

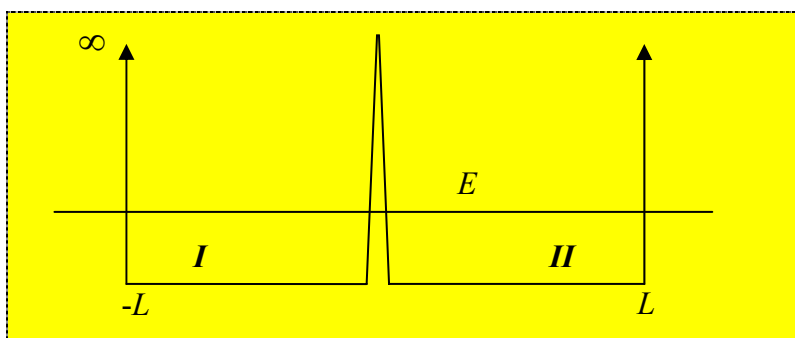
Πρόβλημα Απειρόβαθο Κβαντικό Πηγάδι 3α (ΑΚΠ3α)

Θεωρούμε κβαντικό πηγάδι με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ c\delta(x), & |x| \leq L \end{cases}$.

Να εκτιμηθούν οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος για (α) $c > 0$ και (β) $c < 0$.

Για την περίπτωση (α) να μελετηθεί το ίδιο κβαντικό σύστημα, θεωρώντας το παραπάνω δυναμικό ως οριακή περίπτωση ($\alpha \rightarrow 0$ και $V_0 \rightarrow \infty$) του δυναμικού της μορφής

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ V_0 \Theta(x+a) \Theta(x-a), & |x| \leq L \end{cases}$$



Σχήμα ΑΚΠ3α.1 Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ c\delta(x), & |x| \leq L \end{cases}$ με $c > 0$. Στο δυναμικό αυτό, όλες οι δυνατές ενεργειακές καταστάσεις με $E > 0$ είναι δέσμιες.

Η εξίσωση Schrödinger για την περιοχή I και II είναι

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

Οι λύσεις των διαφορικών εξισώσεων στις δύο περιοχές είναι

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

Από την συνοριακή συνθήκη της κυματοσυνάρτησης στο $x = -L$, έχουμε $\psi_I(x = -L) = 0$, εκτιμούμε ότι $\psi_I(-L) = A_I \cos kL - B_I \sin kL = 0 \Rightarrow A_I = -B_I \tan kL$.

Έτσι

$$\psi_I(x) = A_I \cos kx + B_I \sin kx = -(B_I / \cos kL) \sin kL \cos kx + (B_I / \cos kL) \cos kL \sin kx = C_I \sin k(x + L)$$

Με ανάλογους υπολογισμούς βρίσκουμε ότι η $\psi_{II}(x) = C_I' \sin k(x - L)$.

Ακόμα αφού η συνάρτηση στην θέση $x = 0$ είναι συνεχής, έχουμε την παρακάτω συνθήκη $\psi_{II}(x = 0) = C_I' \sin k(-L) = C_I \sin k(L) = \psi_I(x = 0) \Rightarrow C_I' = -C_I$. Δηλαδή οι ιδιοσυναρτήσεις είναι

$$\text{άρτιες, καθώς } \psi_{II}(-x) = -C_I \sin k(-x - L) = C_I \sin k(x + L) = \psi_I(x)$$

Ενώ η παράγωγος της συνάρτησης είναι ασυνεχής, εξαιτίας της παρουσίας της δ-συνάρτησης στο δυναμικό. Ποσοτικά η ασυνέχεια εκτιμάται μέσω της εξίσωσης Schrödinger, έχουμε δηλαδή

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + c\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d}{dx} \frac{d\psi(x)}{dx} dx + c \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\psi(x) dx = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx.$$

Αν τα όρια των ολοκληρωμάτων ($\varepsilon > 0$) γίνουν πολύ μικρά (τείνουν δηλαδή οριακά στο μηδέν, $\varepsilon \rightarrow 0$), το τρίτο ολοκλήρωμα μηδενίζεται και έχουμε την σχέση

$$\frac{d\psi(\varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi(-\varepsilon)}{dx} - \frac{2mc}{\hbar^2} \psi(0) = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx (\varepsilon \rightarrow 0) \Rightarrow \frac{d\psi(0^+)}{dx} - \frac{d\psi(0^-)}{dx} = \frac{2mc}{\hbar^2} \psi(0).$$

$$\text{Έτσι έχουμε } \frac{d\psi(0^+)}{dx} - \frac{d\psi(0^-)}{dx} = -C_1 k \cos(k0 - kL) - C_1 k \cos(k0 + kL) = \frac{2mc}{\hbar^2} C_1 \sin(k0 + kL).$$

Από την οποία βρίσκουμε τις δυνατές τιμές του k και άρα και της ενέργειας E . Έχουμε δηλαδή

$$2k \cos(kL) = -\frac{2mc}{\hbar^2} \sin(kL) \Rightarrow \tan(kL) = -\frac{\hbar^2}{mc} k \quad (\text{ελέγξτε αν για } c=0, \text{ έχουμε την 'σωστή' συνθήκη}$$

του απειρόβαθου πηγαδιού, θα πρέπει να την έχουμε;). Η λύση της παραπάνω σχέσης μπορεί να βρεθεί αριθμητικά. Προσεγγιστικά μπορούμε να έχουμε μια εκτίμηση των ιδιοενεργειών γραφικά.

Η σταθερά C_1 , εκτιμάται από τον νορμαλισμό των ιδιοσυναρτήσεων. Δηλαδή

$$\int_{-L}^L \psi^2(x) dx = \int_{-L}^0 C_1^2 \sin^2 k(x+L) dx + \int_0^L C_1^2 \sin^2 k(x-L) dx = C_1^2 L/2 + C_1^2 L/2 = 1 \Rightarrow C_1 = 1/\sqrt{L}.$$

Τέλος θα διερευνήσουμε αν βρίσκουμε το ίδιο αποτέλεσμα, αντιμετωπίζοντας το δέλτα δυναμικό ως

$$\text{οριακή περίπτωση του δυναμικού } V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ V_0 \Theta(x+a) \Theta(x-a), & |x| \leq L \end{cases}.$$

Από την λύση του προβλήματος ΑΚΠ2β, αντιγράφουμε την συνθήκη για την εύρεση των άρτιων ιδιοσυναρτήσεων, $\tan k(L-a) \tanh \gamma a = -k/\gamma$. Το δυναμικό του προβλήματος ΑΚΠ2β γίνεται ένα δυναμικό δ-συνάρτησης όταν το πάχος του φράγματος δυναμικού γίνει απείρως μικρό ($a \rightarrow 0$) και το ύψος του απείρως μεγάλο ($V_0 \rightarrow \infty$), αλλά με τέτοιο τρόπο ώστε να διατηρεί το παραλληλόγραμμο σχήμα του και το εμβαδόν να είναι σταθερό. Πρέπει δηλαδή τα δύο εμβαδά να είναι ίσα,

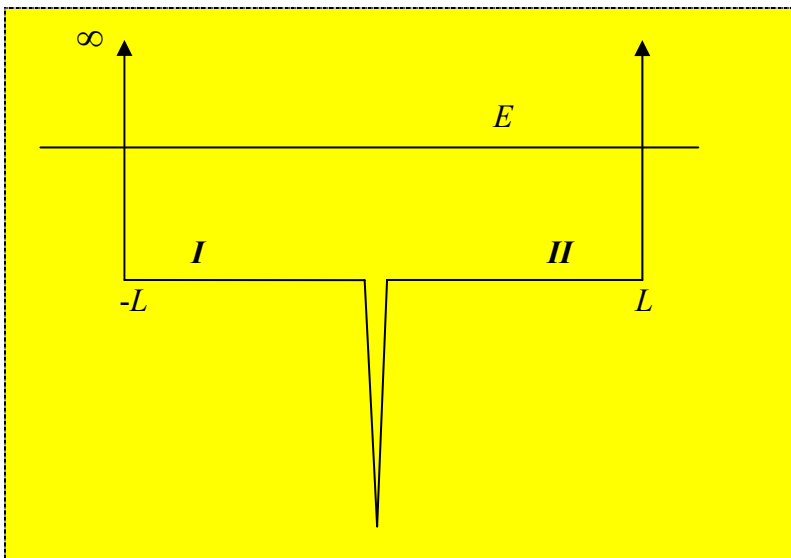
$$2aV_0 = \int_{-a}^a c \delta(x) dx = c. \quad \text{Τώρα όταν } a \rightarrow 0, \text{ η σχέση } \tan k(L-a) \tanh \gamma a = -k/\gamma \text{ γίνεται}$$

$$\tan kL = -k/(\gamma^2 a) \quad (\text{καθώς, } \tanh \gamma a = \frac{\sinh \gamma a}{\cosh \gamma a} = \frac{e^{\gamma a} - e^{-\gamma a}}{e^{\gamma a} + e^{-\gamma a}} \approx \frac{1 + \gamma a - (1 - \gamma a)}{1 + \gamma a + 1 - \gamma a} = \gamma a) \text{ και αφού}$$

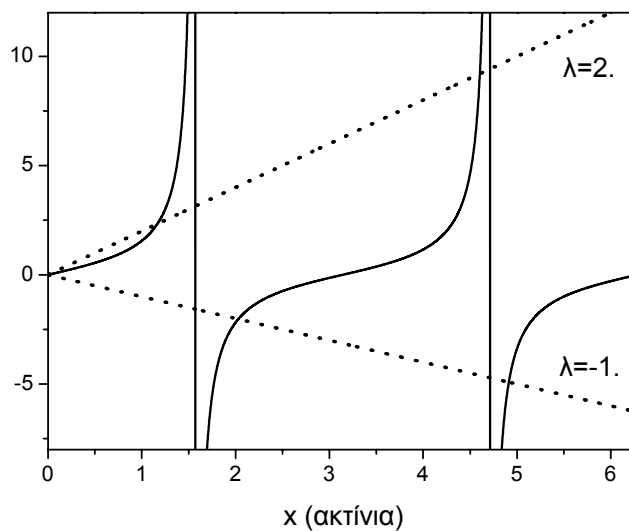
$$\gamma^2 a = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} a = \frac{m(2aV)_0}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} a = \frac{mc}{\hbar^2} - k^2 a \sim \frac{mc}{\hbar^2}, \text{ η σχέση } \tan kL = -k/(\gamma^2 a) \text{ γίνεται η}$$

$$\text{ζητούμενη } \tan(kL) = -\frac{\hbar^2}{mc} k$$

Συνεχίζουμε με την περίπτωση που ο συντελεστής στο δέλτα δυναμικό είναι αρνητικός ενώ η ενέργεια είναι θετική.



Σχήμα ΑΚΠ3α.2 Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ c\delta(x), & |x| \leq L \end{cases}$ με $c < 0$. Στο δυναμικό αυτό, όλες οι δυνατές ενεργειακές καταστάσεις με $E > 0$ είναι δέσμιες.

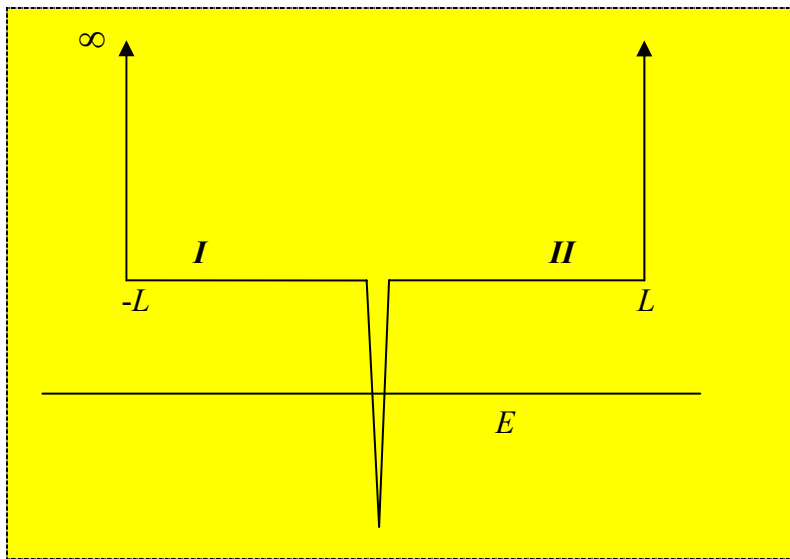


Σχήμα ΑΚΠ3α.3 Γραφική αναζήτηση λύσεων της μη γραμμικής εξίσωσης $\tan(kL) = -\frac{\hbar^2}{mc}k$, η οποία γράφεται ισοδύναμα (αν $x = kL$), $\tan x = \lambda x$ (όπου $\lambda = -\frac{\hbar^2}{mcL}$), από την οποία υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες του συστήματος. Όταν το c είναι θετικό έχουμε την ευθεία με αρνητική κλίση (εδώ $\lambda = -1$), ενώ όταν το c είναι αρνητικό έχουμε την ευθεία με θετική κλίση (εδώ $\lambda = 2$). Ανεξάρτητα προσήμου του c , υπάρχει απειρία λύσεων.

Προφανώς όλη η μεθοδολογία που ακολουθήσαμε παραμένει η ίδια, με τα ίδια ακριβώς αποτελέσματα, μόνο που ο συντελεστής στο δ-δυναμικό είναι αρνητικός. Έχουμε δηλαδή την ίδια συνθήκη για τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας $\tan(kL) = -\frac{\hbar^2}{mc}k$. Όμως τώρα στην γραφική εκτίμηση των ιδιοτιμών

της ενέργειας υπάρχει η διαφορά ότι η κλίση της ευθείας $-\frac{\hbar^2}{mc}k$, είναι θετική.

Παρατηρούμε ότι οι ιδιοτιμές της ενέργειας για θετικό λ (αρνητικό ϵ) είναι μικρότερες από τις αντίστοιχες ενέργειες με αρνητικό λ (θετικό ϵ). Για παράδειγμα παρατηρείστε ότι η λύση της εξίσωσης $\tan x = -\lambda x$ για αρνητικό ϵ αντιστοιχεί σε $x < \pi/2$ ενώ για θετικό ϵ αντιστοιχεί σε $x > \pi/2$. Η συμπεριφορά αυτή είναι αναμενόμενη καθώς θετικό ϵ περιγράφει ένα ισχυρά απωστικό δυναμικό (μπορούμε να φανταστούμε ένα αρνητικό ιόν στο κέντρο του πηγαδιού), ενώ αρνητικό ϵ περιγράφει ένα ισχυρά ελκτικό δυναμικό (π.χ. ένας πυρήνας στο κέντρο του πηγαδιού).



Σχήμα ΑΚΠ3α.4 Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ c\delta(x), & |x| \leq L \end{cases}$ με $c < 0$ και αρνητικές ενέργειες ($E < 0$).

Στην περίπτωση ελκτικού δυναμικού (αρνητικό ϵ) για αρνητικές ενέργειες η εξίσωση Schrödinger για την περιοχή I και II είναι (προσοχή τώρα η ποσότητα $2mE/\hbar^2$, είναι αρνητική καθώς $E < 0$)

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

Οι λύσεις των διαφορικών εξισώσεων στις δύο περιοχές είναι

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

Από την συνοριακή συνθήκη της κυματοσυνάρτησης στο $x = -L$, έχουμε $\psi_I(x = -L) = 0$, εκτιμούμε ότι

$$\psi_I(-L) = A_I e^{-\gamma L} + B_I e^{\gamma L} = 0 \Rightarrow B_I = -A_I e^{-2\gamma L}.$$

$$\text{Έτσι } \psi_I(x) = A_I e^{\gamma x} + B_I e^{-\gamma x} = A_I e^{\gamma x} - A_I e^{-2\gamma L} e^{-\gamma x} = A_I e^{-\gamma L} (e^{\gamma(x+L)} - e^{-\gamma(x+L)}) = C_I \sinh \gamma(x+L).$$

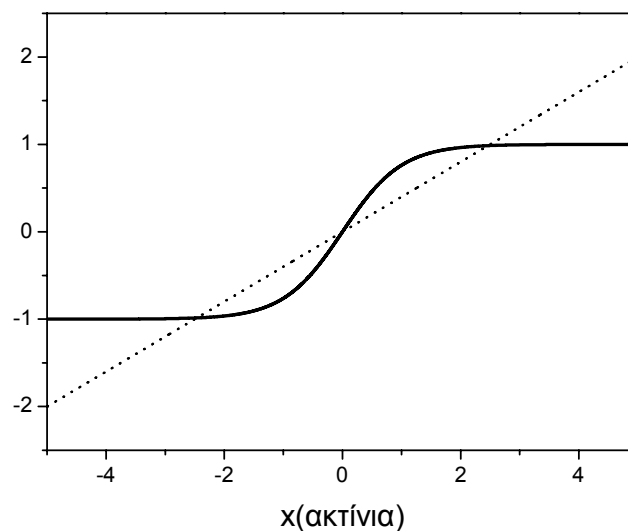
Με ανάλογους υπολογισμούς εκτιμούμε ότι η $\psi_{II}(x) = C_I' \sinh \gamma(x-L)$.

Αφού η συνάρτηση στην θέση $x=0$ είναι συνεχής, έχουμε την παρακάτω συνθήκη $\psi_{II}(x=0) = C_I' \sinh \gamma(-L) = C_I \sinh \gamma(L) = \psi_I(x=0) \Rightarrow C_I' = -C_I$. Δηλαδή οι ιδιοσυναρτήσεις είναι άρτιες, καθώς $\psi_{II}(-x) = -C_I \sinh \gamma(-x-L) = C_I \sinh \gamma(x+L) = \psi_I(x)$.

Η παράγωγος της συνάρτησης είναι ασυνεχής, $\frac{d\psi(0^+)}{dx} - \frac{d\psi(0^-)}{dx} = \frac{2mc}{\hbar^2} \psi(0)$.

Έτσι έχουμε $\frac{d\psi(0^+)}{dx} - \frac{d\psi(0^-)}{dx} = -C_I \gamma \cosh(\gamma 0 - \gamma L) - C_I \gamma \cosh(\gamma 0 + \gamma L) = \frac{2mc}{\hbar^2} C_I \sinh(\gamma 0 + \gamma L)$.

Από την οποία βρίσκουμε τις δυνατές τιμές του k και άρα και της ενέργειας E . Έχουμε δηλαδή $2\gamma \cosh(\gamma L) = -\frac{2mc}{\hbar^2} \sinh(\gamma L) \Rightarrow \tanh(\gamma L) = -\frac{\hbar^2}{mc} \gamma$. Παρατηρούμε ότι υπάρχει μόνο μία ενεργειακή κατάσταση για το δυναμικό αυτό.



Σχήμα ΑΚΠ3α.5 Γραφική αναζήτηση λύσεων της μη γραμμικής εξίσωσης

$\tan k(\gamma L) = -\frac{\hbar^2}{mc} \gamma$, η οποία γράφεται ισοδύναμα (αν $x = \gamma L$), $\tan x = \lambda x$ (όπου $\lambda = -\frac{\hbar^2}{mcL}$),

από την οποία υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες του συστήματος. Εδώ το c είναι αρνητικό έχουμε την ευθεία με θετική κλίση ($\lambda=0.4$). Καθώς το γ είναι θετικό

δεχόμαστε την θετική ρίζα, ενώ από την σχέση $-\gamma^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$, εκτιμούμε την αρνητική ενέργεια.

Προσεγγιστικά η λύση της παραπάνω σχέσης βρίσκεται γραφικά (σχήμα ΑΚΠ3α.5). Παρατηρούμε ότι υπάρχει μία μόνο ιδιοκατάσταση αρνητικής ενέργειας, η οποία είναι και η θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος. Η κλίση της ευθείας λx , είναι τόσο πιο μεγάλη όσο πιο μεγάλο είναι το λ είναι μεγαλύτερο, δηλαδή όσο το c είναι μικρότερο. Πράγματι, για πολύ μικρό c , το δ-δυναμικό είναι πολύ ρηχό και η ενέργεια αναμένεται να είναι κοντά στο μηδέν, πράγμα που επιβεβαιώνεται από την γραφική λύση καθώς όταν η κλίση γίνει πολύ μεγάλη (πολύ μικρό c) η λύση είναι κοντά στο μηδέν. Τέλος παρατηρούμε ότι από κάποιο c και πάνω η κλίση γίνεται μικρή και πρακτικά η λύση της εξίσωσης

$\tan x = \lambda x$ είναι $x \sim 1$, δηλαδή $x = \gamma L \sim 1 \Rightarrow \gamma = -\frac{2mE}{\hbar^2} \sim 1/L \Rightarrow E \sim -\frac{\hbar^2}{2mL}$. Τιμή της ενέργειας

που είναι ανεξάρτητη του βάθους του δ-δυναμικού.

Η σταθερά C_1 , εκτιμάται από τον νορμαλισμό των ιδιοσυναρτήσεων. Δηλαδή $\int_{-L}^L \psi^2(x) dx = \int_{-L}^0 C_1^2 \sin^2 h\gamma(x+L) dx + \int_0^L C_1^2 \sin^2 h\gamma(x-L) dx = 1 \Rightarrow C_1 = ?$ (άσκηση για τον φοιτητή).

Τέλος διερευνήστε (α) αν βρίσκουμε το ίδιο αποτέλεσμα, αντιμετωπίζοντας το δέλτα δυναμικό ως οριακή περίπτωση του δυναμικού $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ V_0 \Theta(x+a) \Theta(x-a), & |x| \leq L \end{cases}$ με $V_0 < 0$, και (β) το πρόβλημα με δυναμικό με $\epsilon > 0$ (σχήμα ΑΚΠ3α.1), αλλά για αρνητικές ενέργειες (βλέπε πρόβλημα ΑΚΠ0β).