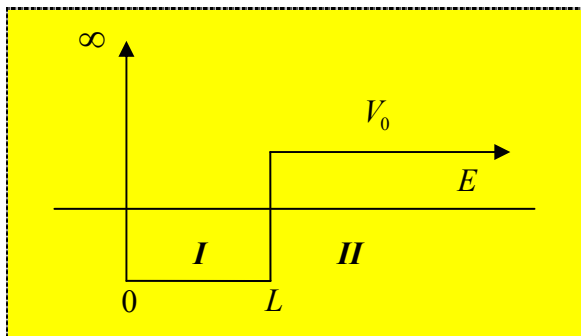


Πρόβλημα Απειρόβαθο Κβαντικό Πηγάδι 2α (ΑΚΠ2α)

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

Να εκτιμηθούν οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος για τις δέσμιες καταστάσεις.



Σχήμα ΑΚΠ2α.1 Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ V_0 \Theta(x-L), & x \geq 0 \end{cases}$ με $V_0 > 0$.

Μεθοδολογία- Εξισώσεις Schrödinger.

Αρχικά γράφουμε τις εξισώσεις Schrödinger για τις περιοχές διαφορετικού δυναμικού.

Η εξίσωση Schrödinger για την περιοχή I είναι

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

ενώ για την περιοχή II είναι

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

Οι λύσεις των διαφορικών εξισώσεων στις δύο περιοχές είναι προφανώς

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

Συνοριακές συνθήκες-Εξίσωση ιδιοτιμών Ενέργειας.

Καθώς από την συνοριακή συνθήκη της κυματοσυνάρτησης στο $x=0$, έχουμε $\psi_I(x=0)=0$, εκτιμούμε ότι $A_I=0$ ($\psi_I(x=0)=A_I \cos k_I 0 + B_I \sin k_I 0 = A_I = 0$), ενώ από το γεγονός ότι η κυματοσυνάρτηση για να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη πρέπει να μηδενίζεται για πολύ μεγάλα x , εκτιμούμε ότι $A_{II}=0$ ($\psi_{II}(x \rightarrow \infty) = A_{II} e^{k_{II} \infty} + B_{II} e^{-k_{II} \infty} = A_{II} e^{k_{II} \infty} = 0 \Rightarrow A_{II}=0$).

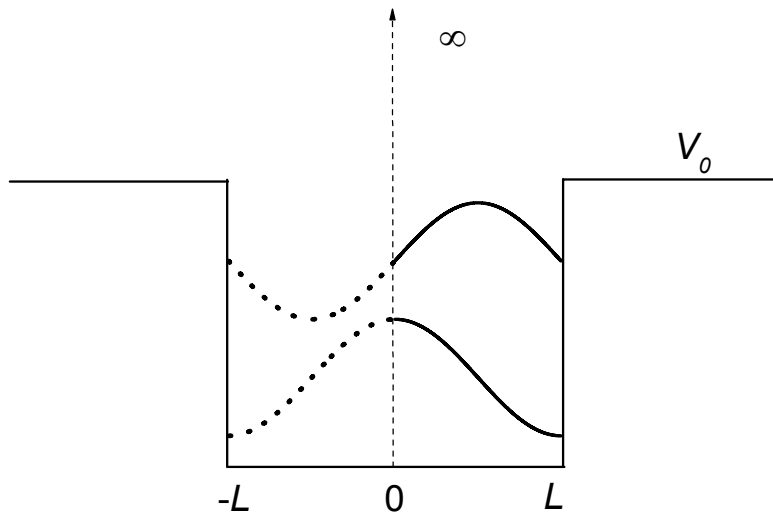
Οι ενεργειακές καταστάσεις του πηγαδιού υπολογίζονται από την σχέση που προκύπτει από τις συνοριακές συνθήκες στη θέση $x=L$. Δηλαδή έχουμε

$$\psi_I(x=L) = \psi_{II}(x=L) \Rightarrow B_I \sin k_I L = B_{II} e^{-k_{II} L}$$

$$\psi_I'(x=L) = \psi_{II}'(x=L) \Rightarrow k_I B_I \cos k_I L = -k_{II} B_{II} e^{-k_{II} L}$$

Διαιρώντας τις δύο αυτές σχέσεις βρίσκουμε την συνθήκη από την οποία εκτιμούμαι τις δυνατές ενεργειακές καταστάσεις $\tan k_I L = -\frac{k_I}{k_{II}}$.

Η συνθήκη αυτή δεν είναι παρὰ η συνθήκη που έχουμε βρει για τις περιττές λύσεις του συμμετρικού τετραγωνικού πηγαδιού πάχους $2L$ (βλέπε άσκηση ΠΚΠ0α και οποιοδήποτε βιβλίο Κβαντομηχανικής). Καθώς οι λύσεις όπου μηδενίζεται η κυματοσυνάρτηση στο $x=0$, είναι οι περιττές ($\psi(x) = -\psi(-x) \Rightarrow \psi(0) = -\psi(0) \Rightarrow 2\{\psi(0) = 0\}$). Ουσιαστικά οι λύσεις του προβλήματος αυτού δεν είναι παρὰ οι περιττές λύσεις του συμμετρικού τετραγωνικού πηγαδιού πάχους $2L$ (σχήμα ΑΚΠ2α.2).



Σχήμα ΑΚΠ2α.2 Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ V_0 \Theta(x-L), & x \geq 0 \end{cases}$ με $V_0 > 0$. Παρατηρούμε ότι το δυναμικό αυτό μπορεί να προέρθει από ένα δυναμικό συμμετρικού τετραγωνικού πηγαδιού πάχους $2L$ ($[-L, L]$), όταν θεωρήσουμε ότι το μισό δυναμικό απειρίζεται. Από το σχήμα αυτό γίνεται φανερό ότι οι λύσεις του συμμετρικού πηγαδιού με άρτια αρτιότητα δεν είναι αποδεκτές λύσεις για το μη συμμετρικό πηγάδι, καθώς στην θέση $x=0$ δεν μηδενίζονται. Αντιθέτως, οι περιττής αρτιότητας λύσεις μηδενίζονται στην θέση $x=0$ και είναι οι λύσεις του προβλήματος αυτού.

Γραφική διερεύνηση λύσεων.

Προφανώς οι ακριβείς λύσεις του προβλήματος ιδιοτιμών μπορούν να βρεθούν μόνο αριθμητικά (εκτός από κάποιες ειδικές ή οριακές περιπτώσεις, μπορείτε να σκεφτείτε κάποιες;) από την επίλυση ως προς

$$E (E < V_0, \text{ δέσμιες καταστάσεις}) \text{ της εξίσωσης } \tan k_I L = -\frac{k_I}{k_{II}} \Rightarrow \tan \frac{L\sqrt{2mE}}{\hbar} = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}.$$

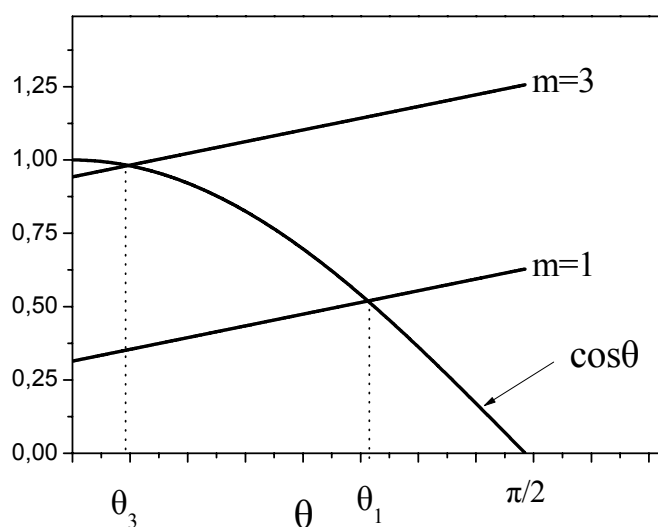
Πρώτη μέθοδο.

Μια προσεγγιστική εκτίμηση των ιδιοτιμών της ενέργειας μπορούμε να πάρουμε από την εξής γραφική μέθοδο. Καθώς $k_I^2 + k_{II}^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv U_0$, μπορούμε να θέσουμε $k_I = \sqrt{U_0} \cos \vartheta, k_{II} = \sqrt{U_0} \sin \vartheta$, όπου ϑ μια γωνία με τον μοναδικό περιορισμό να βρίσκεται στο πρώτο τεταρτημόριο ($0 \leq \vartheta \leq \pi/2$), καθώς αμφότερα $k_I, k_{II} > 0$ και το ίδιο θα πρέπει να ισχύει για το $\cos \vartheta, \sin \vartheta > 0$.

Η σχέση $\tan k_I L = -\frac{k_I}{k_{II}}$ γίνεται $\tan k_I L = -\frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} = \frac{\sin(\vartheta - \pi/2)}{\cos(\vartheta - \pi/2)} = \tan(\vartheta - \pi/2)$

$\Rightarrow k_I L = \vartheta - \pi/2 + n\pi$, όπου n είναι ένας μη μηδενικός ακέραιος ($n=0$ δίνει αρνητικό k_I). Η τελευταία σχέση γράφεται ισοδύναμα, $k_I L = \sqrt{U_0} L \cos \vartheta = \vartheta + (2n-1)\pi/2$. Ορίζοντας την ‘γεωμετρική’ (καθώς εξαρτάται από τα γεωμετρικά στοιχεία του πηγαδιού) παράμετρο $\lambda \equiv \sqrt{U_0} L$, οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος υπολογίζονται από την σχέση $\lambda \cos \vartheta = \vartheta + m\pi/2 \Rightarrow \cos \vartheta = \vartheta/\lambda + m\pi/(2\lambda)$, όπου $m (=1,3,5,\dots)$ θετικός περιττός ακέραιος.

Η ακριβής λύση της παραπάνω αλγεβρικής σχέσης γίνεται αριθμητικά. Μπορούμε να έχουμε όμως μια προσεγγιστική εκτίμηση των ιδιοενεργειών του συστήματος μέσω της γραφικής αναπαράστασης της μη γραμμικής εξίσωσης.



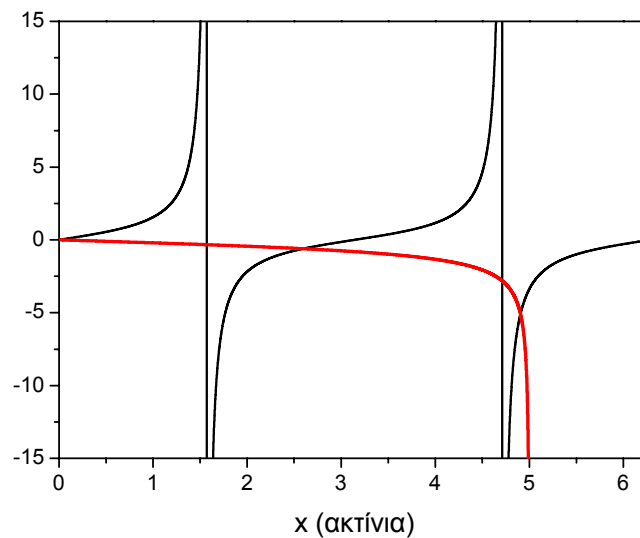
Σχήμα ΑΚΠ2α.3 Γραφική αναπαράσταση της μη γραμμικής εξίσωσης $\cos \vartheta = \vartheta/\lambda + m\pi/(2\lambda)$, από την οποία υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες του συστήματος. Ουσιαστικά οι ‘γραφικές’ λύσεις περιγράφονται από τα σημεία τομής του γραφήματος της συνάρτησης $\cos \vartheta$ (για $0 \leq \vartheta \leq \pi/2$) και της ευθείας $\vartheta/\lambda + m\pi/(2\lambda)$. Στο παρόν σχήμα η παράμετρος $\lambda (=L\sqrt{U_0} = L\sqrt{2mV_0}/\hbar)$ έχει την τιμή 5 (τι πάχος πηγαδιού δίνει αυτή την τιμή, αν $V_0 = 400 \text{ meV}$;). Οι δύο ευθείες τέμνουν τον κάθετο άξονα στα σημεία που προσδιορίζονται από το $m\pi/(2\lambda)$. Είναι δηλαδή 0.1π και 0.3π για $m=1,3$ αντίστοιχα. Από τις τομές των δύο αυτών ευθειών με την συνάρτηση $\cos \vartheta$, βρίσκουμε τις ζητούμενες γωνίες (ϑ_1, ϑ_3 στην γραφική).

Από την σχέση $k_I = U_0 \cos \vartheta \Rightarrow \sqrt{2mE/\hbar^2} = \sqrt{2mV_0/\hbar^2} \cos \vartheta \Rightarrow E = V_0 (\cos \vartheta)^2$, εκτιμούμε τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας. Προφανώς στο παράδειγμα του παρόντος σχήματος, οι ιδιοκαταστάσεις είναι δύο, καθώς η επόμενη τιμή του $m (=5)$, περιγράφει ευθεία που τέμνει τον κάθετο άξονα σε τιμή μεγαλύτερη από την μονάδα (0.5π) και προφανώς δεν υπάρχει σημείο τομής της ευθείας αυτής με την συνάρτηση $\cos \vartheta$ (το τελευταίο ισχύει εφόσον η κλίση της ευθείας είναι πάντα θετική, καθώς $1/\lambda = 1/(L\sqrt{U_0}) > 0$).

‘Δεύτερη’ μέθοδος.

Προσεγγιστική εκτίμηση των ιδιοενεργειών του συστήματος μπορεί να πραγματοποιηθεί μέσω της γραφικής αναπαράστασης της σχέσης $\tan k_I L = -\frac{k_I}{k_{II}}$. Η οποία γράφεται ισοδύναμα

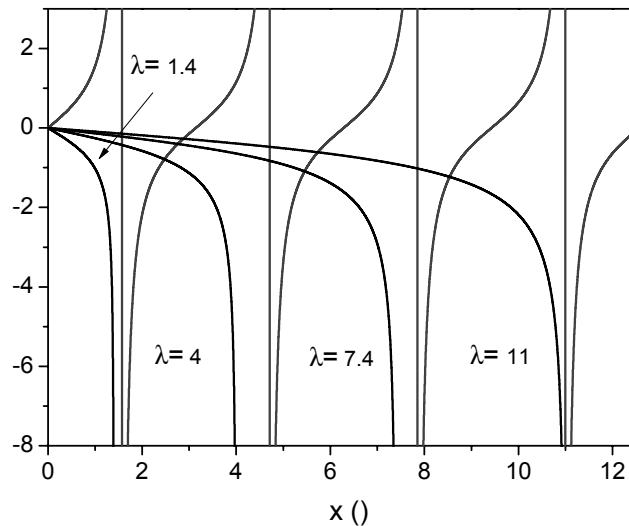
$$\tan k_I L = -\frac{k_I}{k_{II}} (x \equiv k_I L) \Rightarrow \tan x = -\frac{k_I L}{k_{II} L (= \sqrt{U_0 L^2 - (k_I L)^2})} = -\frac{x}{\sqrt{\lambda^2 - x^2}} \text{ (σχήμα ΑΚΠ2α.4).}$$



Σχήμα ΑΚΠ2α.4 Γραφική αναζήτηση λύσεων της μη γραμμικής εξίσωσης $\tan x = -x/\sqrt{\lambda^2 - x^2}$, από την οποία υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες του συστήματος. Ουσιαστικά οι 'γραφικές' λύσεις περιγράφονται από τα σημεία τομής του γραφήματος της συνάρτησης $\tan x$ και της συνάρτησης $-x/\sqrt{\lambda^2 - x^2}$ (η οποία ορίζεται στην περιοχή $[0, \lambda]$, καθώς για $x > \lambda$ έχουμε $E > V_0$ και η ποσότητα στην ρίζα γίνεται αρνητική). Στο παρόν σχήμα η παράμετρος $\lambda (= L\sqrt{U_0} = L\sqrt{2mV_0}/\hbar)$ έχει την τιμή 5 (ίδια με αυτή του προηγούμενου σχήματος ΑΚΠ2α.3). Οι δύο καμπύλες τέμνονται σε δύο σημεία πλην του τετριμμένου στην αρχή των αξόνων (περιγράφει την λύση $x=0$, που δεν έχει φυσική σημασία καθώς μηδενίζονται και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις). Προφανώς τα δύο αυτά σημεία περιγράφουν τις ίδιες ιδιοενέργειες με αυτές που εκτιμήθηκαν στο σχήμα ΑΚΠ2α.3. Πράγματι, η δεύτερη λύση (υψηλότερης ενέργειας) αντιστοιχεί σε x πολύ κοντά στο λ (βλέπε γραφική όπου η τομή των καμπυλών είναι πολύ κοντά στην περιοχή που η καμπύλη του δεξιού μέρους απειρίζεται). Δηλαδή $x \sim \lambda \Rightarrow k_I L \sim \sqrt{U_0} L \Rightarrow E \sim V_0$. Η περίπτωση αυτή αντιστοιχεί στην λύση που περιγράφεται από την γωνία θ_3 (του προηγούμενου σχήματος) η οποία είναι κοντά στο μηδέν και δίνει $E = V_0 (\cos \theta)^2 \Rightarrow E \sim V_0$. Μπορείτε να ελέγξετε, προσεγγιστικά τι συμβαίνει για την άλλη ιδιοκατάσταση της ενέργειας;

Παρατηρούμε στο σχήμα ΑΚΠ2α.5, ότι ο αριθμός των δυνατών ιδιοκαταστάσεων του κβαντικού συστήματος εξαρτάται άμεσα από το λ (για τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής μεγαλύτερες του λ , η συνάρτηση $-x/\sqrt{\lambda^2 - x^2}$ δεν ορίζεται). Για $\lambda = 1.4$, που είναι μικρότερο του $\pi/2$ δεν έχουμε καμία λύση, δηλαδή στο πηγάδι δυναμικού δεν υπάρχει καμία ιδιοκατάσταση ενέργειας. Όταν το λ είναι στην περιοχή $\pi/2$ έως $3\pi/2$, έχουμε μία λύση και. Ο αριθμός των ιδιοκαταστάσεων εκτιμάται από την σχέση $\text{Int}[2\lambda/\pi]$ (όπου Int δίνει το ακέραιο μέρος του αριθμού, δηλαδή ο ακέραιος που προκύπτει από την αποκοπή του δεκαδικού μέρους του αριθμού). Έχουμε δηλαδή, ότι ο αριθμός εκτιμάται από την σχέση $(\text{Int}[2\lambda/\pi] + \text{Mode}(\text{Int}[2\lambda/\pi], 2))/2$ (όπου $\text{Mode}(\text{Int}[2\lambda/\pi], 2)$, είναι το υπόλοιπο της διαίρεσης το ακεραίου $\text{Int}[2\lambda/\pi]$ με το 2, όπου πρακτικά είναι 0 όταν ο ακέραιος είναι ζυγός και 1 όταν είναι μονός). Τώρα η τιμή του λ , εξαρτάται από τα 'γεωμετρικά' χαρακτηριστικά του πηγαιδιού, δηλαδή από το πάχος και το ύψος του, καθώς $\lambda (= L\sqrt{U_0} = L\sqrt{2mV_0}/\hbar)$. Αν το πάχος εκτιμάται σε \AA

και το δυναμικό σε eV το λ υπολογίζεται από την σχέση $\lambda = 0.512029975L\sqrt{V_0}$, αν το σωματίο που βρίσκεται στο πηγάδι είναι ηλεκτρόνιο. Στην γενική περίπτωση οποιοδήποτε σωματιδίου μάζας m , ο τύπος διαφοροποιείται σε $\lambda = 0.512029975L\sqrt{V_0}\sqrt{m/m_e}$, όπου m_e είναι η μάζα του ηλεκτρονίου.



Σχήμα ΑΚΠ2α.5 Γραφική αναζήτηση λύσεων της μη γραμμικής εξίσωσης $\tan x = -x/\sqrt{\lambda^2 - x^2}$, για διάφορες τιμές του λ . Παρατηρούμε ότι ο αριθμός των δυνατών ιδιοκαταστάσεων του κβαντικού συστήματος εξαρτάται άμεσα από το λ . Ο αλγόριθμος είναι απλός, ο αριθμός των ιδιοκαταστάσεων είναι ίσος με το μισό του ακεραίου μέρους του λόγου $2\lambda/\pi$ όταν το ακέραιο μέρος είναι άρτιος ακέραιος και ίσος με το μισό του ακεραίου μέρους του λόγου $2\lambda/\pi$ μειωμένο κατά μία μονάδα όταν το ακέραιο μέρος είναι περιττός ακέραιος.

Ενδεικτικά παραθέτουμε πίνακα με τιμές των γεωμετρικών παραμέτρων του πηγαδιού και τα αντίστοιχα λ από τα οποία εκτιμάται ο αριθμός των δέσμιων ιδιοκαταστάσεων του πηγαδιού.

L (Å)	V_0 (meV)	λ	Αριθμός δέσμιων ιδιοκαταστάσεων
10	30	0.887	0
10	100	1.619	1
10	500	3.621	1
30	80	4.345	1
100	100	16.192	5
200	1000	102.406	33
300	100	48.575	15
500	500	181.03	58
1000	100	161.918	52

Γενικά, από την σχέση $\cos \vartheta = \vartheta / \lambda + m\pi / (2\lambda)$, καταλαβαίνουμε ότι για να έχουμε μία τουλάχιστον δέσμια ιδιοκατάσταση στο πηγάδι δυναμικού θα πρέπει $\lambda > \pi/2$, δηλαδή $\pi/(2\lambda) < 1$. Έτσι για δεδομένο δυναμικό V_0 η παραπάνω συνθήκη σημαίνει $L > \pi\hbar/\sqrt{8mV_0}$ (π.χ. για $V_0 = 100\text{meV}$ η συνθήκη δίνει $L > 9.7\text{\AA}$). Ενώ για δεδομένο πάχος L , η αντίστοιχη συνθήκη είναι $V_0 > \pi^2\hbar^2/8mL^2$ (π.χ. για $L = 10\text{\AA}$ η συνθήκη δίνει $V_0 = 94.11\text{meV}$).

Από την στιγμή που γνωρίζουμε τις ιδιοενέργειες, γνωρίζουμε και τα κυματανύσματα k_I, k_{II} . Έτσι υπολογίζουμε ακριβώς τις ιδιοσυναρτήσεις. Οι σχέσεις προκύπτουν από τον νορμαλισμό των ιδιοσυναρτήσεων (βλέπε πρόβλημα ΠΚΠ0α).

Νορμαλισμός:

$$1 = \int_0^L \Psi_I^2 dx + \int_L^{+\infty} \Psi_{II}^2 dx = B_I^2 \int_0^L \sin^2 k_I x dx + B_{II}^2 \int_L^\infty e^{2k_{II}x} dx = \frac{B_I^2 L}{2} - \frac{B_I^2}{4k_I} \sin 2k_I L + \frac{B_{II}^2}{2k_{II}} e^{-2k_{II}L} =$$

$$(\text{καθώς } B_I \sin k_I L = B_{II} e^{-k_{II}L}) = \frac{B_I^2 \sin^2 k_I L}{2} \left[\frac{L}{\sin^2 k_I L} + \frac{1}{k_I \tan k_I L} + \frac{1}{k_{II}} \right] =$$

$$(\text{αφού } \tan k_I L = -\frac{k_I}{k_{II}}) = \frac{B_I^2 \sin^2 k_I L}{2} \left[\frac{1}{k_{II}} + \frac{k_{II}}{k_I^2} + \frac{L(k_I^2 + k_{II}^2)}{k_I^2} \right] = \frac{B_I^2}{2} \left[\frac{1 + Lk_{II}}{k_{II}} \right] \Rightarrow B_I = \left[\frac{2k_{II}}{1 + Lk_{II}} \right]^{1/2}.$$

$$\text{και } \left[B_{II} = B_I \sin k_I L \cdot e^{k_{II}L} = \sqrt{\frac{2k_{II}}{1 + Lk_{II}}} \frac{k_I}{\sqrt{k_I^2 + k_{II}^2}} = e^{k_{II}L} \frac{k_I}{\sqrt{U_0}} \sqrt{\frac{2k_{II}}{1 + Lk_{II}}} \right]$$

(= U_0)

$$\text{όπου τα } k_I, k_{II} \text{ προσδιορίζονται από } k_I = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ και } k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}.$$

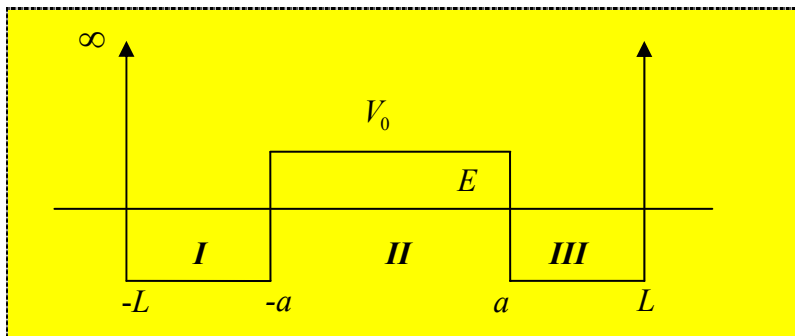
Παρατηρούμε, ότι ουσιαστικά έχουμε τις εκφράσεις του τετραγωνικού δυναμικού, με μοναδική διαφορά το αριθμητικό συντελεστή (2), ο οποίος οφείλεται στο γεγονός ότι η ολοκλήρωση γίνεται στο μισό διάστημα (0,L).

Προσπαθήστε να επιβεβαιώσετε ότι για την περίπτωση που το πεπερασμένο δυναμικό γίνεται πολύ μεγάλο ($V_0 \rightarrow \infty$), τα αποτελέσματά μας ταυτίζονται με αυτά του απλού απειρόβαθου πηγαδιού.

Πρόβλημα Απειροβάθιο Κβαντικό Πηγάδι 2β (ΑΚΠ2β)

Θεωρούμε κβαντικό πηγάδι με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ V_0 \Theta(x+a)\Theta(x-a), & |x| \leq L \end{cases}$

Να εκτιμηθούν οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος.



Σχήμα ΑΚΠ2β.1 Σχηματική αναπαράσταση του κβαντικού πηγαδιού με δυναμικό της μορφής $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ V_0 \Theta(x-a)\Theta(x+a), & |x| \leq L \end{cases}$ με $V_0 > 0$. Στο δυναμικό αυτό, όλες οι δυνατές ενεργειακές καταστάσεις είναι δέσμιες. Αρχικά ασχολούμαστε με την περίπτωση $E < V_0$.

Η εξίσωση Schrödinger για τις περιοχές I και III είναι

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

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

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

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

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

Ανάλογα βρίσκουμε ότι η $\psi_{III}(x) = C_I' \sin k(x - L)$. Αμφότερες οι εκφράσεις είναι αναμενόμενες καθώς είναι αυτές που μηδενίζονται για $x = -L$ και $x = L$ αντίστοιχα. Ακόμα, καθώς το δυναμικό είναι συμμετρικό ($V(x) = V(-x)$), οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος θα είναι άρτιες ή περιττές. Για να συμβαίνει αυτό, καθώς $\psi_I(x) = C_I \sin k(L + x) = \pm \psi_{III}(-x) = \pm C_I' \sin k(-x - L) \Rightarrow C_I = \mp C_I'$. Θα πρέπει $C_I' = \pm C_I$, όπου το αρνητικό(θετικό) πρόσημο αντιστοιχεί στις άρτιες(περιττές) ιδιοκαταστάσεις.

Η λύση στην ενδιαμέση περιοχή είναι προφανώς της μορφής $\psi_{II}(x) = 2A_{II} \cosh \gamma x = D_{II} \cosh \gamma x$, για τις άρτιες λύσεις. Καθώς $\psi_{II}(x) = A_{II}e^{\gamma x} + B_{II}e^{-\gamma x} = \psi_{II}(-x) = A_{II}e^{-\gamma x} + B_{II}e^{\gamma x}$, δίνει $A_{II} = B_{II}$. Ενώ για τις περιττές έχουμε $\psi_{II}(x) = A_{II}e^{\gamma x} + B_{II}e^{-\gamma x} = -\psi_{II}(-x) = -A_{II}e^{-\gamma x} - B_{II}e^{\gamma x}$, που εκτιμά ότι $A_{II} = -B_{II}$, δηλαδή λύση της μορφής $\psi_{II}(x) = 2A_{II} \sinh \gamma x = D_{II} \sinh \gamma x$.

Για να βρούμε τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας χρησιμοποιούμε τις σχέσεις από τις συνοριακές συνθήκες στα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού ($x = \pm a$). Λόγω της συμμετρίας του προβλήματος η οποία έχει ήδη εκφραστεί στις ιδιοσυναρτήσεις μας, δεν χρειάζεται παρά να χρησιμοποιήσουμε τις συνθήκες σε ένα σημείο ασυνέχειας (μπορείτε να αποδείξετε ότι ισχύει). Εργαζόμαστε στο $x = a$.

Άρτιες λύσεις

Συνέχεια συνάρτησης, $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow D_{II} \cosh \gamma a = -C_I \sin k(a-L)$

Συνέχεια παραγώγου συνάρτησης, $\psi_{II}'(a) = \psi_{III}'(a) \Rightarrow D_{II} \gamma \sinh \gamma a = -C_I k \cos k(a-L)$.

Διορώντας τις δυο αυτές σχέσεις βρίσκουμε την συνθήκη για την εκτίμηση των ιδιοενεργειών $\tan k(L-a) \tanh \gamma a = -k/\gamma$.

Περιττές λύσεις

Συνέχεια συνάρτησης, $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow D_{II} \sinh \gamma a = C_I \sin k(a-L)$

Συνέχεια παραγώγου συνάρτησης, $\psi_{II}'(a) = \psi_{III}'(a) \Rightarrow D_{II} \gamma \cosh \gamma a = C_I k \cos k(a-L)$.

Διαιρώντας τις δυο αυτές σχέσεις βρίσκουμε την συνθήκη για την εκτίμηση των ιδιοενεργειών $\tan k(L-a) \coth \gamma a = -k/\gamma$.

Για αμφότερες τις περιπτώσεις παρατηρούμε ότι όταν το πάχος του ενδιαμέσου φράγματος γίνεται πολύ μεγάλο ($a \rightarrow \infty$), οι ιδιοενέργειες ταυτίζονται με αυτές του προηγούμενου προβλήματος (όταν προφανώς και $L \rightarrow \infty$, έτσι ώστε $L-a$). Πράγματι, αμφότερα $\tanh \gamma a$, $\coth \gamma a \rightarrow 1$ για $a \rightarrow \infty$ και η δυο παραπάνω συνθήκες γίνονται $\tan k(L-a) = -k/\gamma$. Η τελευταία είναι η συνθήκη που βρήκαμε στο προηγούμενο πρόβλημα και περιγράφει δυο ανεξάρτητα πηγάδια (σε άπειρη απόσταση), όπως αυτά του προηγούμενου προβλήματος (ΑΚΠ2α) με πάχος $(L-a)$.

Ας προχωρήσουμε τώρα σε μια γραφική διερεύνηση των ιδιοσυναρτήσεων.

Αρχίζουμε με τις περιττές ιδιοενέργειες. Η εξίσωση που τις περιγράφει είναι $\tan k(L-a) \coth \gamma a = -k/\gamma$, η οποία γράφεται ισοδύναμα

$$\tan k(L-a) = -\frac{k}{\gamma} \tanh \gamma a \Rightarrow \tan x = -\frac{x}{\sqrt{\lambda^2 - x^2}} \tanh \left(\frac{a}{L-a} \sqrt{\lambda^2 - x^2} \right), \text{ όπου } x \equiv k(L-a) \text{ και}$$

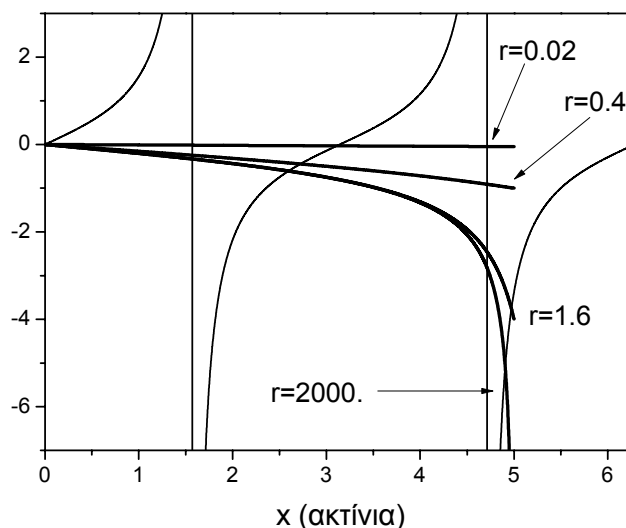
$\lambda \equiv (L-a)\sqrt{2mV_0}/\hbar$. Από την γραφική ΑΠΚ2β.2 παρατηρούμε ότι όσο ο λόγος $a/(L-a) = r/2$

τείνει στο άπειρο (για σταθερό πάχος πηγαιδίου $L-a$) η $\tanh \left(\frac{a}{L-a} \sqrt{\lambda^2 - x^2} \right)$ τείνει στην μονάδα

και όπως είναι αναμενόμενο το σύστημα γίνεται ισοδύναμο με αυτό του προηγούμενου προβλήματος (σύγκρινε το σχήμα ΑΚΠ2β.2 για $r=2000$ και το σχήμα ΑΚΠ2α.4). Στην περίπτωση που έχουμε ενδιαμέσες τιμές του r (π.χ. $r=1.6$ δηλαδή το πάχος του φράγματος έχει 1.6 φορές το πάχος του πηγαιδίου), παρατηρούμε ότι έχουμε δύο δυνατές ιδιοτιμές ενέργειας. Μάλιστα, η πρώτη ιδιοκατάσταση έχει τιμή πρακτικά ίδια με αυτή του προηγούμενου προβλήματος (άπειρο φράγμα δυναμικού). Στις άλλες δύο περιπτώσεις που μελετάμε, με φράγμα δυναμικού σχετικά μικρό ($r=0.4$) η πολύ μικρό ($r=0.02$), βρίσκουμε ότι μία μόνο ιδιοκατάσταση υπάρχει στο σύστημα. Η οποία τώρα είναι διαφορετική από αυτή του μεγάλου φράγματος δυναμικού (σύγκρινε τα σημεία τομής των περιπτώσεων με $r=0.02$ και 0.4 με το σημείο τομής των περιπτώσεων με $r=1.6$ και 2000). Μάλιστα, όσο μικρότερο είναι το φράγμα δυναμικού τόσο περισσότερο είναι μετατοπισμένη η ιδιοτιμή της ενέργειας του συστήματος. Δηλαδή, για πεπερασμένο πάχος φράγματος η ενέργεια της περιττής ιδιοκατάστασης είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του συστήματος με άπειρο πάχος

φράγματος. Οριακά όταν το r τείνει στο μηδέν το σημείο τομής είναι το $x=\pi$ (είναι αναμενόμενο; σε ποια ενέργεια αντιστοιχεί; πρακτικά έχουμε ένα απειρόβαθο πηγάδι πάχους $2L$).

Για τα μικρά φράγματα δυναμικού (α μικρό), $\tanh\left(r\sqrt{\lambda^2-x^2}/2\right) \sim r\sqrt{\lambda^2-x^2}/2$ (καθώς $\tanh w \sim (2w+w^3/3)/(2+w^2) \sim w$), έχουμε $\tan x = -rx/2$ (δηλαδή η δεύτερη εξίσωση γίνεται γραμμική, όπως επιβεβαιώνεται στο σχήμα ΑΚΠ2β.2).



Σχήμα ΑΚΠ2β.2 Γραφική αναζήτηση λύσεων της μη γραμμικής εξίσωσης $\tan x = -\frac{x}{\sqrt{\lambda^2-x^2}} \tanh\left(\frac{a}{L-a}\sqrt{\lambda^2-x^2}\right)$, από την οποία υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες του συστήματος για τις ιδοσυναρτήσεις με περιττή αρτιότητα. Οι 'γραφικές' λύσεις περιγράφονται από τα σημεία τομής του γραφήματος της συνάρτησης $\tan x$ και της συνάρτησης $-x/\sqrt{\lambda^2-x^2} \tanh\left(a\sqrt{\lambda^2-x^2}/(L-a)\right) = -x/\sqrt{\lambda^2-x^2} \tanh\left(r\sqrt{\lambda^2-x^2}/2\right)$ (η οποία ορίζεται στην περιοχή $[0, \lambda]$). Ενώ χρησιμοποιούμε την παράμετρο r , $r \equiv 2a/(L-a)$, η οποία είναι ο λόγος του πάχους του φράγματος δυναμικού με το πάχος εκάστου πηγαδιού δυναμικού (βλέπε σχήμα ΑΚΠ2β.1). Στο παρόν σχήμα η παράμετρος $\lambda (=L\sqrt{U_0} = L\sqrt{2mV_0}/\hbar)$ έχει την τιμή 5 (ίδια με αυτή του προηγούμενου σχήματος ΑΚΠ2α.3 και ΑΚΠ2α.4). Τα αποτελέσματα σχολιάζονται στο κείμενο.

Συνεχίζουμε με τις άρτιες ιδιοενέργειες. Η εξίσωση που τις περιγράφει είναι $\tan k(L-a) \tanh \gamma a = -k/\gamma$, η οποία γράφεται ισοδύναμα

$$\tan x = -\frac{x}{\sqrt{\lambda^2-x^2}} \coth\left(\frac{a}{L-a}\sqrt{\lambda^2-x^2}\right) \quad (\text{όπου πάλι } x \equiv k(L-a)).$$

Από την γραφική ΑΠΚ2β.3 παρατηρούμε ότι όσο ο λόγος $a/(L-a) = r/2$ τείνει στο άπειρο (για σταθερό πάχος πηγαδιού $L-a$)

η $\coth\left(\frac{a}{L-a}\sqrt{\lambda^2-x^2}\right)$ τείνει στην μονάδα και η τιμή της ιδιοενέργειας συμπίπτει με αυτή των

περιττών λύσεων (σύγκρινε με το σχήμα ΑΚΠ2β.2, είναι αναμενόμενο, οι ιδιοσυναρτήσεις είναι διαφορετικές (εμφυλισμός);). Στις περιπτώσεις που μελετάμε, με φράγμα δυναμικού σχετικά μικρό ($r=0.4$) ή πολύ μικρό ($r=0.02$), βρίσκουμε ότι υπάρχουν στο σύστημα δύο ιδιοκαταστάσεις. Η μικρότερης ενέργειας ιδιοκατάσταση είναι διαφορετική από αυτή του μεγάλου φράγματος δυναμικού (σύγκρινε τα σημεία τομής των περιπτώσεων με $r=0.02$ και 0.4 με το σημείο τομής των περιπτώσεων

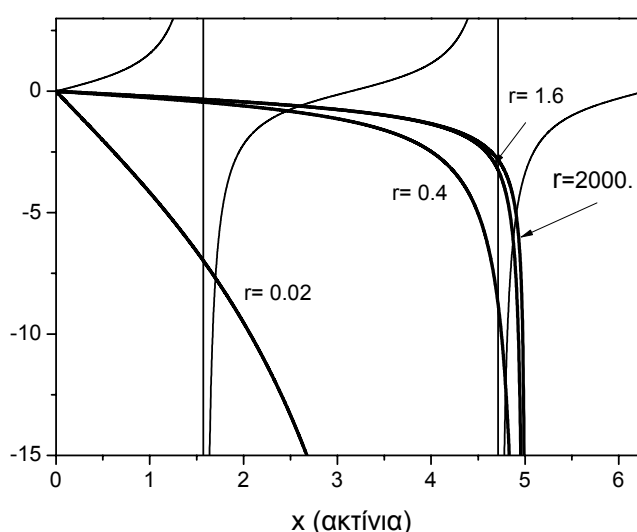
με $r=1.6$ και 2000). Μάλιστα, όσο μικρότερο είναι το φράγμα δυναμικού τόσο περισσότερα είναι μετατοπισμένη η ιδιοτιμή της ενέργειας του συστήματος. Δηλαδή, για πεπερασμένο πάχος φράγματος η ενέργεια της άρτιας ιδιοκατάστασης είναι μικρότερη από την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του συστήματος με άπειρο πάχος φράγματος. Είναι πολύ ενδιαφέρον να παρατηρήσουμε ότι υπάρχει και δεύτερη ιδιοκατάσταση της ενέργειας, η οποία είναι κοντά στην αντίστοιχη ιδιοκατάσταση του μονού πηγαδιού (προηγούμενο πρόβλημα), αλλά είναι πάντα μικρότερη ενεργειακά (που φαίνεται αυτό;).

Πάντως για r πολύ μικρό το x τείνει στο $3\pi/2$. Οριακά όταν το r τείνει στο μηδέν το σημείο τομής είναι το $x=\pi$ (είναι αναμενόμενο; σε ποιά ενέργεια αντιστοιχεί; έχουμε ένα απειρόβαθο πηγάδι πάχους $2L$).

Για τα μικρά φράγματα δυναμικού (a μικρό, $L-a$ δεδομένο, άρα r μικρό),

$$\coth\left(r\sqrt{\lambda^2-x^2}/2\right) \sim 2/r\sqrt{\lambda^2-x^2} \quad (\text{καθώς} \quad \coth w \sim (2+w^2)/(2w+w^3/3) \sim 1/w), \quad \text{έχουμε}$$

$$\tan x = -x/(2r(\lambda^2-x^2)) \quad (\text{δηλαδή η δεύτερη εξίσωση γίνεται παραβολική}).$$



Σχήμα ΑΚΠ2β.3 Γραφική αναζήτηση λύσεων της μη γραμμικής εξίσωσης

$\tan x = -\frac{x}{\sqrt{\lambda^2-x^2}} \coth\left(\frac{a}{L-a}\sqrt{\lambda^2-x^2}\right)$, από την οποία υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες του

συστήματος για τις ιδοσυναρτήσεις με άρτια αρτιότητα. Οι 'γραφικές' λύσεις περιγράφονται από τα σημεία τομής του γραφήματος της συνάρτησης $\tan x$ και της συνάρτησης $-x/\sqrt{\lambda^2-x^2} \coth(a\sqrt{\lambda^2-x^2}/(L-a)) = -x/\sqrt{\lambda^2-x^2} \coth(r\sqrt{\lambda^2-x^2}/2)$ (η οποία

ορίζεται στην περιοχή $[0, \lambda]$). Ενώ χρησιμοποιούμε την παράμετρο r , $r \equiv 2a/(L-a)$, η οποία είναι ο λόγος του πάχους του φράγματος δυναμικού με το πάχος εκάστου πηγαδιού δυναμικού (βλέπε σχήμα ΑΚΠ2β.1). Στο παρόν σχήμα η παράμετρος $\lambda (=L\sqrt{U_0} = L\sqrt{2mV_0}/\hbar)$ έχει την τιμή 5 (ίδια με αυτή του προηγούμενου σχήματος ΑΚΠ2α.3 και ΑΚΠ2α.4). Τα αποτελέσματα σχολιάζονται στο κείμενο.

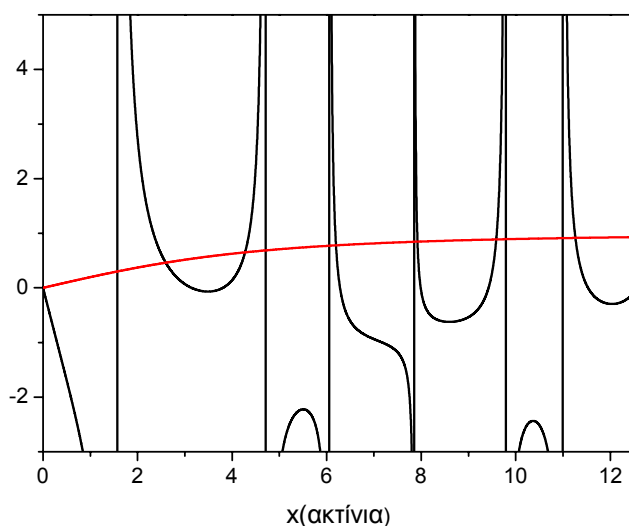
Γενικά παρατηρούμε ότι ενώ στο μονό πηγάδι έχουμε δύο δέσμιες ιδιοκαταστάσεις (σχήμα ΑΚΠ2α.4) στο διπλό πηγάδι με το ίδιο πάχος και το ίδιο βάθος μπορούμε να έχουμε δύο, τρεις ή και τέσσερις δέσμιες ιδιοκαταστάσεις. Ο αριθμός των ιδιοκαταστάσεων εξαρτάται από το πάχος του φράγματος δυναμικού. Έτσι όπως γίνεται φανερό από τα σχήματα ΑΚΠ2β.2 και ΑΚΠ2β.3, για πολύ μικρό r ($r=0.02$), δηλαδή για πολύ μικρού πάχους φράγμα δυναμικού έχουμε μόνο δύο ιδιοκαταστάσεις (μία άρτια και μία περιττή, με μικρότερη και μεγαλύτερη ενέργεια από την ενέργεια του μονού πηγαδιού, αντίστοιχα). Για μεγαλύτερο πάχος φράγματος r ($r=0.4$), δηλαδή για σχετικά μικρού πάχους φράγμα δυναμικού έχουμε τρεις ιδιοκαταστάσεις. Δύο άρτιας αρτιότητας ιδιοσυναρτήσεις (η μία είναι η

θεμελιώδης) και μία ενδιάμεσης ενέργειας σε σχέση με τις άλλες δύο με περιττή αρτιότητα. Για μεγαλύτερου πάχους φράγματα δυναμικού (π.χ. $r=1.6$ και 2000.), έχουμε τέσσερις δέσμιες ιδιοκαταστάσεις (δύο άρτιες και δύο περιττές).

Από τον φοιτητή, αναμένουμε τα εξής:

- Να τις παρουσιάσει σχηματικά (‘‘ζωγραφίσει’’) για όλες τις δυνατές περιπτώσεις (από δύο μέχρι τέσσερις ιδιοκαταστάσεις). Να παρατηρήσει ότι η σειρά που εμφανίζονται είναι άρτια-περιττή-άρτια-περιττή. Μάλιστα να ελέγξει πόσο κοντά είναι οι δύο υψηλότερες ιδιοκαταστάσεις στο ‘‘χείλος’’ του πηγαδιού. Βάσει αυτού να εξηγηθεί πότε έχουμε 3 και πότε 4 ιδιοκαταστάσεις (πότε δηλαδή η τέταρτη ιδιοκατάσταση, είναι οριακά μέσα ή έξω από το πηγάδι)
- Να διευρευνθούν οι ιδιοσυναρτήσεις σε σχέση με απλούς γραμμικούς συνδυασμούς των ιδιοκαταστάσεων των απλών πηγαδιών. Ξεκινήστε από την περίπτωση που το φράγμα δυναμικού είναι σε πολύ μεγάλη απόσταση και ουσιαστικά έχουμε δύο ανεξάρτητα πηγάδια.
- Να διερευνήσετε τι γίνεται σε σχέση με την παράμετρο λ , που χαρακτηρίζει τα γεωμετρικά στοιχεία του πηγαδιού
- Τέλος να συζητηθεί η περίπτωση που το V_0 μηδενίζεται.

Στην συνέχεια αναζητούμε λύσεις για την περίπτωση όπου $E > V_0$. Προφανώς η εξίσωση Schrödinger για την περιοχή I και III δεν διαφοροποιείται σε σχέση με την προηγούμενη περίπτωση ($E < V_0$).



Σχήμα ΑΚΠ2β.4 Γραφική αναζήτηση λύσεων της μη γραμμικής εξίσωσης $\tan x \tanh\left(\frac{a}{L-a}\sqrt{\lambda^2+x^2}\right) = \frac{x}{\sqrt{\lambda^2+x^2}}$, από την οποία υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες του συστήματος για τις ιδοσυναρτήσεις με άρτια αρτιότητα. Οι ‘‘γραφικές’’ λύσεις περιγράφονται από τα σημεία τομής του γραφήματος της συνάρτησης $\tan x \tan\left(r\sqrt{\lambda^2+x^2}/2\right)$ και της συνάρτησης $x/\sqrt{\lambda^2+x^2}$ (κόκκινη καμπύλη). Η παράμετρος $\lambda(=L\sqrt{U_0}=L\sqrt{2mV_0}/\hbar)$ έχει την τιμή 5, ενώ η παράμετρο r , $r \equiv 2a/(L-a)$, η οποία είναι ο λόγος του πάχους του φράγματος δυναμικού με το πάχος εκάστου πηγαδιού δυναμικού έχει την τιμή 2. Παρατηρούμε ότι υπάρχει απειρία δέσμιων καταστάσεων.

Ενώ για την περιοχή II είναι

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

Η εξίσωση αυτή διαφέρει από την προηγούμενη στο ότι έχουμε στην θέση του γ^2 το $-\gamma^2$. Έτσι πρακτικά μπορούμε να ακολουθήσουμε την προηγούμενη μεθοδολογία και στα τελικά αποτελέσματα να αντικαταστήσουμε το $\gamma = \sqrt{\gamma^2}$ με το $i\gamma = \sqrt{-\gamma^2}$. Έτσι η λύση στην περιοχή II είναι $\psi_{II}(x) = D_{II} \cosh i\gamma x = D_{II} (e^{i\gamma x} + e^{-i\gamma x}) / 2 = D_{II} \cos \gamma x$, για τις άρτιες λύσεις και $\psi_{II}(x) = D_{II} \sinh i\gamma x = D_{II} (e^{i\gamma x} - e^{-i\gamma x}) / 2 = iD_{II} (e^{i\gamma x} - e^{-i\gamma x}) / 2i = iD_{II} \sin \gamma x$ για τις περιττές.

Ανάλογα έχουμε για τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας.

Άρτιες λύσεις

Την συνθήκη $\tan k(L-a) \tanh i\gamma a = -k / i\gamma \Rightarrow \tan k(L-a) \tan \gamma a = k / \gamma$.

Περιττές λύσεις

Την συνθήκη $\tan k(L-a) \coth i\gamma a = -k / i\gamma \Rightarrow \tan k(L-a) \cot \gamma a = -k / \gamma$.

Προχωράμε στην γραφική εκτίμηση των λύσεων για τις άρτιες λύσεις. Παρατηρούμε ότι υπάρχουν άπειρα σημεία τομής των συναρτήσεων του αριστερού και του δεξιού μέρους της εξίσωσης ιδιοτιμών. Ανάλογα αποτελέσματα βρίσκουμε για τις περιττές λύσεις.

Τέλος συζητάμε σύντομα την περίπτωση που το V_0 μηδενίζεται. Στην περίπτωση αυτή το υπό μελέτη σύστημα αναμένεται ταυτίζεται με αυτό του απειρόβαθου δυναμικού. Προφανώς για $V_0 = 0$, $\gamma = k$, και έχουμε για τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας.

Άρτιες λύσεις

$\tan k(L-a) \tan \gamma a = k / \gamma \Rightarrow \tan k(L-a) \tan ka = 1 \Rightarrow \tan k(L-a) = \cot ka = \tan(\pi/2 - ka)$, δίνει ότι $k(L-a) = (\pi/2 - ka) + n\pi \Rightarrow kL = (2n+1)\pi/2$, όπου το n παίρνει τιμές 0,1,2...

Περιττές λύσεις

Η συνθήκη

$\tan k(L-a) \cot \gamma a = -k / \gamma \Rightarrow \tan k(L-a) \cot ka = -1 \Rightarrow \tan k(L-a) = -\tan ka = \tan(\pi - ka)$,

δίνει ότι $k(L-a) = (\pi - ka) + n\pi \Rightarrow kL = (n+1)\pi$, όπου το n παίρνει τιμές 0,1,2...

Οι παραπάνω συνθήκες είναι οι συνθήκες για απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού πάχους $2L$ ($2kL = m\pi$, αλλά με $m=1,2,3,\dots$).

Τι γίνεται στην περίπτωση που $E = V_0$; Ας αναζητηθεί από τον φοιτητή, λαμβάνοντας υπόψη ότι η

εξίσωση Schrödinger για την περιοχή II είναι $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{II}(x)}{dx^2} + V_0 \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x) \Rightarrow \psi_{II}''(x) = 0$.

Τέλος αναμένεται από τον σπουδαστή να συζητηθεί αν υπάρχει η δυνατότητα το δυναμικό V_0 να το χειριστούμε ως διαταραχή. Σίγουρα, αυτό έχει νόημα όταν έχουμε πεπερασμένο δυναμικό για το μεγάλο πηγάδι και όχι απειρόβαθο (π.χ. V_1 δυναμικό), οπότε η θεωρία διαταραχών εφαρμόζεται όταν $V_0 \ll V_1$.