristumaton, on yritetilakin kokoonpuristumaton ja sen aaltofunktio on [13]

$$\Psi_\nu = \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^{m-1} \Psi_{\nu_1}. \quad (2.18)$$

Yhtälössä (2.18) esiintyvä kerroin  $\nu$  saa arvon [13]

$$\nu = \frac{\nu_1}{(m-1)\nu_1 + 1}, \quad (2.19)$$

joten kertoimen  $\nu$  murtolukutilat on saatu yhdistettyä kertoimen  $\nu_1$  kokonaislukutiloihin. Yriteaaltofunktio voidaan kirjoittaa koskemaan lukua  $\nu$ , koska on sallittu tilan olevan osittain myös korkeammilla Landaun tasoilla. [13]

Jainin julkaisema teoria selittää murtoluvuilla kvantittuneen Hallin ilmiön melko hyvin. Teoria selittää muun muassa sen, miksi kokeellisesti ei ole havaittu Hallin resistanssille arvoja, jotka yhtälön (1.1) avulla ilmaistuna antaisivat kertoimelle  $\nu$  selvästi irrationaalisen arvon. Kokeissa havaitaan arvoja, jotka ovat yksinkertaisia murtolukuja, kuten  $\frac{1}{3}$ . Teorian mukaan kerroin voi saada muotoa (2.19) olevia murtolukuarvoja. Teoria selittää myös suurimman osan havaituista Hallin resistanssin arvoista ja antaa resistanssin arvoille stabiilisuusjärjestyksen, eli esimerkiksi sen, että arvo  $\nu = \frac{1}{3}$  on stabiilimpi kuin arvo  $\nu = \frac{1}{5}$  tai  $\nu = \frac{2}{5}$ . [13, 12]

Jainin sanojen mukaan elektronien murtoluvuilla kvantittunut Hallin ilmiö on yhdistettyjen fermionien kokonaisluvuilla kvantittuneen Hallin ilmiön ilmentymä. Vuonna 1995 Jain ehdotti, että yhdistettyjä fermioneja voitaisiin käyttää myös kvanttipisteiden fysiikan kuvaamiseen. [12, 14]

Käytännössä yhdistettyjen fermionien yriteaaltofunktio saadaan, kun kerrotaan vuorovaikutuksettomien elektronien  $\phi_{m,n}$  aaltofunktio Jastrowin tekijällä (2.20)

$$D^k = \prod_{i < j} (z_i - z_j)^{2k}, \quad (2.20)$$

minkä jälkeen otetaan saadun tulon projektio alinta Landaun tasoa kuvaavaan Bargmannin avaruuteen. Projektion ottaminen alimmalle Landaun tasolle on fyysikaalisesti mielekästä, sillä magneettikentän kasvaessa hiukkasjoukon ominaisenergia hajoaa kahteen osaan. Magneettikentän aiheuttama "vankeusosa"  $E_c$  on suoraan verrannollinen magneettikenttään  $B$  ja se edustaa alinta Landaun tasoa. Hiukkasten keskinäisen vuorovaikutuksen osa  $V$  on myös verrannollinen magneettikenttään, mutta verrannollisuus on heikompi:  $V \propto \sqrt{B}$ . [14]

## 2.4 Klassisten tulosten simulointi

Harmonisessa potentiaalissa pyörivien varattujen hiukkasten ominaisvärähtelyiden selvittämiseen käytetään simulointiohjelmaa <sup>2</sup>. Ensin ohjelma asettaa hiukkaset sattumanvaraisesti tasoon neliön muotoiselle alueelle, jonka keskipisteessä on harmonisen potentiaalminimikohta. Se selvittää aluksi pyörimättömän systeemin tasapainokoordinaatit pienentämällä hiukkasten nopeuksia jokaisella aika-askeleella. Jokaisen aika-askeleen ajan hiukkasiin vaikuttaa sen alun suuruinen ja suuntainen nettovoima. Vähitellen hiukkaset relaksoituvat tasapainoasemiinsa.

Seuraavassa vaiheessa ohjelma laittaa hiukkaset pyörimään asettamalla niille tietyn kulmanopeuden. Systemi relaksoituu uuteen tasapainoasemaan, jossa elektronit ovat kauempana origosta kuin pyörimättömässä tilanteessa. Uudessa tasapainoasemassa yksittäisen hiukkasen kulmanopeus on pienempi kuin sille asetettu, koska hitausmomentti kasvaa ja pyörimismäärän on pysyttävä vakiona.

Viimeisessä vaiheessa hiukkasille annetaan sattumanvaraisesti nopeudenlisäyksiä, jotta systemi alkaisi värähdellä tasapainoaseman ympärillä. Nopeudenlisäykset ovat sattumanvaraisia sekä suunnaltaan, että arvoltaan, joten ne voivat yhtä hyvin myös hidastaa yksittäisen hiukkasen hetkellistä nopeutta. Ominaisaajuudet selvitetään tarkastelemalla kahden hiukkasen välisen etäisyyden aikakehitystä ja tekemällä tuloksiin Fourier -muunnos.

Klassiset tapaukset lasketaan myös analyttisesti (luku 3). Kahdella toisistaan riippumattomalla tavalla pyritään takaamaan mahdollisimman oikeat tulokset. Ratkaisumenetelmät yhtenevät ainoastaan siinä, että hiukkasten väliset voimat ovat samat, mikä on luonnollista. Periaatteeltaan simulointi vastaa siinä mielessä

<sup>2</sup>Ohjelman on kirjoittanut professori Matti Manninen

koetulosta, että se kertoo mitä hiukkasten välillä oikeasti tapahtuu kullakin ajanhetkellä. Analyytisellä ratkaisumenetelmällä pyritään saamaan ominaistajuuksille yksinkertaiset ratkaisulausekkeet ja toisaalta selvittämään ominaismoodit.

## 2.5 Klassisten rotaatioiden ja värähtelyiden kvantisointi ja niistä konstruoitava kvanttipisteen energiaspektri

Kvanttipisteen energiaspektrin perustilan on todettu olevan jaksollinen pyörimismäärän  $L$  suhteen. Jakson pituuden on todettu olevan hiukkasten lukumäärän  $N$  mittainen. Tarkoituksena on selvittää, löytyisikö vastaavan klassisen systeemin energioista ja moodeista tämän ilmiön selittäjää esimerkiksi suurilla pyörimismäärän arvoilla. Ainakin yksi tutkimus on jo julkaistu klassisten moodien ja parikorraatiofunktioiden samankaltaisuudesta. [23]

Klassisen mekaniikan avulla saadut tulokset on ensin kvantisoitava. Kvantisointi tapahtuu siten, että klassisen harmonisen värähtelijän värähdystaajuus  $\omega$  määrää kvanttimekaanisen harmonisen oskillaattorin kahden perättäisen energiatilan erotuksen. Toisaalta systeemin kokonaispyörimismäärä muunnetaan vastaamaan kvanttimekaniikan pyörimismäärää. Toisin sanoen kvantitus tapahtuu seuraavasti

$$\begin{aligned} \omega &\rightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \\ L &\rightarrow L = \hbar l, \end{aligned} \tag{2.21}$$

missä  $\hbar$  on Planckin vakio ja  $n$  kokonaisluku, joka kertoo harmonisen oskillaattorin energiatilan. Pyörimismäärän kvanttitalan kertoo  $l$ , joka niinkään on kokonaisluku.

Kvantisoidun systeemin kokonaisenergian spektri määräytyy kvantitetun pyörimisenergian ja värähdysenergian summasta. Energiaspektri ilmoitetaan pyörimismäärän funktiona. Koska pyörimismäärä, yhdessä Coulombin repulsion ja alkuperäisen harmonisen potentiaalın kanssa määrää tasapainokohdan arvon, tiettyä pyörimismäärää vastaa tasan yksi pyörimisenergia. Siksi pyörimisenergia on

tietyllä pyörimismäärällä pyörivän systeemin perustilan energia. Hiukkasten värähtely pyörimisen lisäksi lisää kokonaisenergiaa. Harmonisen värähtelijän energiaspektri antaa systeemin kaikki viritysenergiat. Jos harmonista värähtelyä on montaa erilaista, eli moodeja on useita, se monipuolistaa energiaspektriä.

Kvantisoitu pyörimisenergia on muotoa

$$E_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2 l^2}{2I}, \quad (2.22)$$

missä  $I$  on järjestelmän kokonaishitausmomentti

$$I = m \sum_{j=1}^N b_j^2. \quad (2.23)$$

Yksittäisen hiukkasen etäisyys pyörimisakseliin on  $b_j$ . Jos hiukkasten tasapainoetäisyys pyörimisakseliin on kaikilla hiukkasilla sama  $b_0$ , kuten yleensä on pienen hiukkasmäärän järjestelmissä, niin kokonaishitausmomentiksi saadaan

$$I = mN b_0^2. \quad (2.24)$$

Tällaisessa tapauksessa kvantisoiduksi pyörimisenergiaksi saadaan

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2 l^2}{2mN b_0^2}. \quad (2.25)$$

Huomionarvoista kvantisoidun pyörimisenergian lausekkeessa (2.25) on, että myös tasapainoetäisyys riippuu pyörimismäärästä: se kasvaa hiukkasten pyörimismäärän kasvaessa. Riippuvuus on kuitenkin kohtalaisen monimutkaista, koska se näkyy neljännen asteen polynomien nollakohdan ratkaisussa, joten on parempi jättää se tässä kirjoittamatta. Laskuissa se kuitenkin otetaan huomioon, koska se hidastaa olennaisesti pyörimisenergian kasvua pyörimismäärän kasvaessa.

Tässä työssä tutkitaan kokonaisenergian muuttumista pyörimismäärän funktiona, joten on otettava huomioon myös fysikaalisten potentiaalien arvo tasapainokohdassa. “Keskikipakoisvoiman potentiaali” otettiin jo huomioon, koska se on



sama kuin pyörimisenergia. Kvantisoidun  $N$  hiukkasen järjestelmän kokonaisenergian lausekkeeksi saadaan

$$\begin{aligned}
 E = \hbar \sum_{j=1}^z \left( n_j + \frac{1}{2} \right) \omega_j + \frac{\hbar^2 l^2}{2mN b_0^2} + U_{\text{Coul}} \\
 + \frac{mN \omega_0^2 b_0^2}{2} + \hbar \omega_0 (n_0 + 1) ,
 \end{aligned}
 \tag{2.26}$$

missä ensimmäinen termi on keskinäisten värähtelyiden energia ja viimeinen termi massakeskipisteen värähtelyn energia. Termeistä nähdään, että kaikkien moodien nollapiste-energiat otetaan huomioon.

## 2.6 Atomyksikköjärjestelmä

Kaikkien laskujen numeeriset arvot tullaan esittämään atomyksikköjärjestelmässä, joten on syytä selvittää sitä hieman. Atomyksiköissä otetaan

$$e = m_e = \hbar = a_0 = 1 ,
 \tag{2.27}$$

eli elektronin varaus ja massa, Planckin vakio sekä Bohrin säde ovat arvoltaan yksi. Koska Bohrin säde on muotoa [24]

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} ,
 \tag{2.28}$$

niin välittömästi seuraa, että näissä yksiköissä myös

$$4\pi\epsilon_0 = 1 .
 \tag{2.29}$$

Oletetaan jatkossa käsiteltävien hiukkasten olevan elektroneja. Koska niiden muodostamalla järjestelmällä halutaan kuvata kvanttivistettä, ne ovat vangittuja harmoniseen potentiaaliin. Oletetaan harmonisen potentiaalimallin voimakkuuden olevan atomyksiköissä  $\omega_0 = \frac{1}{2}$ . Vastaava jousivakion  $k$  arvo SI -yksiköissä on silloin

$$k = \omega_0^2 m_e = \frac{1}{4} \left( \frac{\hbar}{2\pi m_e a_0^4} \right)^2 m_e = \frac{\hbar^2}{16\pi^2 m_e a_0^2} \approx 10 \frac{\text{N}}{\text{m}} \quad (2.30)$$

eli suuruusluokka vastaa hyvin tyypillisen atomitason harmonisen loukun vahvuutta.

# Luku 3

## Varattujen hiukkasten liikeyhtälöt ja ominaismoodit

### 3.1 Kytkettyjen klassisten liikeyhtälöiden ratkaisumenetelmiä

Klassisen monen hiukkasen järjestelmän liikeyhtälöiden selvittämiseen käytetään yleensä Lagrangen mekaniikkaa [25]. Siinä kirjoitetaan systeemin liike-energian  $T$  ja potentiaalienergian  $U$  erotus ja nimetään se Lagrangen funktioksi

$$L = T - U . \quad (3.1)$$

Lagrangen funktiolle käytetään myös nimeä vaikutus. Muuttujalle  $x_i$  saadaan liikeyhtälö Lagrangen yhtälöstä Lagrangen funktiota derivoimalla

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0 . \quad (3.2)$$

Halutaan tarkastella klassisia hiukkasia kaksiulotteisessa harmonisessa potentiaalissa, ratkaista systeemin ominaistajuudet ja kvantisoida ne. Tarkoituksena on selvittää käytetyn semiklassisen mallin kelpoisuus kvanttipisteiden kuvaamisessa. Erityisesti halutaan tutkia, kuinka Coulombin repulsio ja hiukkasten pyörimismäärä vaikuttavat systeemin värähtelytaajuuksiin.

Kytkettyjen harmonisten värähtelijöiden muodostaman systeemin ominaistajuudet  $\omega$  voidaan ratkaista löytämällä systeemin normaalikoordinaatit  $q_j$  ja  $\dot{q}_j$ .

Normaalikoordinaattien avulla kirjoitetusta Lagrangen funktiosta saadaan silloin erotettua efektiivisen potentiaalin lauseke  $U_{\text{eff}}$ , joka riippuu ainoastaan normaalkoordinaateista  $q_k$  ja efektiivisen liike-energian  $T_{\text{eff}}$  lauseke, joka riippuu ainoastaan normaalikoordinaateista  $\dot{q}_k$  [25]

$$L = U_{\text{eff}}(q_1, \dots, q_n) - T_{\text{eff}}(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n). \quad (3.3)$$

Lagrangen yhtälö (3.1) koordinaatille  $k$  saa nyt muodon

$$\frac{\partial U_{\text{eff}}}{\partial q_k} + \frac{d}{dt} \frac{\partial T_{\text{eff}}}{\partial \dot{q}_k} = 0. \quad (3.4)$$

Jos liikeyhtälöt (3.4) ovat lineaarisia ja niiden ratkaisut ovat muotoa  $C_{1,k}e^{i\omega t} + C_{2,k}e^{-i\omega t}$ , niin ne toteutuvat luonnollisesti myös funktioilla erikseen. Ratkaisut voidaan kirjoittaa matriisimuodossa jakamalla kaikille yhteinen termi  $C_{1,k}e^{i\omega t}$  tai  $C_{2,k}e^{-i\omega t}$  pois. Saatu yhtälöryhmä ratkeaa, kun sen determinantti häviää eli

$$\begin{vmatrix} A_{11} - m_{11}\omega^2 & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} - m_{22}\omega^2 & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} - m_{33}\omega^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0, \quad (3.5)$$

missä

$$A_{jk} = \frac{\partial^2 U_{\text{eff}}}{\partial q_k \partial q_j} \quad \text{ja} \quad m_{jj} = \frac{\partial^2 T_{\text{eff}}}{\partial \dot{q}_j^2}. \quad (3.6)$$

Toisaalta käsiteltävän systeemin liikeyhtälöt voidaan selvittää Newtonin mekaniikan keinoin. Siinä tarkastellaan yksittäisen hiukkasen kokemaa nettovoimaa ja sen perusteella kirjoitetaan jokaiselle hiukkaselle oma liikeyhtälö. Saadun liikeyhtälöryhmän ratkaisun idea on olennaisesti sama kuin edellä eli lopuksi systeemin ominaistajuudet ratkaistaan vaatimalla yhtälöryhmän determinantin häviäminen.

Jatkossa tarkasteltavissa tilanteissa ongelmana on se, että yhtälöryhmät eivät ole lineaarisia, joten niitä ei periaatteessa voida käsitellä matriisilaskennan keinoin. Käsiteltävät yhtälöryhmät voidaan kuitenkin linearisoida systeemin mahdollisen tasapainokohdan ympärillä. Koska linearisointi tehdään tasapainokohdan

ympärillä, niin kaikki vakioarvot tulevat lopuksi kumoutumaan. Tämä johtuu siitä, että tasapainokohdassa nettovoima häviää. Jäljelle jää lineaarinen yhtälöryhmä, jota voidaan kuvata matriisilla.

Linearisoinnin idea käy ilmi kahdesta muuttujasta riippuvan kahden yhtälön tapauksesta. Alkuperäinen yhtälöryhmä on

$$\begin{bmatrix} f_1(x, y) \\ f_2(x, y) \end{bmatrix} = 0, \quad (3.7)$$

joka linearisoidaan pisteen  $(x_0, y_0) =: r_0$  ympäristössä. Operaation jälkeen yhtälöryhmä (3.7) on muotoa

$$\begin{bmatrix} f_1(r_0) \\ f_2(r_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} \Big|_{r_0} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \Big|_{r_0} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} \Big|_{r_0} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \Big|_{r_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix} = 0. \quad (3.8)$$

Koska linearisointi tehdään tasapainokohdan ympärillä ja funktiot  $f_i$  kuvaavat olennaisesti hiukkasen  $i$  kokemaa nettovoimaa, yhtälöryhmän (3.8) vakiotermi on nolla. Lisäksi siirrytään tarkastelemaan yhtälöryhmää suoraan poikkeamille eli koordinaateille  $x - x_0 =: s_x$  ja  $y - y_0 =: s_y$ . Ratkaisun ollessa muotoa

$$\begin{bmatrix} s_x(t) \\ s_y(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} (C_1 e^{i\omega t} + C_2 e^{-i\omega t}), \quad (3.9)$$

saadaan yhtälön (3.5) mukainen lauseke determinantille

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} \Big|_{r_0} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \Big|_{r_0} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} \Big|_{r_0} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \Big|_{r_0} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.10)$$

Tarkastellaan jatkossa harmoniseen potentiaaliin kahlittuja klassisia varattuja hiukkasia. Niiden liikeyhtälöiden kirjoittamiseen käytetään joko Lagrangen tai Newtonin mekaniikkaa, mutta ominaistajuuksien selvittämisen periaate on molemmilla tavoilla sama.

## 3.2 Yksi hiukkanen harmonisessa potentiaalissa

Oletetaan  $q_1$ -varauksisen hiukkasen värähtelevän harmonisessa potentiaalissa

$$U_{\text{harm}} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2, \quad (3.11)$$

missä  $m$  on hiukkasen massa,  $\omega_0$  värähtelytaajuus ja  $x$  hiukkasen etäisyys tasapainoasemasta. Otetaan harmonisen potentiaalin minimikohta koordinaatiston origoksi. Koska pyritään selvittämään repulsiivisen Coulombin potentiaalin

$$U_{\text{Coul}} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{x} \quad (3.12)$$

vaikutus värähtelytaajuuteen, niin lisätään origoon massiivinen hiukkanen, jonka varaus on  $q_2$ . Aikeena on selvittää myös hiukkasen pyörimismäärän  $L$  vaikutus taajuuteen, joten oletetaan hiukkasen pyörivän kulmanopeudella  $\dot{\theta}$ . Massiivinen hiukkanen pysyy origossa, joten tapaus on liikkeen osalta olennaisesti yhden hiukkasen ongelma. Systemin Lagrangen funktio (3.1) on

$$T - U = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + x^2 \dot{\theta}^2) - \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 - \frac{A}{x}, \quad (3.13)$$

missä merkintöjen yksinkertaistamiseksi määriteltiin  $A := \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0}$ . Hiukkasen etäisyyden  $x$  ja kulman  $\theta$  Lagrangen liikeyhtälöiksi (3.2) saadaan

$$\begin{cases} \ddot{x} + \omega_0^2 x - \frac{A}{m} \frac{1}{x^2} - x \dot{\theta}^2 = 0 \\ \frac{d}{dt} (m x^2 \dot{\theta}) = 0. \end{cases} \quad (3.14)$$

Yhtälöparin (3.14) alemman liikeyhtälön perusteella pyörimismäärä  $L = m x^2 \dot{\theta}$  on vakio. Vakiona pysyvän pyörimismäärän avulla voidaan ylempään liikeyhtälön riippuvuus kulmanopeudesta saada eliminoitua. Sijoituksen jälkeen saadaan etäisyyden liikeyhtälöksi

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x - \frac{A}{m} \frac{1}{x^2} - \frac{L^2}{m^2 x^3} = 0, \quad (3.15)$$

jolla on ainakin ajasta riippumaton ratkaisu  $x = x_0$ . Koska  $x_0$  ei riipu ajasta, niin  $\ddot{x}_0 = 0$ , joten se on tasapainokohta. Tasapainokohdalle saadaan yhtälö

$$\begin{aligned} \ddot{x}_0 + \omega_0^2 x_0 - \frac{A}{m} \frac{1}{x_0^2} - \frac{L^2}{m^2 x_0^3} &= 0 \\ \Rightarrow x_0^4 - \frac{A}{m \omega_0^2} x_0 - \frac{L^2}{m^2 \omega_0^2} &= 0, \end{aligned} \quad (3.16)$$

eli neljännen asteen polynomi, jonka nollakohdille on olemassa ratkaisukaava. Käytännössä nollakohtien ratkaisut ovat niin pitkiä lausekkeita, että on parempi selvittää ne tietokoneen avulla.

Tasapainokohta  $x_0$  on stabiili, koska harmoninen potentiaali kasvaa suhteessa etäisyyden neliöön ja Coulombin potentiaali pienenee etäisyyteen kääntäen verrannollisesti. Liiketyhtälö voidaan kirjoittaa suoraan poikkeamalle tasapainoasemasta  $s = x - x_0$ , jolloin  $\dot{s} = \dot{x}$ . Samalla liiketyhtälön (3.16) kaksi termiä voidaan linearisoida stabiilin tasapainokohdan lähistössä seuraavasti

$$\begin{aligned} x^{-3} &= x_0^{-3} \left(1 + \frac{s}{x_0}\right)^{-3} \approx x_0^{-3} \left(1 - \frac{3s}{x_0}\right) \\ x^{-2} &= x_0^{-2} \left(1 + \frac{s}{x_0}\right)^{-2} \approx x_0^{-2} \left(1 - \frac{2s}{x_0}\right). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Sijoittamalla linearisoidut termit takaisin yhtälöön (3.16), saadaan poikkeaman liiketyhtälöksi

$$\ddot{s} + \left(\omega_0^2 + \frac{2A}{mx_0^3} + \frac{3L^2}{m^2x_0^4}\right) s = 0, \quad (3.18)$$

joka saadaan siistimpään muotoon eliminoimalla Coulombin termin riippuvuus tasapainokohdan yhtälön (3.16) avulla ja sijoittamalla pyörimismäärän paikalle hiukkasen kulmanopeus tasapainokohdassa  $\omega_{r_0}$ , eli  $L = mx_0^2\omega_{r_0}$ . Poikkeaman liiketyhtälölle saadaan yksinkertainen muoto

$$\ddot{s} + \underbrace{(3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2)}_{=: \omega^2 > \omega_0^2} s = 0, \quad (3.19)$$

joka on harmonisen oskillaattorin liiketyhtälö. Mielenkiintoista johdetussa harmonisessa oskillaattorissa on, että sen värähtelytaajuus  $\omega$  tasapainokohdan  $x_0$  ympärillä on suurempi kuin alkuperäisessä harmonisessa oskillaattorissa ollut värähtelytaajuus  $\omega_0$ .

Yhtälöstä (3.18) nähdään, että sekä repulsiivinen Coulombin potentiaali että hiukkasen nolasta poikkeava pyörimismäärä kasvattavat värähtelytaajuutta. Yhden hiukkasen järjestelmän ominaistajuutta

$$\omega = \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2} \quad (3.20)$$

vastaava ominaisvektori voidaan ratkaista ja se on

$$X = D_1 (i\omega, 2\omega_{r_0}) e^{i\omega t} + D_2 (-i\omega, 2\omega_{r_0}) e^{-i\omega t}. \quad (3.21)$$

Ominaisvektorilta vaaditaan reaalisuus, joten on oltava  $D_1 = D_2$ . Reaaliseksi ominaisvektoriksi saadaan

$$X = (-\omega \sin \omega t, 2\omega_{r_0} \cos \omega t) . \quad (3.22)$$

Ominaisvektorista (3.22) nähdään, että hiukkanen kiertää ellipsin muotoista rataa vastapäivään ja pyörimismäärän lisääntyessä radasta tulee yhä enemmän ympyrää muistuttava, ollen täysi ympyrä tapauksessa  $\omega = 2\omega_{r_0}$ .

### 3.3 Kaksi klassista hiukkasta harmonisessa potentiaalisissa

Tarkastellaan seuraavaksi kahta identtistä hiukkasta harmonisessa potentiaalisissa. Jos hiukkasten välillä ei ole parivuorovaikutusta eivätkä ne pyöri, niin tilanne redusoituu kahdeksi harmoniseksi oskillaattoriksi. Tällöin hiukkaset värähtelevät toisistaan riippumattomasti, mutta niiden värähtelyillä on sama värähtelytaajuus  $\omega_0$ . Yhden hiukkasen liikeyhtälön (3.19) perusteella voidaan päätellä värähtelytaajuuden kasvavan, kun hiukkaset laitetaan pyörimään. Sama vaikutus luulisi olevan hiukkasten ollessa varaukseltaan nollasta poikkeavia, jolloin niihin kohdistuu hylkivä Coulombin voima. Hiukkasten paikkavektorien Newtonin mekaniikan mukaiset liikeyhtälöt ovat

$$\begin{cases} m\ddot{\mathbf{r}}_1 &= -m\omega_0^2\mathbf{r}_1 + \frac{A}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) \\ m\ddot{\mathbf{r}}_2 &= -m\omega_0^2\mathbf{r}_2 - \frac{A}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) . \end{cases} \quad (3.23)$$

Halutaan erottaa massakeskipisteen liike hiukkasten keskinäisestä liikkeestä, joten siirrytään koordinaatteihin

$$\begin{cases} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{R} &= \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) . \end{cases} \quad (3.24)$$

Yhtälöparin (3.23) yhtälöt summaamalla ja erottamalla saadaan yhtälöt etäisyyden ja massakeskipisteen liikkeelle



$$\begin{cases} \ddot{\mathbf{r}}_1 - \ddot{\mathbf{r}}_2 &= \ddot{\mathbf{r}} = -\left(\omega_0^2 - \frac{2A}{m|\mathbf{r}|^3}\right) \mathbf{r} \\ \frac{1}{2}(\ddot{\mathbf{r}}_1 + \ddot{\mathbf{r}}_2) &= \ddot{\mathbf{R}} = -\omega_0^2 \mathbf{R}. \end{cases} \quad (3.25)$$

Massakeskipisteen liike ei ole erityisen kiinnostavaa, joten sen käsittelemisen lopetetaan toistaiseksi tähän. Kirjoitetaan hiukkasten etäisyyden vektori napakoordinaateissa  $(r, \theta)$ , jolloin pätee [25]

$$\begin{cases} \mathbf{r} &= r\hat{\mathbf{r}} \\ \ddot{\mathbf{r}} &= (\ddot{r} - r\dot{\theta}^2)\hat{\mathbf{r}} + (r\ddot{\theta} + 2\dot{r}\dot{\theta})\hat{\theta}. \end{cases} \quad (3.26)$$

Etäisyyden vektorimuotoisesta liikeyhtälöstä (3.25) saadaan siten molemmille koordinaateille liikeyhtälöt, jotka tosin ovat kytkettyjä toisiinsa

$$\begin{cases} \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 &= \left(-\omega_0^2 + \frac{2A}{mr^3}\right)r \\ r\ddot{\theta} + 2\dot{r}\dot{\theta} &= 0. \end{cases} \quad (3.27)$$

Hiukkasten kokonaispyörimismäärä  $L = \frac{mr^2\dot{\theta}}{2}$  on vakio, koska

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta} \right) = \frac{mr}{2} (r\ddot{\theta} + 2\dot{r}\dot{\theta}) = 0 \quad (3.28)$$

etäisyysvektorin kulmakomponentin liikeyhtälön (3.27) nojalla. Vakioarvoisen liikemäärän avulla saman vektorin etäisyyskomponentin liikeyhtälöstä voidaan eliminoida kulmariippuvuus. Tuloksena saadaan yhtälö pelkästään etäisyyden aika-riippuvuudelle

$$\ddot{r} + \omega_0^2 r - \frac{2A}{m} \frac{1}{r^2} - \frac{4L^2}{m^2} \frac{1}{r^3} = 0. \quad (3.29)$$

Liikeyhtälö (3.29) voidaan linearisoida stabiilin tasapainokohdan  $r_0$  ympärillä samalla tavalla kuin liikeyhtälö (3.15) linearisoitiin. Koska tilanteen potentiaalit ovat olennaisesti samat kuin yhden hiukkasen ongelmassa, tässäkin tapauksessa tasapainokohdan voidaan päätellä olevan stabiili ja se on yksi polynomin

$$r_0^4 - \frac{2A}{m\omega_0^2} r_0 - \frac{4L^2}{m^2\omega_0^2} = 0. \quad (3.30)$$

nollakohdista. Kirjoitetaan liikeyhtälö suoraan muuttujalle  $s$  eli poikkeamalle tasapainoasemasta

$$\ddot{s} + \left( \omega_0^2 + \frac{4A}{m} + \frac{12L^2}{m^2} \right) s = 0 . \quad (3.31)$$

Yhtälö (3.31) saadaan kauniimpaan muotoon eliminoimalla Coulombin termi tasapainokohdan yhtälön (3.30) avulla ja sijoittamalla pyörimismäärän paikalle hiukkasten kulmanopeus tasapainokohdassa  $L = 2mr_0^2\omega_{r_0}$

$$\ddot{s} + (3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2) s = 0 . \quad (3.32)$$

Kahden hiukkasen ominaistajuudeksi saadaan arvo

$$\omega = \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2} , \quad (3.33)$$

eli sama arvo kuin yhden hiukkasen ominaistajuudelle saatiin (3.20).

Hiukkasten välinen hylkivä Coulombin voima sekä niiden nolasta poikkeava pyörimismäärä johtivat uuden harmonisen oskillaattorin liikeyhtälöön (3.32). Kun otetaan huomioon tasapainoaseman siirtyminen pois origosta, poistovoimien eli Coulombin repulsion ja “keskipakovoiman”, yhdistäminen harmoniseen potentiaaliin tuottaa molemmille hiukkasille oman efektiivisen potentiaalin. Koska voimat on linearisoitu, efektiivinen potentiaali on molemmilla hiukkasilla automaattisesti harmoninen potentiaali, jossa hiukkasen värähtelytaajuus on yhtälön (3.33) mukainen.

Ratkaistaan kahden hiukkasen ongelma myös massakeskipistekoordinaatistossa. Harmoniseen potentiaaliin vangittujen varattujen hiukkasten liikeyhtälöt pyörivässä koordinaatistossa ovat muotoa

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}_{\text{harm}} + \mathbf{F}_{\text{Coul}} + \mathbf{F}_{\text{Cor}} + \mathbf{F}_{\text{kp}} . \quad (3.34)$$

Sen kaksi viimeistä termiä voimaa ovat Coriolis- ja keskipakovoima

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{Cor}} &= -2m\boldsymbol{\omega}_r \times \dot{\mathbf{r}} \\ \mathbf{F}_{\text{kp}} &= -m\boldsymbol{\omega}_r \times (\boldsymbol{\omega}_r \times \mathbf{r}) . \end{aligned} \quad (3.35)$$

Pyörivä koordinaatisto pyörii vakionopeudella  $\omega_{r_0}$  ja hiukkaset ovat vangittuja tasoon. Sen vuoksi Coriolis -voima ja keskipakovoima yksinkertaistuvat hieman. Ne ovat muotoa

$$\begin{aligned}
 F_{\text{Cor},x} &= -2m\omega_{r_0}\dot{y} \\
 F_{\text{Cor},y} &= 2m\omega_{r_0}\dot{x} \\
 F_{\text{kp},x} &= m\omega_{r_0}^2 x \\
 F_{\text{kp},y} &= m\omega_{r_0}^2 y .
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

komponenteittain. [25]

Kahden hiukkasen tapauksessa ensimmäisen hiukkasen  $x$  -suuntainen liikeyhtälö on muotoa

$$\ddot{x}_1 = -(\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2)x_1 + \frac{x_1 - x_2}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} - 2\omega_{r_0}\dot{y}_1 . \tag{3.37}$$

Linearisointi pisteiden  $(x_0, 0)$  ja  $(-x_0, 0)$  ympärillä antaa ratkaisua  $C_1 e^{i\omega t}$  käytettäessä yhtälöryhmän matriisin determinantiksi

$$\begin{vmatrix}
 \omega^2 - 2B & B & -2i\omega\omega_{r_0} & 0 \\
 B & \omega^2 - 2B & 0 & -2i\omega\omega_{r_0} \\
 2i\omega\omega_{r_0} & 0 & \omega^2 - \frac{B}{2} & -\frac{B}{2} \\
 0 & 2i\omega\omega_{r_0} & -\frac{B}{2} & \omega^2 - \frac{B}{2}
 \end{vmatrix} = 0 , \tag{3.38}$$

missä tekijä

$$B = \omega_0^2 - \omega_{r_0}^2 . \tag{3.39}$$

Yhtälö (3.38) antaa ominaisarvoiksi lausekkeet

$$\begin{aligned}
 \omega_1 &= \omega_0 - \omega_{r_0} \\
 \omega_2 &= \omega_0 + \omega_{r_0} \\
 \omega_3 &= \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2} .
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

Kun pyörimismäärä on nolla, niin kaksi ensimmäistä moodia vastaavat selvästi massakeskipistevärähtelyitä ja kolmas on "hengitysmoodi". Ominaisarvoja vastaavat ominaisvektorit ovat

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_1 &= D_{\omega_1,1}(-i, -i, 1, 1)e^{i\omega_1 t} + D_{\omega_1,2}(i, i, 1, 1)e^{-i\omega_1 t} \\
 \mathbf{X}_2 &= D_{\omega_2,1}(i, i, 1, 1)e^{i\omega_2 t} + D_{\omega_2,2}(-i, -i, 1, 1)e^{-i\omega_2 t} \\
 \mathbf{X}_3 &= D_{\omega_3,1}(-i\omega_3, i\omega_3, -2\omega_{r_0}, 2\omega_{r_0})e^{i\omega_3 t} \\
 &\quad + D_{\omega_3,2}(i\omega_3, -i\omega_3, -2\omega_{r_0}, 2\omega_{r_0})e^{-i\omega_3 t} .
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

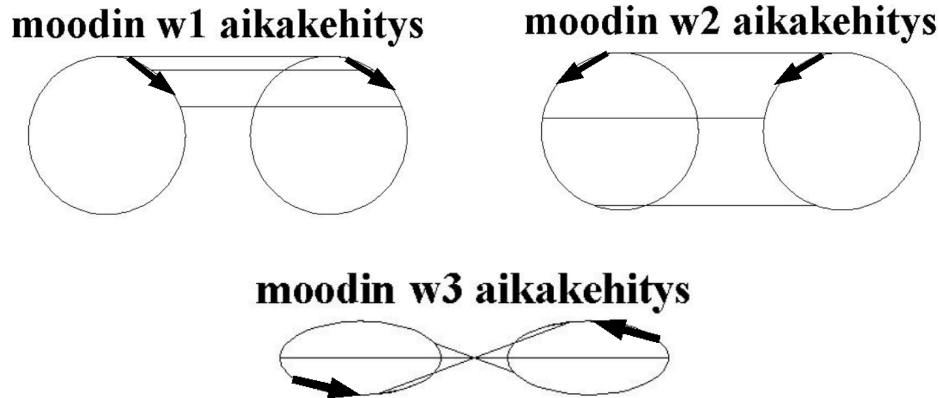
Ominaisvektoreilta vaaditaan reaalisuus, joten vielä määräämättömille vakioille saadaan yhtälö  $D_{\omega_j,1} = D_{\omega_j,2}$ . Reaalisiksi ja normitetuiksi ominaisvektoreiksi saadaan

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin \omega_1 t, \sin \omega_1 t, \cos \omega_1 t, \cos \omega_1 t) \\
 \mathbf{X}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\sin \omega_2 t, -\sin \omega_2 t, \cos \omega_2 t, \cos \omega_2 t) \\
 \mathbf{X}_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}\omega_3}(\omega_3 \sin \omega_3 t, -\omega_3 \sin \omega_3 t, -2\omega_{r_0} \cos \omega_3 t, 2\omega_{r_0} \cos \omega_3 t) .
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

Yhtälöstä (3.42) nähdään, että kaksi ensimmäistä moodia pyörivät tasapainoaseman ympärillä ympyräradoilla. Kolmannen moodin yhtälö on ellipsin yhtälö ja se lähestyy ympyrää, kun  $\omega_3 \rightarrow 2\omega_r$ . Sen normitus on valittu siten, että se lähestyy silloin nimenomaan 1 -säteistä ympyrää. Normitus ei saa riippua ajasta, koska se esimerkiksi voisi normittaa kaikki ellipsiradat ympyräradoiksi. Se pitää sitoa johonkin tiettyyn ajanhetkeen tai vaihtoehtoisesti johonkin rajataajuuteen kuten tässä tehtiin.

Moodien aikakehitystä on esitetty kuvassa 3.1. Sen avulla nähdään ensimmäisten moodien vastaavan massakeskipistevärähtelyitä. Niissä hiukkaset pyörivät aina keskenään samaan suuntaan ja ne ovat lisäksi samoissa kohdissa kukin omalla ympyräradallaan. Hiukkasten keskinäinen etäisyys pysyy vakiona eli systeemi ei puristu eikä laajene missään vaiheessa. Ensimmäinen massakeskipistevärähtely pyörii pyörivän koordinaatiston suuntaisesti ja toinen sitä vastaan. Sen vuoksi ensimmäinen värähtely hidastuu kokonaispyörimismäärän kasvaessa, kun toinen vastaavasti värähtelee suuremmalla värähtelytaajuudella.

“Hengitysmoodissa” kaikki hiukkaset pyörivät niin ikään vastapäivään, eli pyörivän koordinaatiston vastaisesti. Ne ovat keskenään eri vaiheessa, mikä aiheuttaa sen, että hiukkaset värähtelevät ollen ensin mahdollisimman lähellä ja sit-



**Kuva 3.1:** Harmonisessa potentiaalissa värähtelevän kahden klassisen varatun hiukkasen ominaismoodit. Jokaisessa tapauksessa on pyörimismäärä siten, että  $\omega_{r_0} = 0,2$ . Ylhäällä vasemmalta lukien moodit vastaavat ominaistaajuuksia  $\omega_1$  ja  $\omega_2$ . Alhaalla on ominaistaajuuden  $\omega_3$  moodi. Ensimmäiset ovat massakeskipistevärähtelyiden moodeja ja viimeinen on “hengitysmoodi”. Kuvassa moodien hiukkaskonfiguraatiot on esitetty kolmella eri ajanhetkellä. Aikavälit ovat kaikissa samat, jotta taajuuksien riippuvuus pyörimismäärästä tulisi havainnollisemmaksi.

ten siirtyen mahdollisimman kauas toisistaan. Hiukkaset eivät kuitenkaan pyöri ympyräradoilla vaan elliptisillä radoilla. Hiukkasten radat kehittyvät pyörimismäärän kasvaessa alun edestakaisesta värähtelystä yhä paksuuntuvien ellipsiratojen kautta lopulta ympyräradoiksi, kun  $\omega_3 \rightarrow 2\omega_{r_0}$ .

### 3.4 Kolme klassista hiukkasta harmonisessa potentiaalissa

Oletetaan kolmen identtisen hiukkasen olevan vangittuina harmoniseen potentiaaliin. Jos niiden välillä ei ole muita vuorovaikutuksia eivätkä ne pyöri, niin kaikkien hiukkasten liike on taajuudella  $\omega_0$  tapahtuvaa harmonista värähtelyä. Värähtelyt ovat toisistaan riippumattomia. Jos hiukkasten oletetaan olevan varaukseltaan nollasta poikkeavia ja jos sallitaan niiden pyöriä, niin tilanne hankaloituu huomattavasti. Jo kolmen pyöriä ja keskenään vuorovaikuttavan hiukkasen liike on analyttisesti ratkeamaton ongelma, vaikka ne eivät olisi vangittuna harmoniseen potentiaaliin. Kolmen kappaleen ongelma on tuttu taivaanmekaniikasta, jossa se

voidaan ratkaista olettamalla yksi hiukkanen paljon muita kevyemmäksi. Silloin ongelma redusoituu olennaisesti kahden kappaleen ongelmaksi. Nyt ei ole mahdollisuutta seurata tätä analogiaa, koska hiukkaset ovat identtisiä.

Liitteessä lasketaan kolmen hiukkasen tapaus Lagrangen mekaniikkaa käyttäen pyörimisnopeudella  $\omega_r$  pyörivässä koordinaatistossa. Ratkaistaan kolmen tapaus Newtonin mekaniikan avulla. Tarkastellaan tilannetta pyörimisnopeudella  $\omega_{r_0}$  pyörivässä koordinaatistossa. Erona liitteessä esitettyyn tarkasteluun on se, että nyt koordinaatiston pyörimisnopeus on arvoltaan tasapainotilanteen pyörimisnopeus. Liitteessä esitettyssä tavassa pyörimisnopeudeksi valittiin  $\omega_r$ , joten se muuttui hiukkasten värähdysten mukana ja tulokset olivat vääriä. Nyt asetetun tasaisella pyörimisnopeudella pyörivän koordinaatiston pitäisi olla järkevämmin valittu.

Käytetään hiukkasten paikkojen kuvaamiseen karteesisia koordinaatteja  $(x_i, y_i)$ . Hiukkasten välinen tasapainoetäisyys on  $r_0 = \sqrt{3}b_0$ . Kun järjestelmän geometria on tasapainoasemassa tasasivuinen kolmio, niin efektiivinen potentiaali voidaan minimoida mainitun ehdon puitteissa. Niin voidaan tehdä, vaikka itse liikkeen aikana hiukkaset eivät olisi tasasivuisen kolmion muodostelmassa.

Tasasivuisen kolmion mukaisen järjestelmän efektiivinen potentiaali on muotoa

$$U_{\text{eff}} = \frac{3}{2}m\omega_0^2b^2 + \frac{\sqrt{3}A}{b} + \frac{L^2}{6mb^2}. \quad (3.43)$$

Derivoidaan efektiivistä potentiaalia tasapainokohdan yhtälön saamiseksi

$$\begin{aligned} \left. \frac{dU_{\text{eff}}}{db} \right|_{b=b_0} &= 3m\omega_0^2b_0 - \frac{\sqrt{3}A}{b_0^2} - \frac{L^2}{3mb_0^3} = 0 \\ \Rightarrow b_0^4 - \frac{\sqrt{3}A}{3m\omega_0^2}b_0 - \frac{L^2}{9m^2\omega_0^2} &= 0. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Ensimmäinen hiukkanen kokee nettovoiman, joka komponenteittain voidaan ilmoittaa muodossa

$$\begin{aligned}
 F_{x_1} = m\ddot{x}_1 &= -m(\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2)x_1 + \frac{(x_1 - x_2)A}{((x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2)^{\frac{3}{2}}} \\
 &+ \frac{(x_1 - x_3)A}{((x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2)^{\frac{3}{2}}} - 2m\omega_{r_0}\dot{y}_1 \\
 F_{y_1} = m\ddot{y}_1 &= -m(\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2)y_1 + \frac{(y_1 - y_2)A}{((x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2)^{\frac{3}{2}}} \\
 &+ \frac{(y_1 - y_3)A}{((x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2)^{\frac{3}{2}}} + 2m\omega_{r_0}\dot{x}_1,
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

ja muiden hiukkasten kokemat voimat ovat samaa muotoa. Olennaista on huomata, että yhdelle koordinaatille Coulombin voimatermin osoittajassa oma koordinaatti on aina ensin. Koordinaatiston valinnasta johtuen, ero liitteen tarkasteluun nähden on, että nyt liikemäärä sijoitetaan pyörimistaajuuden eliminoinemiseksi vasta lopuksi. Sen vuoksi linearisoitaviksi termeiksi jää ainoastaan Coulombin termit.

Hiukkasen  $i$  yhtälö on linearisoitava koordinaattien  $x_i, x_k, y_i$  ja  $y_k$  suhteen niiden tasapainokohtien ympäristöissä. Merkitään linearisoituja termejä lyhyemmin siten, että esimerkiksi  $C_{x_i}$  on  $x_i$ :n suhteen linearisoitu termi. Linearisoituiksi termeiksi saadaan olennaisesti

$$\begin{aligned}
 C_{x_i} &= \sum_{j \neq i} \left( \frac{1}{((x_{i_0} - x_{j_0})^2 + (y_{i_0} - y_{j_0})^2)^{\frac{3}{2}}} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{3(x_{i_0} - x_{j_0})^2}{((x_{i_0} - x_{j_0})^2 + (y_{i_0} - y_{j_0})^2)^{\frac{5}{2}}} \right) x_i \\
 C_{x_k} &= \left( \frac{3(x_{i_0} - x_{k_0})^2}{((x_{i_0} - x_{k_0})^2 + (y_{i_0} - y_{k_0})^2)^{\frac{5}{2}}} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{((x_{i_0} - x_{k_0})^2 + (y_{i_0} - y_{k_0})^2)^{\frac{3}{2}}} \right) x_k \\
 C_{y_i} &= - \sum_{j \neq i} \frac{3(x_{i_0} - x_{j_0})(y_{i_0} - y_{j_0})}{((x_{i_0} - x_{j_0})^2 + (y_{i_0} - y_{j_0})^2)^{\frac{5}{2}}} y_i \\
 C_{y_k} &= \frac{3(x_{i_0} - x_{k_0})(y_{i_0} - y_{k_0})}{((x_{i_0} - x_{k_0})^2 + (y_{i_0} - y_{k_0})^2)^{\frac{5}{2}}} y_k,
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

missä koordinaatti varustettuna alaindeksillä 'nolla' tarkoittaa tasapainotilanteen arvoa kyseiselle koordinaatille. Tässä kohdassa on syytä huomauttaa, että linea-

risoinnissa  $f(x) \approx f(x_0) + \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x_0} (x - x_0)$  tulee lisäksi vakiotermejä. Kun kaikki vakiotermit lasketaan yhteen, niin ne summautuvat nolllaksi, joten niitä ei ole tässä esitetty ollenkaan. Tasapainotilanteessa karteesisten koordinaattien arvot ovat

$$\begin{aligned}(x_{10}, y_{10}) &= \left( -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}} \right) r_0 \\(x_{20}, y_{20}) &= \left( 0, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) r_0 \\(x_{30}, y_{30}) &= \left( \frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}} \right) r_0.\end{aligned}\tag{3.47}$$

Yhtälöryhmän (3.45) mukaisen kuuden yhtälön yhtälöryhmän linearisoinnin jälkeen huomataan, että sen yleinen ratkaisu on muotoa

$$\mathbf{X}_j = \begin{bmatrix} x_i \\ y_k \end{bmatrix} (C_1 e^{i\omega t} + C_2 e^{-i\omega t}), \tag{3.48}$$

missä  $j = 1, \dots, 6$  sekä  $i, k = 1, 2$  ja  $3$ . Vaaditaan yhtälöryhmän ratkeavuus, joten sen determinantin on hävittävä molemmilla ratkaisufunktioilla

$$\begin{vmatrix} F_3 - m\omega^2 & \frac{A}{4r_0^3} & -\frac{2A}{r_0^3} & \frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} + K_3 & -\frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} & 0 \\ \frac{A}{4r_0^3} & G_3 - m\omega^2 & \frac{A}{4r_0^3} & -\frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} & K_3 & \frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} \\ -\frac{2A}{r_0^3} & \frac{A}{4r_0^3} & F_3 - m\omega^2 & 0 & \frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} & -\frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} + K_3 \\ \frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} - K_3 & -\frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} & 0 & H_3 - m\omega^2 & -\frac{5A}{4r_0^3} & \frac{A}{r_0^3} \\ -\frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} & -K_3 & \frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} & -\frac{5A}{4r_0^3} & J_3 - m\omega^2 & -\frac{5A}{4r_0^3} \\ 0 & \frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} & -\frac{3\sqrt{3}A}{4r_0^3} - K_3 & \frac{A}{r_0^3} & -\frac{5A}{4r_0^3} & H_3 - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0, \tag{3.49}$$

missä vakioiden arvot ovat



$$\begin{aligned}
 F_3 &= \frac{7A}{4r_0^3} + m(\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2) \\
 G_3 &= -\frac{A}{2r_0^3} + m(\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2) \\
 H_3 &= \frac{A}{4r_0^3} + m(\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2) \\
 J_3 &= \frac{5A}{2r_0^3} + m(\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2) \\
 K_3 &= \pm 2im\omega\omega_{r_0}.
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

Vakion  $K_3$  etumerkki riippuu ratkaisufunktiosta. Ratkaisufunktiolle  $C_1 e^{i\omega t}$  se on positiivinen ja funktiolle  $C_2 e^{-i\omega t}$  negatiivinen. Ero johtuu siitä, että kyseinen vakio on Coriolis -termin etukerroin. Coriolis -termi puolestaan on olennaisesti ratkaisufunktion ensimmäinen aikaderivaatta.

Ratkaisemalla yhtälö (3.49) saadaan kolmen hiukkasen järjestelmän ominaistaajuuksiksi arvot

$$\begin{aligned}
 \omega_1 &= \omega_0 - \omega_{r_0} \\
 \omega_2 &= \omega_0 + \omega_{r_0} \\
 \omega_3 &= \sqrt[4]{3\omega_0^4 + 10\omega_0^2\omega_{r_0}^2 - \frac{7}{3}\omega_{r_0}^4 + \frac{R_3}{12S_3} - \frac{S_3}{12}} \\
 \omega_4 &= \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2 - \omega_3^2} \\
 \omega_5 &= \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2},
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

missä kertoimet  $R_3$  ja  $S_3$  ovat

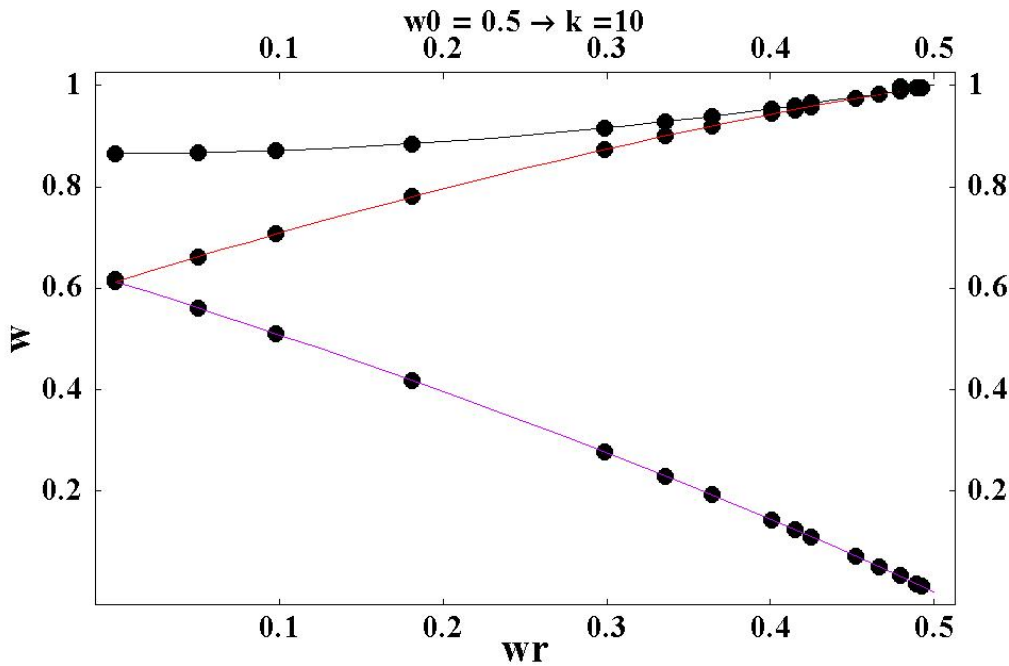
$$\begin{aligned}
 R_3 &= -81\omega_0^8 - 3132\omega_0^6\omega_{r_0}^2 - 1638\omega_0^4\omega_{r_0}^4 + 708\omega_0^2\omega_{r_0}^6 + 47\omega_{r_0}^8 \\
 S_3 &= \left( -729\omega_0^{12} + 62694\omega_0^{10}\omega_{r_0}^2 + 234009\omega_0^8\omega_{r_0}^4 - 108\omega_0^6\omega_{r_0}^6 \right. \\
 &\quad \left. - 29079\omega_0^4\omega_{r_0}^8 - 7002\omega_0^2\omega_{r_0}^{10} + 2359\omega_{r_0}^{12} \right. \\
 &\quad \left. + i972\sqrt{6}(\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2)^4 \sqrt{3\omega_0^2 - \omega_{r_0}^2}(\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2)\omega_{r_0} \right)^{\frac{1}{3}}.
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

On mielenkiintoista, että vaikka  $S_3$  on kompleksinen, niin ominaistaajuudet  $\omega_3$  ja  $\omega_4$  ovat kuitenkin reaalisia, kun  $\omega_{r_0} \in [0, \omega_0]$ .

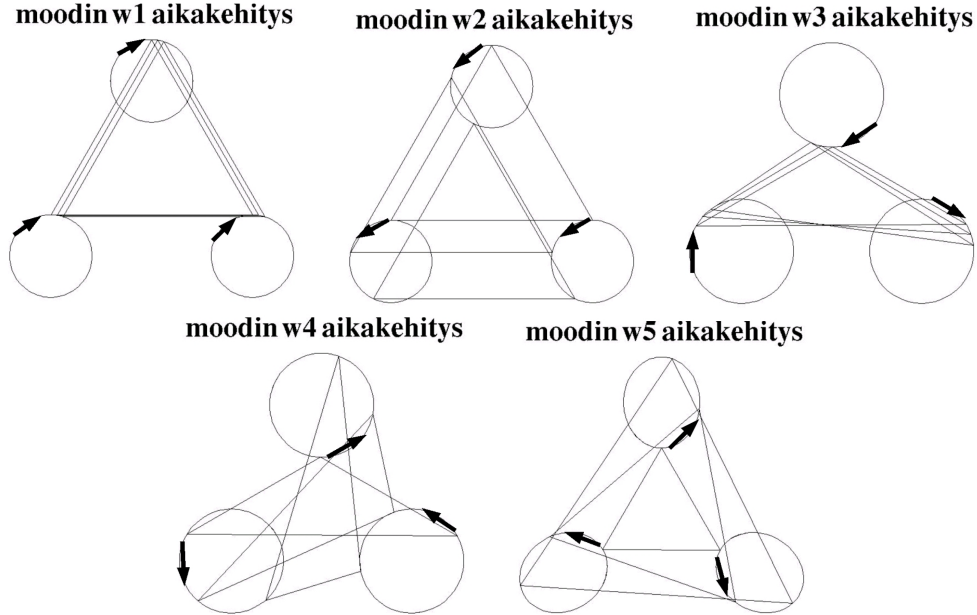
Massakeskipisteen ominaistaajuuksista nähdään, että ne eivät vastaa simulointituloksia. Niiden muodot näyttävät kuitenkin lupaavilta, koska ne ovat suoraan verrannollisia pyörivän koordinaatiston kulmanopeuteen  $\omega_{r_0}$ .

Verrataan seuraavaksi kolmen hiukkasen keskinäisiä ominaisvärähtelyitä  $\omega_3$ ,  $\omega_4$  ja  $\omega_5$  simulointituloksiin. Kuvasta 3.2 nähdään, että johdetut ominaistaajuudet vastaavat täydellisesti simuloinnin mukaisia ominaisvärähtelyiden taajuuksia. Koska simulointi tässä tilanteessa vastaa periaatteessa sitä, mitä hiukkasten välillä oikeasti tapahtuu, on sen antamiin tuloksiin luotettava. Kahdella eri tavalla saatu- jen yhtenevien tulosten perusteella voidaan lähes varmuudella todeta, että kolmen hiukkasen ominaistaajuudet ovat yhtälön (3.50) lausekkeet.

Ominaistaajuuksia vastaavien ominaisvektoreiden analyttiset muodot ovat



**Kuva 3.2:** Kuvassa on esitettyä sekä simuloinnin antamat, että johdetun yhtälön (3.51) mukaiset numeeriset arvot ominaistaajuuksille. Eri menetelmillä saadut tulokset ovat lukuarvoiltaan identtiset, joten on erittäin perusteltua olettaa johdettujen ominaistaajuuksien olevan oikein. Kuvassa mustalla on “hengitysmoodin” ominaistaajuus. Violetti ja punainen kuvaaja kertovat ominaistaajuuksien  $\omega_3$  ja  $\omega_4$  riippuvuuden kulmataajuudesta  $\omega_{r_0}$ .



**Kuva 3.3:** Harmonisessa potentiaalissa värähtelevän kolmen klassisen varatun hiukkasen ominaismoodit. Jokaisessa tapauksessa on pyörimismäärä siten, että  $\omega_{r_0} = 0,4$ . Ylhäältä vasemmalta lukien moodit vastaavat ominaistajuuksia  $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4$  ja  $\omega_5$ .

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_1 &= D_{\omega_1,1}(-i, -i, -i, 1, 1, 1)e^{i\omega_1 t} + D_{\omega_1,2}(i, i, i, 1, 1, 1)e^{-i\omega_1 t} \\
 \mathbf{X}_2 &= D_{\omega_2,1}(i, i, i, 1, 1, 1)e^{i\omega_2 t} + D_{\omega_2,2}(-i, -i, -i, 1, 1, 1)e^{-i\omega_2 t} \\
 \mathbf{X}_3 &= D_{\omega_3,1}(-\sqrt{3} + i, \sqrt{3} + i, -2i, -1 - \sqrt{3}i, -1 + \sqrt{3}i, 2)e^{i\omega_3 t} \\
 &\quad + D_{\omega_3,2}(-\sqrt{3} - i, \sqrt{3} - i, 2i, -1 + \sqrt{3}i, -1 - \sqrt{3}i, 2)e^{-i\omega_3 t} \\
 \mathbf{X}_4 &= D_{\omega_4,1}(\sqrt{3} + i, -\sqrt{3} + i, -2i, 1 - \sqrt{3}i, 1 + \sqrt{3}i, -2)e^{i\omega_4 t} \\
 &\quad + D_{\omega_4,2}(\sqrt{3} - i, -\sqrt{3} - i, 2i, 1 + \sqrt{3}i, 1 - \sqrt{3}i, -2)e^{-i\omega_4 t} \\
 \mathbf{X}_5 &= D_{\omega_5,1}\left(3\sqrt{3}\omega_0^2 + 5\sqrt{3}\omega_{r_0}^2 - 4i\omega_{r_0}\omega_5, -8\sqrt{3}\omega_{r_0}^2 - 4i\omega_{r_0}\omega_5, \right. \\
 &\quad - 3\sqrt{3}\omega_0^2 + 3\sqrt{3}\omega_{r_0}^2 + 8i\omega_{r_0}\omega_5, 3\omega_0^2 - 11\omega_{r_0}^2 - 4\sqrt{3}i\omega_{r_0}\omega_5, \\
 &\quad \left. - 6\omega_0^2 - 2\omega_{r_0}^2 + 4\sqrt{3}i\omega_{r_0}\omega_5, 3\omega_0^2 + 13\omega_{r_0}^2\right)e^{i\omega_5 t} \\
 &\quad + D_{\omega_5,2}\left(3\sqrt{3}\omega_0^2 + 5\sqrt{3}\omega_{r_0}^2 + 4i\omega_{r_0}\omega_5, -8\sqrt{3}\omega_{r_0}^2 + 4i\omega_{r_0}\omega_5, \right. \\
 &\quad - 3\sqrt{3}\omega_0^2 + 3\sqrt{3}\omega_{r_0}^2 - 8i\omega_{r_0}\omega_5, 3\omega_0^2 - 11\omega_{r_0}^2 + 4\sqrt{3}i\omega_{r_0}\omega_5, \\
 &\quad \left. - 6\omega_0^2 - 2\omega_{r_0}^2 - 4\sqrt{3}i\omega_{r_0}\omega_5, 3\omega_0^2 + 13\omega_{r_0}^2\right)e^{-i\omega_5 t}.
 \end{aligned} \tag{3.53}$$

Jokaisella ominaisvektorilla  $i$  sen  $j$ . komponentti on muotoa

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_{i,j} &= D_{\omega_i,1}(A + Bi)e^{i\omega_i t} + D_{\omega_i,2}(A - Bi)e^{-i\omega_i t} \\
 &= A(D_{\omega_i,1} + D_{\omega_i,2}) \cos \omega_i t - B(D_{\omega_i,1} + D_{\omega_i,2}) \sin \omega_i t \\
 &\quad + i \underbrace{(A(D_{\omega_i,1} - D_{\omega_i,2}) \sin \omega_i t + B(D_{\omega_i,1} - D_{\omega_i,2}) \cos \omega_i t)}_{=0 \Rightarrow D_{\omega_i,1} = D_{\omega_i,2}} \\
 &= 2D_{i,1}(A \cos \omega_i t - B \sin \omega_i t) .
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

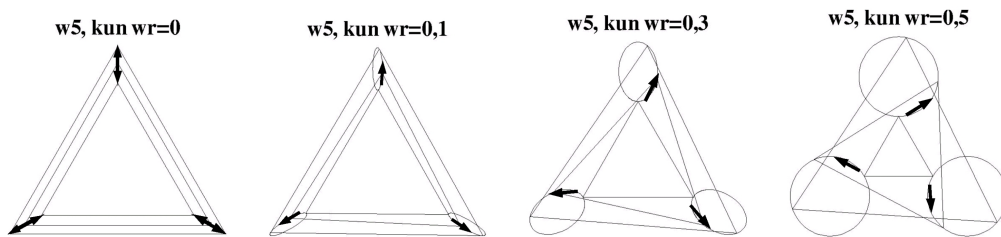
Edellä olevassa yhtälössä (3.54) vaadittiin ominaisvektorin reaalisuus, joten asetettiin  $D_{\omega_i,1} = D_{\omega_i,2}$ . Koska vakio  $D_{i,1}$  on koko ominaisvektorin kertoimena, eikä se riipu ainakaan ajasta, niin ei sen arvoa tarvitse selvittää. Vakion merkitys nimittäin häviää normituksessa. Ominaistaajuuksia vastaavien ominaisvektoreiden reaaliseksi ja normitetuiksi ratkaisuiksi saadaan lausekkeet

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_1 &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\sin \omega_1 t, \sin \omega_1 t, \sin \omega_1 t, \cos \omega_1 t, \cos \omega_1 t, \cos \omega_1 t) \\
 \mathbf{X}_2 &= \frac{1}{\sqrt{6}}(-\sin \omega_2 t, -\sin \omega_2 t, -\sin \omega_2 t, \cos \omega_2 t, \cos \omega_2 t, \cos \omega_2 t) \\
 \mathbf{X}_3 &= \frac{1}{\sqrt{12}}\left(-\sqrt{3} \cos \omega_3 t - \sin \omega_3 t, \sqrt{3} \cos \omega_3 t - \sin \omega_3 t, 2 \sin \omega_3 t, \right. \\
 &\quad \left. -\cos \omega_3 t + \sqrt{3} \sin \omega_3 t, -\cos \omega_3 t - \sqrt{3} \sin \omega_3 t, 2 \cos \omega_3 t\right) \\
 \mathbf{X}_4 &= \frac{1}{\sqrt{12}}\left(\sqrt{3} \cos \omega_4 t - \sin \omega_4 t, -\sqrt{3} \cos \omega_4 t - \sin \omega_4 t, 2 \sin \omega_4 t, \right. \\
 &\quad \left. \cos \omega_4 t + \sqrt{3} \sin \omega_4 t, \cos \omega_4 t - \sqrt{3} \sin \omega_4 t, -2 \cos \omega_4 t\right) \\
 \mathbf{X}_5 &= \frac{1}{16\sqrt{3}\omega_0^2}\left((3\omega_0^2 + 5\omega_{r_0}^2)\sqrt{3} \cos \omega_5 t + 4\omega_{r_0}\omega_5 \sin \omega_5 t, -8\sqrt{3}\omega_{r_0}^2 \cos \omega_5 t \right. \\
 &\quad \left. + 4\omega_{r_0}\omega_5 \sin \omega_5 t, (-3\omega_0^2 + 3\omega_{r_0}^2)\sqrt{3} \cos \omega_5 t - 8\omega_{r_0}\omega_5 \sin \omega_5 t, \right. \\
 &\quad \left. (3\omega_0^2 - 11\omega_{r_0}^2) \cos \omega_5 t + 4\sqrt{3}\omega_{r_0}\omega_5 \sin \omega_5 t, -(6\omega_0^2 + 2\omega_{r_0}^2) \cos \omega_5 t \right. \\
 &\quad \left. - 4\sqrt{3}\omega_{r_0}\omega_5 \sin \omega_5 t, (3\omega_0^2 + 13\omega_{r_0}^2) \cos \omega_5 t\right) .
 \end{aligned} \tag{3.55}$$

Kuvassa 3.3 on esitetty kolmen hiukkasen tapauksen moodien aikakehitykset kokonaispyörimismäärän  $\omega_{r_0} = \omega_0$  tapauksessa. Vasemmalta ylhäältä lukien kak-

si ensimmäistä moodia vastaavat massakeskipistevärähtelyitä, joista ensimmäinen kiertää ympyräradalla myötäpäivään ja toinen vastapäivään. Kaksi seuraavaa moodia ovat myös keskenään liikeratojen osalta samanlaisia ja ne vastaavat taajuuksia  $\omega_3$  ja  $\omega_4$ . Niistäkin ensimmäinen kiertää ympyräradalla myötäpäivään ja toinen vastapäivään. Viimeinen moodi on “hengitysmoodi” ja se kiertää ellipsin muotoisella radalla vastapäivään.

Pyörimistaajuuksia  $\omega_3$  ja  $\omega_4$  sekä massakeskipistevärähtelyjä vastaavat moodit ovat pyörimismäärän nolla tilanteessa molemmat degeneroituneita moodeja. Degeneraatio häviää heti systeemin lähtiessä pyörimään. Kuvaa 3.3 katsoessa degeneraation häviämiseksi löytyy luonnollinen selitys.



**Kuva 3.4:** “Hengitysmoodi” kehittyä pyörimismäärän kasvaessa alun edestakaisesta värähtelystä yhä paksuuntuvien ellipsiratojen kautta lopulta ympyräradoiksi, kun  $\omega_{r_0} = 0,5$ .

Pyörivässä koordinaatistossa myötäpäivään kiertävät moodit värähtelevät yhä pienemmällä energialla ja niiden ominaistajuus on lopulta nolla, kun  $\omega_{r_0} = \omega_0$ . Vastapäivään kiertävien moodien värähtelytaajuus kasvaa lineaarisesti lähestyen arvoa  $2\omega_0$ . Tilanne voidaan tulkita siten, että vastapäivään tapahtuva värähtely pyörii laboratoriokoordinaatistossa kulmanopeuden  $\omega_{r_0}$  suuntaisesti ja toinen sitä vastaan. Pyörivässä koordinaatistossa tilanne näyttää siltä, että ensimmäinen värähtely hidastuu, kunnes lopulta näyttää melkein pysähtyvän, ja toinen pyörii yhä suuremmalla kulmanopeudella.

“Hengitysmoodin” hiukkasten ratojen riippuvuutta pyörimismäärästä on selvitetty kuvassa 3.4. Siitä nähdään, että moodi kehittyä pyörimismäärän kasvaessa alun edestakaisesta värähtelystä yhä paksuuntuvien ellipsiratojen kautta lopulta ympyräradoiksi, kun  $\omega_3 \rightarrow 2\omega_0$ . Kuvasta huomataan myös, että “hengitysmoodissa” kolmio pysyy koko ajan tasasivuisena.

### 3.5 Neljä klassista hiukkasta harmonisessa potentiaalissa

Neljän identtisen varatun klassisen hiukkasen liike voidaan niinkään ratkaista olettamalla systeemin liikkeen tapahtuvan lähellä tasapainokohtaa.

Tasapainoasemassa järjestelmän geometrian voidaan päätellä olevan neliö. Nyt hiukkasten välisen tasapainoetäisyyden  $r_0$  ja hiukkasen tasapainotilanteen etäisyyden origoon  $b_0$  pätee sääntö

$$r_0 = \sqrt{2}b_0. \quad (3.56)$$

Tarkastellaan tilannetta pyörimisnopeudella pyörivässä koordinaatistossa ja käytetään hiukkasten paikkojen kuvaamiseen karteesisia koordinaatteja  $(x_i, y_i)$ . Selvitetään aluksi tasapainokoordinaatit. Tasapainoasemassa järjestelmän efektiivinen potentiaali

$$\begin{aligned} U_{\text{eff}} &= 2m\omega_0^2 b^2 + \frac{4A}{r} + \frac{A}{b} + 2m\dot{\theta}^2 b^2 \\ &= m\omega_0^2 r^2 + \frac{4 + \sqrt{2}}{r} A + \frac{L^2}{4mr^2}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

minimoituu, joten tasapainokohdan  $r_0$  yhtälöksi saadaan

$$r_0^2 - \frac{4 + \sqrt{2}}{2m\omega_0^2} A r_0 - \frac{L^2}{4m^2\omega_0^2} = 0. \quad (3.58)$$

Yksittäinen hiukkanen kokee nettovoiman, joka on olennaisesti yhtälön (3.45) mukainen. Erona kolmen hiukkasen tapaukseen, neljän hiukkasen tilanteessa Coulombin termissä on vuorovaikutus luonnollisesti kolmen eikä kahden hiukkasen kanssa. Ratkaisuperiaate on muutenkin lähes identtinen edellä laskettuun kolmen hiukkasen tapaukseen verrattuna eli Coulombin termit linearisoidaan jokaisen muuttujan suhteen. Neljän hiukkasen järjestelmän tasapainokoordinaatit ovat

$$\begin{aligned}
 (x_{10}, y_{10}) &= \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) r_0 \\
 (x_{20}, y_{20}) &= \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) r_0 \\
 (x_{30}, y_{30}) &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) r_0 \\
 (x_{40}, y_{40}) &= \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) r_0 .
 \end{aligned} \tag{3.59}$$

Yhtälöryhmän (3.45) mukaisen kahdeksan yhtälön yhtälöryhmän linearisoinnin jälkeen huomataan, että sen yleinen ratkaisu on muotoa

$$\mathbf{X}_j = \begin{bmatrix} x_i \\ y_k \end{bmatrix} (C_1 e^{i\omega t} + C_2 e^{-i\omega t}) , \tag{3.60}$$

missä  $j = 1, \dots, 8$  sekä  $i, k = 1, \dots, 4$ . Vaaditaan yhtälöryhmän ratkeavuus, joten sen determinantin on hävittävä kummallakin ratkaisufunktiolla erikseen.

Neljän hiukkasen tapauksessa sekä yhtälöitä että muuttujia on kahdeksan, joten yhtälöryhmän determinantti on  $8 \times 8$  -ulotteinen. Kolmen hiukkasen determinantista (3.49) nähdään, että jo  $6 \times 6$  -dimensiollinen vie kohtalaisen paljon tilaa. Neljän hiukkasen järjestelmän determinanttia ei edellä mainittuun syyhyn vedoten tässä yhteydessä esitetä. Kun vaaditaan determinantin häviäminen, niin molemmilla ratkaisufunktioilla neljän hiukkasen liikkeen ominaistajuuksiksi saadaan

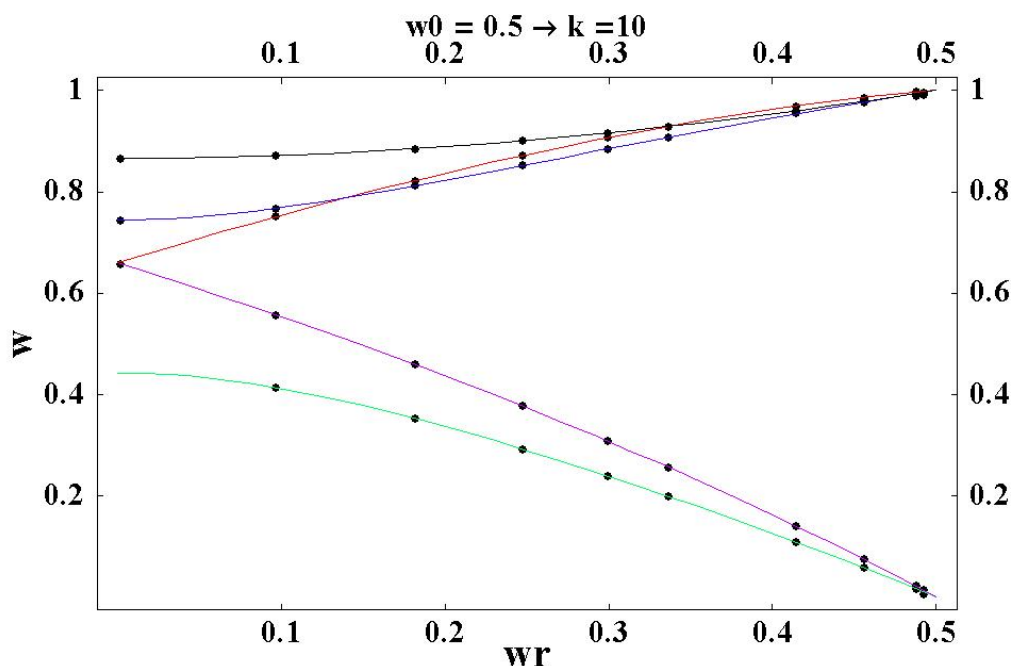
$$\begin{aligned}
 \omega_1 &= \omega_0 - \omega_{r_0} \\
 \omega_2 &= \omega_0 + \omega_{r_0} \\
 \omega_3 &= \sqrt{\frac{3\omega_0^2}{2} + \frac{\omega_{r_0}^2}{2} - R_4} \\
 \omega_4 &= S_4 - \omega_{r_0} \\
 \omega_5 &= S_4 + \omega_{r_0} \\
 \omega_6 &= \sqrt{\frac{3\omega_0^2}{2} + \frac{\omega_{r_0}^2}{2} + R_4} \\
 \omega_7 &= \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2} .
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

Yhtälössä (3.61) esiintyvät kertoimet ovat

$$R_4 = \frac{1}{14} \left( (1017 - 648\sqrt{2}) \omega_0^4 \right. \\ \left. (1296\sqrt{2} - 858) \omega_0^2 \omega_{r_0}^2 + (625 - 648\sqrt{2}) \omega_{r_0}^4 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.62)$$

$$S_4 = \frac{\sqrt{7}}{7} \sqrt{(15 - 2\sqrt{2}) \omega_0^2 + (2\sqrt{2} - 8) \omega_{r_0}^2}.$$

Neljän hiukkasen järjestelmän ominaistajuudet saatiin siten ratkaistua analyttisesti ja niiden ratkaisulausekkeet ovat verrattain yksinkertaiset. Niiden oikeellisuus on kuitenkin syytä tarkastaa.



**Kuva 3.5:** Kuvassa on esitettyä sekä simuloinnin antamat, että johdetun yhtälön (3.61) mukaiset numeeriset arvot ominaistajuuksille. Eri menetelmillä saadut tulokset ovat lukuarvoiltaan identtiset. Kuvassa mustalla on “hengitysmoodin” ominaistajuus. Violetti ja punainen kuvaaja kertovat ominaistajuuksien  $\omega_4$  ja  $\omega_5$  riippuvuudesta  $\omega_{r_0}$ . Vihreä ja sininen kuvaaja kertovat puolestaan saman asian ominaistajuuksista  $\omega_3$  ja  $\omega_7$ . Erityisen mielenkiintoinen tulos on se, että pyörimismäärän kasvaessa  $\omega_5$  ohittaa ensin taajuuden  $\omega_6$  ja lopulta jopa “hengitysmoodia” vastaavan taajuuden  $\omega_7$ .

Johdettuja hiukkasen keskinäisen värähtelyn ominaistajuuksia  $\omega_3$ ,  $\omega_4$ ,  $\omega_5$ ,



$\omega_6$  ja  $\omega_7$  voidaan verrata saman järjestelmän simulointituloksiin. Kuvasta 3.5 nähdään, että johdetut ominaistajuudet ovat yhteneviä simuloinnin antamien ominaistajuuksien kanssa. Taajuuksia  $\omega_1$  ja  $\omega_2$  sekä  $\omega_3$  ja  $\omega_4$  ovat energioiltaan pareittain degeneroituneita pyörimättömässä tilanteessa. Degeneraatio häviää heti systeemin lähtiessä pyörimään. Erityisen mielenkiintoista on, että alussa kolmanneksi suurimmalla ominaistajuudella  $\omega_5$  värähtelevä moodi ohittaa energiassa taajuudella  $\omega_6$  värähtelevän moodin noin kohdassa  $\omega_{r_0} = 1,4$ . Vielä erikoisempi seikka on, että sama moodi ohittaa energiassa jopa taajuudella  $\omega_7$  värähtelevän moodin eli ”hengitysmoodin” kohdassa  $\omega_{r_0} = 3,4$ .

Ominaistajuuksia vastaavat ominaisvektorit ratkaistaan samalla tekniikalla kuin kolmen hiukkasen tapauksessa. Ainoastaan taajuuksien  $\omega_1, \omega_2, \omega_4$  ja  $\omega_5$  ominaismoodit saadaan ratkaistua analyttisesti. Ne ovat

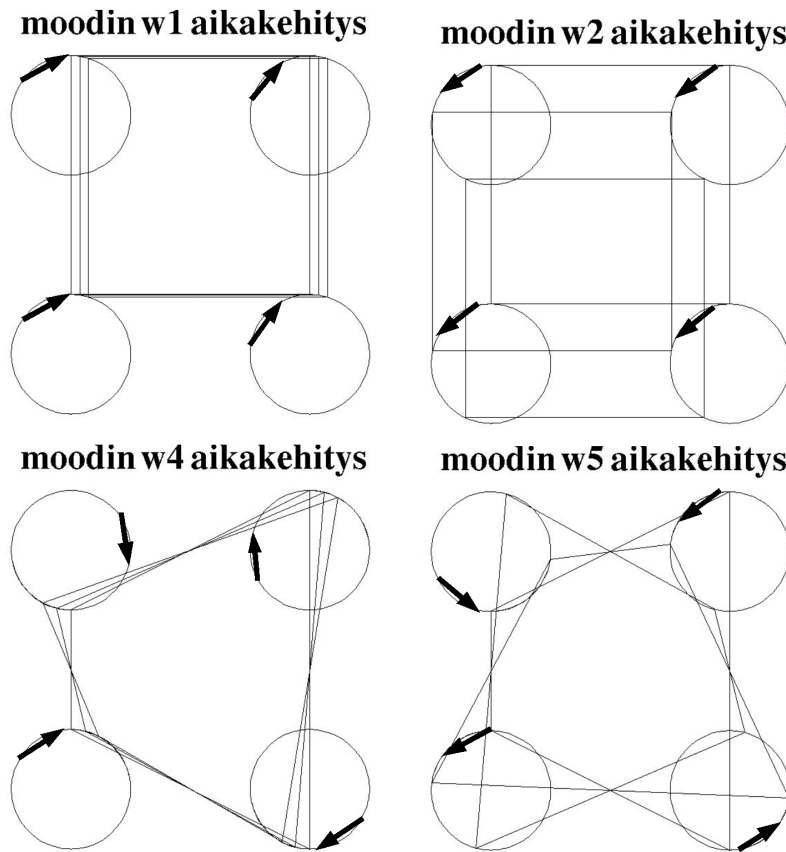
$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_1 &= \frac{1}{2} (\sin \omega_1 t, \sin \omega_1 t, \sin \omega_1 t, \sin \omega_1 t, \\
 &\quad \cos \omega_1 t, \cos \omega_1 t, \cos \omega_1 t, \cos \omega_1 t) \\
 \mathbf{X}_2 &= \frac{1}{2} (-\sin \omega_2 t, -\sin \omega_2 t, -\sin \omega_2 t, -\sin \omega_2 t, \\
 &\quad \cos \omega_2 t, \cos \omega_2 t, \cos \omega_2 t, \cos \omega_2 t) \\
 \mathbf{X}_4 &= \frac{1}{2} (\sin \omega_4 t, -\sin \omega_4 t, \sin \omega_4 t, -\sin \omega_4 t, \\
 &\quad \cos \omega_4 t, -\cos \omega_4 t, \cos \omega_4 t, -\cos \omega_4 t) \\
 \mathbf{X}_5 &= \frac{1}{2} (-\sin \omega_5 t, \sin \omega_5 t, -\sin \omega_5 t, \sin \omega_5 t, \\
 &\quad \cos \omega_5 t, -\cos \omega_5 t, \cos \omega_5 t, -\cos \omega_5 t) .
 \end{aligned} \tag{3.63}$$

Kuvassa 3.6 on esitetty näiden moodien aikakehitykset kokonaispyörimismäärän  $\omega_{r_0} = 0,4$  tapauksessa. Kaikissa tapauksissa kolmen eri ajanhetken aikaväli on sama, jotta ominaistajuuksien riippuvuutta pyörimismäärästä saataisiin havainnollistettua. Vasemmalta ylhäältä lukien kaksi ensimmäistä moodia vastaavat massakeskipistevärähtelyitä. Alhaalla vasemmalla on ominaistajuutta  $\omega_4$  vastaavan moodin aikakehitys ja sen oikealla puolella sama taajuudelle  $\omega_5$ .

Kuvasta 3.6 nähdään, että moodit  $\omega_1$  ja  $\omega_2$  sekä  $\omega_4$  ja  $\omega_5$  ovat liikeradoiltaan lähes identtiset. Ainoa ero pareilla on, että ensimmäinen kiertää myötäpäivään ja jälkimmäinen vastapäivään.

Ominaistaajuuksien  $\omega_3$ ,  $\omega_6$  ja  $\omega_7$  ominaismodeja ei saatu ratkaistua analyytisesti. Ratkaisun saamiseksi pitäisi ratkaista yli neljännen asteen polynomin juuret, mikä on mahdotonta. Niiden radat voidaan kuitenkin selvittää asettamalla jokin pyörimismäärän arvo ja ratkaisemalla arvot numeerisesti. Kuvassa 3.7 on esitetty tällä menetelmällä saadut moodien kehitykset pyörimismäärän funktiona. Kuvassa ylimpänä on taajuuden  $\omega_3$  ominaismoodi, ja sen alapuolella taajuutta  $\omega_6$  vastaava moodi. Alimpana on esitetty ominaistaajuuden  $\omega_7$  moodi, joka on “hengitysmoodi”.

Kuvasta 3.7 nähdään, että moodien  $\omega_3$  ja  $\omega_7$  hiukkasten radat näyttävät ole-



**Kuva 3.6:** Harmonisessa potentiaalissa värähtelevän neljän klassisen varatun hiukkasen ympyrärataiset ominaismoodit. Jokaisessa tapauksessa on pyörimismäärä siten, että  $\omega_{r_0} = 0,4$ . Ylhäältä vasemmalta lukien moodit vastaavat ominaistaajuuksia  $\omega_1$ ,  $\omega_2$ ,  $\omega_4$  ja  $\omega_5$ . Muita moodeja ei ole esitetty tässä, koska niille ei saatu johdettua yhtälömuotoisia lausekkeita.

van aika samankaltaiset, varsinkin pienellä pyörimismäärällä. Ne kuitenkin kiertävät erilaisissa vaiheissa omia ellipsiratojaan, joten hiukkaskonfiguraatiot ovat aivan erilaiset. "Hengitysmoodissa" hiukkaskonfiguraatio pysyy koko ajan neliönä. Taajuuden  $\omega_3$  suorakaide venyy jakson aikana nurkistaan, palaa suorakaiteeksi ja venyy sitten toisista nurkistaan.

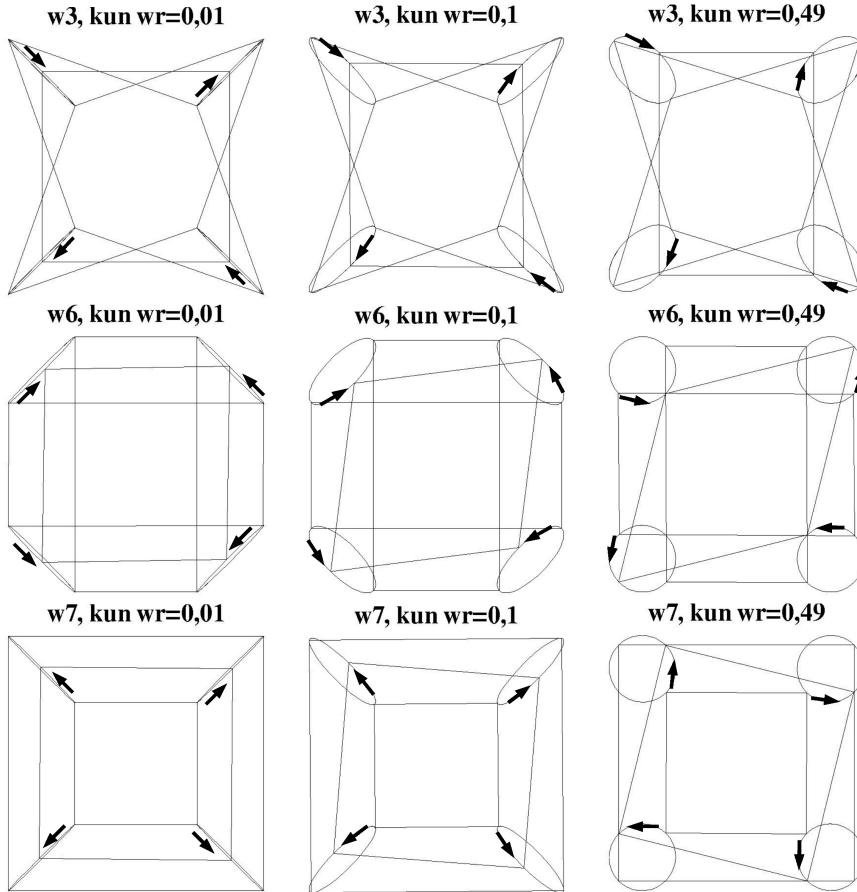
Jokaisen moodin aikakehitys on piirretty kolmella eri pyörimismäärällä. Kuvasta 3.7 nähdään, että ensimmäiset moodit kehittyvät pyörimismäärän kasvaessa alun edestakaisesta värähtelystä yhä pullistuvien ellipsien kautta lopulta ympyröiksi. Kummassakin moodissa hiukkaset pyörivät vastapäivään. Yllättävä tulos on se, että moodin  $\omega_3$  hiukkasten radat eivät lähene ympyröitä vaan pysyvät loppuun asti ellipseinä. Ominaistaajuutta  $\omega_3$  vastaavassa ominaismoodissa hiukkaset pyörivät ellipsiradoillaan myötäpäivään.

Ominaistaajuuksien moodien  $\omega_3$ ,  $\omega_6$  ja  $\omega_7$  riippuvuutta pyörimismäärästä ei pystytty selvittämään yhtälömuotoisena. Siitä huolimatta niille voidaan määrittää lausekkeet, johon jää muuttujiksi toistaiseksi tuntemattomat parametrit. Tuntemattomista parametreista riippuvat moodien lausekkeet ovat

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_3 &= \left( -\frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_3 t, T_{\omega_3,1} \cos \omega_3 t - T_{\omega_3,2} \sin \omega_3 t, \frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_3 t, \right. \\
 &\quad \left. -T_{\omega_3,1} \cos \omega_3 t + T_{\omega_3,2} \sin \omega_3 t, -T_{\omega_3,1} \cos \omega_3 t + T_{\omega_3,2} \sin \omega_3 t, \right. \\
 &\quad \left. -\frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_3 t, T_{\omega_3,1} \cos \omega_3 t - T_{\omega_3,2} \sin \omega_3 t, \frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_3 t \right) \\
 \mathbf{X}_6 &= \left( \frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_6 t, T_{\omega_6,1} \cos \omega_6 t - T_{\omega_6,2} \sin \omega_6 t, -\frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_6 t, \right. \\
 &\quad \left. -T_{\omega_6,1} \cos \omega_6 t + T_{\omega_6,2} \sin \omega_6 t, -T_{\omega_6,1} \cos \omega_6 t + T_{\omega_6,2} \sin \omega_6 t, \right. \\
 &\quad \left. \frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_6 t, T_{\omega_6,1} \cos \omega_6 t - T_{\omega_6,2} \sin \omega_6 t, -\frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_6 t \right) \\
 \mathbf{X}_7 &= \left( -\frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_7 t, -T_{\omega_7,1} \cos \omega_7 t - T_{\omega_7,2} \sin \omega_7 t, \frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_7 t, \right. \\
 &\quad \left. T_{\omega_7,1} \cos \omega_7 t + T_{\omega_7,2} \sin \omega_7 t, -T_{\omega_7,1} \cos \omega_7 t - T_{\omega_7,2} \sin \omega_7 t, \right. \\
 &\quad \left. \frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_7 t, T_{\omega_7,1} \cos \omega_7 t + T_{\omega_7,2} \sin \omega_7 t, -\frac{1}{\sqrt{8}} \cos \omega_7 t \right).
 \end{aligned} \tag{3.64}$$

Moodien lausekkeita (3.64) ei ole johdettu siinä mielessä, mitä johtamisella perinteisesti tarkoitetaan. Niiden muodon päättelyminen on niin sanottu elegantti arvaus. Kaikissa numeerisesti lasketuissa ratkaisuissa moodien muodot olivat

edellä mainittujen lausekkeiden mukaiset. Tässä tuntemattomaksi jäävät parametrit tulevat varsinaisessa analyttisessä ratkaisussa riippumaan arvoista  $\omega_0$  ja  $\omega_{r_0}$ . Numeeristen tulosten perusteella parametrit näyttävät noudattavan seuraavia sääntöjä



**Kuva 3.7:** Harmonisessa potentiaalissa värähtelevän neljän klassisen varatun hiukkasen ellipsirataiset ominaismoodit. Ylhäältä lukien moodit vastaavat taajuuksia  $\omega_3$ ,  $\omega_6$  ja  $\omega_7$ .

$$\sqrt{T_{\omega_j,1}^2 + T_{\omega_j,2}^2} = \frac{1}{\sqrt{8}}$$

$$T_{\omega_6,1}, T_{\omega_7,1} \rightarrow 0, \text{ kun } \omega_{r_0} \rightarrow \omega_0 \quad (3.65)$$

$$T_{\omega_6,2}, T_{\omega_7,2} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{8}}, \text{ kun } \omega_{r_0} \rightarrow \omega_0 .$$

Parametrit  $T_{\omega_3,1}$  ja  $T_{\omega_3,2}$  näyttävät lähestyvän jotain muuta kuin lukuja 0 ja  $\frac{1}{\sqrt{8}}$ .

Kuvia 3.5, 3.6 ja 3.7 vertailemalla huomataan, että kaikkien myötäpäivään kiertävien moodien energiat pienenevät pyörimismäärän kasvaessa. Kehitys on päinvastainen vastapäivään kiertävillä moodeilla. Selitys tähän oudolta vaikuttavaan kehitykseen on luonnollinen. Myötäpäivään pyörivät moodit nimittäin kiertävät samaan suuntaan pyörivän koordinaatiston pyörimissuunnan kanssa. Siksi pyörivässä koordinaatistossa niiden liike näyttää hidastuvan, kunnes pyörimisnopeudet ovat samat. Silloin moodi näyttää pysyvän paikallaan.

Neljän hiukkasen systeemin kenties mielenkiintoisin tulos on se, että pyörimistaajuutta  $\omega_5$  vastaava moodi ohittaa alussa korkeammalla energialla värähtelevät moodit  $\omega_6$  ja  $\omega_7$  eli jopa “hengitysmoodin”. Toisaalta erityisesti matalaenergistien moodien  $\omega_1$ ,  $\omega_3$  ja  $\omega_4$  muodot ovat mielenkiintoisia, koska lähinnä niiden energiat ovat merkittäviä kvantisoidussa energiaspektrissä. Jos klassisen systeemin kvantisoidut tulokset selittävät kvanttipisteen energiaspektrin, niin kvanttimekaanisista aaltofunktioista (oikeammin parikorrelaatiofunktioista) voidaan mahdollisesti havaita klassiset moodit. On syytä vielä huomauttaa, että “hengitysmoodin” ominaistaajuuden riippuvuus pyörimismäärästä on sama kuin edellä lasketuissa pienemmissä systeemeissä.

### 3.6 “Hengitysmoodin” ominaistaajuuden lauseke rengasmaisessa systeemissä

Kaikissa edellä lasketuissa tilanteissa (3.20), (3.40), (3.51) ja (3.61) on esiintynyt ominaistaajuudella

$$\omega_{\text{heng}} = \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2} . \quad (3.66)$$

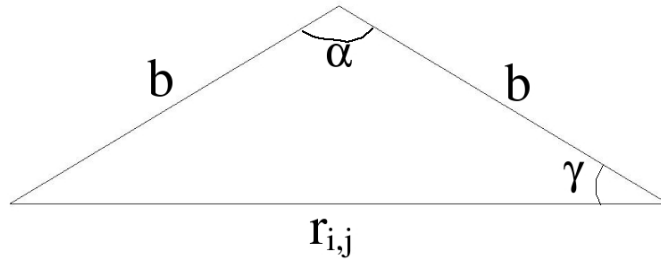
värähtelevä moodi. Se on “hengitysmoodi” eli moodi, jossa järjestelmä värähtelee puristuen ja laajentuen sen ääriasentojen välillä. Järjestelmän ääriasennoilla tarkoitetaan tässä sellaisia hiukkaskonfiguraatioita, joissa hiukkaset ovat mahdollisimman lähellä tai kaukana toisiaan. Koska moodi havaittiin kaikilla tarkastelluilla hiukkasmäärillä, herää kysymys siitä, onko “hengitysmoodi” olemassa samalla ominaistaajuudella yleisessä  $N$  hiukkasen järjestelmässä.

Etsitään  $N$  hiukkasen muodostaman systeemin tasapainokohta ja kehitetään potentiaali Taylorin polynomiksi sen ympärillä. Valitaan harmonisen potentiaalin minimi koordinaatiston origoksi ja merkitään yksittäisen hiukkasen etäisyyttä siitä symbolilla  $b_j$ . Systeemin tasapainokohdan selvittämiseksi pitää minimoida sen efektiivinen potentiaali

$$\begin{aligned}
 U &= U_{\text{harm}} + U_{\text{Coul}} + \frac{L^2}{2I} \\
 &= \frac{m\omega_0^2}{2} \sum_{j=1}^N b_j^2 + \sum_{j<i} \frac{A}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \frac{L^2}{2m \sum_{j=1}^N b_j^2}, \quad (3.67)
 \end{aligned}$$

missä  $I$  on kokonaishitausmomentti.

Yhtälöstä (3.67) nähdään, että Coulombin termi voi tuottaa hankaluuksia. Tilanne helpottuu huomattavasti, kun oletetaan järjestelmän olevan tasapainokohdassa rengasmaisen. Rengasmaisella tarkoitetaan sitä, että järjestelmän tasapainokohdassa jokaisen hiukkasen etäisyys harmonisen potentiaalin minimiin on keskenään sama eli  $b_j = b$  jokaiselle hiukkaselle  $j$ . Edellä käsitellyt systeemit olivat kaikki tasapainokohdissaan rengasmaisia.



**Kuva 3.8:** Rengasmaisessa systeemissä kahden mielivaltaisesti valitun hiukkasen välinen etäisyys on tasakylkisen kolmion pohjasivu  $r_{i,j}$ . Kolmio on tasakylkinen, koska kummankin hiukkasen etäisyys origoon on  $b$ .

Rengasmaisessa systeemissä minkä tahansa kahden hiukkasen  $i$  ja  $j$  välinen etäisyys on kuvan 3.8 mukaisen tasakylkisen kolmion pohjasivu  $r_{i,j} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Kolmion kärkikulma on

$$\alpha = \frac{2N_2\pi}{N}, \quad (3.68)$$

missä tekijä  $N_2 = 1, \dots, \lfloor \frac{N}{2} \rfloor$  määräytyy sen mukaan kuinka lähekkäin hiukkaset ovat renkaassa. Jos hiukkaset ovat esimerkiksi vierekkäin, niin  $N_2 = 1$ . Jos niiden välissä on kaksi hiukkasta, niin  $N_2 = 2$  ja jos hiukkaset ovat renkaan vastakkaisilla puolilla, niin  $N_2 = \lfloor \frac{N}{2} \rfloor$ . Trigonometriaa käyttäen saadaan johdettua sääntö

$$r_{i,j} = 2b \cos \gamma = 2b \cos \left( \frac{\pi}{2} - \frac{\pi N_2}{N} \right), \quad (3.69)$$

koska  $2\gamma = \pi - \alpha$ .

Edellä mainitun tasakylkisen kolmion kulmat eivät siis riipu tasapainoetäisyydestä  $b$  vaan ainoastaan hiukkaslukumäärästä ja tarkasteltavien hiukkasten keskinäisestä sijainnista renkaassa. Siksi johdettu yhtälö (3.69) tarkoittaa sitä, että  $r_{i,j} \propto b$  kaikilla hiukkaspareilla  $i, j$  ja erityisesti koko Coulombin termi  $U_{\text{Coul}} \propto \frac{1}{b}$ .

Minimoidaan rengasmaisen järjestelmän efektiivinen potentiaali

$$U = \frac{mN\omega_0^2}{2}b^2 + \frac{D}{b} + \frac{L^2}{2mNb^2}, \quad (3.70)$$

tasapainokohdan selvittämiseksi. Vakiotekijä  $D$  ei riipu arvosta  $b$  eikä sen tarkkaa arvoa tarvitse tietää ainakaan vielä. Tasapainokohdalle  $r_0$  saadaan johdettua yhtälö potentiaalia derivoimalla

$$\left. \frac{dU}{db} \right|_{b=b_0} = mN\omega_0^2 b_0 - \frac{D}{b_0^2} - \frac{L^2}{mNb_0^3} = 0. \quad (3.71)$$

Kehitetään potentiaali toisen asteen Taylorin polynomiksi tasapainokohdan ympärillä [26]

$$\begin{aligned} U &\approx U_0 + \underbrace{\left. \frac{dU}{db} \right|_{b=b_0}}_{=0} (b - b_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{db^2} \right|_{b=b_0} (b - b_0)^2 \\ &= U_0 + \frac{mN}{2} \left( 3\omega_0^2 + \frac{L^2}{(mNb_0^2)^2} \right) (b - b_0)^2 \end{aligned} \quad (3.72)$$

tasapainokohdan yhtälön (3.71) nojalla. Eliminoidaan kehitelmästä (3.72) pyörimismäärä sijoituksella  $L = \omega_{r_0} I = \omega_{r_0} mN b_0^2$ . Potentiaalın sarjakehitelmäksi saadaan silloin lauseke

$$U \approx U_0 + \frac{mN}{2} (3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2) (b - b_0)^2 . \quad (3.73)$$

Tulkitaan yhtälön (3.73) toisen asteen termin etukerroin  $mN$  -massaisen harmonisen oskillaattorin etukertoimeksi eli

$$\begin{aligned} \frac{mN}{2} \omega^2 &= \frac{mN}{2} (3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2) \\ \Rightarrow \omega &=: \omega_{\text{heng}} = \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2} . \end{aligned} \quad (3.74)$$

Saatiin osoitettua, että yhtälön (3.66) mukaisella taajuudella värähtelevä moodi on olemassa yleisessä  $N$  hiukkasen muodostamassa rengasmaisessa järjestelmässä. On vaikea kuvitella esimerkiksi sadan hiukkasen konfiguraation olevan tasapainoasemassa todella rengasmaisen. Rengasmaisuus toteutuu ilmeisesti vielä ainakin viiden ja kuuden hiukkasen systeemeille. Tämän tarkastelun avulla ei voida päätellä sitä, että ominaistaaajuus vastaa nimenomaan “hengitysmoodin” taajuutta. Aikaisemmin ratkaistuissa tapauksissa niiden välinen yhteys on jo todettu, joten on todennäköistä yhteyden olevan voimassa myös muille tapauksille.

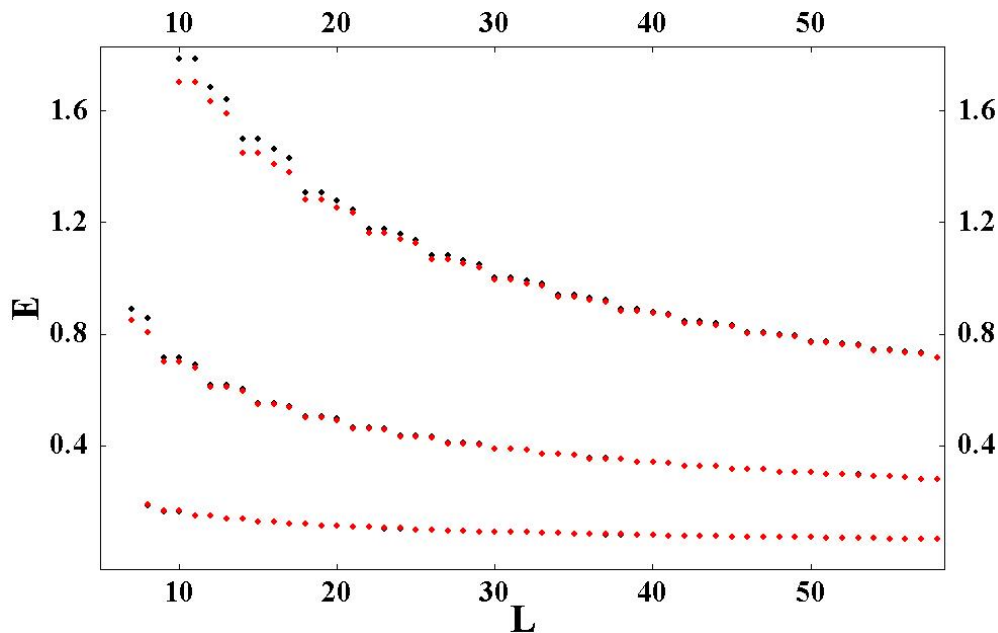


## Luku 4

# Kvantisoidut klassiset energiat ja CI -menetelmällä saadut energiat

Kahden, kolmen ja neljän hiukkasen klassiset kokonaisenergiat voidaan kvantisoida yhtälön (2.26) antamalla tavalla. Klassinen energiapektri konstruoidaan valitsemalla alimmilla energioilla värähtelevistä moodeista sallitut. Moodien valinnat tehdään ryhmäteoreettisin perustein. Tässä luvussa esitetään kvantisoidut tulokset ja verrataan niitä vastaaviin CI -menetelmällä laskettuihin energioihin. Kummallakin menetelmällä saadut kokonaisenergiat skaalataan siten, että niistä vähennetään massakeskipisteen viritysentergia  $\hbar L\omega_0$ . Lisäksi kokonaisenergioista vähennetään nollapistevärähtelyn maksimiarvo  $\hbar N\omega_0$ . Skaalauksen syy on se, että massakeskipisteviritykset erottuvat spektrissä vaakasuorina viivoina. [15, 27]

Kuvassa 4.1 nähdään kahden, kolmen ja neljän hiukkasen perustilojen energiat. Kvanttimekaaniset energiat on esitettyinä kuvassa mustilla pisteillä ja klassiset punaisilla. Tuloksista nähdään, että jokaisen perustilan energiaspektri on jaksollinen, missä jakson pituus on sama kuin hiukkaslukumäärä. Kahden hiukkasen perustila koostuu pelkästä pyörivästä tilasta ja sen massakeskipistevärähtelyistä. Kolmella hiukkasella mukaan tulee alimmalla energialla tapahtuva keskinäinen värähtely. Neljällä hiukkasella edellisten lisäksi tulee vielä toiseksi alimmalla energialla värähtelevän moodin energia. Jatkossa puhuttaessa jakson ensimmäisestä tilasta tarkoitetaan pelkän pyörimisenergian tilaa. Silloin jakson toinen energia on massakeskipistevärähtely ja loput ovat hiukkasten keskinäisen värähtelyn tiloja. Kvantisoidulla saatu perustila kuvaa kvanttipisteen perustilaa sekä kvalita-



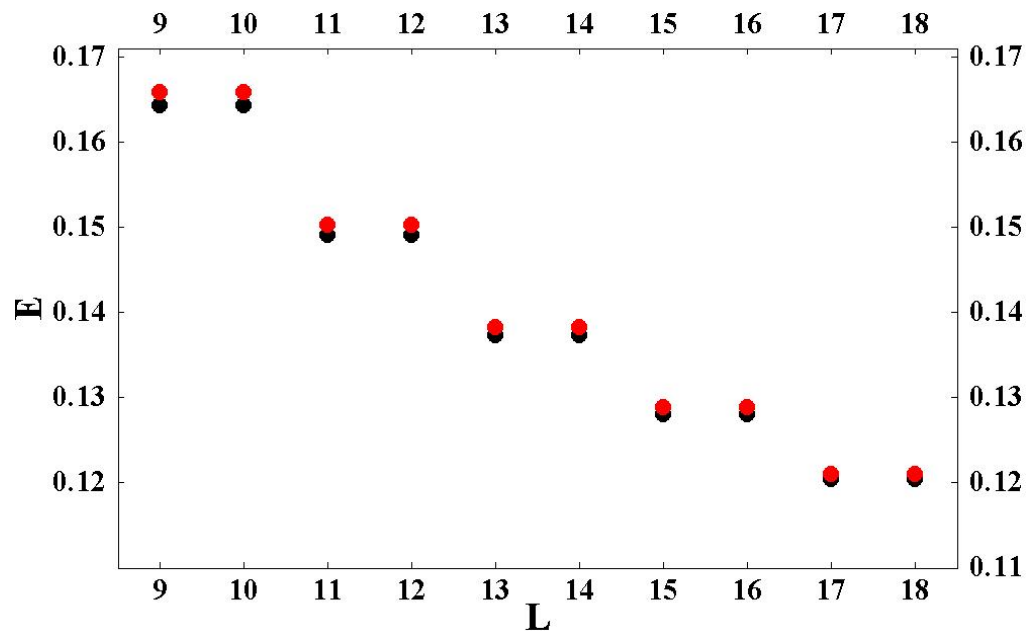
**Kuva 4.1:** Kuvassa näkyvät kahden, kolmen ja neljän hiukkasen perustilojen energiat. CI -menetelmällä saadut energiat on merkitty mustilla pisteillä ja klassisista tuloksista kvantisoidut energiat punaisilla pisteillä.

tiivisesti, että kvantitatiivisesti erittäin hyvin. Vaikka tulokset poikkeavat pienillä pyörimismäärän arvoilla jonkin verran toisistaan, niin siitä huolimatta energiapektrin muodot ovat silloinkin identtiset.

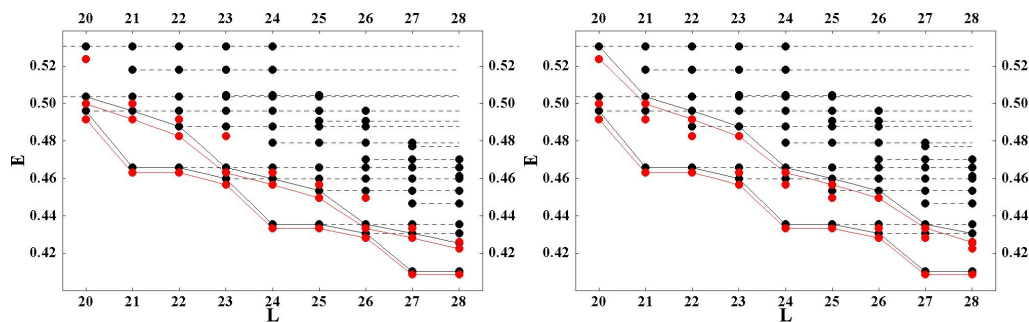
Kuvan 4.1 tuloksista nähdään myös, että energiat lähenevät toisiaan sitä hitaammin, mitä enemmän hiukkasia kvanttipisteessä on. Syy siihen selviää tarkastelemalla aaltofunktiota (2.18) ja siihen liittyvää kerrointa  $\nu$ , (2.19). Koska pyörimismäärä  $L = \frac{N(N-1)}{2}m$ , missä  $m$  antaa olennaisesti kertoimen  $\nu$ , niin hiukkasluvun kasvaessa samaa kerrointa vastaava tila saavutetaan suuremmilla pyörimismäärän arvoilla.

Kahden hiukkasen perustilan energiat on esitetty pyörimismäärän funktiona kuvassa 4.2. Kvantisoidut energiat näyttävät yhtenevän kvanttipisteen energioiden kanssa jopa näin pienessä energiaskaalassa. Pyörimismäärän  $L = 9$  arvolla energiat poikkeavat toisistaan noin 1,2% ja pyörimismäärällä  $L = 18$  enää noin 0,4%.

Kuvasta 4.3 nähdään kolmen hiukkasen järjestelmän kolme alinta energiatilaa. Kuvassa vasemmalla on kaksi alinta energiatilaa sekä oikealla alin ja kolmanneksi alin energiatila. Siitä nähdään, että klassiset energiat sopivat sekä kvalitatiivisesti,

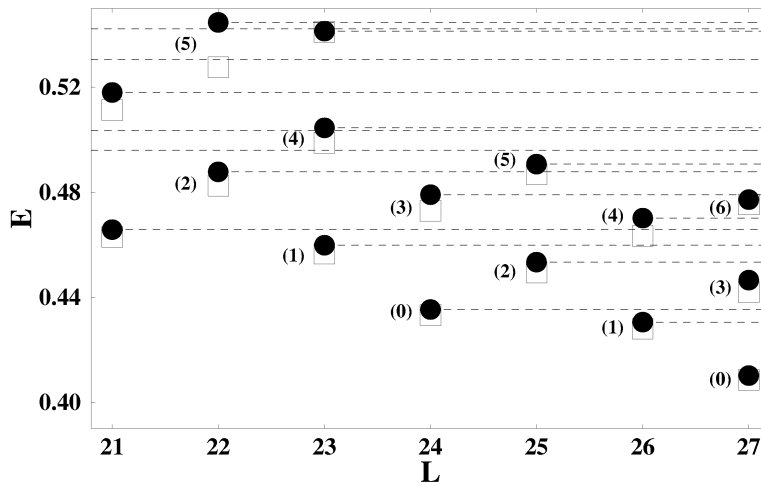


**Kuva 4.2:** Kahden hiukkasen perustilan energiat laskettuna klassista tuloksista kvantisoimalla ja suoraan Hamiltonin funktio diagonalisoimalla. Kvantisoidut tulokset näkyvät punaisina pisteinä ja kvanttimekaaniset tarkat energiat mustina pisteinä. Energiaspektrit ovat lähes identtiset.



**Kuva 4.3:** Vasemmalla: kolmen hiukkasen järjestelmän perustilan, ja ensimmäisen viritystilan energiat. Yhdistämättömät punaiset pisteet ovat toisen viritystilan energioita. Oikealla: kolmen hiukkasen järjestelmän perustilan, ja toisen viritystilan energiat. Yhdistämättömät punaiset pisteet ovat ensimmäisen viritystilan energioita. Molemmissa tapauksissa energiat on laskettu sekä kvantisoimalla klassisten järjestelmien tulokset, että numeerisesti CI -menetelmällä. Kvantisoidut tulokset näkyvät punaisina pisteinä ja kvanttimekaaniset tarkat energiat mustina pisteinä.

että kvantitatiivisesti yhteen tarkkojen kvanttimekaanisten monihiukkaslaskujen kanssa. Klassiset energiat näyttäisivät olevan jonkin vakioarvon verran pienempiä kuin varsinaisen kvanttipisteen energiat. Ero ei ole suuri, koska energiat poikkeavat toisistaan korkeintaan prosenttien verran.

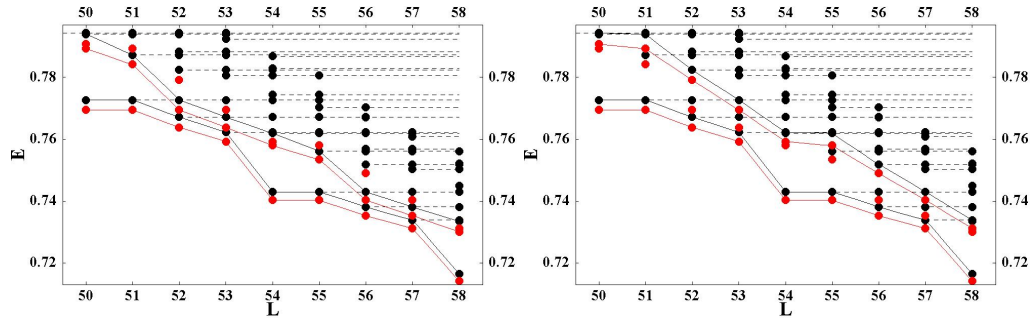


**Kuva 4.4:** CI -menetelmällä lasketut kolmen hiukkasen kvanttimekaaniset energiat on esitetty kuvassa mustina pisteinä. Klassisten tulosten kvantisoidut energiat on esitetty kuvassa punaisina pisteinä. Klassisten tulosten yhtenevyys CI -menetelmällä saatuihin tuloksiin nähden on erittäin hyvä. Kvanttimekaanisista tuloksista lähtevät poikittaiset katkoviivat tarkoittavat sen tilan massakeskipistevärähtelyitä. Niiden energia-arvoja ei ole piirretty kuvaan pisteinä, jotta ne eivät sekoittaisi uusien värähtelytilojen havainnoimista. Ominaisaajuuden  $\omega_3$  moninkerrat on numeroitu kuvaan.

Kuvasta 4.4 nähdään kolmen hiukkasen kvanttipisteen energiaspektri sekä CI -menetelmällä laskettuna, että klassisista tuloksista kvantisoimalla laskettuna. Klassinen energiaspektri on konstruoitu siten, että moodit  $\omega_3$  toistuvat harmonisen oskillaattorin energian moninkertoina kahden pyörimismäärätilan välein oikealle päin kasvaen.

Kuvassa 4.5 on neljän hiukkasen järjestelmän kolme alinta energiatilaa. Kuvassa vasemmalla on kaksi alinta energiatilaa sekä oikealla alin ja kolmanneksi alin energiatila. Siitä nähdään, että klassinen energiaspektri mukaillee sekä muodoltaan, että energioiden absoluuttisilta arvoiltaan kvanttipisteen energiaspektriä. Tässäkin tapauksessa klassiset energiat näyttävät olevan jonkin vakioarvon verran pienempiä kuin vastaavan kvanttipisteen energiat. Poikkema on kuitenkin pieni,

koska energiat eroavat toisistaan noin puolen prosentin verran.

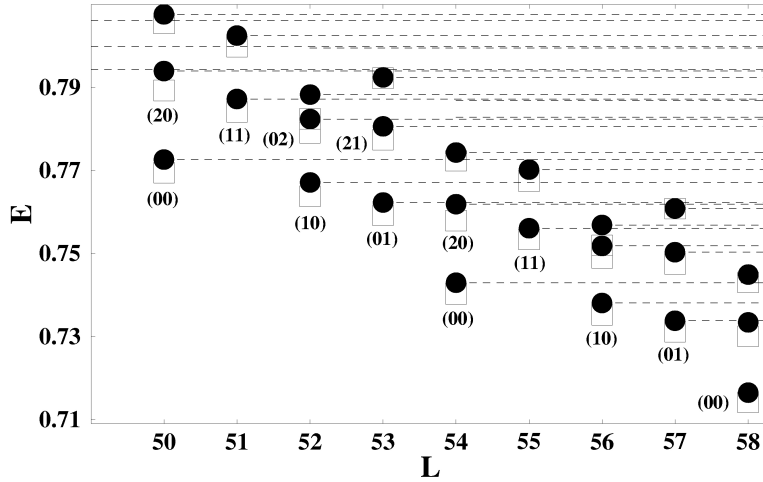


**Kuva 4.5:** Vasemmalla: neljän hiukkasen järjestelmän perustilan, ja ensimmäisen viritystilan energiat. Yhdistämättömät punaiset pisteet ovat toisen viritystilan energioita. Oikealla: neljän hiukkasen järjestelmän perustilan, ja toisen viritystilan energiat. Yhdistämättömät punaiset pisteet ovat ensimmäisen viritystilan energioita. Molemmissa tapauksissa energiat on laskettu sekä kvantisoimalla klassisten järjestelmien tulokset, että numeerisesti CI -menetelmällä. Kvantisoidut tulokset näkyvät punaisina pisteinä ja kvanttimekaaniset tarkat energiat mustina pisteinä.

Kuvassa 4.6 on esitettyä neljän hiukkasen järjestelmän alimpien tilojen kvanttimekaaninen energiaspektri. Samaan kuvaan on asetettu vertailun vuoksi vastaavan klassisen järjestelmän kvantisoitu energiaspektri. Klassinen energiaspektri on konstruoitu siten, että moodit  $\omega_3$  toistuvat harmonisen oskillaattorin energian moninkertoina kahden pyörimismäärätilan välein oikealle päin kasvaen. Moodi  $\omega_4$  toistuu samalla logiikalla, mutta kolmen pyörimismäärätilan välein.

Otetaan käyttöön tiloilta merkintä  $(L, i, j)$ , missä  $L$  antaa pyörimismäärän,  $i$  kertoo monennellako energiatilalla systeemi värähtelee moodin  $\omega_3$  suhteen ja  $j$  kertoo vastaavan moodin  $\omega_4$  suhteen. Koska ensimmäinen moodin  $\omega_3$  värähtely lähtee jakson kolmannelta energialta ja moodin  $\omega_4$  neljänneltä energialta, niin ensimmäinen sekoitustila on heti seuraavan jakson toisen energian viritystilana. Edellä mainituin merkinnöin kuvassa 4.6 moodien ensimmäiset värähdystilat ovat  $(52, 1, 0)$  ja  $(53, 0, 1)$  (sekä luonnollisesti  $(56, 1, 0)$  ja  $(57, 0, 1)$ ). Kuten edellä mainittiin, ne ovat samalla kyseisiä pyörimismäärän tiloja vastaavat energian perustilat.

Moodien  $\omega_3$  ja  $\omega_4$  toiset värähdystilat ovat konstruktion mukaan  $(54, 2, 0)$  ja  $(56, 0, 2)$ , joista  $(54, 2, 0)$  on samalla pyörimismääränsä vastaavan tilan ensimmäinen energian viritystila. Moodin  $\omega_4$  toinen värähdystila on vasta pyörimis-



**Kuva 4.6:** CI -menetelmällä lasketut neljän hiukkasen kvanttimekaaniset energiat on esitetty kuvassa avoimina neliöinä. Klassisten tulosten kvantisoidut energiat on esitetty kuvassa mustina neliöinä. Klassisten tulosten yhtenevyys CI -menetelmällä saatuihin tuloksiin nähden on hyvä. Kvanttimekaanisista tuloksista lähtevät poikittaiset katkoviivat tarkoittavat sen tilan massakeskipistevärähtelyitä. Niiden energia-arvoja ei ole piirretty kuvaan, jotta ne eivät sekoittaisi uusien värähtelytilojen havainnoimista. Moodien  $(\omega_3, \omega_4)$  moninkerrat on numeroitu kuvaan.

määränsä toinen viritystila, koska sitä alempana on moodin  $\omega_3$  massakeskipisteviritys. Moodeja oikealle päin kasvatettaessa, niiden ensimmäinen sekoitustila on  $(55, 1, 1)$ , joka niin ikään on pyörimismääränsä ensimmäinen viritystila.

Sekoitustilaa  $(55, 1, 1)$  korkeammat moodien värähdystilat eivät enää esiinny ensimmäisissä viritystiloissa, joten puhutaan jatkossa siitä kuinka monensia uusia tiloja ne ovat. Uudella tilalla tarkoitetaan tässä sitä, monesko energiatila se olisi, jos poistettaisiin kaikki massakeskipistevärähdykset.

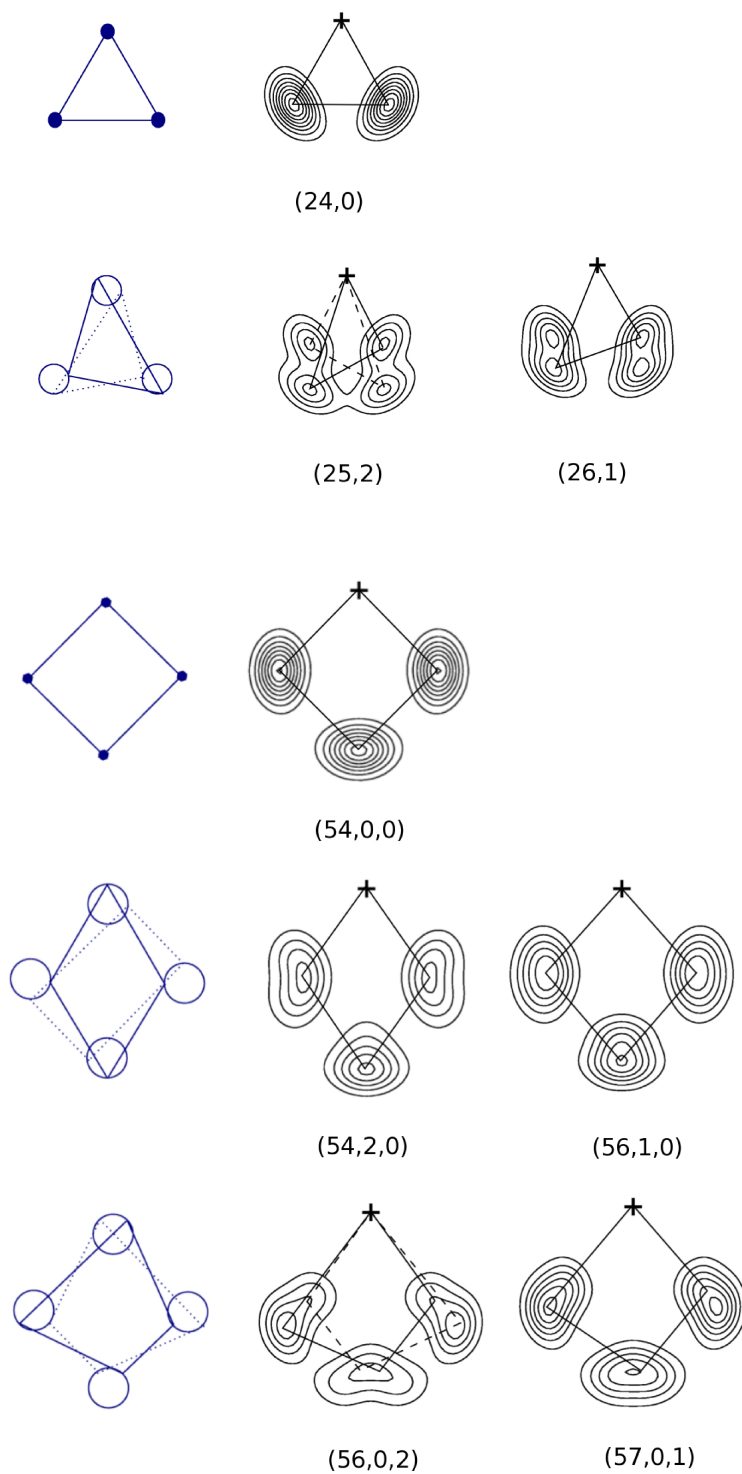
Esimerkiksi tilat  $(55, 0, 3)$  ja  $(57, 2, 1)$  ovat pyörimismääränsä toisia uusia tiloja, kun tilat  $(56, 3, 0)$ ,  $(57, 1, 3)$  ja  $(58, 1, 2)$  ovat pyörimismääriensä kolmansia uusia tiloja. Osalle näistä pyörimismäärän “lähtöpisteet” ovat niin pienen pyörimismäärän tiloja, etteivät ne näy kuvassa 4.6. Tilan  $(55, 0, 3)$  pyörimismäärän “lähtöpiste” on  $L = 55 - 0 \cdot 2 - 3 \cdot 3 = 46$ , kun vastaavasti tilan  $(57, 2, 1)$  lähtöpiste on  $L = 57 - 2 \cdot 2 - 1 \cdot 3 = 50$ . Tilojen  $(56, 3, 0)$ ,  $(57, 1, 3)$  ja  $(58, 1, 2)$  alkupisteet ovat  $L = 50, 46$  ja  $50$ .

Kaikissa kolmessa tapauksessa klassisista rotaatioista ja värähtelyistä kon-

struoitu energiaspektri sopii erittäin hyvin yhteen vastaavan kvanttipisteen energiaspektrin kanssa. Jos kvanttipiste todella värähtelee klassisten moodien tapaisissa tiloissa, niin nämä pitäisi olla havaittavissa kvanttipisteen parikorraatiofunktioista. Kuvassa 4.7 on esitetty klassisten energiatilojen moodit ja vastaavan kvanttipisteen energiatilojen parikorraatiofunktioita. Kuvasta nähdään, että parikorraatiofunktioista pystyy havaitsemaan klassisten moodien tapaisen muodon.

Käyttöön otettua energiaspektrin konstruointitapaa voidaan käyttää myös suurempien hiukkasmäärien kvanttipisteiden kuvaamiseen. Vaikuttaa siltä, että sopivia klassisia moodeja on aina  $N - 2$  kappaletta, joten yhdessä massakeskipistevärähtelyn kanssa moodeja on  $N - 1$ . Sopivalla tarkoitetaan tässä sitä, että moodin energia pienenee pyörimismäärän kasvaessa. Kun otetaan huomioon vielä pelkkää pyörimistä vastaava tila, niin jakson pituudeksi saadaan  $N$ , jonka on todettu olevan kvanttipisteen perustilan jakson pituus. [15]

Erityisen mielenkiintoinen olisi tapaus, jossa kahden alhaisella energialla värähtelevän moodin energiat menisivät ristiin, kuten neljän hiukkasen tapauksessa 3.5 kävi suuremmilla energioilla värähteleville moodeille. Sellainen tilanne antaisi mahdollisuuden testata tässä käytettyä energiaspektrin konstruointitapaa, koska silloin energiaspektrissä kahden moodin paikka vaihtuisi. Se havaittaisiin faasitransitiona eli jossakin perustilan jaksossa kahden vierekkäisen energian aaltofunktioita (parikorraatiofunktioita) vaihtuisivat keskenään verrattuna aikaisempiin jaksoihin.



**Kuva 4.7:** Klassisten värähtelyiden moodit ja kvanttipisteen vastaavien energioiden parikorrelaatiofunktio. Ne muistuttavat hyvin paljon toisiaan.



# Luku 5

## Päätelmät

Tämän työn tavoite oli selvittää kuinka hyvin kvanttipisteitä voitaisiin kuvata klassisilla rotaatioilla ja värähtelyillä. Tulosten perusteella voidaan sanoa, että kuvaaminen onnistuu erittäin hyvin ainakin hieman suuremmilla pyörimismäärän arvoilla. Klassisista energioista konstruoitu energiaspektri kuvaa sekä kvalitatiivisesti, että kvantitatiivisesti kvanttipisteen energiaspektriä. Klassiset moodit vastaavat kvanttimekaanisia parikorraatiofunktioita ainakin kvalitatiivisesti.

Klassisessa osuudessa saatiin johdettua kahden, kolmen ja neljän hiukkasen järjestelmille analyyttiset ominaistajuudet. Tulosten oikeellisuus varmennettiin toteamalla klassisten simulointitulosten olevan niiden kanssa yhtenevät. Lisäksi johdettiin analyyttiset lausekkeet kahden ja kolmen hiukkasen ominaismodeille, ja piirrettiin niistä kuvat. Kaikille neljän hiukkasen ominaismodeille ei onnistuttu johtamaan analyyttistä muotoa. Kaikista modeista saatiin ratkaistua ainakin numeeriset lausekkeet, joiden perusteella piirrettiin niistä kuvat. Sekä moodit, että niiden energiat laskettiin pyörivässä koordinaatistossa.

Kahden, kolmen ja neljän hiukkasen tapauksissa todettiin jokaisessa olevan “hengitysmoodin”, jossa hiukkaset värähtelevät tavalla, joka muistuttaa hengitystä. Kyseisessä moodissa värähtelyn taajuus on  $\omega = \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_{r_0}^2}$ . Pystyttiin osoittamaan, että yleisessä  $N$  hiukkasen muodostamassa “rengasmaisessa” järjestelmässä esiintyy samalla taajuudella värähtelevä moodi, joka hyvin todennäköisesti on aina “hengitysmoodi”.

Kvantisoimalla saadut energiat eroavat oikean kvanttipisteen energioista hyvin vähän. Tulokset ovat yhtenevät noin 0,5 – 1,2% tarkkuudella. Poikkeaman

syynä voi olla esimerkiksi se, että klassisia energioita johdettaessa joudutaan linearisoimaan voimat tasapainokohdan ympärillä. Kvanttipisteen elektronit eivät välttämättä ole lokalisoituneet niin hyvin, että tämä arvio vastaisi todellista tilannetta. Toisaalta kvanttimekaanisia tuloksia laskettaessa oletetaan kaikkien hiukasten olevan alimmalla Landaun tasolla. Jos ylemmillä tasoilla sallittaisiin olevan hiukkasia, niin se voisi muuttaa kvanttimekaanisia energioita.

Neljän hiukkasen klassiset ominaisenergiat käyttäytyvät erittäin mielenkiintoisesti. Moodin  $\omega_5$  energia ohittaa moodien  $\omega_6$  ja  $\omega_7$  energiat pyörimismäärän kasvaessa. Kyseiset moodit ovat energialtaan niin suuria, etteivät ne vaikuta kvantisoitujen tilojen energioihin. Jos vastaavanlainen ilmiö tapahtuisi alhaisilla energioilla, niin se antaisi tavan testata käytetyn kvantisoinnin oikeellisuutta kvanttipisteen energiaspektrin selvittämisessä. Jos klassisten moodien kahden alimman tilan energiat menisivät ristiin pyörimismäärän kasvaessa, niin se pitäisi olla havaittavissa myös parikorrelaatiofunktioista. Jos samalla pyörimismäärän arvolla olisi esimerkiksi värähtelyt  $(0, 2)$  ja  $(2, 0)$ , niin myös niiden energiat leikkaisivat. Ilmiö havaittaisiin siten, että leikkauskohdassa suurempaa energiaa vastaavan tilan parikorrelaatiofunktio vaihtuisi pienemmän energian parikorrelaatiofunktioiksi ja päinvastoin.

# Kirjallisuutta

- [1] A.L Efros. On the theory of a.c conduction in amorphous semiconductors and chalcogenide glasses. *Philosophical Magazine B: Physics of Condensed Matter: statistical Mechanics, Electronic, Optical and Magnetic Properties*, 43(5):829–838, 1981.
- [2] A.I Ekimov and A.A Onushchenko. Quantum size effect in three dimensional microscopic semiconductor crystals. *JETP Letters*, 34:345–349, 1981.
- [3] Quantum Dot Corporation. *Technology, Basics, History*. [www.qdots.com](http://www.qdots.com), 2005.
- [4] R. Rossetti and L. Brus. Electron-hole recombination emission as a probe of surface chemistry in aqueous cds colloid. *J. Phys. Chem.*, 86:4470–4472, 1982.
- [5] The Nobel Foundation. <http://nobelprize.org/physics/laureates/1913/index.html>. Nobelprize.org, 2005.
- [6] Klaus von Klitzing. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Physical Review Letters*, 45 (6), 1980.
- [7] Richard E. Prange and Steven M. Girvin. *The Quantum Hall Effect*. Springer-Verlag New York Inc., 1990.
- [8] The Royal Swedish Academy of Sciences. *Press Release: The Nobel Prize in Physics 1998*. <http://hp0.cts.iisc.ernet.in/Nobelprize/physics98.html>, 2005.

- 
- [9] D.C. Tsui, H.L. Störmer, and A.C. Gossard. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Physical Review Letters*, 48 (22), 1982.
- [10] R. B. Laughlin. Anomalous quantum hall effect: An incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Physical Review Letters*, 50 (18), 1983.
- [11] R. B. Laughlin. Quantized motion of three two-dimensional electrons in a strong magnetic field. *Phys. Rev. B*, 27:3383–3389, 1983.
- [12] J. K. Jain. Composite-fermion approach for the fractional quantum hall effect. *Physical Review Letters*, 63 (2), 1989.
- [13] J. K. Jain. Theory of the fractional quantum hall effect. *Physical Review B*, 41 (11), 1990.
- [14] J. K. Jain and T. Kawamura. Composite fermions in quantum dots. *Euromphysics Letters*, 29 (4):321–326, 1995.
- [15] M. Manninen and S. M. Reimann. Electronic structure of quantum dots. *Reviews of Modern Physics*, 74, 2002.
- [16] S. Viefers, P. Koskinen, P. Singha Deo, and M. Manninen. Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents. *Physica E*, 2003.
- [17] T. Chakraborty. *Quantum Dots: A Survey of the Properties of Artificial Atoms*. 1999.
- [18] Jouni Niskanen. *Kvanttimekaniikka II, 2. korjattu painos*. Limes ry, Helsinki, 2003.
- [19] Stephen Elliott. *The Physics and Chemistry of Solids*. John Wiley and Sons Ltd, South Carolina Columbia, SC, USA, 1998.
- [20] P. Hohenberg and W.Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136:B864, 1964.

- 
- [21] U. von Barth and L. Hedin. A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. i. *Journal of Physics C: Solid State Phys.*, 5:1629–1642, 1972.
- [22] W. Kohn and L.J Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140:A1133, 1965.
- [23] A. Matulis and E. Anisimovas. A quasiclassical approach to strongly correlated quantum dots in intense magnetic fields. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2005.
- [24] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics Second Edition*.
- [25] Stephen T. Thornton and Jerry B. Marion. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. Thomson Brooks/Cole, 10 Davis Drive, Belmont, CA 94002, USA, 2004.
- [26] Murray R. Spiegel and John Liu. *Mathematical Handbook of Formulas and Tables, Second Edition*. McGraw-Hill, 1999.
- [27] M. Koskinen, M. Manninen, B. Mottelson, and S.M. Reimann. Rotational and vibrational spectra of quantum rings. *Phys. Rev B*, 63:205323, 2001.



# Luku 6

## Liitteet

Tarkastellaan kolmen hiukkasen ongelmaa pyörimisnopeudella  $\omega_r$  pyörivässä koordinaatistossa. Pyörimisnopeus  $\omega_r$  valitaan sen mukaan, että se vastaa pyörimismäärää  $L$  eli

$$\omega_r = \frac{L}{I}, \quad (6.1)$$

missä  $I$  on systeemin hitausmomentti.

Keskenään vuorovaikuttavan kolmen hiukkasen liike voidaan ratkaista oletamalla systeemin olevan aluksi tasapainoasemassa tai ainakin lähellä sitä. Tasapainoasemassa edellä mainitun järjestelmän geometria voidaan päätellä olevan tasasivuinen kolmio. Trigonometrian avulla johdettua sääntö  $r$ :n (hiukkasten välinen etäisyys) ja  $b$ :n (hiukkasen etäisyys origosta) välille

$$r = \sqrt{3}b. \quad (6.2)$$

Kun järjestelmän geometria on tasapainoasemassa oletetun kaltainen, niin yksittäisen hiukkasen etäisyys origosta  $b_{\text{tas}} =: b_0$  voidaan selvittää minimoimalla systeemin efektiivinen potentiaali  $U_{\text{eff}}$  mainitun ehdon puitteissa. Efektiivinen potentiaali voidaan minimoida näin vaikka itse liikkeen aikana hiukkaset eivät olisi-kaan tasasivuisen kolmion mukaisessa muodostelmassa. Pelkästään tilanteen fyysikaalisten potentiaalien, eli harmonisen- ja Coulombin potentiaalin, minimoiminen ei riitä, koska hiukkasen pyöriminen luonnollisesti kasvattaa tasapainoetäisyyttä.

Pyörimisliikkeessä olevien hiukkasten kokema efektiivinen “keskipakovoima” voidaan ottaa huomioon lisäämällä sen “potentiaali” eli systeemin pyörimisener-

gia fysikaalisten potentiaalien jatkoksi. Saatua efektiivistä potentiaalia käsitellään kuin oikeaa potentiaalia. Kun otetaan huomioon, että systeemin kokonaishitausmomentti on

$$I = m \sum_{j=1}^3 b_j^2, \quad (6.3)$$

saadaan “keskipakovoiman potentiaaliksi” lauseke

$$U_{\text{CF}} = \frac{L^2}{2I} = \frac{L^2}{2m \sum_{j=1}^3 b_j^2}. \quad (6.4)$$

Fysikaalisten potentiaalien muoto tiedetään aikaisempien esimerkkien perusteella, joten efektiivinen potentiaali voidaan kirjoittaa muodossa

$$U_{\text{eff}} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \sum_{j=1}^3 b_j^2 + A \sum_{j=1}^3 \frac{1}{r_j} + \frac{L^2}{2m \sum_{j=1}^3 b_j^2}. \quad (6.5)$$

Tasapainoasemassa systeemin geometria on tasasivuinen kolmio, jolloin jokaisen hiukkasen etäisyys origosta on  $b_0$  ja keskinäinen etäisyys  $r_0$ . Efektiivisen potentiaalin (6.5) minimoinnin asemesta voidaan minimoida tasapainoaseman muotoisen systeemin efektiivinen potentiaali, joka riippuu olennaisesti vain yhdestä koordinaatista  $b$ . Näin saadaan tasapainoaseman arvo  $b_0$  selvitettyä helpommin kuin ilman tätä yksinkertaistusta. Tasasivuisen kolmion mukaisen järjestelmän efektiivinen potentiaali on muotoa

$$U_{\text{eff}} = \frac{3}{2} m \omega_0^2 b^2 + \frac{\sqrt{3}A}{b} + \frac{L^2}{6mb^2}, \quad (6.6)$$

joka säännön (6.2) avulla saatiin riippumaan ainoastaan yhdestä muuttujasta  $b$ . Derivoidaan yhtälöä (6.6) muuttujan  $b$  suhteen tasapainokohdan yhtälön saamiseksi

$$\begin{aligned} \left. \frac{dU_{\text{eff}}}{db} \right|_{b=b_0} &= 3m\omega_0^2 b_0 - \frac{\sqrt{3}A}{b_0^2} - \frac{L^2}{3mb_0^3} = 0 \\ \Rightarrow b_0^4 - \frac{\sqrt{3}A}{3m\omega_0^2} b_0 - \frac{L^2}{9m^2\omega_0^2} &= 0. \end{aligned} \quad (6.7)$$



Halutaan ratkaista kolmen hiukkasen systeemin ominaistajuudet, joten derivoidaan systeemin efektiivistä potentiaalia ja liike-energiaa yhtälön (3.6) mukaisesti. Koska tasapainoasemassa yksittäisen hiukkasen  $j$  kokemat voimat ovat janan  $b_j$  suuntaiset, voidaan hiukkasten kolme normaalikoordinaattia päätellä olevan koordinaatit  $b_j$ . Loput kolme normaalikoordinaattia ovat siten janoja  $b_j$  kohtisuoraan olevat koordinaatit  $b_{j,\perp} \approx b_0\theta_j$ . Tangentiaalisia normaalikoordinaatteja lausussa tehty approksimaatio on hyvin perusteltu, koska joka tapauksessa siirtymät ovat pieniä.

Koska tangentiaalisissa normaalikoordinaateissa on sekä kulma-, että etäisyysriippuvuutta, täytyy efektiivistä potentiaalia derivoitaessa ottaa huomioon, että

$$\frac{\partial U_{\text{eff}}}{\partial b_{j,\perp}} = \underbrace{\frac{\partial \theta_j}{\partial b_{j,\perp}}}_{=\frac{1}{b_0}} \frac{\partial U_{\text{eff}}}{\partial \theta_j} = \frac{1}{b_0} \frac{\partial U_{\text{eff}}}{\partial \theta_j} \quad (6.8)$$

ketjusäännön nojalla. Systeemin ominaistajuudet voidaan selvittää ratkaisemalla yhtälö (3.5). Kolmen hiukkasen tilanteessa häviävä determinantti on  $6 \times 6$  -determinantti.

Coulombin potentiaali ja keskipakoisvoiman potentiaali riippuvat normaalikoordinaateista suhteessa  $\frac{1}{b_j}$  ja  $\frac{1}{b_j^2}$ . Siksi derivoinnissa etäisyysriippuvuutta ei saada häviämään, kuten kytkettyjä harmonisia värähtelijöitä ratkaistaessa saadaan. Ratkaisuksi otetaan käytännössä sama, kuin kahden hiukkasen tapauksessa eli kehitetään hankaluuksia aiheuttavat potentiaalit Taylorin polynomeiksi tasapainokohdan ympärillä. Nyt se tehdään kuitenkin siten, että asetetaan kaikkien etäisyyskoordinaattien arvoksi lopussa tasapainoetäisyys  $b_0$ .

Matemaattisesti ajateltuna on sama, että kehitetäänkö potentiaalit toisen asteen Taylorin polynomeiksi, linearisoidaanko kytketyt liikeyhtälöt, vai tehdäänkö nyt valitulla tavalla. Saadaan kuusi kytkettyä liikeyhtälöä, jotka ovat automaattisesti harmonisten oskillaattoreiden liikeyhtälöitä. Niiden ratkaisufunktiot ovat siten  $e^{i\omega t}$  ja  $e^{-i\omega t}$ . Molempien ratkaisufunktioiden erikseen on toteutettava yhtälöt, joten sijoitetaan ratkaisufunktiot yhtälöryhmään. Derivointien jälkeen eksponenttitermit voidaan jakaa pois. Jäljelle jää determinantti, jonka pitää hävitä, jotta yhtälöryhmä olisi ratkeava

$$\begin{vmatrix}
B_3 - m\omega^2 & D_3 & D_3 & 0 & E_3 & -E_3 \\
D_3 & B_3 - m\omega^2 & D_3 & -E_3 & 0 & E_3 \\
D_3 & D_3 & B_3 - m\omega^2 & E_3 & -E_3 & 0 \\
0 & -E_3 & E_3 & C_3 - m\omega^2 & -\frac{C_3}{2} & -\frac{C_3}{2} \\
E_3 & 0 & -E_3 & -\frac{C_3}{2} & C_3 - m\omega^2 & -\frac{C_3}{2} \\
-E_3 & E_3 & 0 & -\frac{C_3}{2} & -\frac{C_3}{2} & C_3 - m\omega^2
\end{vmatrix}
= 0.$$

(6.9)

Yhtälön (6.9) vakioiden arvot ovat

$$\begin{aligned}
B_3 &= \frac{\overbrace{5A}^{=C_3}}{6\sqrt{3}b_0^3} + \frac{L^2}{27mb_0^4} + m\omega_0^2 = C_3 + \frac{L^2}{27mb_0^4} + m\omega_0^2 \\
D_3 &= \frac{7\sqrt{3}A}{36\sqrt{3}b_0^3} + \frac{4L^2}{27mb_0^4} \\
E_3 &= \frac{5A}{6\sqrt{3}b_0^3}.
\end{aligned}$$

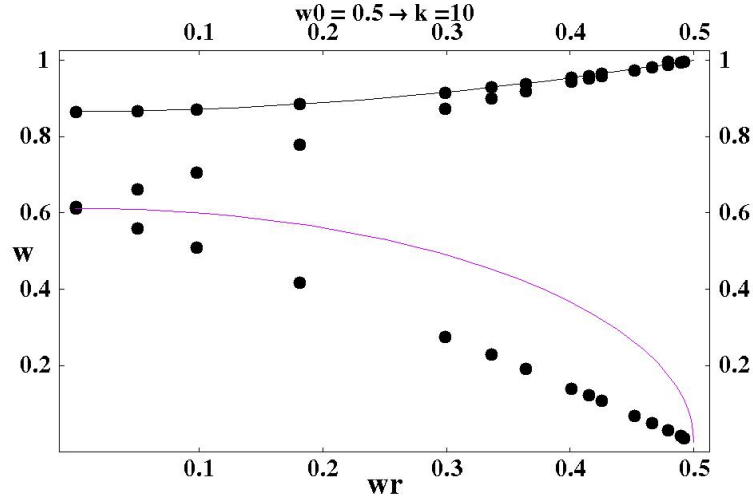
(6.10)

Ratkaisemalla yhtälö (6.9) saadaan kolmen hiukkasen järjestelmän ominaistajuuksiksi arvot

$$\begin{aligned}
\omega_1 = \omega_2 &= \sqrt{\omega_0^2 - \frac{L^2}{9m^2b_0^4}} = \sqrt{\omega_0^2 - \omega_r^2} \\
\omega_3 = \omega_4 &= \sqrt{\frac{3}{2}\omega_0^2 - \frac{L^2}{6m^2b_0^4}} = \sqrt{\frac{3}{2}(\omega_0^2 - \omega_r^2)} \\
\omega_5 &= \sqrt{3\omega_0^2 + \frac{L^2}{9m^2b_0^4}} = \sqrt{3\omega_0^2 + \omega_r^2}.
\end{aligned}$$

(6.11)

Ominaistajuuksista (6.11) kaksi ensimmäistä vastaavat ilmeisesti massakeskipistevärähtelyitä. Verrataan hiukkasten keskinäisten värähtelyiden ominaistajuuksia simuloinnin antamiin ominaistajuuksiin. Kuvasta 6.1 nähdään, että menetelmän antamista ominaistajuuksista ainoastaan “hengitysmoodin” ominais-



**Kuva 6.1:** Kuvassa on esitettyä sekä simuloinnin antamat, että johdetun yhtälön (6.11) mukaiset numeeriset arvot ominaistajuuksille. Kuvassa mustalla on “hengitysmoodin” ominaistajuus. Violetti kuvaaja kertoo ominaistajuuksien  $\omega_3$  ja  $\omega_4$  riippuvuuden kulma-  
taajuudesta  $\omega_r$ . Vain “hengitysmoodin” tulokset ovat yhteneviä.

taajuus  $\omega_5$  vastaa simuloinnin antamia arvoja. Kuvassa violettina näkyvä ominaistajuus  $\omega_3 = \omega_4$  ei vastaa simulointituloksia muuten kuin pyörimismäärää nolla vastaavassa tilanteessa.

Näyttää siltä, että johdetut ominaisvärähtelyiden yhtälöt (6.11) eivät anna oikeita tuloksia. Huomion arvoinen asia on, että kolmen hiukkasen ominaistajuu-  
det johdettiin pyörimisnopeudella  $\omega_r$  pyörivässä koordinaatistossa. Kulmanopeu-  
den ja pyörimismäärän välillä vallitsee yhteys

$$\omega_r = \frac{L}{m \sum b_i^2}, \tag{6.12}$$

joten pyörimismäärän ollessa vakio ja etäisyyksien  $b_i$  muuttuessa myös itse koor-  
dinaatiston pyörimisnopeus vaihtelee. On siis mahdollista, että ominaisvärähte-  
lyiden yhtälöt (6.11) johdettiin vääränlaisessa koordinaatistossa. Esiintynyt on-  
gelma ratkaistaan laskemalla ominaistajuuudet vakiokulmanopeudella  $\omega_{r_0}$  pyöri-  
vässä koordinaatistossa.