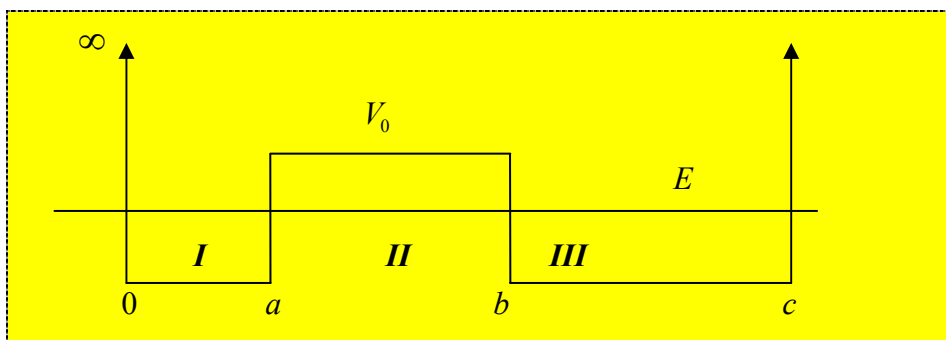


Πρόβλημα ΑπειρόβαθοΚβαντικόΠηγάδι4α(ΑΚΠ4α)

Θεωρούμε κβαντικό πηγάδι με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, x > c \\ V_0 \Theta(x-a)\Theta(b-x), & a \leq x \leq b \end{cases}$.

Να βρεθεί η μη γραμμική εξίσωση από την οποία μπορούν να εκτιμηθούν οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος.



Σχήμα ΑΚΠ4α.1 Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, x > c \\ V_0 \Theta(x-a)\Theta(b-x), & a \leq x \leq b \end{cases}$ με $V_0 > 0$. Στο δυναμικό αυτό, όλες οι δυνατές ενεργειακές καταστάσεις είναι δέσμιες.

Αρχικά μελετάμε την περίπτωση $E < V_0$.

Η εξίσωση Schrödinger για την περιοχή I και III είναι

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{III}(x)}{dx^2} = E \psi_{III}(x) \Rightarrow \psi_{III}''(x) + \left[k_{III}^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \right] \psi_{III}(x) = 0,$$

ενώ για την περιοχή II είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{II}(x)}{dx^2} + V_0 \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x) \Rightarrow \psi_{II}''(x) - \left[k_{II}^2 \equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = \gamma^2 \right] \psi_{II}(x) = 0 \quad (\text{για } E < V_0).$$

Οι λύσεις των διαφορικών εξισώσεων στις τρεις περιοχές είναι προφανώς

$$\psi_I(x) = A_I \cos kx + B_I \sin kx, \quad \psi_{II}(x) = A_{II} e^{\gamma x} + B_{II} e^{-\gamma x}, \quad \psi_{III}(x) = A_{III} \cos kx + B_{III} \sin kx.$$

Αρχικά έχουμε ότι $\psi_I(0) = A_I \cos k0 + B_I \sin k0 = A_I = 0$, έτσι $\psi_I(x) = B_I \sin kx$.

Επίσης $\psi_{III}(c) = A_{III} \cos kc + B_{III} \sin kc$, έτσι $\psi_{III}(x) = C_{III} \sin k(x-c)$

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

Έχουμε δηλαδή

$$\psi_I(a) = B_I \sin ka = \psi_{II}(a) = A_{II} e^{\gamma a} + B_{II} e^{-\gamma a},$$

$$\psi_I'(a) = B_I k \cos ka = \psi_{II}'(a) = A_{II} \gamma e^{\gamma a} - B_{II} \gamma e^{-\gamma a}$$

Ακόμα

$$\psi_{II}(b) = A_{II} e^{\gamma b} + B_{II} e^{-\gamma b} = \psi_{III}(b) = C_{III} \sin k(b-c),$$

$$\psi_{II}'(b) = A_{II}\gamma e^{\gamma b} - B_{II}\gamma e^{-\gamma b} = \psi_{III}'(b) = C_{III}k \cos k(b-c)$$

Έχουμε δηλαδή

$$\psi_I(a) = B_I \sin ka = \psi_{II}(a) = A_{II}e^{\gamma a} + B_{II}e^{-\gamma a},$$

$$\psi_I'(a) = B_I k \cos ka = \psi_{II}'(a) = A_{II}\gamma e^{\gamma a} - B_{II}\gamma e^{-\gamma a}$$

Ακόμα

$$\psi_{II}(b) = A_{II}e^{\gamma b} + B_{II}e^{-\gamma b} = \psi_{III}(b) = C_{III} \sin k(b-c),$$

$$\psi_{II}'(b) = A_{II}\gamma e^{\gamma b} - B_{II}\gamma e^{-\gamma b} = \psi_{III}'(b) = C_{III}k \cos k(b-c)$$

Έχουμε ουσιαστικά τις εξής εξισώσεις

$$\begin{bmatrix} \sin ka & -e^{\gamma a} & -e^{-\gamma a} & 0 \\ k \cos ka & -\gamma e^{\gamma a} & \gamma e^{-\gamma a} & 0 \\ 0 & e^{\gamma b} & e^{-\gamma b} & -\sin k(b-c) \\ 0 & \gamma e^{\gamma b} & -\gamma e^{-\gamma b} & -k \cos k(b-c) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_I \\ A_{II} \\ B_{II} \\ C_{III} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

Γνωρίζουμε από την γραμμική άλγεβρα, ότι οι παραπάνω γραμμικές εξισώσεις έχουν μη μηδενική λύση όταν η ορίζουσα των συντελεστών μηδενίζεται. Δηλαδή η ζητούμενη συνθήκη για την εύρεση των ιδιοτιμών της ενέργειας εκτιμάται από την επίλυση της παρακάτω μη γραμμικής εξίσωσης.

$$\det \begin{bmatrix} \sin ka & -e^{\gamma a} & -e^{-\gamma a} & 0 \\ k \cos ka & -\gamma e^{\gamma a} & \gamma e^{-\gamma a} & 0 \\ 0 & e^{\gamma b} & e^{-\gamma b} & -\sin k(b-c) \\ 0 & \gamma e^{\gamma b} & -\gamma e^{-\gamma b} & -k \cos k(b-c) \end{bmatrix} = 0$$

Ελέγξατε την ορθότητα της εξίσωσης-συνθήκης σε διάφορες ειδικές περιπτώσεις όπως για παράδειγμα όταν το πάχος των πηγαδιών είναι ίδιο (δηλαδή $c-b=a$).