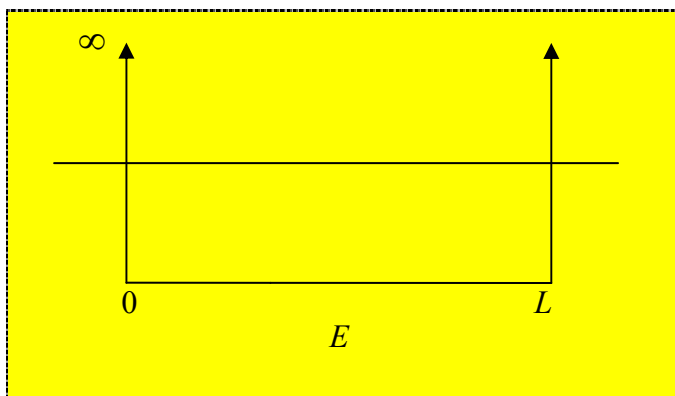


### Πρόβλημα Απειρόβαθο Κβαντικό Πηγάδι (ΑΚΠ0α)

Να μελετηθεί το απειρόβαθο κβαντικό πηγάδι με θετικές ενεργειακές καταστάσεις ( $E > 0$ ).

Αρχίζουμε με την μη συμμετρική μορφή του απειρόβαθου κβαντικού πηγαδιού δυναμικού, το οποίο εκτείνεται από 0 έως  $L$ .



**Σχήμα ΑΚΠ0α.1** Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής  $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, x > L \\ 0, & 0 \leq x \leq L \end{cases}$ . Αναζητούμε δέσμιες ενεργειακές καταστάσεις με  $E > 0$ .

*Μεθοδολογία.*

*Πρώτο στάδιο- Εξισώσεις Schrödinger.*

Ξεκινάμε, γράφοντας προσεκτικά τις εξισώσεις Schrödinger στις διάφορες περιοχές του δυναμικού. Στο παρόν δυναμικό έχουμε τρεις περιοχές. Τις περιοχές εκτός του πηγαδιού ( $x < 0, x > L$ ) και την περιοχή μέσα στο πηγάδι ( $0 < x < L$ ). Η γενική έκφραση για την εξίσωση Schrödinger είναι

$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$ . Για τις περιοχές εκτός του πηγαδιού η εξίσωση Schrödinger δεν

δίνει κάποιες πληροφορίες (ή έτσι φαίνεται με μια γρήγορη ματιά). Αναμένουμε όμως (όπως και στην κλασική φυσική) να μην υπάρχει δυνατότητα παρουσίας του σωματιδίου στις περιοχές αυτές. Δηλαδή θα πρέπει η κυματοσυνάρτηση να μηδενίζεται εκεί. Έχουμε λοιπόν ότι  $\psi(x) = 0$  για  $x < 0, x > L$  (μπορεί ο μηδενισμός της κυματοσυνάρτησης να προκύψει από το γεγονός ότι το δυναμικό απειρίζεται ( $V(x) \rightarrow \infty$ ) για  $x < 0, x > L$ ). Στην περιοχή μέσα στο πηγάδι ( $V(x) = 0$ ) η εξίσωση Schrödinger

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

*Δεύτερο στάδιο- Επίλυση εξισώσεων Schrödinger.*

Στο παρόν πρόβλημα, ουσιαστικά έχουμε μία εξίσωση Schrödinger, αυτή που περιγράφει την κυματοσυνάρτηση στην περιοχή μέσα στο πηγάδι.

Η εξίσωση Schrödinger γράφεται  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$  και καθώς

αναζητούμε λύσεις με θετικές ενέργειες η ποσότητα  $\frac{2mE}{\hbar^2}$  είναι θετική. Θέτουμε την ποσότητα αυτή ίση με το τετράγωνο κάποιας νέας φυσικής ποσότητας (αυτή έχει διαστάσεις κυματανύσματος), δηλαδή

$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$ , και η εξίσωση Schrödinger γράφεται  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$ . Από τα μαθηματικά

(θεωρία διαφορικών εξισώσεων) αλλά και από την φυσική (θεωρία περιοδικών φαινομένων), γνωρίζουμε ότι η λύση της εξίσωσης αυτής είναι

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$= A \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} + B \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} = \left[ \frac{B - iA}{2} \right] e^{ikx} + \left[ \frac{B + iA}{2} \right] e^{-ikx},$$

$$= A' e^{ikx} + B' e^{-ikx}$$

δηλαδή είναι ένας γραμμικός συνδυασμός λύσεων  $\sin kx, \cos kx$  ή ισοδύναμα ένας συνδυασμός εκθετικών λύσεων ( $e^{ikx}, e^{-ikx}$ ).

*Συνοριακές συνθήκες-Λύση με φυσική σημασία.*

Στα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού, εφαρμόζουμε τις συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της κυματοσυνάρτησης. Οι συνθήκες αυτές είναι προφανείς, καθώς σε διαφορετική περίπτωση, δηλαδή στην περίπτωση που είχαμε ασυνέχεια της συνάρτησης ή της πρώτης παραγώγου δεν θα οριζόνταν η πρώτη και η δεύτερη παράγωγος της κυματοσυνάρτησης αντίστοιχα (στην περίπτωση που η δεύτερη παράγωγος δεν ορίζεται ή αλλιώς είναι άπειρη δεν έχει νόημα η εξίσωση Schrödinger). Από τις συνοριακές συνθήκες μπορούμε να βρούμε (α) τις δυνατές τιμές της παραμέτρου  $k$  (και ισοδύναμα της ενέργειας) και (β) για δεδομένη ενέργεια τις τιμές των συντελεστών της κυματοσυνάρτησης. Έτσι έχουμε από την συνθήκη συνέχειας της κυματοσυνάρτησης στα σημεία 0 και  $L$ , ότι  $\psi(x=0)=0 \Rightarrow A \sin k0 + B \cos k0 = 0 \Rightarrow B = 0$

$$\text{και } \psi(x=L)=0 \Rightarrow A \sin kL = 0 \Rightarrow \sin kL = 0.$$

Στο απειρόβαθο κβαντικό πηγάδι δυναμικού, δεν έχουμε καμία επιπλέον πληροφορία από την παράγωγο της κυματοσυνάρτησης, καθώς αφού η ασυνέχεια του δυναμικού είναι άπειρη, η πρώτη παράγωγος δεν είναι συνεχής.

$$\text{Από την δεύτερη συνθήκη έχουμε } \sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi \Rightarrow \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = n\pi \Rightarrow E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \text{ όπου το}$$

$n$  είναι ένας ακέραιος αριθμός.

Η τελευταία σχέση μας δίνει τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας, ενώ το  $n$  είναι ο κβαντικός αριθμός που

$$\text{τις χαρακτηρίζει, } E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2.$$

$$\text{Καθώς } kL = n\pi, \text{ έχουμε } \psi(x) = A \sin kx = A \sin n\pi x / L.$$

Προφανώς, αφού φυσική σημασία έχει το γινόμενο  $\psi^*(x)\psi(x) = |\psi(x)|^2$ , οι αρνητικές τιμές του ακέραιου  $n$  δεν δίνουν διαφορετικές ισοσυναρτήσεις, ούτε και διαφορετικές ιδιοενέργειες (βλέπε το  $n^2$  στην σχέση ιδιοτιμών της ενέργειας).

Τέλος, παρατηρούμε ότι και η μηδενική τιμή του  $n$ , δίνει μηδενική κυματοσυνάρτηση, η οποία δεν είναι αποδεκτή (η αντίστοιχη πιθανότητα είναι παντού μηδέν). Έτσι οι δυνατές τιμές του  $n$  είναι 1,2,3...(θετική ακέραιοι).

*Νορμαλισμός.*

Για τον υπολογισμό του συντελεστή στην κυματοσυνάρτηση, χρησιμοποιούμε την συνθήκη νορμαλισμού. Συνθήκη η οποία εξασφαλίζει το γινόμενο  $\psi^*(x)\psi(x) = |\psi(x)|^2$  να έχει την φυσική σημασία της πιθανότητας.

Έχουμε από τον νορμαλισμό

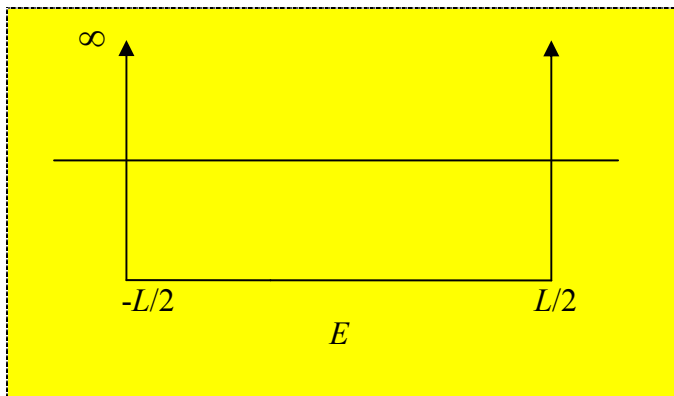
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_0^L A^* A \sin(n\pi x / L) \sin(n\pi x / L)dx = |A|^2 \int_0^L \sin^2(n\pi x / L)dx = |A|^2 L / 2 = 1,$$

$$\text{δηλαδή } |A| = \sqrt{2/L}.$$

Η τελευταία σχέση εκτιμά ότι  $A = \sqrt{2/L} e^{i\varphi}$  όπου  $\varphi$  είναι ένας οποιοδήποτε αριθμός (συνήθως ονομάζεται φάση). Αν δεν υπάρχει κάποια επιπλέον πληροφορία για την φάση αυτή, η κάποια πληροφορία για το κβαντικό σύστημα που να μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να βρεθεί η φάση, θα την παραλείψουμε.

Έτσι οι ιδιοσυναρτήσεις του απειρόβαθου πηγαδιού είναι  $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \Theta(x) \Theta(L-x)$ , όπου  $n=1,2,\dots$  (θετικός ακέραιος) και  $\Theta(x)$  είναι η συνάρτηση Heaviside γνωστή και ως συνάρτηση βήματος  $(\Theta(x-x_0) = \begin{cases} 0, & x \leq x_0 \\ 1, & x > x_0 \end{cases})$ . Οι συναρτήσεις βήματος εξασφαλίζουν τον μηδενισμό των ιδιοσυναρτήσεων εκτός του πηγαδιού.

Αρχίζουμε με την συμμετρική μορφή του απειρόβαθου κβαντικού πηγαδιού δυναμικού, το οποίο εκτείνεται από  $-L/2$  έως  $L/2$ .



**Σχήμα ΑΚΠ0α.2** Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής  $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L/2 \\ 0, & |x| \leq L/2 \end{cases}$ . Αναζητούμε δέσμιες ενεργειακές καταστάσεις με  $E > 0$ .

*Α' μέθοδος.*

Ξεκινάμε από την λύση που βρήκαμε στην μη συμμετρική περιγραφή του δυναμικού, δηλαδή την

$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \Theta(x) \Theta(L-x)$ . Καθώς το δυναμικό της συμμετρικής μορφής (σχήμα ΑΚΠ0α.2)

μπορεί να προέρθει από την μετατόπιση του μη συμμετρικού δυναμικού (σχήμα ΑΚΠ0α.1) κατά  $L/2$  προς τα δεξιά, αναμένουμε και η λύση να προέρχεται από μία ανάλογη μετατόπιση που ισοδυναμεί με αντικατάσταση του  $x$  με το  $x+L/2$ .

Για να καταλάβουμε γιατί χρειάζεται η παραπάνω αντικατάσταση και όχι η  $x-L/2$ , σκεφτόμαστε ως εξής. Έστω ότι έχουμε μια γνωστή απλή συνάρτηση, για παράδειγμα την  $x^2$ . Η συνάρτηση αυτή έχει ελάχιστο στο  $x=0$ . Τώρα αν μετατοπίσουμε τον άξονα  $x$  προς τα δεξιά κατά  $x_0$ , το ελάχιστο της συνάρτησης παρατηρείται για  $x=-x_0$  (κάντε ένα απλό σχήμα για να το καταλάβετε καλύτερα). Για να συμβαίνει αυτό θα πρέπει να γράψουμε την συνάρτηση  $x^2$  στο νέο σύστημα ως  $(x+x_0)^2$ .

Έτσι έχουμε για την κυματοσυνάρτηση στο συμμετρικό δυναμικό

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi(x+L/2)}{L} \Theta(x+L/2) \Theta(L-x-L/2) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left( \frac{n\pi x}{L} + \frac{n\pi}{2} \right) \Theta(x+L/2) \Theta(L/2-x)$$

Η τελευταία σχέση γράφεται ισοδύναμα

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left( \frac{n\pi x}{L} + \frac{n\pi}{2} \right) \Theta(x+L/2) \Theta(L/2-x) = \Theta(x+L/2) \Theta(L/2-x) \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(n\pi x/L), & n=1,3,5.. \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L), & n=2,4,6.. \end{cases}$$

Δηλαδή έχουμε άρτιες λύσεις για περιττό  $n$  (π.χ. για  $n=1$  έχουμε την θεμελιώδη κοί) και περιττές λύσεις για άρτιο  $n$  (π.χ. για  $n=2$  έχουμε την πρώτη διεγερμένη κοί).

Η συμπεριφορά αυτή των ιδιοσυναρτήσεων είναι αναμενόμενη καθώς έχουμε συμμετρικό δυναμικό.

*B' μέθοδος.*

Μπορούμε να εργαστούμε όπως στην μη συμμετρική μορφή του δυναμικού, εφαρμόζοντας τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες. Έτσι έχουμε από την συνθήκη συνέχειας της κυματοσυνάρτησης στα σημεία  $-L/2$  και  $L/2$ , ότι  $\psi(x=-L/2)=0 \Rightarrow -A \sin kL/2 + B \cos kL/2 = 0$

και  $\psi(x=L/2)=0 \Rightarrow A \sin kL/2 + B \cos kL/2 = 0$ .

Έχουμε ουσιαστικά ένα σύστημα δύο εξισώσεων με δύο αγνώστους,

$$\begin{bmatrix} -\sin kL/2 & \cos kL/2 \\ \sin kL/2 & \cos kL/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Το παραπάνω σύστημα έχει μη μηδενική λύση όταν η ορίζουσα των συντελεστών είναι μηδέν, δηλαδή

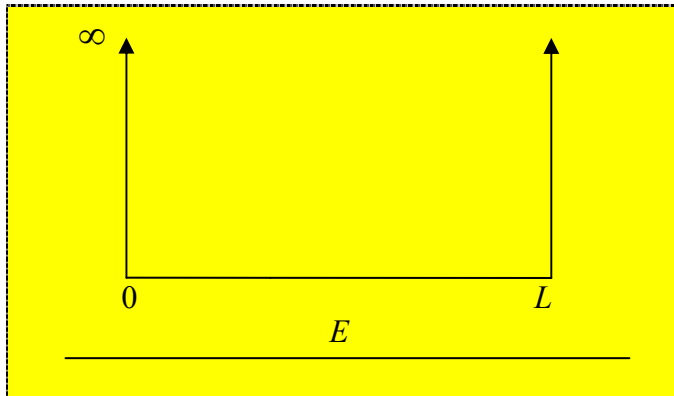
$$\det \begin{bmatrix} -\sin kL/2 & \cos kL/2 \\ \sin kL/2 & \cos kL/2 \end{bmatrix} = -\sin kL/2 \cos kL/2 - \sin kL/2 \cos kL/2 = -\sin kL = 0.$$

Βρίσκουμε, όπως αναμένουμε την ίδια συνθήκη για τις ιδιοενέργειες.

Ακόμα από την πρώτη σχέση βρίσκουμε ότι  $B = A \tan kL/2$ . Προσπαθήστε να αποδείξετε ότι από την σχέση αυτή βρίσκουμε τις ιδιοσυναρτήσεις που βρήκαμε στην Α' μέθοδο (μη ξεχάσετε να κάνετε τις πράξεις και για το νορμαλισμό για να επιβεβαιώσετε ότι ο συντελεστής είναι ο ίδιος).

**Πρόβλημα Απειρόβαθο Κβαντικό Πηγάδι (ΑΚΠ0β)**

Για το 'κλασικό' απειρόβαθο κβαντικό πηγάδι διερευνήστε την δυνατότητα ύπαρξης μη θετικών ενεργειών ( $E \leq 0$ ).



**Σχήμα ΑΚΠ5α.1** Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής  $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, x > L \\ 0, & 0 \leq x \leq L \end{cases}$ . Αναζητούμε δέσμιες ενεργειακές καταστάσεις με  $E \leq 0$ .

Μπορούμε να ξεκινήσουμε με την μηδενική ενέργεια. Προφανώς η μηδενική ενέργεια πρακτικά συμπεριλαμβάνεται στην διερεύνηση των μη μηδενικών ενεργειών που γίνεται σε όλα τα εγχειρίδια κβαντομηχανικής. Έτσι γνωρίζουμε ότι η δεν γίνεται για οποιαδήποτε γεωμετρικά στοιχεία του πηγαδιού να έχουμε μηδενική ενέργεια. Αλλά ας διερευνήσουμε την περίπτωση μηδενικής ενέργειας χρησιμοποιώντας την εξίσωση Schrödinger.

$$\text{Έχουμε } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = 0 (E=0) \Rightarrow \psi(x) = Ax + B.$$

Από τις συνοριακές συνθήκες βρίσκουμε  $\psi(x=0) = A \cdot 0 + B = 0$ ,  $\psi(x=L) = AL = 0 \Rightarrow A = 0$ .

Δηλαδή η μοναδική λύση είναι η  $\psi(x) = 0$ , η οποία προφανώς δεν είναι φυσικά αποδεκτή (πιθανότητα ηλεκτρονίου παντού μηδενική!).

Προχωράμε στην διερεύνηση των αρνητικών ενεργειών. Από την εξίσωση Schrödinger έχουμε

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \psi''(x) - \left[ \gamma^2 \equiv -\frac{2mE}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0 \Rightarrow \psi(x) = Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x},$$

Εφαρμόζουμε τώρα τις συνοριακές συνθήκες της κυματοσυνάρτησης στα σημεία 0 και L, και της παραγώγου της στα υπόλοιπα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού.

$$\psi(0) = Ae^{\gamma \cdot 0} + Be^{-\gamma \cdot 0} = 0 \Rightarrow B = -A \Rightarrow \psi(x) = 2A \sinh \gamma x,$$

$$\text{Και } \psi(L) = 2A \sinh \gamma L = 0 \Rightarrow \gamma L = 0 \Rightarrow \gamma = 0 \Rightarrow (E=0), \psi(x) = 0$$

Πάλι μη αποδεκτή λύση (πυκνότητα πιθανότητας παντού μηδέν!).