

## Κεφάλαιο 11. Η Εξίσωση Schrödinger σε μια διάσταση

### Εισαγωγικές Παρατηρήσεις

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είχαμε μια πρώτη επαφή με την εξίσωση του Schrödinger, σε μια διάσταση, και την «επίλυση» της για ένα απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού. Σ' αυτό το κεφάλαιο, θα επεκταθούμε και θα διερευνήσουμε με περισσότερες λεπτομέρειες, περισσότερα μονοδιάστατα προβλήματα. Πέρα από την ακριβή «ποσοτική» λύση, όπου αυτή είναι εφικτή, θα αναζητήσουμε και θα αναπτύξουμε ποιοτικά επιχειρήματα, τα οποία θα μας επιτρέψουν να κατανοήσουμε τις λύσεις σε πιο πολύπλοκες περιπτώσεις, μέσα από μια προσεγγιστική ποιοτική περιγραφή.

### Σκοπός

- Η εξοικείωση με την κβαντομηχανική περιγραφή ενός φυσικού συστήματος σε μια διάσταση, μέσα από την εξίσωση του Schrödinger.
- Η επίλυση της εξισώσεως του Schrödinger σε απλά προβλήματα.
- Η διερεύνηση των λύσεων της εξισώσεως του Schrödinger.
- Η διερεύνηση της εξισώσεως του Schrödinger και η ποιοτική περιγραφή των λύσεων της, σε πιο σύνθετα προβλήματα.

### Προσδοκώμενα αποτελέσματα

Όταν θα έχετε ολοκληρώσει τη μελέτη αυτού του κεφαλαίου, θα μπορείτε να:

- Γράψετε την εξίσωση του Schrödinger για ένα σωματίο, το οποίο βρίσκεται υπό την επίδραση μιας δύναμης  $F(x)$ , λόγω της οποίας αποκτά μια δυναμική ενέργεια  $V(x)$ .

- Επιλύσετε την (μονοδιάστατη) εξίσωση του Schrödinger σε συγκεκριμένες απλές περιπτώσεις, όπως για ένα σωματίο, το οποίο βρίσκεται σε ένα άπειρο ή πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού.
- Περιγράψετε ποιοτικά την συμπεριφορά των λύσεων σε πιο πολύπλοκες περιπτώσεις.
- Επαληθεύσετε την αποδοχή ή όχι προτεινομένων λύσεων της εξίσωσης του Schrödinger

### Έννοιες Κλειδιά

- Κβαντομηχανική κατάσταση
- Δέσμια κατάσταση
- Κατάσταση σκέδασης
- Περαιτωμένη κίνηση
- Καμπυλότητα κυματοσυνάρτησης
- «Κινητική ενέργεια», ποσότητα  $T = E - V(x)$ .
- Κινητική ενέργεια

## 11.1 Το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού.

### 11.1.1 Σύνδεση με τα προηγούμενα.

Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, η εξίσωση Schrödinger<sup>1</sup> για ένα σωματίο μάζας  $m$  σε ένα απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού, της μορφής:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & x < 0, \quad x > L \end{cases} \quad (11.1),$$

γράφεται:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$ , (11.2), όταν  $0 \leq x \leq L$ ,

με λύσεις  $\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  για  $0 \leq x \leq L$ ,

<sup>1</sup> Από εδώ και πέρα με τον όρο «εξίσωση του Schrödinger» εννοούμε την χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

όπου η σταθερά  $A$  ισούται (βλέπε άσκηση 10.1) με  $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$  (11.3).

Στις περιοχές  $x < 0$  και  $x > L$  η εξίσωση Schrödinger εκφυλίζεται στην την οριακή

μορφή:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + (\infty) \cdot \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$ , όπου οι μοναδικές, φυσικά και

μαθηματικά αποδεκτές, κυματοσυναρτήσεις είναι κατ' ανάγκην μηδενικές.

Οι κυματοσυναρτήσεις  $\psi_n(x)$  έχουν, λοιπόν, την γενική μορφή:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & , \quad 0 \leq x \leq L \\ 0 & , \quad x < 0, x > L \end{cases} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (11.4) \quad \text{\textit{ιδιοσυναρτήσεις,}}$$

ενώ οι αντίστοιχες ιδιοτιμές της ενέργειας δίνονται από την σχέση:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2 \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (11.5) \quad \text{\textit{ιδιοτιμές.}}$$

**Ο κβαντικός αριθμός  $n$ , λοιπόν, προσδιορίζει πλήρως την κατάσταση του σωματιδίου (του φυσικού συστήματος, γενικότερα) και την ενέργεια του.**

Η κβαντομηχανική «κατάσταση» ενός φυσικού συστήματος περιγράφεται από την συγκεκριμένη ιδιοσυνάρτηση  $\psi_n(x)$ .

Γι' αυτό το λόγο, όταν αναφερόμαστε στην **κατάσταση ενός συστήματος**, συνήθως αποφεύγουμε τον όρο «κυματοσυνάρτηση», ο οποίος συνήθως υπονοεί απλά την συνάρτηση η οποία ικανοποιεί (επαληθεύει) την διαφορική κυματική εξίσωση, χωρίς ρητή αναφορά στις οριακές συνθήκες, οι οποίες ορίζουν το μαθηματικό πρόβλημα ιδιοτιμών. Μάλιστα, για να υποδηλώσουμε την αναλογία των κυματοσυναρτήσεων / ιδιοσυναρτήσεων με τα ιδιοδιανύσματα σε πεπερασμένους γενικευμένους διανυσματικούς χώρους<sup>2</sup>, χρησιμοποιούμε συχνά για συντομογραφία τον συμβολισμό:  $\psi_n(x) \equiv |\psi_n(x)\rangle$  (11.6),

η ακόμα:  $\psi_n(x) \equiv |n\rangle$  (11.7), **ορισμός διανύσματος «κετ» (Ket).**

Ο συμβολισμός αυτός, ο οποίος εισήχθη από τον Dirac, στηρίζεται στην μαθηματική αναλογία της ιδιοσυναρτήσεως  $\psi_n(x)$ , με ένα γενικευμένο διάνυσμα  $|n\rangle$ , το οποίο, για λόγους οι οποίοι θα γίνουν σύντομα κατανοητοί, ονομάζεται διάνυσμα «κετ»,

---

<sup>2</sup> Βλέπε κεφάλαιο 2 στο «μαθηματικό συμπλήρωμα», Α. Ζδέτση ( υπό έκδοση)

Ket. Παράλληλα, η συζυγής κυματοσυναρτησης της  $\psi_n(x)$ ,  $\psi_n^*(x)$ , συμβολίζεται με ένα αντίστοιχο διάνυσμα, το οποίο ονομάζεται «μπρά», bra<sup>3</sup> :

$$\psi_n(x)^* = \langle n | \quad (11.8) \text{ ορισμός διανύσματος «bra» .}$$

Οι όροι bra και ket προέρχονται από τα συνθετικά της αγγλικής λέξης bracket (αγκύλη). Η λέξη προέρχεται από την ποσότητα

$$\int |\psi_n(x)|^2 dx = \int \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx ,$$

η οποία στον γενικευμένο διανυσματικό χώρο των ιδιοσυναρτήσεων ερμηνεύεται ως εσωτερικό γινόμενο και συμβολίζεται:

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx \equiv \langle n | n \rangle \quad (11.9) \text{ bra(c)ket}^4 .$$

Τα διανύσματα bra και ket έχουν πολλές ενδιαφέρουσες και βαθύτερες μαθηματικές ιδιότητες, οι οποίες δεν πρόκειται να μας απασχολήσουν. Εδώ απλά θα χρησιμοποιήσουμε τον συμβολισμό (όπου χρειασθεί) σαν απλή συντομογραφία («ταμπέλα») ορισμένων κβαντικών καταστάσεων (κυματοσυναρτήσεων).

### 11.1.2 Ιδιότητες των κυματοσυναρτήσεων/ιδιοσυναρτήσεων και ιδιοτιμών

Όπως φαίνεται από τις σχέσεις (11.4) και το σχήμα 10.7, οι κυματοσυναρτήσεις (ιδιοσυναρτήσεις) μέσα στο πηγάδι είναι ημιτονοειδείς συναρτήσεις με κόμβους (μόνιμους μηδενισμούς) ίσους προς τον κβαντικό αριθμό  $n$  μείον ένα. Για παράδειγμα, η θεμελιώδης κατάσταση με  $n=1$  δεν έχει κανένα κόμβο, ενώ η πρώτη διεγερμένη κατάσταση με  $n=2$  έχει ένα κόμβο, χωρίς φυσικά να λογαριάζουμε τους μόνιμους μηδενισμούς στα άκρα  $x=0$  και  $x=L$  του πηγαδιού, οι οποίοι προέρχονται από την συνέχεια της κυματοσυναρτήσεως στις περιοχές εντός και εκτός του πηγαδιού. Βλέπουμε δηλαδή ότι όσο περισσότερους κόμβους έχει η κυματοσυνάρτηση, τόσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια της, και αντίστροφα.

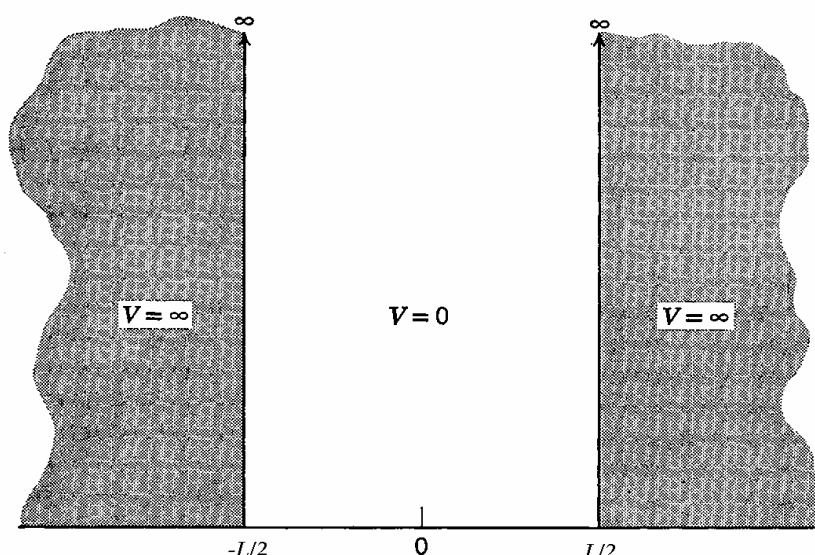
Μάλιστα, εφόσον το δυναμικό παραμένει σταθερό, μπορούμε να πούμε, πως όσο περισσότερους κόμβους (και κατά συνέπεια όσο περισσότερες «αναδιπλώσεις») έχει η κυματοσυνάρτηση, τόσο μεγαλύτερη είναι η κινητική ενέργεια του σωματίου, στην αντίστοιχη κατάσταση (η οποία χαρακτηρίζεται από τον κβαντικό

<sup>3</sup> καμία σχέση με τη μετάφραση την οποία μπορεί να βρει κανείς σ' ένα αγγλοελληνικό λεξικό.

<sup>4</sup> Πολλές φορές χρησιμοποιείται εναλλακτικά για το εσωτερικό γινόμενο ο συμβολισμός  $\langle n |, | n \rangle$

αριθμό  $n$ ).

Μια δεύτερη παρατήρηση έχει να κάνει με την συμμετρία της κυματοσυνάρτησης, ως προς την κάθετο στο μέσο του πηγαδιού (στη θέση  $x=L/2$ ). Μπορούμε να παρατηρήσουμε στο σχήμα 10.7, ότι οι ιδιοσυναρτήσεις είναι εναλλακτικά συμμετρικές και αντισυμμετρικές ως προς την μεσοκάθετο. Οι ιδιοσυναρτήσεις με περιττό κβαντικό αριθμό ( $n=1,3,5,\dots$ ) είναι συμμετρικές, ενώ εκείνες με άρτιο κβαντικό αριθμό ( $n=2,4,6,\dots$ ) είναι αντισυμμετρικές. Και στις δύο περιπτώσεις, οι πυκνότητες πιθανότητας, οι οποίες δίνονται από το τετράγωνο των αντίστοιχων κυματοσυναρτήσεων είναι συμμετρικές. Για να αναδείξουμε αυτή τη συμμετρία, μπορούμε να μεταφέρουμε την αρχή του άξονα  $x$  στο μέσον του πηγαδιού, όπως φαίνεται στο σχήμα 11.1.



Σχήμα 11.1

*Το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού σε συμμετρική μορφή*

$$\text{Το δυναμικό δίνεται από τη σχέση } V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad -L/2 \leq x \leq +L/2 \\ \infty & , \quad x < -L/2, \quad x > +L/2 \end{cases} \quad (11.10).$$

Σ' αυτή τη μορφή, οι οριακές συνθήκες συνεχείας για την λύση  $\psi(x)$  της εξίσωσης (11.2), στα άκρα του πηγαδιού γράφονται:

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(+\frac{L}{2}\right) \quad (11.11),$$

ενώ η κυματοσυνάρτηση  $\psi(x)$  μέσα στο πηγάδι θα έχει την γενική μορφή:

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \quad (11.12)$$

Επομένως θα έχουμε:

$$\text{ή } B=0 \text{ και } A \cos\left(\frac{k_n L}{2}\right) = 0 \text{ οπότε } \frac{k_n L}{2} = \frac{\pi}{2}, 3\frac{\pi}{2}, \dots,$$

$$\text{δηλ } k_n = \frac{n\pi}{L}, n=1,3,5,\dots \quad (11.13)$$

$$\text{ή } A=0 \text{ και } B \sin\left(\frac{k_n L}{2}\right) = 0 \text{ οπότε } \frac{k_n L}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots,$$

$$\text{δηλ } k_n = \frac{n\pi}{L}, n=2,4,6,\dots \quad (11.14)$$

Η πρώτη περίπτωση, δίνει τις άρτιες ιδιοσυναρτήσεις και η δεύτερη τις περιττές. Οι σταθερές A και B, προκύπτουν από την συνθήκη νορμαλισμού, απ' όπου βρίσκουμε  $A=B=\sqrt{\frac{2}{L}}$ . Οι ιδιοσυναρτήσεις /κυματοσυναρτήσεις έχουν, λοιπόν, την τελική μορφή:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & n=1,3,5,\dots \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & n=2,4,6,\dots \end{cases} \quad -\frac{L}{2} \leq x \leq +\frac{L}{2} \quad (11.15)$$

Το ίδιο αποτέλεσμα θα είχαμε πάρει αν είχαμε εισαγάγει μια νέα μεταβλητή θέσης

$$x' = x - \frac{L}{2} \quad (11.16),$$

και είχαμε χρησιμοποιήσει, τις παλιές σχέσεις και οριακές συνθήκες. Σ' αυτή την περίπτωση, στις σχέσεις (11.15) θα είχαμε παντού  $x'$  στη θέση της μεταβλητής  $x$ .

Η ενέργεια όπως έχουμε ήδη αναφέρει, θα εξακολουθεί να δίνεται από την ίδια

$$\text{σχέση, } E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2, n=1,2,3,\dots \quad (11.5).$$

Παρατηρούμε ότι συμμετρία των κυματοσυναρτήσεων ως προς το μεσοκάθετο επίπεδο, τώρα παρουσιάζεται ως συμμετρία αρτιότητας (ως προς την αρχή του άξονα  $x$ ). Οι κυματοσυναρτήσεις με περιττό κβαντικό αριθμό είναι άρτιες, δηλαδή:

$$\psi_n(-x) = \psi_n(x), n=1,3,5,\dots \quad (11.17), \text{ άρτιες κυματοσυναρτήσεις}$$

ενώ οι κυματοσυναρτήσεις με άρτιο κβαντικό αριθμό είναι περιττές:

$$\psi_n(-x) = -\psi_n(x), n=2,4,6,\dots \quad (11.18) \text{ περιττές κυματοσυναρτήσεις}$$

Και στις δύο περιπτώσεις το τετράγωνο της κυματοσυναρτήσεως είναι άρτια συνάρτηση,  $|\psi_n(-x)|^2 = |\psi_n(x)|^2, n=1,2,3,4,5,\dots \quad (11.19),$

όπως και το δυναμικό (η δυναμική ενέργεια) :

$$V(-x) = V(x) \quad (11.20) \quad \text{\textit{συμμετρικό (άρτια) δυναμικό.}}$$

Παρατηρούμε δηλαδή, πως όταν το δυναμικό είναι συμμετρικό (άρτια συνάρτηση της μεταβλητής θέσης  $x$ ), οι κυματοσυναρτήσεις είναι είτε άρτιες είτε περιττές (έχουν καθορισμένη «αρτιότητα»).

Όπως θα δούμε παρακάτω, αυτή είναι μια γενικότερη ιδιότητα, η οποία θα μας φανεί χρήσιμη στην ποιοτική διερεύνηση των λύσεων σε πιο πολύπλοκες περιπτώσεις.

## **Ασκήσεις**

**11.1** Χρησιμοποιώντας την συνθήκη κανονικοποίησης (ή συνθήκη νορμαλισμού) ότι δηλαδή, η ολική πιθανότητα να βρεθεί το σωματίο κάπου σε όλο τον χώρο είναι ίση με την μονάδα (βεβαιότητα), δείξτε ότι η σταθερά  $A$  στις κυματοσυναρτήσεις δίνεται από την σχέση (11.3).

**11.2** Τι θα άλλαζε στα παραπάνω αποτελέσματα για τις (ιδιο)ενέργειες και (ιδιο)συναρτήσεις, εάν η τιμή του δυναμικού στο εσωτερικό του πηγαδιού δεν ήταν μηδενική αλλά ίση προς  $V_0$  ;

## **11.2 Πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού, με $E < V_0$**

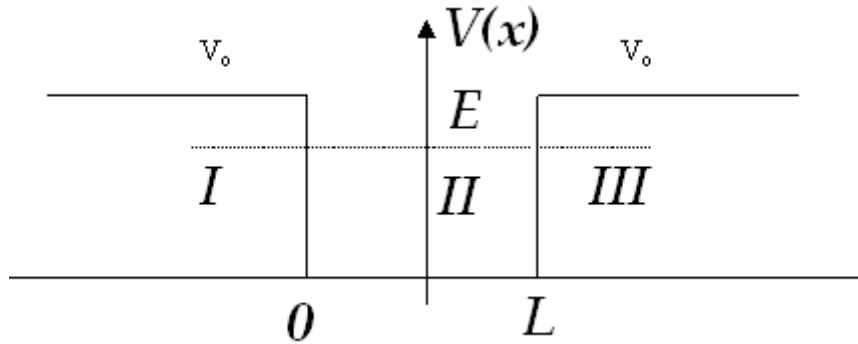
### **11.2.1 ποιοτική περιγραφή**

Ας δούμε τώρα, ένα άλλο παράδειγμα, όπου το δυναμικό δεν είναι άπειρο στις θέσεις έξω από το πηγάδι, αλλά έχει ένα πεπερασμένο ύψος ή βάθος  $V_0$ , όπως φαίνεται στο σχήμα 11.2. Σε αντιστοιχία, με το απειρόβαθο πηγάδι, η αναλυτική μορφή του

$$\text{δυναμικού περιγράφεται από τη σχέση: } V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad 0 \leq x \leq L \\ V_0 & , \quad x < 0 \quad , \quad x > L \end{cases} \quad (11.21).$$

Όμως, σε αντίθεση με το απειρόβαθο πηγάδι, η κυματοσυνάρτηση στις περιοχές I και III του σχήματος 11.2, δηλαδή έξω από το πηγάδι, δεν είναι μηδενική, αφού τώρα το δυναμικό είναι πεπερασμένο και ίσο προς  $V_0$ .

Όπως θα δούμε παρακάτω, στις περιοχές I και III η κυματοσυνάρτηση έχει την μορφή εκθετικού (φθίνοντος) κύματος, ενώ στην περιοχή II μέσα στο πηγάδι, η κυματοσυνάρτηση έχει τριγωνομετρική (ημιτονοειδή / συνημιτονοειδή) μορφή. Οι ενέργειες ακολουθούν λίγο-πολύ κάποια παρόμοια διάταξη με το απειρόβαθο πηγάδι.



**Σχήμα 11.2**

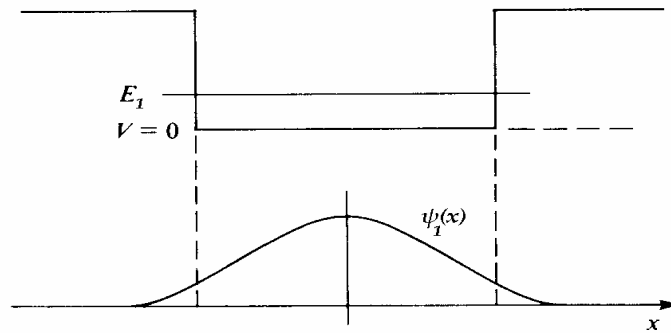
*Πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού ύψους (βάθους)  $V_0$ .*

Το δυναμικό δίνεται από τη σχέση (11.21): 
$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad 0 \leq x \leq L \\ V_0 & , \quad x < 0 \quad , \quad x > L \end{cases} .$$

*Διακρίνουμε τρεις περιοχές I, II και III, όπως και στο απειρόβαθο πηγάδι.*

Όμως, η μαθηματική έκφραση τους δεν είναι πλέον διόλου απλή. Έτσι, δεν υπάρχει κάποια κλειστή αναλυτική σχέση, όμοια με την (11.5), από την οποία θα μπορούσαν να υπολογισθούν οι ενέργειες. Στο σχήμα 11.3 συνοψίζουμε την συμπεριφορά της θεμελιώδους καταστάσεως ( $n=1$ ). Όπως παρατηρούμε, η κυματοσυνάρτηση είναι συμμετρική ως προς το μέσον του πηγαδιού και δεν έχει κανένα κόμβο, όπως και στο απειρόβαθο πηγάδι. Όμως, σε αντίθεση με το απειρόβαθο πηγάδι η κυματοσυνάρτηση παρουσιάζει «εκθετικές ουρές» έξω από το πηγάδι. Δηλαδή, στο εσωτερικό του πηγαδιού η κυματοσυνάρτηση παριστάνει αρμονικό κύμα, ενώ έξω από το πηγάδι έχει την μορφή εκθετικού κύματος. Αυτό σημαίνει ότι το σωματίο έχει κάποια μικρή, αλλά εκθετικά φθίνουσα πιθανότητα να βρεθεί έξω από το πηγάδι, ενώ δεν υπήρχε καμία τέτοια πιθανότητα στην περίπτωση του απειρόβαθου πηγαδιού. Δεν υπήρχε επίσης καμία πιθανότητα να βρεθεί σε μια τέτοια περιοχή το σωματίο, με βάση την κλασική Φυσική. Διότι, όπως φαίνεται στα σχήματα 11.2 και 11.3, σ' αυτή την περιοχή η ολική ενέργεια του σωματιδίου είναι μικρότερη από την αντίστοιχη δυναμική ενέργεια. Δηλαδή εάν το σωματίο βρισκόταν, έστω και για λίγο, σε μια τέτοια περιοχή θα έπρεπε να έχει αρνητική κινητική ενέργεια, όπερ άτοπο, αφού η κινητική ενέργεια (ίση προς  $\frac{1}{2}mv^2$ ) είναι πάντα ένας θετικός αριθμός. Γι αυτό τον λόγο περιοχές όπου η ενέργεια  $E$  είναι μικρότερη από την δυναμική ενέργεια ονομάζονται **κλασικά απαγορευμένες περιοχές**.





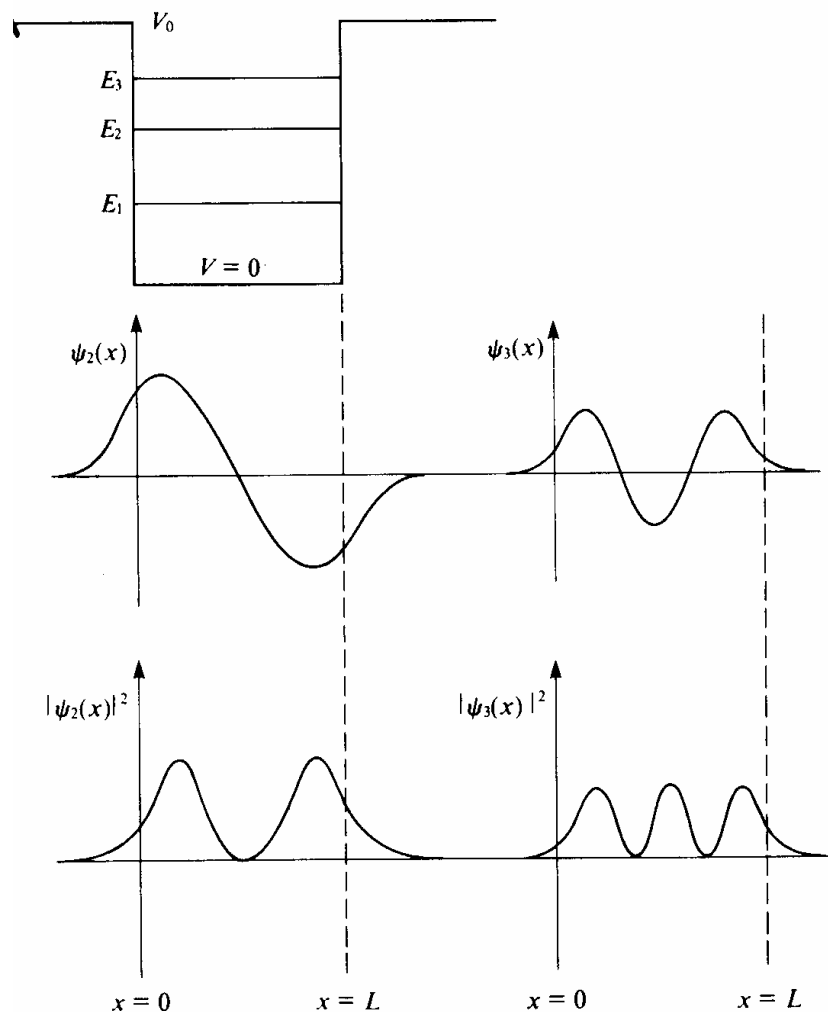
**Σχήμα 11.3**

**Η θεμελιώδης κατάσταση ενός πεπερασμένου πηγαδιού δυναμικού.**

Στο εσωτερικό η συνάρτηση  $\psi(x)$  έχει μορφή αρμονικού κύματος, ενώ έξω από το πηγάδι έχει μορφή εκθετικού κύματος. Στα όρια του πηγαδιού οι δυο μορφές ταιριάζουν τέλεια (οριακές συνθήκες).

Βέβαια η αρχή της αβεβαιότητας μπορεί δώσει κάποια εξήγηση σ' αυτές τις «εκθετικές ουρές πιθανότητας» εφόσον η αβεβαιότητα στην θέση του σωματιδίου μπορεί να είναι συγκρίσιμη ή και μεγαλύτερη από το αντίστοιχο **μήκος διείδυσης** του εκθετικού κύματος, μέσα στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή.

Το ίδιο ισχύει και για τις υπόλοιπες, *διεγερμένες*, καταστάσεις. Η συμπεριφορά των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων των δυο πρώτων διεγερμένων καταστάσεων ( $n=2,3$ ) του πεπερασμένου πηγαδιού δυναμικού απεικονίζεται στο σχήμα 11.4. Στο ίδιο σχήμα απεικονίζονται και οι αντίστοιχες πυκνότητες πιθανότητας. Παρατηρούμε ότι σε κάθε περίπτωση, οι κυματομορφές ενώνονται ομαλά στα όρια του πηγαδιού. Επίσης παρατηρούμε, ότι οι κυματοσυναρτήσεις είναι ή συμμετρικές ή αντισυμμετρικές, λόγω της συμμετρίας του δυναμικού, ενώ η πυκνότητα πιθανότητας είναι πάντοτε συμμετρική. Μπορούμε, όπως και στο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού, να εκμεταλλευτούμε αυτή την συμμετρία για να απλοποιήσουμε την διαδικασία εύρεσης των ιδιοσυναρτήσεων και των αντιστοίχων ιδιοτιμών. Πράγματι, αν μεταφέρουμε τα άκρα του δυναμικού στις θέσεις  $x = \pm \frac{L}{2}$ , όπως στο σχήμα 11.5, μπορούμε να θεωρήσουμε χωριστά τις άρτιες από τις περιττές λύσεις. Όμως, θα ακολουθήσουμε διαφορετική πορεία παρακάτω και δεν θα χρησιμοποιήσουμε εξ αρχής επιχειρήματα συμμετρίας.



**Σχήμα 11.4**

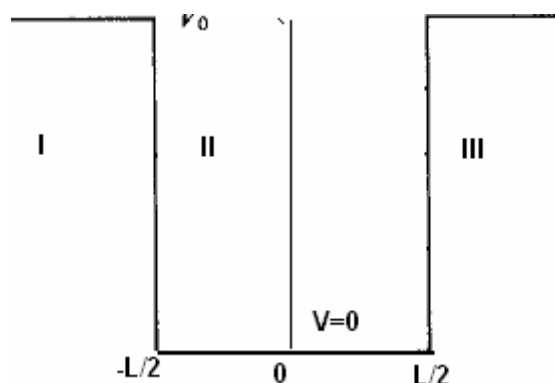
*Οι δύο πρώτες διεγερμένες καταστάσεις όμως πεπερασμένου πηγαδιού δυναμικού. Όπως και η θεμελιώδης κατάσταση (η οποία όμως δεν έχει κανένα κόμβο) μέσα στο πηγάδι οι κυματοσυναρτήσεις έχουν μορφή αρμονικού κύματος, ενώ έξω από το πηγάδι έχουν μορφή εκθετικού κύματος. Οι αντίστοιχες κατανομές πιθανότητας είναι συμμετρικές συναρτήσεις. Στα όρια του πηγαδιού οι δυο μορφές ταιριάζουν τέλεια (όπως απαιτούν οι οριακές συνθήκες).*

**\*11.2.2 ποσοτική περιγραφή**

Γράφουμε, λοιπόν, το δυναμικό στη συμμετρική μορφή:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -\frac{L}{2}, \quad x > \frac{L}{2} \\ 0 & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (11.22).$$

και αναζητούμε τις ακριβείς λύσεις σε κάθε μια από τις τρεις περιοχές.



**Σχήμα 11.5**

*Συμμετρική μορφή του πεπερασμένου πηγαδιού δυναμικού.*

Ας γράψουμε την εξίσωση του Schrödinger για την περιοχή II, δηλαδή για την περιοχή  $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ , όπου το δυναμικό είναι μηδέν. Θα έχουμε :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) \quad (11.23).$$

Όπως έχουμε ήδη δει, η λύση της παραπάνω εξίσωσης είναι :

$$\Psi_{II}(x) = A\cos k_2 x + B\sin k_2 x \quad \text{με} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (11.24).$$

Η εξίσωση του Schrödinger για τις περιοχές I και III έχει την μορφή:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V_0 \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (11.25),$$

$$\text{ή} \quad \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \Psi(x) \quad (11.26).$$

Επομένως και στις δύο περιοχές  $x < -\frac{L}{2}$  και  $x > \frac{L}{2}$  θα έχουμε λύσεις της ίδιας

μορφής. Άρα, θέτοντας  $k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$  (11.27),

γράφουμε:

$\Psi_I(x) = Ce^{k_1x} + De^{-k_1x}$  (11.28), λύση για  $x < -\frac{L}{2}$

και

$\Psi_{III}(x) = Ee^{k_3x} + Fe^{-k_3x}$  (11.29), λύση για  $x > \frac{L}{2}$ .

Ως γνωστόν, η κυματοσυναρτησή μας θα πρέπει να μην απειρίζεται για πολύ μεγάλα ή πολύ μικρά  $x$ , δηλαδή θα πρέπει:

$\Psi_I(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$  και  $\Psi_{III}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$  (11.30) οριακή συνθήκη στο  $\pm\infty$

Από την παραπάνω απαίτηση, βλέπουμε αμέσως ότι τα  $D, E$  θα πρέπει να είναι μηδέν. Έτσι, οι κυματοσυναρτήσεις θα γίνουν:

$\Psi_I(x) = Ce^{k_1x}$ ,  $x < -\frac{L}{2}$  (11.31)

και

$\Psi_{III}(x) = Fe^{-k_1x}$ ,  $x > \frac{L}{2}$  (11.32).

Επιπλέον, η  $\Psi(x)$  καθώς και η πρώτη παραγωγός της,  $\frac{d\Psi}{dx}$ , θα πρέπει να είναι

συνεχείς στα σημεία  $x = -\frac{L}{2}$  και  $x = \frac{L}{2}$ . Αυτό βέβαια μπορεί να συμβεί, μόνο για ορισμένες τιμές της ενέργειας  $E$ , όπως και για το απειρόβαθο πηγάδι.

Οι συνθήκες προσαρμογής, για  $x = -\frac{L}{2}$  είναι :

$A\cos(k_2 \frac{L}{2}) - B\sin(k_2 \frac{L}{2}) = Ce^{-k_1 \frac{L}{2}}$  (11.33) συνέχεια συναρτήσεων

και

$Ak_2 \sin(k_2 \frac{L}{2}) + Bk_2 \cos(k_2 \frac{L}{2}) = Ck_1 e^{-k_1 \frac{L}{2}}$  (11.34) συνέχεια παραγώγων.

Επίσης οι συνθήκες προσαρμογής για  $x = \frac{L}{2}$  δίνουν :

$$A\cos(k_2 \frac{L}{2}) + B\sin(k_2 \frac{L}{2}) = Fe^{-k_1 \frac{L}{2}} \quad (11.35) \text{ συνέχεια συναρτήσεων}$$

και

$$-Ak_2\sin(k_2 \frac{L}{2}) + Bk_2\cos(k_2 \frac{L}{2}) = -Fk_1e^{-k_1 \frac{L}{2}} \quad (11.36) \text{ συνέχεια παραγώγων.}$$

Προσθέτοντας τώρα τις σχέσεις (11.33) και (11.35) παίρνουμε:

$$2A\cos(k_2 \frac{L}{2}) = (C + F)e^{-k_1 \frac{L}{2}} \quad (11.37).$$

Αφαιρώντας τώρα από την (11.35) την (11.33) βρίσκουμε:

$$2B\sin(k_2 \frac{L}{2}) = (F - C)e^{-k_1 \frac{L}{2}} \quad (11.38).$$

Προσθέτοντας τις (11.34) και (11.36) παίρνουμε :

$$2Bk_2\cos(k_2 \frac{L}{2}) = (C - F)k_1e^{-k_1 \frac{L}{2}} \quad (11.39),$$

ενώ αφαιρώντας από την (11.34) την (11.36) βρίσκουμε:

$$2Ak_2\sin(k_2 \frac{L}{2}) = (F + C)k_1e^{-k_1 \frac{L}{2}} \quad (11.40).$$

Διαιρώντας στη συνέχεια την (11.40) με την (11.37) έχουμε :

$$k_2 \tan(k_2 \frac{L}{2}) = k_1 \text{ με } A \neq 0 \text{ και } C+F \neq 0 \quad (11.41).$$

Ομοίως διαιρώντας την (11.39) με την (11.38) βρίσκουμε:

$$k_2 \cot(k_2 \frac{L}{2}) = -k_1 \text{ με } B \neq 0 \text{ και } C-F \neq 0 \quad (11.42).$$

Μπορούμε να δούμε αμέσως ότι η (11.41) και η (11.42) δεν μπορούν να ισχύουν ταυτόχρονα, αφού διαιρώντας κατά μέλη βρίσκουμε:

$$\tan^2(k_2 \frac{L}{2}) = -1 \quad (11.43),$$

αποτέλεσμα που είναι αδύνατο. Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα, ότι ή η σχέση (11.41) θα ισχύει ή η (11.42). Ποτέ και οι δυο μαζί.

Έστω τώρα ότι ισχύει η (11.41). Τότε θα έχουμε ότι  $B=0$  και  $C=F$ . Από την (11.33) τότε, θα έχω ότι :

$$C = G = Ae^{k_1 \frac{L}{2}} \cos(k_2 \frac{L}{2}) \quad (11.44)$$

Άρα, η ολική κυματοσυνάρτηση θα είναι :

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{k_1 \frac{L}{2}} \cos(k_2 \frac{L}{2}) e^{k_1 x} & x < -\frac{L}{2} \\ A \cos(k_2 x) & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ Ae^{k_1 \frac{L}{2}} \cos(k_2 \frac{L}{2}) e^{-k_1 x} & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (11.45) \text{ άρτια κυματοσυνάρτηση.}$$

Αν τώρα ισχύει η (11.42) θα έχουμε ότι  $A=0$  και  $C+G=0$ . Τότε από την (11.33) θα πάρουμε ότι :

$$C = -F = Be^{k_1 \frac{L}{2}} \sin(k_2 \frac{L}{2}) \quad (11.46).$$

Η ολική κυματοσυνάρτηση σ' αυτή την περίπτωση θα είναι:

$$\Psi(x) = \begin{cases} Be^{k_1 \frac{L}{2}} \sin(k_2 \frac{L}{2}) e^{k_1 x} & x < -\frac{L}{2} \\ B \sin(k_2 x) & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ -Be^{k_1 \frac{L}{2}} \sin(k_2 \frac{L}{2}) e^{-k_1 x} & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (11.47) \text{ περιττή κυματοσυνάρτηση}$$

Από τις σχέσεις (11.45) και (11.47) παρατηρούμε ότι η πρώτη είναι άρτια κυματοσυνάρτηση ενώ η δεύτερη περιττή. Αυτό βέβαια ήταν αναμενόμενο, αφού θεωρώντας την αρχή του άξονα  $x$  στο μέσο του πηγαδιού, καταστήσαμε το πηγάδι συμμετρικό ως προς τον μετασχηματισμό  $x \rightarrow -x$ .

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας, υπολογίζονται από τις σχέσεις (11.41) και (11.42) αντικαθιστώντας τα  $k$  και λύνοντας ως προς  $E$ . Οι ιδιοτιμές αυτές, εξαρτώνται από το βάθος του πηγαδιού  $V_0$  και από το εύρος  $L$  και προσδιορίζονται αριθμητικά ή γραφικά (δείτε άσκηση 10.3).

### **\*Ασκήσεις**

**\*11.3** Χρησιμοποιώντας εξ αρχής την συμμετρία του τετραγωνικού πηγαδιού δυναμικού επιλύσατε λεπτομερώς την εξίσωση του Schrödinger και καθορίσετε τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές.

## **11.3 Δέσιμες και μη δέσιμες καταστάσεις**

### **11.3.1 Κλασική περιγραφή περατωμένης και μη περατωμένης κίνησης**

Στο προβλήματα του απειρόβαθου και του πεπερασμένου πηγαδιού δυναμικού, που εξετάσαμε, είδαμε ότι το σωματίο είναι εντοπισμένο σε μια πεπερασμένη περιοχή του χώρου και δεν μπορεί να βρεθεί μακριά στο άπειρο. Αυτού του είδους η κίνηση ονομάζεται **περατωμένη κίνηση**. Σε αντίθετη περίπτωση, όταν το σωματίο μπορεί να βρεθεί οσονδήποτε μακριά (στο άπειρο) έχουμε μια **μη περατωμένη κίνηση**. Στην περατωμένη κίνηση το σωματίο ουσιαστικά εκτελεί παλινδρομική κίνηση μεταξύ δύο ακρότατων σημείων και είναι εγκλωβισμένο σε μια περιορισμένη περιοχή του χώρου, τα όρια της οποίας καθορίζονται από την τιμή της ενέργειας  $E$  σε σχέση με την δυναμική ενέργεια. Είναι λοιπόν συνηθισμένη τακτική στη κλασική Φυσική, να χρησιμοποιούμε διαγράμματα δυναμικής ενέργειας<sup>5</sup>, στα οποία σχεδιάζεται και η σταθερή ολική ενέργεια  $E$ . Κατ' αυτόν τον τρόπο μπορούμε εύκολα να μελετήσουμε και να διερευνήσουμε ποιοτικά και ποσοτικά την μονοδιάστατη κίνηση ενός σώματος του οποίου η ενέργεια παραμένει σταθερή (διατηρείται). Μπορούμε να δούμε αυτή την διαδικασία με δύο παραδείγματα.

### **Παράδειγμα 11.1**

Ας θεωρήσουμε, για παράδειγμα, την κίνηση ενός υλικού σημείου μάζας  $m$ , το οποίο κινείται υπό την επίδραση μιας δύναμης  $F(x) = C(4x - x^2)$  (11.48),

όπου  $C$  μια θετική σταθερά. Θέλουμε να διερευνήσουμε υπό ποιες συνθήκες η κίνηση του υλικού σημείου θα είναι περατωμένη, καθώς επίσης να βρούμε τα αντίστοιχα όρια των περιοχών εντοπισμού του σωματίου.

Χάριν απλότητας θέτουμε  $C = m = 1$ .

### **Απάντηση.**

Η δυναμική ενέργεια βρίσκεται από τη σχέση:

$$V(x) = - \int F dx = -2x^2 + x^3/3 \quad (11.49).$$

Σχεδιάζουμε την δυναμική ενέργεια στο σχήμα 11.6 και υπολογίζουμε τα μέγιστα και τα ελάχιστα της (μηδενίζοντας την πρώτη παράγωγό της). Για τον σκοπό αυτό βρίσκουμε την πρώτη  $V'(x)$  ( και εν συνεχεία την δεύτερη,  $V''(x)$  ) παράγωγο:

$$V'(x) = 0 \text{ (δηλαδή } F = 0 \text{) απ' όπου έπεται } x_1 = 0, x_2 = 4.$$

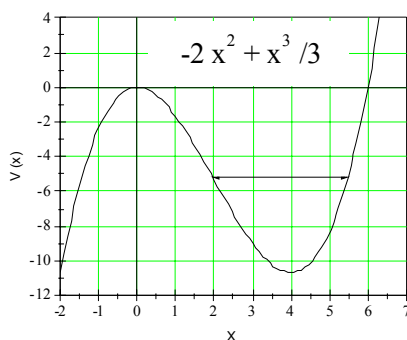
Έχουμε δηλαδή δύο ακρότατα, ένα στη θέση  $x=0$  και ένα στη θέση  $x=4$ . Όπως φαίνεται στο σχήμα 11.6, στη θέση  $x=0$  έχουμε ένα μέγιστο, ενώ στη θέση  $x=4$

<sup>5</sup> Από τα διαγράμματα δυναμικής ενέργειας μπορούν να κατασκευασθούν τα «διαγράμματα φάσεως»,

έχουμε ένα ελάχιστο. Αυτό βέβαια προκύπτει και αναλυτικά από το πρόσημο της δεύτερης παραγώγου στις θέσεις 0 και 4:

$$V''(x_1 = 0) = -4 < 0, \quad V(0) = 0 \text{ (μέγιστο θέση ασταθούς ισορροπίας).}$$

$$V''(x_2 = 4) = +4 > 0, \quad V(4) = -32/3 = -10.66 \text{ (ελάχιστο, θέση ευσταθούς ισορροπίας).}$$



**Σχήμα 11.6**

**Η δυναμική ενέργεια του παραδείγματος 11.1, σχέση (11.49)**

Η οριζόντια γραμμή αντιστοιχεί σε μια από τις ενέργειες, για τις οποίες έχουμε περατωμένη κίνηση. Τα όρια της κίνησης για αυτή την ενέργεια καθορίζονται από τα πλησιέστερα σημεία, στα οποία η οριζόντια ευθεία της ενέργειας «κόβει» (συναντάται με) την καμπύλη  $V(x)$ .

Περατωμένη κίνηση έχουμε όταν η ενέργεια  $E$  είναι μεγαλύτερη από το τοπικό ελάχιστο της δυναμικής ενέργειας ( $V=-32/3$ ) και μικρότερη από το τοπικό μέγιστο ( $V=0$ ). Εάν η δυναμική ενέργεια έχει περισσότερα από ένα τοπικά ελάχιστα ή /και τοπικά μέγιστα, θα έχουμε περατωμένη κίνηση όταν η ενέργεια είναι μεγαλύτερη από το μικρότερο τοπικό ελάχιστο (*minimum*) και μικρότερη από το μικρότερο τοπικό μέγιστο. Δηλαδή:

$$\min\{\text{τοπικών ελαχίστων του } V\} < E < \min\{\text{τοπικών μεγίστων του } V\} \text{ (11.50)}$$

**συνθήκη περατωμένης κίνησης**

Στην προκειμένη περίπτωση, η κίνηση είναι περατωμένη όταν:

$$-32/3 < E < 0 \text{ (11.51) } \underline{\text{συνθήκη περατωμένης κίνησης για το δυναμικό (11.49)}}$$

Η κινητική ενέργεια  $T$  είναι μέγιστη όταν η  $V$  είναι ελάχιστη (αφού  $T+V = E = \text{σταθερό}$ ). Να σημειώσουμε ότι για μια δοσμένη ενέργεια ανάμεσα στα όρια τα οποία καθορίζει η συνθήκη (11.51), η περιοχή εντοπισμού του σωματιδίου καθορίζεται από τα πλησιέστερα σημεία στα οποία η γραμμή της ενέργειας «κόβει» την καμπύλη της

τα οποία για περατωμένη κίνηση αντιστοιχούν σε κλειστές καμπύλες .



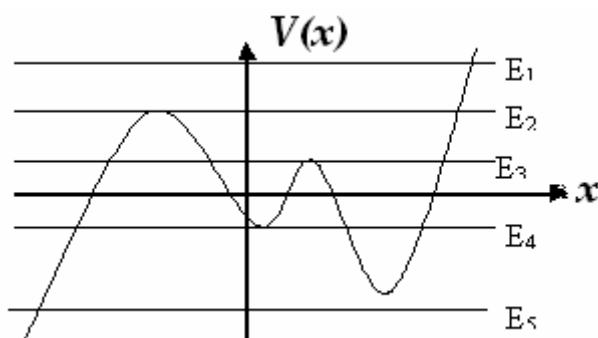
δυναμικής ενέργειας. Δηλαδή, στα σημεία τα οποία καθορίζονται από την σχέση:

$$V(x)=E \quad (11.52) .$$

Σ' αυτά τα σημεία η κινητική ενέργεια μηδενίζεται.

### Παράδειγμα 11.2

Υλικό σημείο κινείται στον άξονα  $x$  υπό την επίδραση του δυναμικού  $V$  του σχήματος 11.7 . Να μελετηθεί η κίνησή του όταν έχει ενέργεια  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$ .



Σχήμα 11.7

*Η δυναμική ενέργεια του παραδείγματος 11.2*

*Οι οριζόντιες γραμμές αντιστοιχούν σε κάθε μια από τις ενέργειες,  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  .*

### Απάντηση.

Σύμφωνα με την συζήτηση του προηγούμενου παραδείγματος, σχεδιάζουμε τα «οριακά σημεία» για κάθε μια από τις ενέργειες, στο σχήμα 11.8 και βλέπουμε ότι:

**α) Για  $E = E_5$  :**

Το υλικό σημείο μπορεί να “κυλίσει” μόνο από το προς τα αριστερά:  $x < x_Z$  .

(ημιπερατωμένη κίνηση)

**β)  $E = E_4$  :**

Ανάλογα με τις αρχικές συνθήκες το υλικό σημείο μπορεί:

1) να “κυλίσει” μόνο από το προς τα αριστερά για  $x < x_{A4}$ .

2) για  $x = x_{A3}$ , να μένει εκεί ακίνητο σε ευσταθή ισορροπία ( περατωμένη κίνηση).

3) να εκτελεί παλινδρομική κίνηση (να ταλαντώνεται) μεταξύ  $\Delta_1$  και  $\Delta_2$  για

$x_{A1} \leq x \leq x_{A2}$  ( περατωμένη κίνηση)

**γ) για  $E = E_3$  :**

1) για  $x < x_{Γ4}$  . ( ημιπερατωμένη κίνηση)

2) Επίσης μπορεί να κινείται παλινδρομικά μεταξύ  $\Gamma_1$  και  $\Gamma_3$  ( περατωμένη κίνηση).

3) Επειδή στο  $\Gamma_2$  είναι  $V(x_{\Gamma 2}) = E_3$ , άρα  $T(\Gamma_2) = 0$ , εκεί η ταχύτητα μηδενίζεται και το σημείο μένει σε ασταθή ισορροπία. Δεν είναι βέβαιον αν από το  $\Gamma_2$  θα πάει δεξιά ή

αριστερά.

**δ) για  $E = E_2$  :**

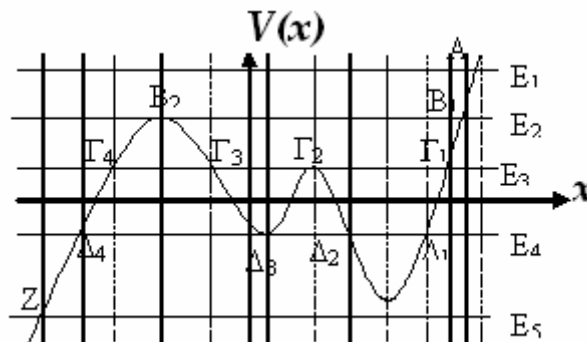
Το κινητό μπορεί να ταλαντωθεί μεταξύ  $B_1$  και  $B_2$  ( περατωμένη κίνηση)

Επειδή, ομοίως, το  $B_2$  είναι σημείο ασταθούς ισορροπίας δεν είναι βέβαιον αν από το  $B_2$  το κινητό θα πάει δεξιά ή αριστερά.

Η ενέργεια  $E_2$  είναι αρκετή για να προσπεράσει τον τοπικό φραγμό δυναμικού στο  $\Gamma_2$ . Εκεί η κινητική ενέργεια του κινητού είναι  $T(x_{\Gamma_2}) = E_2 - V(x_{\Gamma_2}) > 0$ .

**Ε) για  $E = E_1$  :**

Θα είναι  $x < x_A$ . Η ενέργεια  $E_1$  είναι αρκετή για να προσπεράσει το κινητό όλους τους φραγμούς δυναμικού, στο  $\Gamma_2$  και στο  $B_2$ , και να κινηθεί απεριόριστα αριστερά του Α.



**Σχήμα 11.8**

*Η δυναμική ενέργεια του παραδείγματος 11.2 (σχήμα 11.7) μαζί με τα «οριακά σημεία» για κάθε μια ενέργεια.*

### **11.3.2 Κβαντική περιγραφή της περατωμένης και μη περατωμένης κίνησης:**

#### **Στάσιμες ή Δέσιμες καταστάσεις και καταστάσεις σκέδασης**

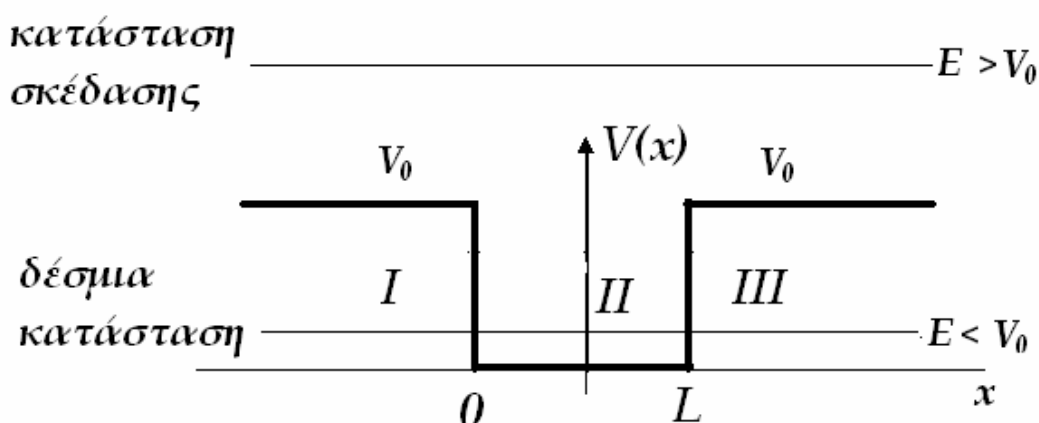
Από την μέχρι τώρα συζήτηση είναι ξεκάθαρο ότι ένα σωματίο σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού εκτελεί πάντα περατωμένη κίνηση, αφού η ενέργεια του σωματιδίου είναι πάντα μεγαλύτερη από την ελάχιστη δυναμική ενέργεια (0) και πάντα μικρότερη από την μέγιστη τιμή του δυναμικού ( $\infty$ ). Οι κβαντομηχανικές καταστάσεις του σωματιδίου, όπως αναφέραμε στο κεφάλαιο 10, αντιστοιχούν σε δέσιμες καταστάσεις. Αντίθετα, για ένα πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού, για να έχουμε περατωμένη κίνηση και κατ' επέκταση δέσιμες καταστάσεις, θα πρέπει οι ενέργειες

του σωματιδίου να είναι πάντα μικρότερες από την μέγιστη δυναμική ενέργεια,  $V_0$ , δηλαδή από το ύψος του δυναμικού:

$$E < V_0 \quad (11.53).$$

Για τις ενέργειες  $E_1, E_2, E_3$ , του σχήματος 11.4 (ή την ενέργεια  $E$  του σχήματος 11.2) η συνθήκη αυτή έχει προκαταβολικά επιλεγεί να ισχύει. Τι γίνεται όμως στην γενικότερη περίπτωση, καθώς οι ενέργειες συνεχίζουν να αυξάνουν;

Αν η ενέργεια  $E$  γίνει μεγαλύτερη από το ύψος του δυναμικού  $V_0$ , όπως στο πάνω μέρος του σχήματος 11.9, τότε οι λύσεις στις περιοχές I και III δεν είναι εκθετικά κύματα, αλλά συνηθισμένα αρμονικά (επίπεδα) κύματα. Ούτε όμως και η λύση στην περιοχή II είναι στάσιμο κύμα, αλλά αποτελείται, όπως θα δούμε παρακάτω από δύο τρέχοντα (ή οδεύοντα) κύματα προς αντίθετες διευθύνσεις και με διαφορετικά πλάτη. Πως χειρίζεται κανείς τέτοιες καταστάσεις;



**Σχήμα 11.9**

*Δέσμιες ( $E < V_0$ ) και μη δέσμιες ( $E > V_0$ ) καταστάσεις,*

*σε ένα πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού ύψους  $V_0$ .*

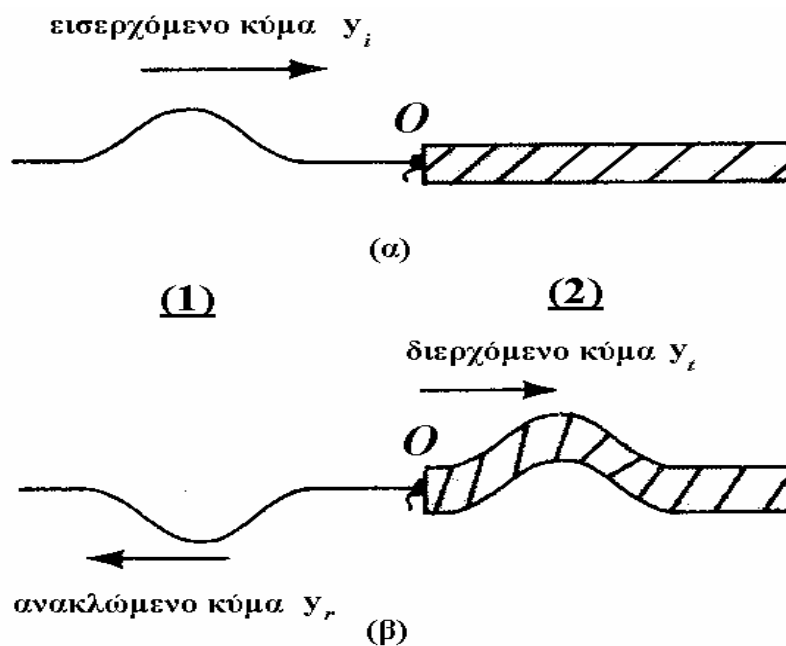
*Οι μη δέσμιες καταστάσεις ονομάζονται καταστάσεις σκέδασης.*

Η απάντηση προκύπτει εύλογα από το ανάλογο πρόβλημα της κλασικής Κυματικής.

Τι συμβαίνει όταν ένα τρέχον κύμα συναντά ένα εμπόδιο ή μια ασυνεχή ανομοιογένεια στο μέσο διάδοσης;

Δείτε για παράδειγμα το κεφάλαιο 8, του βιβλίου «Ταλαντώσεις και Κύματα» του συγγραφέα (εκδόσεις ΕΑΠ, 2004).

Ας δανειστούμε το παράδειγμα του σχήματος 11.10.



**Σχήμα 11.10**

*Δύο χορδές διαφορετικού πάχους σταθερά συνδεδεμένες μεταξύ τους στο σημείο O. Οι χορδές αποτελούν απλό μοντέλο μονοδιάστατης κυματικής διάδοσης σε δύο διαφορετικά μέσα (1) και (2) τα οποία χωρίζονται από μια διαχωριστική επιφάνεια στο O. (α) εισερχόμενο κύμα, (β) διερχόμενο και ανακλώμενο κύμα.*

Κατά την κλασσική Κυματική, ένα κύμα το οποίο διαδίδεται σε κάποιο μέσο (1) με δείκτη διάθλασης  $n_1$ , όταν συναντήσει μια διαχωριστική επιφάνεια στο O (στην θέση  $x=0$ ) με ένα άλλο μέσο (2) με δείκτη διάθλασης  $n_2$  ( $n_1 \neq n_2$ , στην περίπτωση του σχήματος 11.10  $n_1 < n_2$ ) θα υποστεί δύο διαφορετικές διαδικασίες: Ένα μέρος του αρχικού (προσπίπτοντος) κύματος θα ανακλαστεί και θα συνεχίσει την διάδοσή του στο αρχικό μέσο (1) με αντίθετη κατεύθυνση, ενώ το υπόλοιπο θα διέλθει και θα συνεχίσει την διάδοσή του στο μέσο 2 (μεταδιδόμενο κύμα).

Το εισερχόμενο (από αριστερά προς τα δεξιά), το ανακλώμενο και το διερχόμενο κύμα έχουν τις μορφές:

Εισερχόμενο κύμα:  $y_i = A_1 e^{i(k_1 x - \omega t)}$  (11.54)

Το κύμα έχει πλάτος  $A_1$  και ταξιδεύει προς τη θετική φορά του άξονα  $x$ , με ταχύτητα  $v_1$ . Στη θέση  $x = 0$ , σχηματίζεται και ένα ανακλώμενο κύμα  $y_r$  το οποίο ταξιδεύει στο μέσο (1) και έχει τη μορφή:

Ανακλώμενο κύμα:  $y_r = B_1 e^{i(-k_1 x - \omega t)}$  (11.55).

Το ανακλώμενο κύμα κατευθύνεται προς την αντίθετη διεύθυνση (προς την αρνητική πλευρά του άξονα του  $x$ ) προς το  $-\infty$ . Το μήκος κύματος του είναι το ίδιο με του εισερχομένου κύματος, αφού οι ιδιότητες του δεν έχουν αλλάξει εφόσον βρίσκεται στο ίδιο μέσο (1).

Τέλος, δεξιά του σημείου  $x=0$  στο μέσο (2) διαδίδεται το διερχόμενο κύμα, προς την θετική φορά του άξονα  $x$ . Το διερχόμενο κύμα θα έχει την μορφή:

Διερχόμενο κύμα:  $y_t = A_2 e^{i(k_2 x - \omega t)}$  (11.56).

Η ταχύτητά του διερχομένου κύματος, επειδή το μέσο έχει διαφορετικές ιδιότητες (διαφορετική πυκνότητα) είναι  $v_2$ , και επειδή το  $\eta$  συχνότητα  $\omega$  παραμένει η ίδια, ο κυματάρθμος του είναι  $k_2$ .

Αυτό που μας ενδιαφέρει σε τέτοια προβλήματα είναι το ποσοστό της ενέργειας (ή του πλάτους) που θα διέλθει και το ποσοστό της ενέργειας (ή του πλάτους) του αρχικού κύματος που θα ανακλαστεί. Τα ποσοστά αυτά ορίζονται αντίστοιχα από τον συντελεστή ανακλάσεως (ενέργειας)  $R$  και από τον συντελεστή διελύσεως  $T$ :

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 \quad (11.57) \quad \text{και} \quad T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 \quad (11.58).$$

**Οι συντελεστές αυτοί προσδιορίζονται από τις απαιτήσεις συνέχειας:**

**1<sup>ov</sup>) της κυματικής διαταραχής, δηλαδή της κυματοσυνάρτησης  $\psi(x,t)$ , ή  $\psi(x)$ , και 2<sup>ov</sup>) της χωρικής παραγώγου της  $\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}$  στη θέση  $O (x=0)$ .**

**Τα ίδια ισχύουν και για τις αντίστοιχες κβαντομηχανικές κυματοσυναρτήσεις.**

Στις καταστάσεις σκέδασης, όπως είδαμε, η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίο οπουδήποτε και οσοδήποτε μακριά στο άπειρο, έξω από το πηγάδι δεν είναι μηδενική αλλά πεπερασμένη σ' όλο τον χώρο. Σαν αποτέλεσμα το ολοκλήρωμα  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$  δεν συγκλίνει και η πιθανότητα θέσεως δεν μπορεί να «νορμαλισθεί» ώστε η πιθανότητα θέσεως σε όλο τον χώρο να είναι ίση με την μονάδα.

Για τις καταστάσεις σκέδασης, προφανώς δεν ισχύει η απαίτηση  $\psi(x)_{x \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0$  (10.77), που είδαμε στο κεφάλαιο 10. Σε αντίθεση με τις δέσμιες καταστάσεις, οι οποίες αντιστοιχούν σε στάσιμα κύματα, οι καταστάσεις σκέδασης αντιστοιχούν σε τρέχοντα κύματα (κυματοπακέτα, στην γενική περίπτωση).

**Στις καταστάσεις σκέδασης η ενέργεια του εισερχομένου κύματος, δεν είναι κβαντισμένη και το αντίστοιχο (ενεργειακό) φάσμα είναι συνεχές. Η κβάντωση της**

**ενέργειας (το διακριτό φάσμα) περιορίζεται στις δέσμιες καταστάσεις, σε πλήρη αναλογία με τις διακριτές συχνότητες των στασίμων κυμάτων (π.χ. των κυμάτων μια χορδής στερεωμένης σταθερά στα δύο άκρα της).**

Για παράδειγμα, μια δέσμη σωματιδίων ηλεκτρονίων η οποία έχει μια σταθερή ενέργεια  $E$  και οδεύει προς το σταθερό δυναμικό του σχήματος 11.9 (το οποίο μεταβάλλεται απότομα στις θέσεις  $x=0$  και  $x=L$ ) θα σκεδαστεί, θα ανακλαστεί και θα διαδοθεί. Το μέτρο του πόσο ισχυρή είναι η σκέδαση της δέσμης, δηλαδή ποιο είναι το ποσοστό των σωματιδίων που ανακλώνται και ποιο αυτών που μεταδίδονται, μας το δίνουν αντίστοιχα ο συντελεστής ανακλάσεως  $R$  (στις θέσεις  $x=0$  και  $x=L$ ) και ο συντελεστής διελύσεως  $T$  (στις θέσεις  $x=0$  και  $x=L$ ). Οι συντελεστές αυτοί περιγράφουν ουσιαστικά την πιθανότητα ανάκλασης και διέλευσης ενός σωματιδίου της αρχικής δέσμης. Η συνολική κυματοσυνάρτηση στην περιοχή I θα αποτελείται από ένα εισερχόμενο και ένα ανακλώμενο (στη θέση  $x=0$ ) της μορφής:

$$\psi_I(x) = \underbrace{A_0 e^{ik_1 x}}_{\text{προσπίπουσα-δέσμη}} + \underbrace{A e^{-ik_1 x}}_{\text{ανακλώμενη-δέσμη}} \quad (11.59),$$

$$\text{με } k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (11.60).$$

Όμοια, η κυματοσυνάρτηση στην περιοχή II θα αποτελείται από ένα διερχόμενο (προς τα δεξιά) και ένα ανακλώμενο (στη θέση  $x=L$ ) της μορφής:

$$\psi_{II}(x) = B e^{ik_2 x} + C e^{-ik_2 x} \quad (11.61), \quad \text{με } k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (11.62).$$

Τέλος στην περιοχή III θα υπάρχει μόνο ένα διερχόμενο κύμα της μορφής:

$$\psi_{III}(x) = D e^{ik_1 x} \quad (11.63).$$

Ο συντελεστής διελύσεως (το ποσοστό των σωματιδίων που συνολικά διέρχονται)

$$\text{θα δίνεται από την σχέση } T = \left| \frac{D}{A_0} \right|^2 \quad (11.64),$$

ενώ το ποσοστό των ανακλωμένων σωματιδίων θα είναι  $R = 1 - T$  (11.65).

Για να βρούμε αυτόν τον συντελεστή  $T$  θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τις συνθήκες συνεχείας (συναρμογής).

Από τις συνθήκες συναρμογής (συνεχείας) θα έχουμε:

$$\underline{\text{Στο } x = 0:} \quad A_0 + A = B + C \quad (11.66),$$

$$\text{και} \quad ik_1 A_0 - ik_1 A = ik_2 B - ik_2 C \quad (11.67).$$

**Στο  $x = L$ :**  $Be^{ik_2L} + Ce^{-ik_2L} = De^{ik_1L}$  (11.68),

και  $ik_2Be^{ik_2L} - ik_2Ce^{-ik_2L} = ik_1De^{ik_1L}$  (11.69).

Από αυτές τις συνθήκες μπορούμε να βρούμε (άσκηση 11.4) τον συντελεστή  $T$ :

$$T \approx \frac{4k_1^2}{k_2^2 \sin^2(k_2L)} \quad (11.70).$$

Δεν μας ενδιαφέρουν περισσότερες λεπτομέρειες για τους συντελεστές ανακλάσεως και διελεύσεως σ' αυτό το κεφάλαιο.

Σ' αυτό το κεφάλαιο, θα συγκεντρώσουμε την προσοχή μας στις δέσμιες καταστάσεις και δεν θα ασχοληθούμε περισσότερο με τις καταστάσεις σκέδασης.

**Το αντίστοιχο με το κλασικό κριτήριο (11.50) περατωμένης κίνησης, για τις δέσμιες καταστάσεις είναι η ενέργεια  $E$  να είναι μεγαλύτερη από την απολύτως ελάχιστη τιμή της δυναμικής ενέργειας και μικρότερη από την τιμή του δυναμικού στο άπειρο.**

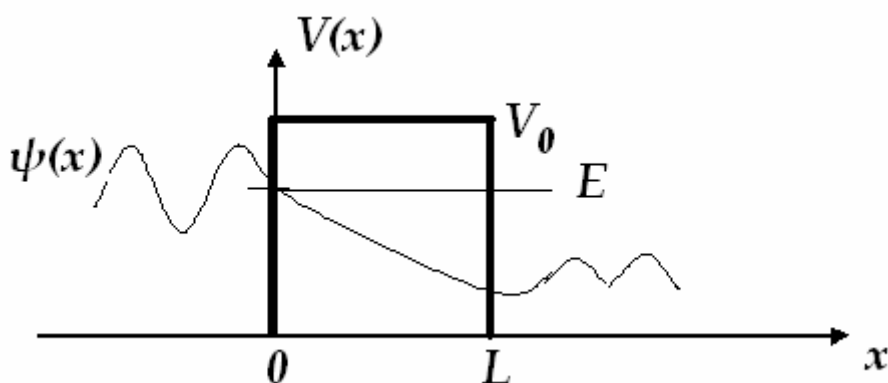
Η διαφορά από το αντίστοιχο κλασικό κριτήριο για περατωμένη κίνηση έγκειται στο φαινόμενο της κβαντομηχανικής διείδυσης του σωματιδίου σε κλασικά απαγορευμένες περιοχές. Εάν τα τοπικά μέγιστα και ελάχιστα είναι περιορισμένα σε έκταση και πεπερασμένα σε ύψος, το σωματίο έχει περιορισμένη, αλλά όχι μηδενική πιθανότητα να τα ξεπεράσει και να βρεθεί στην επόμενη περιοχή τοπικού ελαχίστου και εν συνεχεία να φτάσει μέχρι το άπειρο, εφόσον η ενέργεια του είναι μικρότερη από την αντίστοιχη δυναμική ενέργεια στο άπειρο:

$$V_{\min} \leq E < V(\pm\infty) \quad (11.71) \text{ κριτήριο δέσμιας κατάστασης.}$$

Για παράδειγμα, στο σχήμα 11.8, στην περίπτωση του σώματος με ενέργεια  $E_3$ , κβαντομηχανικά το σωματίο μπορεί να βρεθεί από το σημείο  $\Gamma_4$  στην περιοχή του σημείου  $\Gamma_3$  και στη συνέχεια στη περιοχή του σημείου  $\Gamma_2$  ( δεν μπορεί όμως να διαφύγει πολύ μακρύτερα του σημείου  $\Gamma_1$  και να φτάσει μέχρι το άπειρο, επειδή εκεί, στο άπειρο, η δυναμική ενέργεια απειρίζεται).

Αυτό φαίνεται πιο καλά στην απλούστερη περίπτωση του σχήματος 11.11, το οποίο δείχνει την κυματοσυνάρτηση κατά την σκέδαση ενός σωματιδίου σε ένα **φράγμα δυναμικού** ύψους  $V_0$ . Όπως βλέπουμε στο σχήμα 11.11, η κυματοσυνάρτηση διεισδύει στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή  $[0, L]$  και εξέρχεται στην περιοχή  $x > L$  με μικρότερο πλάτος (μικρότερη ένταση) αλλά με το ίδιο μήκος κύματος. Δηλαδή για μια δέσμη σωματιδίων η οποία προσπίπτει στο φράγμα με ενέργεια μικρότερη

από την απαιτούμενη ενέργεια  $V_0$  για να διέλθει, υπάρχει πάντα ένα ποσοστό σωματιδίων (το οποίο δίνεται από τον αντίστοιχο συντελεστή διελεύσεως) τα οποία διέρχονται. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται φαινόμενο σήραγγας, επειδή μοιάζει σαν «να σκάβουν» τα διερχόμενα σωματάρια της δέσμης κάποια σήραγγα στο «βουνό» του φράγματος. Θα μπορούσαμε επίσης να πούμε, αν δεν μας ενδιαφέρει να μιλήσουμε με κάποια επιστημονική αυστηρότητα, ότι το διερχόμενο σωματάριο δανείζεται σχεδόν στιγμιαία ένα ποσό ενέργειας μεγαλύτερο ή ίσο με  $V_0 - E$ , το οποίο μέσα στον απειροελάχιστο χρόνο, που του επιτρέπει η αρχή της αβεβαιότητας, το επιστρέφει, αφού προηγουμένως έχει βρεθεί στην άλλη άκρη, πίσω από το φράγμα. Εάν το εύρος  $L$  του φράγματος γίνει άπειρο, το σωματάριο δεν έχει καμία πιθανότητα να βρεθεί στο άπειρο. Ο συντελεστής διελεύσεως, τότε μηδενίζεται.



Σχήμα 11.11

*Δείδωση της κυματοσυνάρτησης μέσα σε φράγμα δυναμικού (φαινόμενο σήραγγας).*

### \*Ασκήσεις

\*11.4 Δείξτε την σχέση (11.70)

## 11.4 ποιοτικά κριτήρια

### 11.4.1 Εισαγωγή

Η εξίσωση Schrödinger σε πολύ λίγες περιπτώσεις λύνεται αναλυτικά και χωρίς απλουστευτικές (ή καμια φορά υπεραπλουστευτικές) προσεγγίσεις. Στις περισσότερες περιπτώσεις η λύση επιτυγχάνεται αριθμητικά στον ηλεκτρονικό υπολογιστή με ή χωρίς επιπλέον προσεγγίσεις. Μόνο με αριθμητικές λύσεις αντιμετωπίζονται τα περισσότερα από τα πιο ενδιαφέροντα προβλήματα για άτομα (πέραν του



υδρογόνου), μόρια, και γενικότερα συμπλέγματα αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων και άλλων σωματιδίων. Επειδή συνήθως ισχύει ότι «ουδέν καλόν αμιγές κακού», το τμήμα το οποίο πληρώνουμε, πέρα από τις όποιες προσεγγίσεις, είναι η «αδιαφάνεια των λύσεων», η οποία συνεπάγεται έλλειψη Φυσικής εποπτείας. Βλέποντας δηλαδή τη λύση με τη μορφή κάποιας καμπύλης ή πίνακα τιμών δεν είναι εύκολο να έχουμε πλήρη εποπτεία των διαφόρων εξαρτήσεων που κρύβονται μέσα στους αριθμούς. Σαν συνέπεια, αφενός μεν δυσκολεύεται ο έλεγχος για την ορθότητα των αποτελεσμάτων, αφετέρου καθίσταται προβληματική η διεξοδική διερεύνηση των λύσεων. Δηλαδή, δεν μπορούμε εύκολα να μαντέψουμε, χωρίς να κάνουμε πάλι όλες τις πράξεις από την αρχή, πως θα άλλαζε το αποτέλεσμα αν αλλάζαμε κάποια από τα δεδομένα, ή τι θα έπρεπε να αλλάξω στα δεδομένα ώστε να αλλάξει το αποτέλεσμα κατά συγκεκριμένο τρόπο. Αντίθετα στην περίπτωση που έχουμε «κλειστές» αναλυτικές λύσεις υπάρχει «πλήρης διαφάνεια». Για παράδειγμα, στο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού έχοντας την ενέργεια και την κυματοσυνάρτηση με την μορφή γνωστών μαθηματικών συναρτήσεων, μπορούμε αμέσως να προβλέψουμε πως θα αλλάξει, αν πούμε, η ενέργεια του σωματιδίου αν διπλασιάσουμε το εύρος του πηγαδιού<sup>6</sup> (θα γίνει το  $\frac{1}{4}$  της προηγούμενης τιμής). Είναι λοιπόν πολύ χρήσιμο, όπου και όταν μπορεί να γίνει, να έχουμε κάποια όσο το δυνατόν γενικά ποιοτικά (εάν υπάρχουν και ποσοτικά ακόμα καλύτερα) κριτήρια που θα μας επιτρέπουν να αυξήσουμε την εποπτεία και την διαφάνεια των λύσεων της εξίσωσης Schrödinger χωρίς πρόσθετους πολύπλοκους υπολογισμούς. Τέτοιου είδους ποιοτικές θεωρήσεις και διερευνήσεις μας βοηθούν να ξεχωρίζουμε εύκολα την Φυσική από τις μαθηματικές τεχνικές και τις αριθμητικές λεπτομέρειες του προβλήματος. Όπως είδαμε νωρίτερα, στα παραδείγματα 11.1 και 11.2, διερευνήσεις αυτού τύπου με βάση την διατήρηση της ενέργειας και άλλες γενικότερες απαιτήσεις (και άλλους νόμους διατηρήσεως) έχουν αναμφίβολα μεγάλη Φυσική αξία και στην Κλασική Φυσική

Τα ποιοτικά κριτήρια που θα παρουσιάσουμε εδώ αφορούν :

- α) την συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης (καμπυλότητα, ακρότατα, μηδενισμούς) όταν περιγράφει δέσμιες καταστάσεις ή καταστάσεις σκέδασης
- β) την συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης στις «κλασικά επιτρεπτές» και τις «κλασικά απαγορευμένες» περιοχές

---

<sup>6</sup> Αυτή ειδικά την πληροφορία μπορούμε να την πάρουμε και από την αρχή της αβεβαιότητας.

- γ) τη συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης σε μεγάλες αποστάσεις,  
 δ) την συμμετρία της κυματοσυνάρτησης (σε σχέση με την συμμετρία της δυναμικής ενέργειας).

Όλα αυτά τα χαρακτηριστικά (συμμετρία, καμπυλότητα, ακρότατα, μηδενισμοί) προφανώς εξετάζονται και διερευνώνται πάντα σε σχέση με το μέγεθος της αντίστοιχης ενέργειας  $E$ . Όπως είδαμε στο πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού, άλλη συμπεριφορά έχουν οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για  $E < V_0$  (δέσμιες καταστάσεις) και άλλη για  $E > V_0$  (καταστάσεις σκέδασης).

Πριν προχωρήσουμε στην ανάπτυξη και εφαρμογή των ποιοτικών κριτηρίων, που αναφέραμε θα κάνουμε μια μικρή παρένθεση για να δούμε με ένα απλό παράδειγμα την διαδικασία επίλυσης της εξίσωσης Schrödinger, αριθμητικά για μονοδιάστατα προβλήματα,

#### **11.4.2 Αριθμητικές λύσεις της εξίσωσης Schrödinger.**

Η αριθμητική επίλυση μιας δευτεροβάθμιας διαφορικής εξίσωσης στο κλειστό διάστημα  $[a, \beta]$ , επιτυγχάνεται με την «διακριτικοποίηση» της συνεχούς μεταβλητής  $x$  και την ουσιαστική μετατροπή της διαφορικής εξίσωσης σε μια εξίσωση πεπερασμένων διαφορών. Αφετηρία των υπολογισμών είναι η επιλογή ενός διαμερισμού του διαστήματος  $[a, \beta]$  σε ένα πολύ μεγάλο πλήθος  $N$  σημείων, σε

$$\text{απόσταση } \delta x = \frac{(\beta - a)}{(N - 1)} \quad (11.72),$$

το κάθε ένα από το επόμενο. Όταν το πλήθος  $N$  είναι πολύ μεγάλο, ώστε να θεωρηθεί ότι αντιπροσωπεύει το άπειρο, η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών σημείων τείνει στο μηδέν, ώστε η κατανομή των σημείων να μπορεί να θεωρηθεί πρακτικά συνεχής.

Η μεταβλητή  $x$  παίρνει διακριτές τιμές  $x_i$ , οι οποίες προσδιορίζονται από την σχέση:

$$x_i = a + (\delta x)i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N - 1 \quad (11.73)$$

και καλύπτουν όλο το κλειστό διάστημα  $[a, \beta]$ . Αν γνωρίζουμε (ή μπορούμε να μαντέψουμε) την τιμή της συνάρτησης  $\psi(x)$  και της παραγώγου της στο σημείο  $x = x_1 = a$ , τότε χρησιμοποιώντας την διαφορική εξίσωση, μπορούμε να υπολογίσουμε την τιμή της συνάρτησης στη θέση  $x = x_2 = a + \delta x$  και να επαναλάβουμε την διαδικασία συνεχώς μέχρι το σημείο  $x = \beta$ . Ισοδύναμα, μπορούμε να πούμε ότι εφόσον τα διαστήματα  $\delta x$  είναι απειροστά μικρά, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι μέσα σ' αυτά τα διαστήματα η δυναμική ενέργεια είναι σταθερή. Κατά συνέπεια, έχουμε πολλά

«μικρά πηγαδάκια δυναμικού», τα οποία γνωρίζουμε κατ' αρχήν πώς να τα επιλύσουμε. Προφανώς, αν εκτελούσαμε αυτή την διαδικασία μόνοι μας δεν θα τελειώναμε πρακτικά ποτέ. Όμως, για ένα σύγχρονο προσωπικό υπολογιστή, η διαδικασία αυτή μπορεί να ολοκληρωθεί, στις περισσότερες περιπτώσεις, σε κλάσματα του δευτερολέπτου.

Για την εξίσωση Schrödinger, την οποία για τους σκοπούς της αριθμητικής ανάλυσης

$$\text{γράφουμε στην μορφή } \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{-2m[E - V(x)]}{\hbar^2} \cdot \psi(x) \quad (11.74),$$

επιλέγουμε διάστημα  $(-\infty, +\infty)$  το οποίο προσεγγίζουμε με ένα κατάλληλα επιλεγμένο κλειστό διάστημα  $[\alpha, \beta]$ . Γνωρίζουμε την δυναμική ενέργεια και επιλέγουμε μια τιμή για την ενέργεια  $E$ . Για να ξεκινήσουμε χρειαζόμαστε την τιμή της κυματοσυνάρτησης  $\psi(x)$  και της παραγώγου της. Για δέσμιες καταστάσεις, όπως φαίνεται και στα σχήματα 11.3 και 11.4, η άγνωστη κυματοσυνάρτηση και η παράγωγός της μηδενίζονται. Στο σημείο  $x=a$ , θα έχουμε λοιπόν,

$$\psi(a) \equiv \psi(-\infty) = 0, \quad \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=a} = 0 \quad (11.75),$$

οπότε μπορούμε να ξεκινήσουμε, και να ολοκληρώσουμε την διαδικασία.

Τα αποτελέσματα μιας τέτοιας διαδικασίας περιγράφουμε συνοπτικά στο παράδειγμα 11.3, και το αντίστοιχο σχήμα 11.12.

### **Παράδειγμα 11.3**

Στο σχήμα 11.2 παρακάτω είναι πρόχειρα σχεδιασμένες τρεις λύσεις της διαφορικής

$$\text{εξίσωσης του Schrödinger } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \text{ οι οποίες προέκυψαν}$$

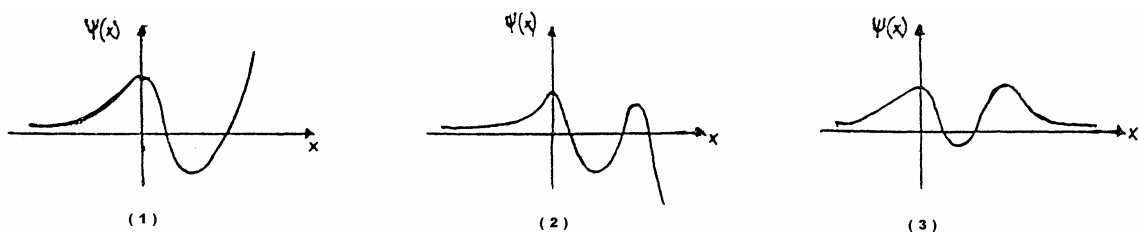
για ένα συγκεκριμένο δυναμικό από την αριθμητική διαδικασία, την οποία περιγράψαμε πιο πάνω. Οι τρεις λύσεις αντιστοιχούν σε τρεις διαφορετικές επιλογές  $E_1, E_2$  και  $E_3$  της παραμέτρου  $E$ .

### **Ερώτημα (τα)**

Πώς εξηγείται μια τόσο διαφορετική συμπεριφορά για το ίδιο πρόβλημα με την ίδια δυναμική ενέργεια;

Είναι όλες αυτές οι λύσεις της διαφορικής εξίσωσης αποδεκτές;

Τι σχέση έχουν οι ενέργειες  $E_1, E_2$  και  $E_3$  μεταξύ τους;



## Σχήμα 11.12

*Ακριβείς αριθμητικές λύσεις της διαφορικής εξίσωσης*

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \text{ για μια δοσμένη δυναμική ενέργεια } V(x).$$

### Απαντήσεις

Η μεθοδολογία που ακολουθήσαμε εξαρτάται, όπως φαίνεται από την επιλογή της ενέργειας  $E$ , την οποία επιλέξαμε τυχαία. Όμως, για δέσμιες καταστάσεις για τις οποίες ενδιαφερόμαστε, η ενέργεια δεν είναι εξ αρχής γνωστή αλλά προκύπτει από (το πρόβλημα ιδιοτιμών) την επίλυση της εξισώσεως Schrödinger με τις κατάλληλες οριακές συνθήκες. Στο  $-\infty$  θέσαμε την σωστή οριακή συνθήκη εκ κατασκευής, όμως στο  $+\infty$  δεν έχουμε καμία εξασφάλιση ότι η αντίστοιχη οριακή συνθήκη θα πληρούται. Όπως βλέπουμε για τις περιπτώσεις (1) και (2) η συνθήκη:

$$\psi(x) \rightarrow 0 \quad (11.76) \\ x \rightarrow +\infty$$

δεν ικανοποιείται και οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις δεν είναι αποδεκτές.

Αντίθετα, η κυματοσυνάρτηση και η αντίστοιχη ενέργεια της περιπτώσεως (3) είναι αποδεκτές και ορθές. Η πραγματική ενέργεια είναι λοιπόν η ενέργεια  $E=E_3$ .

Μπορεί ναδειχθεί ότι, εφόσον αναφερόμαστε στην ίδια κατάσταση (όπως φαίνεται από το πλήθος των κόμβων, το οποίο είναι το ίδιο και για τις τρεις συναρτήσεις του σχήματος 11.12) ότι η (δοκιμαστική) ενέργεια  $E_1$  είναι μεγαλύτερη από την αντίστοιχη πραγματική ενέργεια  $E=E_3$ . Αντίθετα, η (δοκιμαστική) ενέργεια  $E_2$  είναι μικρότερη από την αντίστοιχη πραγματική ενέργεια  $E=E_3$ . Αυτή η διαπίστωση, μας οδηγεί στη συμπλήρωση και διόρθωση του αλγόριθμου που ακολουθήσαμε για να βρούμε τις λύσεις. Μπορούμε να αρχίσουμε μαντεύοντας κάποια τιμή της ενέργειας και να βρούμε την αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση. Αν αυτή αποκλίνει προς το  $+\infty$  για μεγάλες τιμές της μεταβλητής  $x$ , δοκιμάζουμε κάποια μικρότερη τιμή της ενέργειας. Αν η κυματοσυνάρτηση αποκλίνει προς το  $-\infty$  για μεγάλες τιμές της μεταβλητής  $x$ , τότε δοκιμάζουμε κάποια μεγαλύτερη τιμή της ενέργειας. Επαναλαμβάνουμε την ίδια διαδικασία μέχρι να πετύχουμε την σωστή συμπεριφορά (11.76) και την αντίστοιχη σωστή ενέργεια.

Το παράδειγμα 11.3 δείχνει με έναν πολύ διαφωτιστικό τρόπο την ακριβή φύση του προβλήματος ιδιοτιμών που «συνοδεύει» την διαφορική εξίσωση Schrödinger.

### 11.4.3 Άλλα ποιοτικά κριτήρια.

Η εξίσωση Schrödinger στην μορφή  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{-2m[E - V(x)]}{\hbar^2} \cdot \psi(x)$  (11.74),

Είναι βολική για την περιγραφή της καμπυλότητας της κυματοσυνάρτησης, η οποία μπορεί να ορισθεί από την δεύτερη παράγωγο  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ .

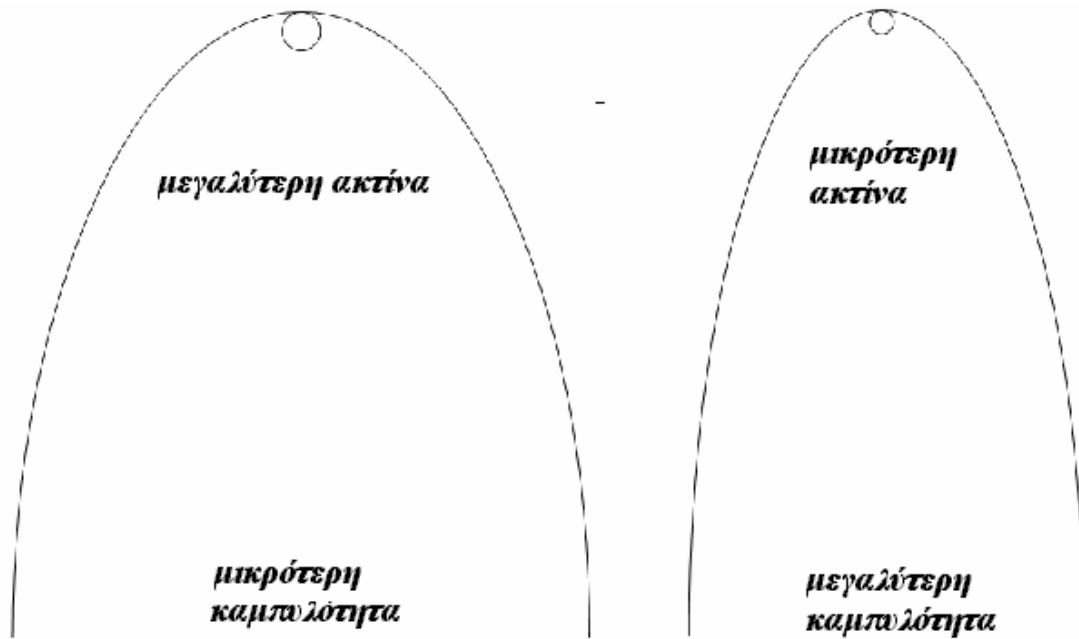
Βλέπουμε λοιπόν ότι η καμπυλότητα της κυματοσυνάρτησης εξαρτάται από την «κινητική ενέργεια»  $T = E - V(x)$

Να σημειώσουμε ότι ο ακριβής μαθηματικός ορισμός περιέχει και έναν όρο

$\sqrt{\frac{1}{1 + \left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2}}$  στον παρονομαστή, ο οποίος δεν θα μας απασχολήσει εδώ.

Για την ποιοτική περιγραφή της καμπυλότητας θα πρέπει να αναφέρουμε πως μεταξύ δύο καμπυλών, όπως εκείνες στο σχήμα 11.13, μεγαλύτερη καμπυλότητα σε κάποια περιοχή ενός σημείου θα έχει εκείνη η καμπύλη που θα είναι πιο απότομη και η κλίση της θα μεταβάλλεται με γοργότερο ρυθμό. Συνήθως αναφερόμαστε στην καμπυλότητα μιας καμπύλης γύρω από κάποιο τοπικό ελάχιστο ή τοπικό μέγιστο, οπότε το πρόσημο της καμπυλότητας, δηλαδή του  $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}$ , στο εν λόγω σημείο θα είναι θετικό ή αρνητικό ανάλογα με το εάν έχουμε μέγιστο ή ελάχιστο, αντίστοιχα.

Γεωμετρικά, για τον ορισμό της έννοιας της καμπυλότητας, παίρνουμε έναν εφαπτόμενο κύκλο στο ζητούμενο σημείο της καμπύλης (π.χ. στο μέγιστο) και ορίζουμε ως καμπυλότητα το αντίστροφο της ακτίνας  $\rho$  του κύκλου αυτού. Όσο πιο απότομη είναι μια καμπύλη, τόσο πιο μικρή ακτίνα έχει ο εφαπτόμενος κύκλος και τόσο πιο μεγάλη καμπυλότητα μας δίνει και ο όρος  $1/\rho$ . Το πρόσημο της καμπυλότητας καθορίζεται από την θέση του κέντρου του κύκλου σε σχέση με το σημείο επαφής του κύκλου και της καμπύλης. Αν το σημείο επαφής είναι προς την θετική φορά του άξονα  $\psi$  σε σχέση με το κέντρο του κύκλου, τότε η καμπυλότητα είναι θετική, όπως στο σχήμα 11.13. Σ' αυτή την περίπτωση η καμπύλη στρέφει τα κύλα προς τα κάτω. Αντίθετα, αν το σημείο επαφής είναι προς την αρνητική φορά του άξονα  $\psi$  σε σχέση με το κέντρο του κύκλου, τότε η καμπυλότητα είναι αρνητική. Σ' αυτή την περίπτωση η καμπύλη στρέφει τα κύλα προς τα πάνω.

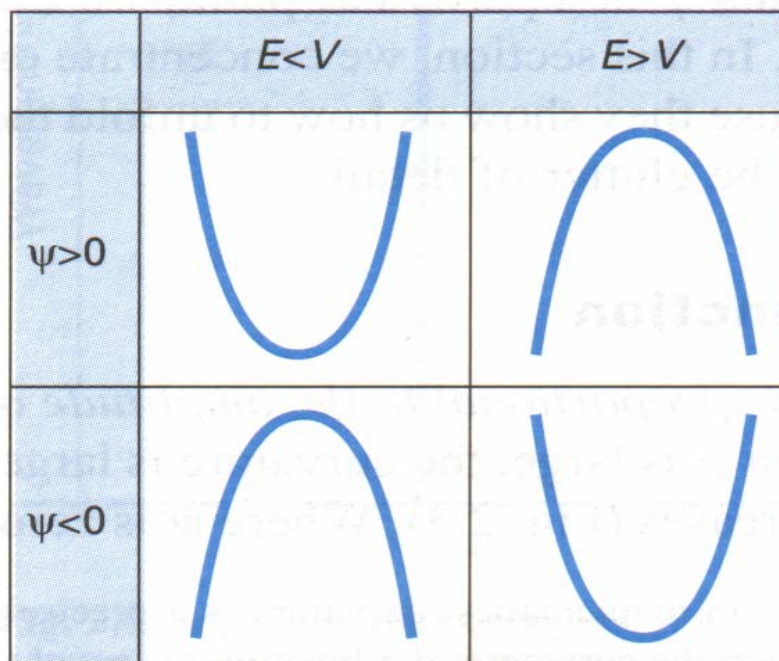


**Σχήμα 11.13**

*Γεωμετρικός ορισμός της καμπυλότητας.*

*Το μέγιστο της καμπύλης αριστερά παρουσιάζει μικρότερη καμπυλότητα από το αντίστοιχο μέγιστο της καμπύλης δεξιά. Και στις δύο περιπτώσεις η καμπυλότητα είναι θετική.*

Όπως βλέπουμε από την (11.74), η καμπυλότητα της κυματοσυνάρτησης και η κυματοσυνάρτηση έχουν αντίθετα πρόσημα στις κλασικά επιτρεπτές περιοχές, όπου η ποσότητα  $T = E - V(x)$  («κινητική ενέργεια») είναι θετική:  $E > V(x)$ . Ακριβώς το αντίθετο συμβαίνει για τις κλασικά απαγορευμένες περιοχές  $E < V(x)$ , όπως φαίνεται στο σχήμα 11.14. Δηλαδή:



**Σχήμα 11.13**

*Θετικές και αρνητικές συναρτήσεις και καμπυλότητες.*

**1) «Κλασικά επιτρεπτή περιοχή»**

$$\begin{array}{l}
 \Psi(x) > 0 \text{ και } \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} < 0 \\
 \text{ή} \\
 \Psi(x) < 0 \text{ και } \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} > 0
 \end{array}
 \Rightarrow \mathbf{T > 0} \Rightarrow \text{καμπυλότητα της } \Psi(x) \text{ προς τον άξονα } x$$

$\underline{\text{Η } \Psi(x) \text{ στρέφει τα κοίλα προς τα κάτω .}}$   
 $\underline{\text{Η } \Psi(x) \text{ στρέφει τα κοίλα προς τα πάνω .}}$

**2) « Κλασικά απαγορευμένη περιοχή »**

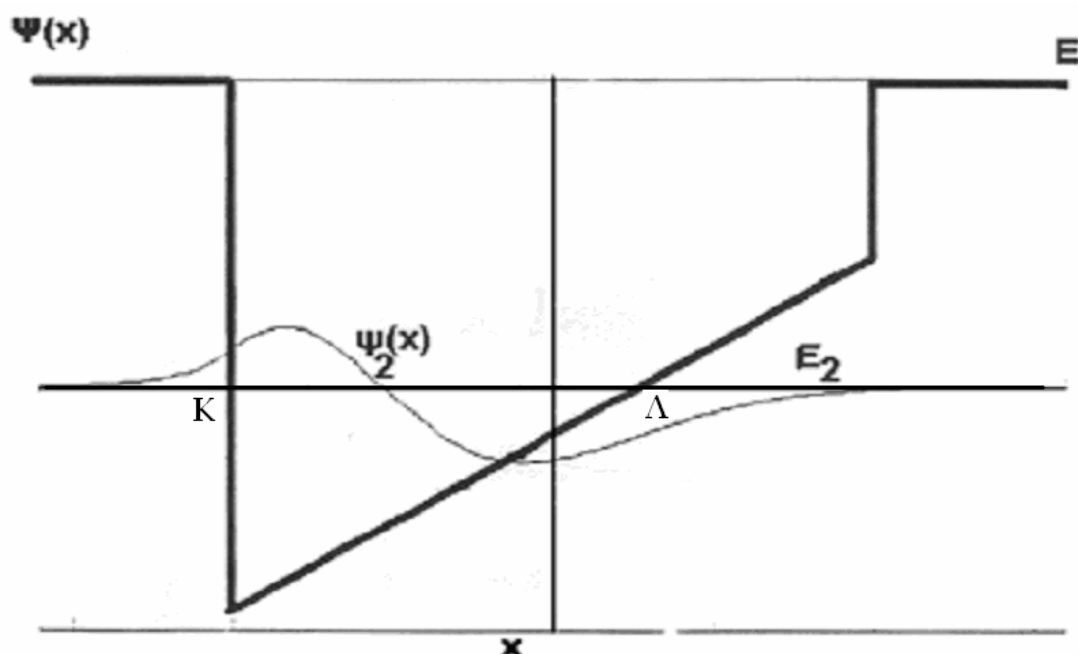
$$\begin{array}{l}
 \Psi(x) > 0 \text{ και } \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} > 0 \\
 \text{ή} \\
 \Psi(x) < 0 \text{ και } \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} < 0
 \end{array}
 \Rightarrow \mathbf{T < 0} \Rightarrow \text{καμπυλότητα μακριά απο τον άξονα } x$$

$\underline{\text{Η } \Psi(x) \text{ στρέφει τα κοίλα προς τα πάνω .}}$   
 $\underline{\text{Η } \Psi(x) \text{ στρέφει τα κοίλα προς τα κάτω .}}$

**3)  $\Psi(x) \neq 0$  και  $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = 0 \Rightarrow \mathbf{T = 0}$  .  $\underline{\text{Η } \Psi(x) \text{ παρουσιάζει «σημείο καμψής» .}}$**

Βλέπουμε ότι γνωρίζοντας την δυναμική ενέργεια μπορούμε να μαντέψουμε την συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης και αντίστροφα. Μεγάλη καμπυλότητα σημαίνει μεγάλη «κινητική ενέργεια» και αντίστροφα.

Για παράδειγμα, στο σχήμα 11.14 έχουμε τα αποτελέσματα της αριθμητικής λύσης για ένα γραμμικά μεταβαλλόμενο δυναμικό, όπως αυτό ενός ηλεκτρονίου σε ένα ομογενές σταθερό ηλεκτρικό πεδίο. Πως μπορούμε να κατανοήσουμε τα χαρακτηριστικά της συγκεκριμένης κυματοσυναρτήσεως;



**Σχήμα 11.14**

*Αριθμητική λύση της εξίσωσης Schrödinger για ένα γραμμικό δυναμικό.*

Σε κοινούς άξονες έχουν σχεδιαστεί το δυναμικό (με χοντρή γραμμή) και η κυματοσυνάρτηση (με λεπτότερη γραμμή). Τα σημεία K και Λ στα οποία η γραμμή της ενέργειας τέμνει την καμπύλη της δυναμικής ενέργειας είναι τα «σημεία καμπής», στα οποία ποσότητα  $T=E-V(x)$  μηδενίζεται. Σύμφωνα με την συνηθισμένη πρακτική, η οριζόντια γραμμή της σταθερής ενέργειας χρησιμεύει και ως άξονας x για την αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση.

Στην αριστερή πλευρά του σημείου καμπής K, όπου μηδενίζεται η «κινητική ενέργεια», έχουμε την κλασικά απαγορευμένη περιοχή, όπου η «κινητική ενέργεια»  $T=E-V(x)$  είναι μικρότερη του μηδενός. Σ' αυτή την περιοχή η καμπυλότητα στρέφει την κυματοσυνάρτηση μακριά από τον άξονα. Η περιοχή από το σημείο K έως το Λ είναι η κλασικά επιτρεπτή περιοχή ( $T>0$ ). Σ' αυτή την περιοχή βλέπουμε ότι, σε συμφωνία με ότι αναφέραμε πιο πάνω, η καμπυλότητα είναι «προς τον άξονα» και συνεχώς μικραίνει, καθώς μικραίνει συνεχώς η «κινητική ενέργεια»  $T=E-V(x)$ , μέχρι μηδενισμού στο Λ. Από το Λ και δεξιότερα η καμπυλότητα στρέφεται «μακριά από



τον άξονα» και προσεγγίζει ασυμπτωτικά την τιμή μηδέν για  $x \rightarrow \infty$ .

Βλέπουμε επίσης ότι η κυματοσυνάρτηση έχει ένα κόμβο. Κατά συνέπεια δεν είναι η θεμελιώδης κατάσταση (η οποία δεν έχει κόμβους) αλλά η κατάσταση με  $n=2$ .

Η σύνδεση με την τοπική «κινητική ενέργεια» μπορεί να γίνει πρακτικά ισοδύναμα και με την έννοια του «τοπικού μήκους κύματος», αντί της καμπυλότητας. Μπορούμε δηλαδή να θεωρήσουμε ότι σε κάθε μια μικρή περιοχή (όπου το δυναμικό μπορεί να θεωρηθεί πρακτικά σταθερό) η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση είναι τμήμα μιας ημιτονοειδούς καμπύλης με ένα τοπικό μήκος  $\lambda(x)$ , το οποίο εξαρτάται από την συγκεκριμένη θέση. Μπορούμε δηλαδή, να γράψουμε την κυματοσυνάρτηση στη μορφή: 
$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda(x)} + \phi\right) \quad (11.77).$$

Η κυματοσυνάρτηση (11.77) θα ήταν απλής ημιτονικής μορφής, αν το  $\lambda$  ήταν σταθερό, δηλαδή αν το δυναμικό ήταν σταθερό. Γράφοντας την (11.77) ουσιαστικά ταιριάζουμε σε κάθε μικρή περιοχή την πραγματική κυματοσυνάρτηση με μια τριγωνομετρική (ημίτονική) καμπύλη. Όπου, λοιπόν, το τοπικό μήκος κύματος είναι μεγάλο, η αντίστοιχη τοπική ορμή  $p = \frac{h}{\lambda(x)}$  θα είναι μικρή. Το ίδιο συμβαίνει και με

την αντίστοιχη «κινητική ενέργεια»:

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2(x)} \quad (11.78).$$

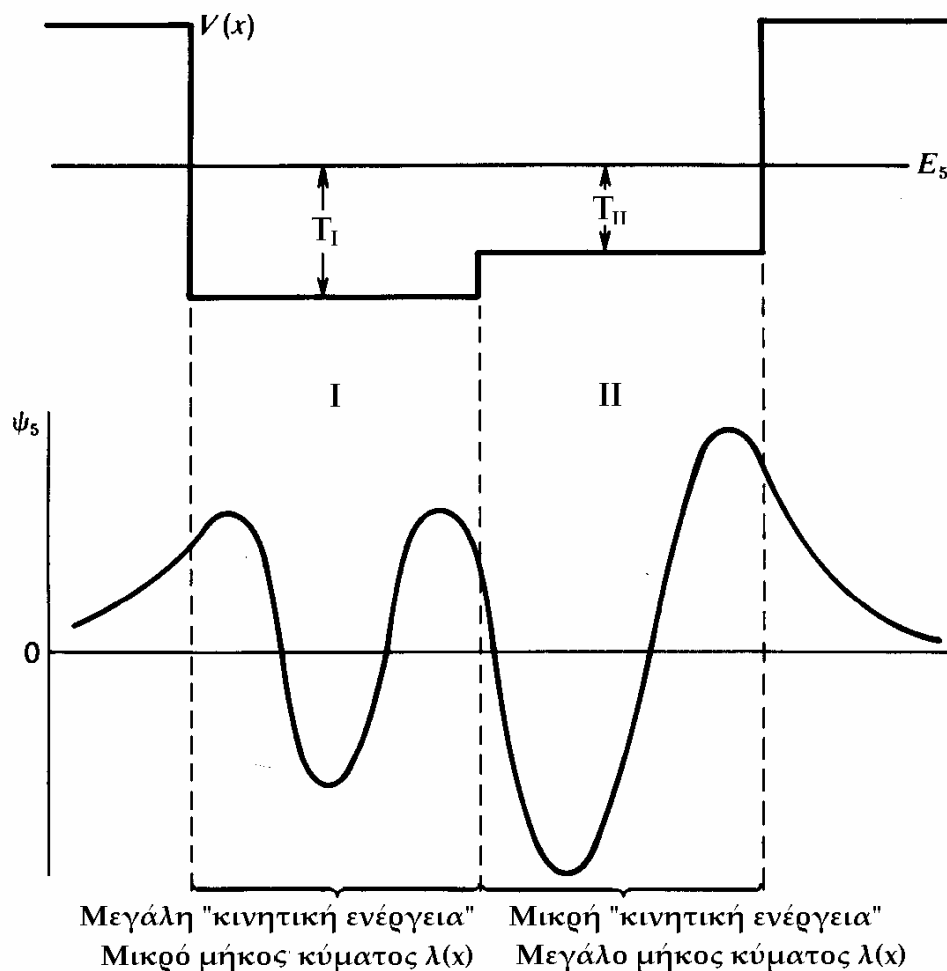
Μπορούμε λοιπόν αντί για μικρή και μεγάλη καμπυλότητα να μιλάμε για μεγάλο και μικρό τοπικό μήκος κύματος αντίστοιχα.

#### **Παράδειγμα 11.4**

Στο σχήμα 11.15 έχει σχεδιασθεί ένα διπλό πηγάδι δυναμικού. Χρησιμοποιώντας τα κριτήρια που έχουμε αναπτύξει μέχρι σχεδιάστε πρόχειρα την μορφή της κυματοσυνάρτησης για την πέμπτη κατάσταση (με  $n=5$ ).

#### **Απάντηση**

Η κυματοσυνάρτηση θα έχει 4 (5-1) κόμβους, μεγαλύτερο «μήκος κύματος», στην περιοχή μικρότερης «κινητικής ενέργειας», θα «πέφτει εκθετικά» στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή, και θα έχει μεγαλύτερο πλάτος (μεγαλύτερη πιθανότητα) στην περιοχή με την μικρότερη «κινητική ενέργεια», όπως φαίνεται στο κάτω μέρος του σχήματος 11.15



**Σχήμα 11.15**

*Η πέμπτη κατάσταση ενός διπλού πηγαδιού δυναμικού.*

#### 11.4.4 «κινητική ενέργεια» και κινητική ενέργεια

Μέχρι τώρα αναφερθήκαμε επανειλημμένα στην ποσότητα  $T$  ως «κινητική ενέργεια», υποδηλώνοντας ότι δεν είναι η πραγματική κινητική ενέργεια του σωματιδίου. Ας δούμε λοιπόν την διαφορά, κλείνοντας αυτό το κεφάλαιο.

Από την εξίσωση του Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \text{βρίσκουμε ότι η ποσότητα } T = E - V \text{ ,}$$

ισούται με :

$$T \equiv E - V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi(x)} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \quad (11.79) \quad \text{«Κινητική ενέργεια»}.$$

Η ποσότητα  $T$  παριστάνει την κινητική ενέργεια που θα είχε το σωματίο εάν

βρισκότανε στην θέση μεταξύ  $x$  και  $x+dx$ , κάτι που δεν μπορούμε να ξέρουμε, ούτε να μετρήσουμε, σύμφωνα με την Κβαντομηχανική. Έτσι, για να υπολογίσουμε την κινητική ενέργεια του σωματιδίου  $E_K$ , στην κατάσταση που περιγράφει η κυματοσυνάρτηση  $\Psi(x)$ , πρέπει να πολλαπλασιάσουμε την ποσότητα  $T$  επί την πιθανότητα  $|\Psi(x)|^2 dx$ , να βρεθεί το σωματίο σ' αυτή τη θέση (μεταξύ  $x$  και  $x+dx$ ) και να ολοκληρώσουμε σ' όλο τον χώρο από  $-\infty$  μέχρι  $+\infty$ . Δηλαδή:

$$E_K = \int_{-\infty}^{+\infty} (E - V(x)) |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{|\Psi(x)|^2}{\Psi(x)} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right] dx \quad (11.80),$$

ή τελικά, επειδή  $|\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x) \Psi(x)$ :

$$E_K = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^*(x) \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right] dx \quad (11.81) \quad \text{\textit{Κινητική ενέργεια.}}$$

Δεν θα σχολιάσουμε, προς το παρόν, αυτό το αποτέλεσμα σ' αυτή τη θέση.

### **Ασκήσεις**

**11.5** Σχεδιάστε πρόχειρα την θεμελιώδη κατάσταση για τα σωματίο στο δυναμικό του σχήματος 11.14

## Απαντήσεις στις Ασκήσεις

### 11.1

Η σταθερά  $A$  προκύπτει από την συνθήκη νορμαλισμού:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = 1, \text{ ή ισοδύναμα, περιορίζοντας τα όρια της ολοκλήρωσης στην μη}$$

$$\text{μηδενική περιοχή της } \psi: \int_0^L \psi^* \psi dx = 1 .$$

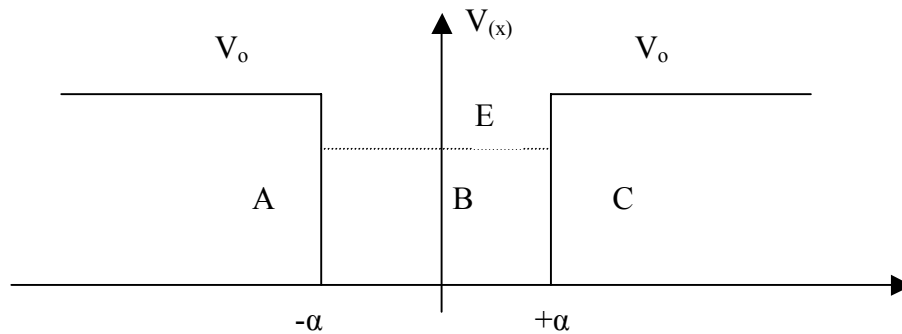
Υπολογίζοντας το ολοκλήρωμα, έχουμε διαδοχικά:

$$\begin{aligned} \int_0^L \psi^* \psi dx = 1 &\Rightarrow A^* A \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L} x\right)}{2} dx = 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow A^2 \int_0^L \frac{1}{2} dx - A^2 \int_0^L \frac{\cos\left(\frac{2n\pi}{L} x\right)}{2} dx = 1 \Rightarrow \frac{A^2 L}{2} - \frac{A^2 L}{4n\pi} \left[ \sin\left(\frac{2n\pi}{L} x\right) \right]_0^L = 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{A^2 L}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} . \end{aligned}$$

**11.2** Μπορούμε εύκολα να βρούμε την λύση και με μαθηματικό αλλά και με φυσικό τρόπο. Από πλευράς φυσικής γνωρίζουμε, ότι την θέση του μηδενός της δυναμικής ενέργειας (και του δυναμικού) μπορούμε να την ορίσουμε όπως εμείς θέλουμε, αρκεί να είμαστε συνεπής, αφού μας ενδιαφέρουν οι διαφορές του δυναμικού και όχι η απόλυτες τιμές του. Κατά συνέπεια, όσον αφορά την ενέργεια μπορώ να χρησιμοποιήσω την σχέση που βρήκαμε και να προσθέσω την τιμή  $V_0$ . Όσον αναφορά την μορφή της κυματοσυνάρτησης, αυτή θα μείνει αμετάβλητη, αφού το δυναμικό εξακολουθεί να είναι άπειρο έξω από το πηγάδι. Το ίδιο αποτέλεσμα μπορώ να πάρω και με ένα μαθηματικό μετασχηματισμό (μετατόπιση) του άξονα της ενέργειας, θέτοντας  $V' = V + V_0$ , κατ' αναλογία προς τον μετασχηματισμό (11.16). Και στις δύο περιπτώσεις η νέες ενέργειες θα δίνονται από τη σχέση:

$$E_n = V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

### \*11.3



Λόγω της προφανούς κατοπτρικής συμμετρίας, οι λύσεις θα είναι εναλλάξ άρτιες και περιττές. Και για πίο αποτελεσματική αξιοποίηση αυτής της ιδιότητας, βάλουμε την αρχή του άξονα στο μέσο του πηγαδιού.

Επειδή ενδιαφερόμαστε μόνο για τις δέσμιες καταστάσεις, η ενέργεια  $E$  του σωματιδίου είναι πιο χαμηλά από το χείλος του πηγαδιού ( $E < V_0$ ).

Η εξίσωση του Schrodinger σε κάθε μια από τις περιοχές A,B,C γράφεται:

$$A: y''_A = (v_0 - \varepsilon)y_A = \gamma^2 y_A$$

$$B: y''_B = -\varepsilon y_B = -\kappa^2 y_B$$

$$C: y''_C = (v_0 - \varepsilon)y_C = \gamma^2 y_C$$

$$\text{όπου } \varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}, v_0 = \frac{2mv_0}{\hbar^2} \text{ και } \varepsilon = \kappa^2, v_0 - \varepsilon = \gamma^2 (v_0 > \varepsilon)$$

Θα εξετάσουμε χωριστά τις άρτιες και τις περιττές λύσεις:

### I. Άρτιες λύσεις:

Εδώ η μορφή της κυματοσυνάρτησης σε κάθε μια από τις περιοχές A,B,C θα είναι:

$$y_A = Ae^{\gamma x} + A'e^{-\gamma x}$$

$$y_B = B \cos \kappa x + B' \sin \kappa x$$

$$y_C = Ce^{-\gamma x}$$

Στην περιοχή A, η γενική λύση περιέχει επίσης και το εκθετικό ( $e^{-\gamma x}$ ) το οποίο απειρίζεται στο όριο  $x \rightarrow -\infty$ . Γι' αυτό και μηδενίζουμε τη σταθερά που το συνοδεύει, ώστε η λύση μας να έχει στο άπειρο τη συμπεριφορά που αρμόζει σε μια δέσμια κατάσταση (να μηδενίζεται). Στην περιοχή B, η γενική λύση είναι ένας γραμμικός συνδυασμός ημιτόνου και συνημιτόνου, από το οποίο κρατήσαμε μόνο το συνημίτονο γιατί εδώ ενδιαφερόμαστε για τις άρτιες λύσεις (είναι γνωστό ότι το συνημίτονο είναι μια άρτια συνάρτηση ενώ το ημίτονο είναι περιττή). Επίσης, ο περιορισμός σε άρτιες λύσεις μας επέβαλλε να βάλουμε τη σταθερά C στη λύση  $y_C = Ce^{-\gamma x}$  ίση με A οπότε πράγματι οι λύσεις στις περιοχές A και C ικανοποιούν τη συνθήκη αρτιότητας  $y_A(x) = y_C(-x)$ .

Συνεπώς οι κυματοσυναρτήσεις παίρνουν τελικά τη μορφή:

$$y_A = Ae^{\gamma x}$$

$$y_B = B \cos \kappa x$$

$$y_C = Ae^{-\gamma x}$$

Λόγω συμμετρίας, οι συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου στα σημεία  $x=a$  και  $x=-a$  είναι ταυτόσημες οπότε αρκεί να θεωρήσουμε μόνο τη μια απ' αυτές (έστω εκείνη στο σημείο  $x=a$ ).

Θα έχουμε λοιπόν:

$$y_B(a) = y_C(a) \Rightarrow B \cos \kappa a = Ae^{-\gamma a} \quad (1)$$

$$y'_B(a) = y'_C(a) \Rightarrow -B\kappa \sin \kappa a = -\gamma Ae^{-\gamma a} \quad (2)$$

διαιρώντας κατά μέλη τις δυο σχέσεις παίρνουμε:

$$\tan \kappa a = \frac{\gamma}{\kappa} \quad (3)$$

Δεδομένου ότι τα  $\gamma$  και  $\kappa$  είναι συναρτήσεις της άγνωστης ενεργειακής ιδιοτιμής  $E$  η (3) είναι μια αλγεβρική εξίσωση που η λύση της θα μας δώσει τις ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στις άρτιες ιδιοσυναρτήσεις

$$\left. \begin{array}{l} \tan \kappa a = \frac{\gamma}{\kappa} \\ \varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}, v_o = \frac{2m v_o}{\hbar^2} \\ \varepsilon = \kappa^2, v_o - \varepsilon = \gamma^2 \end{array} \right\} \Rightarrow E = \frac{v_o}{\tan^2 \kappa a + 1}$$

## II. Περιττές λύσεις

Εδώ θα έχουμε:

$$y_A = Ae^{\gamma x}$$

$$y_B = B \sin \kappa x$$

$$y_C = -Ae^{-\gamma x}$$

Όπως στην περίπτωση των άρτιων λύσεων, έτσι και εδώ στις περιοχές A και C κρατήσαμε εκείνα τα εκθετικά που ικανοποιούν την ανάγκη της δέσμιας κατάστασης ενώ στην περιοχή B το ημίτονο, που είναι περιττή συνάρτηση. Επειδή όπως πρέπει να ισχύει η σχέση

$y_C(x) = -y_A(-x)$  διαλέξαμε  $C=-A$ . Πρέπει να σημειωθεί ότι για απλότητα συμβολίσαμε τις σταθερές A και B με τα ίδια γράμματα όπως και πριν αν και οι συγκεκριμένες

τους τιμές είναι διαφορετικές στις δυο περιπτώσεις. Οι οριακές συνθήκες στο  $x=a$  δίνουν τώρα:

$$y_B(a) = y_C(a) \Rightarrow B \sin \kappa a = -Ae^{-\gamma a} \quad (4)$$

$$y'_B(a) = y'_C(a) \Rightarrow B\kappa \cos \kappa a = \gamma A e^{-\gamma a} \quad (5)$$

Διαιρώντας και πάλι τις δυο σχέσεις κατά μέλη παίρνουμε:

$$\left. \begin{array}{l} \tan \kappa a = -\frac{\kappa}{\gamma} \\ \varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}, v_o = \frac{2mv_o}{\hbar^2} \\ \varepsilon = \kappa^2, v_o - \varepsilon = \gamma^2 \end{array} \right\} \Rightarrow E = \frac{v_o \tan^2 \kappa a}{\tan^2 \kappa a + 1}$$

### Υπολογισμός των ιδιοτιμών

Δεδομένου ότι:  $\kappa^2 = \varepsilon$ ,  $\gamma^2 = v_o - \varepsilon$ ,

κάθε μέλος των εξισώσεων (3) και (6) είναι μια συνάρτηση της άγνωστης ιδιοτιμής  $\varepsilon$ , οπότε οι αλγεβρικές εξισώσεις που πρέπει να λύσουμε έχουν τη γενική μορφή:

$$f_1(\varepsilon) = f_2(\varepsilon)$$

Συνεπώς δεν έχουμε παρά να σχεδιάσουμε τις καμπύλες  $f_1(\varepsilon)$  και  $f_2(\varepsilon)$  και να βρούμε τα σημεία τομής τους. Αυτή είναι η γενική ιδέα. Στην πράξη όμως μπορούμε να ακολουθήσουμε την εξής διαδικασία: Για παράδειγμα δεν είναι καθόλου απαραίτητο να χρησιμοποιήσουμε το ίδιο  $\varepsilon$  σαν μεταβλητή, εξ' ίσου καλά μπορούμε να πάρουμε σαν μεταβλητή μια συνάρτηση  $\xi = \xi(\varepsilon)$  διαλεγμένη κατάλληλα, ώστε να οδηγήσει σε όσο το δυνατόν απλούστερες καμπύλες, οι οποίες να επιτρέπουν μια πολύ καλύτερη εποπτεία και επί πλέον ακριβέστερο υπολογισμό των ιδιοτιμών. Επίσης είναι σκόπιμο η νέα μεταβλητή  $\xi$  να είναι αδιάστατη ώστε οι γραφικές παραστάσεις να μην εξαρτώνται από το σύστημα μονάδων που χρησιμοποιούμε.

Μια συνήθης εκλογή αδιάστατης μεταβλητής είναι η:

$$\xi = \alpha \kappa = \alpha \sqrt{\varepsilon}$$

ως προς την οποία η εξίσωση  $\tan \kappa a = \gamma/\kappa$  π.χ. παίρνει τη μορφή:

$$\tan \xi = \frac{1}{\xi} \sqrt{\lambda^2 - \xi^2}, \quad (\lambda = a\sqrt{v_o})$$

Εδώ θα χρησιμοποιήσουμε μια διαφορετική παραμέτρηση που οδηγεί σε σημαντικά απλούστερες καμπύλες και επί πλέον επιτρέπει τον ενιαίο χειρισμό τόσο της άρτιας, όσο και της περιττής περίπτωσης.

Δεδομένου ότι  $\kappa^2 = \varepsilon$  και  $\gamma^2 = v_o - \varepsilon$  θα έχουμε:

$$\kappa^2 + \gamma^2 = v_0.$$

Αυτή η σχέση μας λέει αμέσως ότι η πιο φυσιολογική παραμέτρηση του προβλήματος είναι η:

$$\kappa = \sqrt{v_0} \cos \vartheta, \quad \gamma = \sqrt{v_0} \sin \vartheta$$

Επειδή τα  $\kappa$  και  $\gamma$  είναι θετικά, η γωνία  $\theta$  περιορίζεται στο διάστημα  $0 \leq \theta \leq \pi/2$

Συναρτήσει του  $\theta$ , η άγνωστη ιδιοτιμή  $\varepsilon$  ή  $E$  γράφεται:

$$\varepsilon = v_0 \cos^2 \vartheta \quad \text{ή} \quad E = v_0 \cos^2 \vartheta$$

Επομένως, δεν έχουμε παρά να βρούμε τις επιτρεπόμενες τιμές της παραμέτρου  $\theta$ .

Οι εξισώσεις

$$\tan \kappa a = \frac{\gamma}{\kappa} \quad \text{και} \quad \tan \kappa a = -\frac{\kappa}{\gamma}$$

παίρνουν τη μορφή:

$$\tan \kappa a = \frac{\gamma}{\kappa} = \tan \theta \quad (7)$$

$$\tan \kappa a = -\frac{\kappa}{\gamma} = \tan\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) \quad (8)$$

Από την (7) παίρνουμε:  $\kappa a = \theta + n_+ \pi \equiv \theta + 2n_+ \frac{\pi}{2}$ ,  $n_+ = 0, 1, \dots$  (9)

ενώ από την (8)

$$\kappa a = \theta - \frac{\pi}{2} = n_- \pi \equiv \theta + (2n_- - 1) \frac{\pi}{2}, \quad n_- = 1, 2, \dots \quad (10)$$

Οι δείκτες  $\pm$  στους ακέραιους αριθμούς  $n_+$ ,  $n_-$  είναι για να μας θυμίζουν ότι ο πρώτος αφορά τις άρτιες λύσεις και ο δεύτερος τις περιττές. Δεδομένου ότι το πρώτο μέλος της (10) πρέπει να είναι θετικό, για κάθε  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ , το  $n_-$  πρέπει να αρχίζει από την τιμή  $n_- = 1$ . Παρατηρούμε ότι οι (9) και (10) μπορούν να συγχωνευτούν στην ενιαία εξίσωση

$$\kappa a = \theta + n \frac{\pi}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

όπου οι άρτιες τιμές του  $n$  αντιστοιχούν στις άρτιες λύσεις και οι περιττές στις περιττές.

Γράφοντας  $\kappa a = a\sqrt{v_0} \cos \vartheta = \lambda \cos \vartheta$  ( $\lambda = a\sqrt{v_0}$ ) η (11) παίρνει τη μορφή

$$\lambda \cos \vartheta = \theta + n \frac{\pi}{2}$$

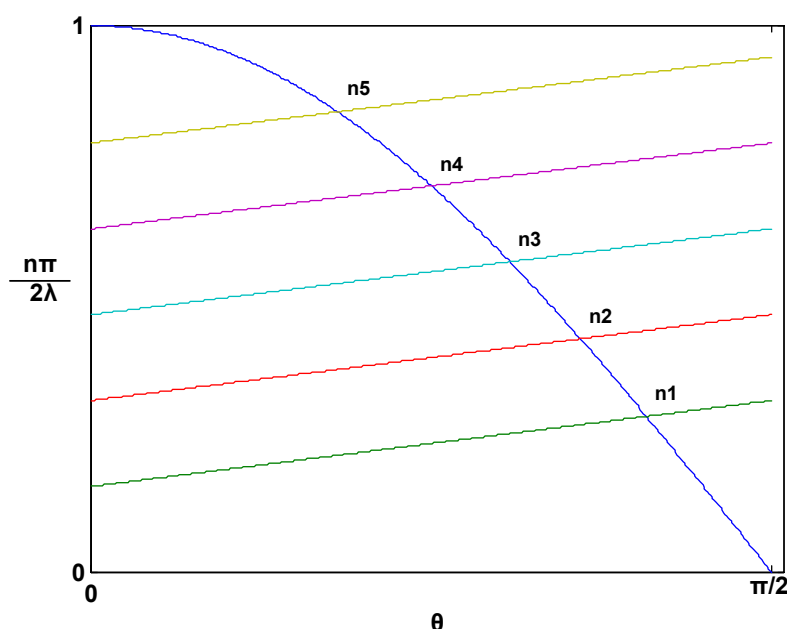


ή ισοδύναμα τη μορφή

$$\cos \vartheta = \frac{1}{\lambda} \theta + n \frac{\pi}{2\lambda} \quad (12)$$

Η σχέση αυτή επιδέχεται απλούστατη γραφική λύση, γιατί στο πρώτο μέλος έχουμε την καμπύλη του συνημιτόνου στο διάστημα  $[0, \pi/2]$ , ενώ το δεύτερο μέλος παριστάνεται από μια οικογένεια παράλληλων ευθειών κλίσης  $\lambda^{-1} = (a\sqrt{v_o})^{-1}$  που κόβουν τον κατακόρυφο άξονα στα ακέραια πολλαπλάσια της ποσότητας  $\pi/2\lambda$ . Τα σημεία τομής δίνουν τις επιτρεπόμενες τιμές  $\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n$  του  $\theta$  οπότε οι αντίστοιχες ιδιοτιμές θα είναι:

$$E_n = v_o \cos^2 \vartheta_n$$

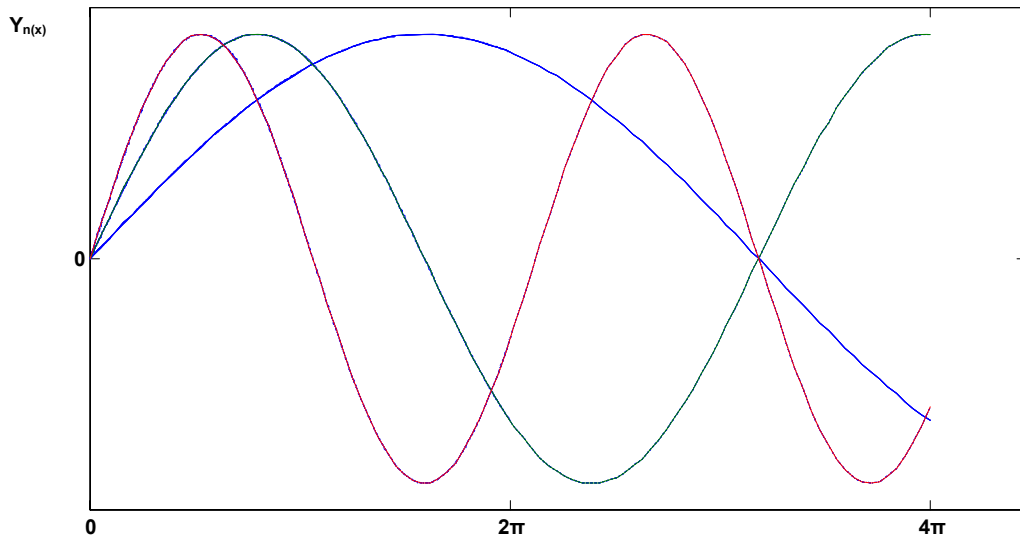


Φτιάχνοντας την γραφική παράσταση, ο αριθμός  $N$  των δέσμιων καταστάσεων είναι πεπερασμένος και καθορίζεται από το πόσες φορές χωρά στη μονάδα ο αριθμός  $\pi/2\lambda$ .

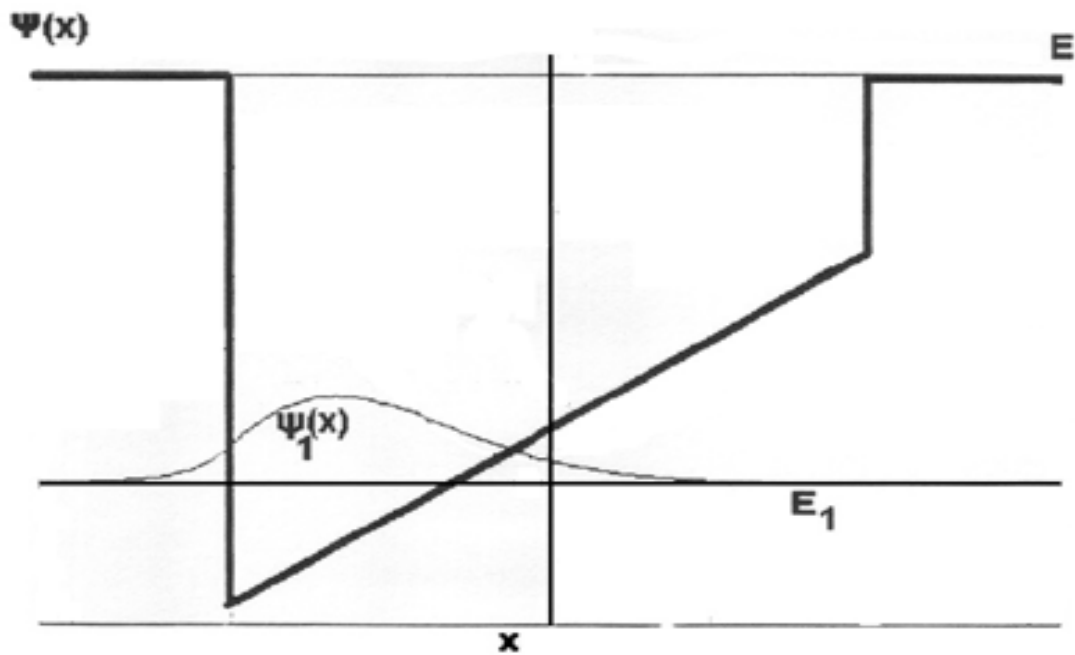
Συγκεκριμένα θα είναι:

$$N = \left[ \frac{2\lambda}{\pi} \right] + 1$$

όπου το  $[2\lambda/\pi]$  δηλώνει το ακέραιο μέρος του αριθμού  $2\lambda/\pi$



**11.5** Η θεμελιώδης κατάσταση θα έχει την μορφή (κανένας κόμβος).



## Κεφάλαιο 12. Η Εξίσωση Schrödinger σε δύο και τρεις διαστάσεις

### Εισαγωγικές Παρατηρήσεις

Σ' αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με την εξίσωση του Schrödinger και την επίλυσή της σε χαρακτηριστικά διδιάστατα και τρισδιάστατα προβλήματα. Σαν βασικό πρότυπο θα χρησιμοποιήσουμε το σωματίο σε κιβώτιο δυναμικού, που εξετάσαμε νωρίτερα στην 1- διάσταση και θα διερευνήσουμε την επέκτασή του σε 2 και 3 διαστάσεις.

Ένας από τους **στόχους** μας είναι να οδηγηθούμε σταδιακά, προς το τέλος του κεφαλαίου, στην μελέτη του ατόμου του υδρογόνου χρησιμοποιώντας τα συμπεράσματα και την πείρα που αποκτήσαμε στο μεταξύ.

Ένας εξ ίσου, ή ακόμα πιο, σημαντικός στόχος μας είναι επιχειρήσουμε να αναδείξουμε την χρησιμότητα, την σημασία, καθώς και την σύνδεση των εννοιών :

του κβαντικού αριθμού, του «καλού κβαντικού αριθμού», της συμμετρίας και του εκφυλισμού.

### Προσδοκώμενα αποτελέσματα

Όταν θα έχετε ολοκληρώσει τη μελέτη αυτού του κεφαλαίου, θα μπορείτε να :

- **Γράψετε και να επιλύσετε την εξίσωση του Schrödinger για ένα τετραγωνικό διδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού.**
- **Γράψετε και να επιλύσετε την εξίσωση του Schrödinger για ένα τρισδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού.**
- **Δώσετε τον ορισμό της έννοιας του εκφυλισμού μαζί με ένα τουλάχιστον παράδειγμα.**
- **Περιγράψετε τα αίτια για το φαινόμενο του εκφυλισμού καθώς και τρόπους για την άρση του.**
- **Περιγράψετε την έννοια του «καλού κβαντικού αριθμού» μαζί με ένα τουλάχιστον παράδειγμα.**
- **Συνδέσετε την έννοια του «καλού κβαντικού αριθμού» με αντίστοιχες συμμετρίες του φυσικού συστήματος.**

- Συνδέσετε την έννοια του «καλού κβαντικού αριθμού» με αντίστοιχους νόμους διατήρησης.

### Έννοιες Κλειδιά

- Συμμετρία
- Εκφυλισμός
- Καλός Κβαντικός αριθμός.
- Στροφορμή
- Νόμοι Διατήρησης
- Χωρισμός μεταβλητών
- Πολικές συντεταγμένες

## 12.1 Η εξίσωση Shrödinger σε δύο διαστάσεις.

### 12.1.1 Εισαγωγή

Μέχρι τώρα, τα παραδείγματα και η συζήτηση που κάναμε για την κυματοσυνάρτηση και το νόημα της, είχε περιοριστεί σε απλά μονοδιάστατα προβλήματα, όπου είχαμε μια μόνο μεταβλητή, την  $x$ . Στην πραγματικότητα βέβαια, όπως όλοι γνωρίζουμε, ο χώρος είναι τρισδιάστατος, οπότε η κυματοσυνάρτηση και τα αντίστοιχα δυναμικά, έχουν τουλάχιστον τρεις συντεταγμένες του χώρου, εφόσον μιλάμε για ένα σωματίο. Προτού όμως πάμε στην τρισδιάστατη περίπτωση, η οποία είναι πολύπλοκη και ίσως να χάσουμε την εποπτεία, ας δούμε μερικά παραδείγματα στις δυο διαστάσεις. Μετά βέβαια από την συζήτηση στις δυο διαστάσεις, η τρισδιάστατη περίπτωση, θα είναι πολύ πιο εύκολη. Χωρίς πολύ δυσκολία μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση Shrödinger σε δύο διαστάσεις :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \Psi(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y, t)}{\partial y^2} \right] + V(x, y) \Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t} \quad (12.1),$$

απ' όπου κατά γνωστά, εφόσον το δυναμικό  $V(x, y)$  δεν εξαρτάται από τον χρόνο  $t$ , παίρνουμε ( με την μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών ) την αντίστοιχη χρονοανεξάρτητη εξίσωση:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \Psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y)}{\partial y^2} \right] + V(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (12.2)$$

Η κυματοσυνάρτηση  $\Psi(x, y)$  συνδέεται, όπως και στην μονοδιάστατη περίπτωση, με

την πιθανότητα  $P_{x,x+dx, y,y+dy}$  να βρεθεί το σωματίο σε μια περιοχή του (διδιάστατου) χώρου με  $x$  συνιστώσα μεταξύ  $x$  και  $x+dx$ , και  $y$  συνιστώσα στην περιοχή μεταξύ  $y$  και  $y+dy$  με την σχέση:

$$P_{x,x+dx, y,y+dy} = |\Psi(x, y)|^2 dx dy \quad (12.3) \text{ πιθανότητα θέσης στις δύο διαστάσεις.}$$

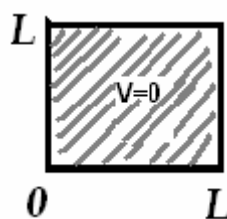
Οι αντίστοιχες καταστάσεις, όπως θα δούμε παρακάτω, προσδιορίζονται από δύο κβαντικούς αριθμούς  $|n_x, n_y\rangle$ .

Ας θεωρήσουμε σαν παράδειγμα ένα απειρόβαθο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού, το οποίο είναι το απλούστερο πρόβλημα και μπορούμε να το λύσουμε εύκολα στις δυο διαστάσεις.

### 12.1.2 Το διδιάστατο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού απείρου βάθους

Το απειρόβαθο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού, το οποίο φαίνεται παραστατικά στο σχήμα 12.1, αποτελεί απλή και αυτονόητη γενίκευση του αντίστοιχου μονοδιάστατου προβλήματος και ορίζεται από την απαίτηση το δυναμικό να είναι μηδέν στην γραμμοσκιασμένη περιοχή του σχήματος 12.1 (όταν δηλαδή οι μεταβλητές  $x$  και  $y$  βρίσκονται στην περιοχή  $0 < x, y < L$ ), ενώ σε όλες τις άλλες περιπτώσεις είναι άπειρο.

$$\text{Δηλαδή: } V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{όταν } 0 \leq x \leq L \text{ και } 0 \leq y \leq L \\ \infty & \text{όταν } x,y < 0 \text{ ή } x > L, y > L \end{cases} \quad (12.4).$$



**Σχήμα 12.1**

*Παράσταση του τετραγωνικού πηγαδιού δυναμικού στο επίπεδο  $xy$ .*

*Μέσα στην γραμμοσκιασμένη περιοχή το δυναμικό είναι μηδέν, ενώ έξω από την περιοχή αυτή το δυναμικό απειρίζεται.*

Μπορούμε επίσης να γράψουμε το δυναμικό στην «χωριζόμενη» μορφή:

$$V_x(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & x < 0, x > L \end{cases} \quad (12.5) \quad \text{και} \quad V_y(y) = \begin{cases} 0 & 0 \leq y \leq L \\ \infty & y < 0, y > L \end{cases} \quad (12.6).$$

Στο εσωτερικό του πηγαδιού η (12.2) γράφεται:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x,y)}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi(x,y) = 0 \quad (12.7).$$

Για την επίλυση της (12.7) αναζητούμε «χωριζόμενες» λύσεις της μορφής:

$$\Psi(x,y) = X(x)Y(y) \quad (12.8).$$

Εισάγοντας την έκφραση της κυματοσυνάρτησης (12.8) στην (12.7) και διαιρώντας κάθε όρο με την  $\Psi(x,y)$ , υποθέτοντας ότι είναι διάφορος του μηδενός, παίρνουμε:

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + 2m \frac{E}{\hbar^2} = 0 \quad (12.9),$$

$$\text{ή} \quad \frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = -\frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} - 2m \frac{E}{\hbar^2} \quad (12.10).$$

Σε αυτήν την μορφή, οι ανεξάρτητες μεταβλητές εμφανίζονται σε συγκεκριμένους μόνο όρους της εξίσωσης ή σε διαφορετικά μέλη της εξίσωσης. ο πρώτος όρος στο αριστερό μέλος εξαρτάται μόνο από το  $x$  και ο δεύτερος στο δεξιό μέλος μόνο από το  $y$ . Για να ικανοποιείται αυτή η εξίσωση παντού μέσα στο τετραγωνικό απειρόβαθο πηγάδι, καθένας από τους όρους αυτούς, πρέπει να ισούται με κάποια σταθερά και το άθροισμα των σταθερών, περιλαμβανομένου και του όρου  $2m \frac{E}{\hbar^2}$ , να ισούται με

μηδέν. Δηλαδή:

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = -k_x^2 \quad (12.11) \quad \text{και} \quad \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} = -k_y^2 \quad (12.12),$$

$$\text{με:} \quad k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}, \quad k_y^2 = \frac{2mE_y}{\hbar^2} \quad (12.13),$$

$$\text{και} \quad k_x^2 + k_y^2 = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (12.14).$$

Οι σταθερές  $E_x$  και  $E_y$ , σε προφανή συμβολισμό, έχουν διαστάσεις ενέργειας για τα αντίστοιχα μονοδιάστατα προβλήματα και το άθροισμα τους ισούται με την ολική ενέργεια  $E$ :  $E_x + E_y = E$  (12.15).

Γράφουμε τώρα την (11.70) στη μορφή:

$$\frac{d^2 X(x)}{dx^2} + k_x^2 X(x) = 0, \text{ απ' όπου έπεται η γενική λύση:}$$

$$X(x) = A \cos(k_x x) + B \sin(k_x x) \quad (12.16)$$

Εφαρμόζοντας, όπως και στην αντίστοιχη μονοδιάστατη περίπτωση τις οριακές

συνθήκες βρίσκουμε α)  $A=0$ , οπότε  $X(x) = B\sin(k_x x)$  (12.17),

και β)  $X(L) = 0 \Rightarrow B\sin(k_x L) = 0 \Rightarrow k_x L = n_x \pi \Rightarrow k_x = \frac{n_x \pi}{L}$ ,  $n_x=1,2,\dots$  (12.18).

Όμοια από την (12.12) βρίσκουμε:  $k_y = \frac{n_y \pi}{L}$   $n_y=1,2,\dots$  (12.19).

Κατά συνέπεια από τις (12.14) και (12.15) βρίσκουμε:

$$E = \frac{(k_x^2 + k_y^2)\hbar^2}{2m} = \frac{k_x^2 \hbar^2}{2m} + \frac{k_y^2 \hbar^2}{2m} \quad (12.20), \quad \text{ή:}$$

$$E = \frac{n_x^2 \pi^2 \hbar^2}{L^2 2m} + \frac{n_y^2 \pi^2 \hbar^2}{L^2 2m}, \quad n_x = 1, 2, 3, \dots, \quad n_y = 1, 2, 3, \dots \quad (12.21),$$

απ' όπου:  $E_{n_x, n_y} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$ , με  $n_x = 1, 2, 3, \dots$ ,  $n_y = 1, 2, 3, \dots$  (12.22).

Η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση έχει την μορφή:

$$\Psi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right), \quad n_x = 1, 2, 3, \dots, \quad n_y = 1, 2, 3, \dots \quad (12.23).$$

Στην (12.23) έχουμε χρησιμοποιήσει την συνθήκη νορμαλισμού, απ' όπου βρίσκουμε κατά τα γνωστά  $B = \sqrt{\frac{2}{L}}$ , με μια παρόμοια σχέση για την σταθερά της  $y$ -κυματοσυναρτήσεως.

**Παρατηρούμε ότι, τώρα (στις δύο διαστάσεις) έχουμε δύο κβαντικούς αριθμούς, όσοι και οι διαστάσεις (ή όσοι και οι βαθμοί ελευθερίας του συστήματος) για να χαρακτηρίσουμε την κβαντική κατάσταση του σωματιδίου.**

Θα δούμε ότι η παρατήρηση αυτή έχει γενικότερη ισχύ.

Για  $n_x = n_y = 1$ , βρίσκουμε την **θεμελιώδη κατάσταση**:

$$|n_x = 1, n_y = 1\rangle = \Psi_{1,1}(x, y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \quad (12.24),$$

$$\text{με θεμελιώδη ενέργεια } E_{1,1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \quad (12.25),$$

η οποία ονομάζεται και **ενέργεια θεμελιώδους καταστάσεως**.

**Παρατηρούμε ότι η ενέργεια είναι ίση με το άθροισμα των ενεργειών στην  $x$  και  $y$  διάσταση και ότι η κυματοσυνάρτηση είναι ίση με το γινόμενο των κυματοσυναρτήσεων.**

Παρατηρούμε επίσης, ότι η ενέργεια δεν εξαρτάται χωριστά από τα  $n_x$  και  $n_y$ , αλλά

εξαρτάται από το άθροισμα των τετραγώνων τους. Αν δηλαδή θεωρήσουμε την περίπτωση όπου έχουμε  $n_x=1$  και  $n_y=2$ , η ενέργεια είναι ακριβώς ίδια με το εάν είχαμε θεωρήσει  $n_x=2$  και  $n_y=1$ . Αυτό βέβαια ήταν αναμενόμενο αφού όπως είπαμε η ενέργεια εξαρτάται από το άθροισμα των τετραγώνων των δυο αυτών αριθμών και όχι από τον καθένα ξεχωριστά. Στις δυο αυτές όμως περιπτώσεις, η κυματοσυνάρτηση είναι διαφορετική. Έχουμε δηλαδή, δυο διαφορετικές λύσεις με

$$\text{την ίδια ενέργεια: } E_{1,2} = E_{2,1} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{mL^2} \quad (12.26), \text{ εκφυλισμός.}$$

$$\text{ενώ: } \Psi_{1,2}(x,y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right) \neq \Psi_{2,1}(x,y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \quad (12.27),$$

οι δύο κυματοσυναρτήσεις (καταστάσεις) είναι διαφορετικές. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται εκφυλισμός.

**Δηλαδή εκφυλισμός είναι το φαινόμενο, κατά το οποίο δυο ή περισσότερες καταστάσεις έχουν την ίδια ενέργεια.**

**Η βασική αιτία για το φαινόμενο του εκφυλισμού είναι κάποια φανερός ή κρυφής συμμετρία.** Ποια είναι η συμμετρία στην προκειμένη περίπτωση;

Στην προκειμένη περίπτωση, το τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού, έχει δύο διαφορετικές αλλά σχετιζόμενες συμμετρίες:

1) Είναι χωριζόμενο στην  $x$  και  $y$  διάσταση, σχέσεις (12.5) και (12.6). Αυτή η συμμετρία, η οποία δηλώνει την ανεξαρτησία των δύο διευθύνσεων, έχει ήδη χρησιμοποιηθεί και είχε σαν αποτέλεσμα την δυνατότητα χωρισμού των μεταβλητών (αντί για μια διδιάστατη εξίσωση έχουμε δύο διαφορετικές μονοδιάστατες εξισώσεις).

2) Επιπλέον, δεν υπάρχει κάτι που να ξεχωρίζει την  $x$  από την  $y$  διεύθυνση. Δηλαδή, αν αντικαταστήσουμε παντού και βάλουμε, όπου  $x$  το  $y$  και αντίστροφα, θα πάρουμε ακριβώς την ίδια λύση (δηλαδή, ουσιαστικά δεν έχουμε δύο διαφορετικές, αλλά δύο όμοιες μονοδιάστατες εξισώσεις).

Αυτό δεν συμβαίνει μόνο στην λύση, αλλά και στην εξίσωση. Η συμμετρία αυτή, οφείλεται στο γεγονός ότι το δυναμικό, έχει την ίδια συμπεριφορά και στην  $x$  και στην  $y$  διεύθυνση, γεγονός που έχει σαν συνέπεια τον εκφυλισμό. Οι ενέργειες δηλαδή, που αντιστοιχούν σε καταστάσεις οι οποίες είναι διαφορετικές, λόγω αυτής της συμμετρίας, είναι ίσες.

Για να δικαιολογήσουμε αυτό το συμπέρασμα, ας κάνουμε κάτι για να χαλάσουμε την συμμετρία των δύο διευθύνσεων  $x$  και  $y$ . Με ποιο τρόπο;



### 12.1.3 Το διδιάστατο ορθογώνιο πηγάδι δυναμικού απείρου βάθους

Ας θεωρήσουμε, ότι κατά την  $x$  και  $y$  διεύθυνση, το εύρος του πηγαδιού είναι διαφορετικό.

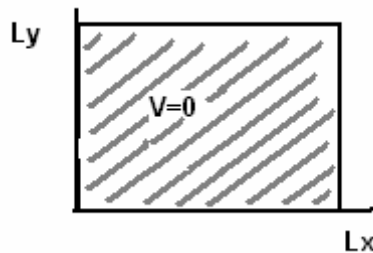
Αντί, λοιπόν, για ένα τετραγωνικό απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού, θα θεωρήσουμε ένα ορθογώνιο πηγάδι της μορφής

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{όταν } 0 \leq x \leq L_x \text{ και } 0 \leq y \leq L_y \\ \infty & \text{όταν } x,y < 0 \text{ ή } x > L_x, y > L_y \end{cases} \quad (12.28), \quad \text{όπως στο σχήμα 12.2.}$$

Σ αυτήν την περίπτωση, έχοντας υπόψη τα προηγούμενα βήματα, βρίσκουμε αντί

$$\text{των (12.18) και (12.19): } k_x = \frac{n_x \pi}{L_x}, \quad n_x = 1, 2, \dots \quad (12.29),$$

$$\text{και } k_y = \frac{n_y \pi}{L_y}, \quad n_y = 1, 2, \dots \quad (12.30).$$



**Σχήμα 12.2**

*Παράσταση του ορθογώνιου πηγαδιού δυναμικού στο επίπεδο  $xy$ .*

*Μέσα στην γραμμοσκιασμένη περιοχή το δυναμικό είναι μηδέν, ενώ έξω από την περιοχή αυτή το δυναμικό απειρίζεται.*

Η ενέργεια τώρα θα δίνεται από την σχέση:

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x} + \frac{n_y^2}{L_y} \right), \quad n_x = 1, 2, 3, \dots, \quad n_y = 1, 2, 3, \dots \quad (12.31)$$

και

$$\Psi_{n_x, n_y} = \frac{2}{\sqrt{L_x L_y}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right), \quad n_x = 1, 2, 3, \dots, \quad n_y = 1, 2, 3, \dots \quad (12.32).$$

Οι αντίστοιχες μονοδιάστατες κυματοσυναρτήσεις έχουν την μορφή

$$X_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \quad (12.33) \quad \text{και} \quad Y_{n_y}(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \quad (12.34).$$

Από την (12.31) βλέπουμε τώρα ότι οι ενέργειες  $E_{1,2}$  και  $E_{2,1}$  είναι διαφορετικές:

$$E_{1,2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{L_x} + \frac{4}{L_y} \right) \neq E_{2,1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{4}{L_x} + \frac{1}{L_y} \right) \quad (12.35),$$

όπως και οι αντίστοιχες καταστάσεις  $|n_x, n_y\rangle$ .

Έχουμε δηλαδή **άρση του εκφυλισμού**. Η άρση του εκφυλισμού, είναι αποτέλεσμα της άρσης της συμμετρίας των δύο διευθύνσεων  $x$  και  $y$ .

ατά συνέπεια, εάν κάνουμε κάτι το οποίο χαλάει την συμμετρία, η οποία είναι υπεύθυνη για τον εκφυλισμό, τότε αυτόματα ο εκφυλισμός αίρεται.

Τώρα τίθεται το ερώτημα: τι θα άλλαζε αν το δυναμικό είχε άλλου είδους συμμετρία, όπως, παραδείγματος χάριν, κυκλική συμμετρία;

Η, πως σχετίζονται οι κβαντικοί αριθμοί με την συγκεκριμένη συμμετρία του προβλήματος;

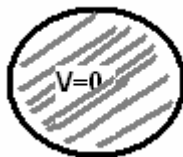
Θα εξετάσουμε αυτό το ερώτημα στο επόμενο εδάφιο.

#### 12.1.4 Το κυκλικό πηγάδι δυναμικού απείρου βάθους

Για να απαντήσουμε τα ερωτήματα σχετικά με την συμμετρία του δυναμικού, τον χωρισμό των μεταβλητών και τον αναμενόμενο, λόγω συμμετρίας εκφυλισμό, θα γενικεύσουμε πάλι στις δύο διαστάσεις το μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού. Μόνο που τώρα, η συνθήκη η οποία καθορίζει την περιοχή όπου το δυναμικό είναι μηδέν αναφέρεται σε μια κυκλική περιοχή ακτίνας  $R$ . Όταν οι συντεταγμένες  $x$  και  $y$  βρίσκονται μέσα σε ένα κύκλο ακτίνας  $R$ , το δυναμικό είναι μηδέν, ενώ έξω από αυτήν την ακτίνα, το δυναμικό είναι άπειρο. Έχουμε δηλαδή, ένα *κυκλικό απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού*, το οποίο προσδιορίζεται από την απαίτηση:

$$V=0 \text{ για } r=\sqrt{x^2+y^2} \leq R \text{ και } V=\infty \text{ για } r \geq R \quad (12.36),$$

όπως φαίνεται στο σχήμα 12.3.



**Σχήμα 12.3**

**Παράσταση κυκλικού πηγαδιού δυναμικού στο επίπεδο  $xy$ .**

*Μέσα στην γραμμοσκιασμένη κυκλική περιοχή (ακτίνας  $R$ ) το δυναμικό είναι μηδέν, ενώ έξω από την περιοχή αυτή το δυναμικό απειρίζεται.*

Μπορούμε τώρα να χωρίσουμε το πηγάδι δυναμικού στην  $x$  και  $y$  διεύθυνση; Δηλαδή, μπορούμε να χωρίσουμε την εξίσωση σε  $x$  και  $y$  ανεξάρτητες μεταβλητές και να ακολουθήσουμε μια παρόμοια ανάλυση σαν εκείνη για το τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού;

Στο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού οι ισοδυναμικές γραμμές είχαν την μορφή:

$x = \text{σταθερό}$ ,  $y$  οτιδήποτε, ή  $y = \text{σταθερό}$ ,  $x$  οτιδήποτε, οπότε η συμπεριφορά του δυναμικού ήταν ανεξάρτητη για κάθε μια από τις δύο μεταβλητές. Βλέπουμε όμως τώρα, ότι στην προκειμένη περίπτωση οι  $x$  και  $y$  συνιστώσες δεν είναι ανεξάρτητες, διότι σε κάθε θέση  $(x,y)$ , η ακτίνα των ισοδυναμικών γραμμών είναι ίση με  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Με άλλα λόγια, αν προσπαθήσουμε να χρησιμοποιήσουμε τις καρτεσιανές συντεταγμένες όπως τις ξέρουμε, για να εκφράσουμε τόσο την εξίσωση του Schrödinger, όσο και τις οριακές συνθήκες, δεν θα καταφέρουμε να χωρίσουμε το διδιάστατο πρόβλημα σε μονοδιάστατα προβλήματα. Είναι γνωστό, από τα κυκλικά ή τα σφαιρικά κύματα στην Κυματική, ότι λόγω κυκλικής συμμετρίας, θα πρέπει να χρησιμοποιούμε πολικές συντεταγμένες για να εκφράσουμε τις ισοδυναμικές επιφάνειες και να εκμεταλλευτούμε την κυκλική συμμετρία του προβλήματος, ώστε να μπορούμε να «χωρίσουμε» την εξίσωση.

**Θα χρησιμοποιήσουμε λοιπόν κυκλικές πολικές συντεταγμένες  $r$  και  $\phi$  στη θέση των καρτεσιανών συντεταγμένων  $x$  και  $y$  για να εκμεταλλευτούμε την (κυκλική) συμμετρία του προβλήματος. Υπάρχει κέντρο συμμετρίας (και, εάν επεκταθούμε νοερά στις 3 διαστάσεις, υπάρχει άξονας συμμετρίας ή άξονας περιστροφής, ο οποίος διέρχεται από το κέντρο και είναι κάθετος στο επίπεδο  $xy$ ).**

Οι πολικές συντεταγμένες ορίζονται από τη σχέσεις :

$$\begin{aligned} x &= r \cos \phi \\ y &= r \sin \phi \end{aligned} \quad (12.37)$$

Με τις δύο νέες συντεταγμένες  $r$  και  $\varphi$  οι ισοδυναμικές γραμμές του κυκλικού δυναμικού γράφονται:

$r = \text{σταθερό}, \varphi = \text{οτιδήποτε} \Leftrightarrow$  ανεξαρτησία των μεταβλητών  $r$  και  $\varphi$  !

Με βάση τις (12.37) μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση του Schrödinger σε πολικές συντεταγμένες μέσα στο κυκλικό απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού στην μορφή:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right\} = E \Psi \quad (12.38)$$

Αναζητώντας λύσεις της μορφής  $\Psi = R(r)\Phi(\varphi)$  (12.39),

και αντικαθιστώντας στην παραπάνω εξίσωση βρίσκουμε, μετά από πράξεις:

$$-\left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{1}{R} \left( R'' + \frac{1}{r} R' \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\Phi''}{\Phi} = E \quad (12.40)$$

Ακολουθώντας την ίδια λογική που χρησιμοποιήσαμε για το ορθογώνιο πηγάδι δυναμικού βλέπουμε ότι μπορούμε να «χωρίσουμε» την εξίσωση (12.40) στις ακόλουθες εξισώσεις :

$$\Phi'' = -m_l^2 \Phi \quad (12.41),$$

$$\text{και} \quad r^2 R'' + rR' + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right) r^2 R = m_l^2 R \quad (12.42)$$

Από την (12.41), η οποία έχει την γνωστή μορφή «ταλάντωσης» βρίσκουμε την λύση: εξισώσεις παίρνουμε ότι:

$$\Phi = A e^{im_l \varphi} + B e^{-im_l \varphi} \quad (12.43).$$

Για να είναι μονότιμη, η λύση (12.43) θα πρέπει να ικανοποιεί την συνθήκη:  $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$  (12.44).

Για να ικανοποιείται αυτή η συνθήκη θα πρέπει:

$$A e^{im_l \varphi} e^{2\pi i m_l} + B e^{-im_l \varphi} e^{-2\pi i m_l} = A e^{im_l \varphi} + B e^{-im_l \varphi} \quad (12.45),$$

$$\text{ή} \quad e^{2\pi i m_l} = 1 \quad (12.46),$$

απ' όπου έπεται ότι ο αριθμός  $m_l$  θα πρέπει να είναι ακέραιος:

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (12.47) \quad \text{\textbf{κβαντικός αριθμός.}}$$

Από την εξίσωση (12.42) προκύπτει ένας ακόμη κβαντικός αριθμός τον οποίον ονομάζουμε  $l$ .

Η κατάσταση λοιπόν του συστήματος προσδιορίζεται από τους δύο κβαντικούς αριθμούς  $l, m_l$ :  $|l, m_l\rangle$  αντί των  $|n_x, n_y\rangle$ .

Οι κβαντικοί αριθμοί  $l, m$ , οι οποίοι αντιστοιχούν σε καταστάσεις οι οποίες είναι

συμβατές με την συμμετρία του προβλήματος (της δυναμικής ενέργειας), ονομάζονται **καλοί κβαντικοί αριθμοί**.

Οι καλοί κβαντικοί αριθμοί, οι οποίοι αντανακλούν την συμμετρία του προβλήματος, χαρακτηρίζουν (αντιστοιχούν) σε φυσικές ποσότητες οι οποίες διατηρούνται. Για παράδειγμα, τα  $n_x$  και  $n_y$  στο ορθογώνιο πηγάδι χαρακτηρίζουν τις ορμές  $p_x, p_y$  μέσα από τους αντίστοιχους κυματαριθμούς  $k$ , και την σχέση  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ . Εκτός λοιπόν από την ενέργεια χαρακτηρίζουν και τις άλλες ποσότητες, οι οποίες διατηρούνται και οι οποίες υπεισέρχονται στην έκφραση της ενέργειας.

Στην περίπτωση του σωματίου μέσα στο απειρόβαθο κυκλικό δυναμικό, οι αντίστοιχες ορμές, οι οποίες χαρακτηρίζουν την κινητική ενέργεια (η οποία είναι και η μόνη ενέργεια, αφού το δυναμικό είναι μηδέν) είναι η **ακτινική ορμή** και η **στροφορμή**.

***Είναι εύκολο να αντιληφθούμε, λοιπόν, ότι ο κβαντικός αριθμός  $n_l$  χαρακτηρίζει την στροφορμή, αφού αναφέρεται στην γωνιακή εξίσωση της ενέργειας, ενώ ο κβαντικός αριθμός  $l$  χαρακτηρίζει την ακτινική ορμή.***

Η γενίκευση στις τρεις διαστάσεις είναι πλέον λίγο-πολύ προφανής.

## **12.2 Η εξίσωση Shrödinger σε τρεις διαστάσεις**

### **12.2.1 Το ορθογώνιο απειρόβαθο δυναμικό**

Είναι προφανές ότι για ένα τρισδιάστατο πηγάδι δυναμικού, θα έχουμε τρεις κβαντικούς αριθμούς  $n_x, n_y, n_z$ , οι οποίοι θα χαρακτηρίζουν τις τρισδιάστατες καταστάσεις  $|n_x, n_y, n_z\rangle$ . Ουσιαστικά η συζήτηση δεν έχει τίποτα καινούργιο να προσθέσει. Σε πλήρη αναλογία με το διδιάστατο πρόβλημα, η εξίσωση και η κυματοσυνάρτηση  $\Psi(x, y, z)$ , χωρίζονται σε τρεις συνιστώσες, ανεξάρτητες η μια από την άλλη. Η συνολική κυματοσυνάρτηση έχει την μορφή:

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = \Psi_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\sqrt{2^3}}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right) \quad (12.48),$$

ενώ η αντίστοιχη ενέργεια δίνεται από την σχέση:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad (12.49).$$

Για  $L_x = L_y = L_z = L$ , η ενέργεια γίνεται τριπλά εκφυλισμένη.

### **12.2.2 Το σφαιρικό απειρόβαθο δυναμικό: ποιοτική θεώρηση**

Το απειρόβαθο σφαιρικό πηγάδι δυναμικού είναι μια ειδική περίπτωση σφαιρικού δυναμικού, δηλαδή δυναμικού, το οποίο εξαρτάται μόνο από το μέτρο του διανύσματος θέσης  $|\vec{r}|=r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ , στο οποίο δεν υπεισέρχονται οι γωνίες  $\theta$  και  $\varphi$ . Δηλαδή:  $V=V(r)$  (12.50).

Προφανώς, στην προκειμένη περίπτωση θα χρησιμοποιήσουμε σφαιρικές συντεταγμένες. Όπως είδαμε νωρίτερα, στις τρεις διαστάσεις θα να έχουμε τρεις κβαντικούς αριθμούς οι οποίοι, εν προκειμένω δεν θα είναι  $n_x, n_y, n_z$ , του ορθογωνίου πηγαδιού, αλλά μια κατάλληλη τριάδα «σφαιρικών» κβαντικών αριθμών, τους οποίους ονομάζουμε  $n, l, m_l$ . Οι αντίστοιχες κβαντομηχανικές καταστάσεις συμβολίζονται με το ket:  $|n, l, m_l\rangle$ .

Σύμφωνα με την αντίστοιχη περίπτωση (το κυκλικό δυναμικό) στις δύο διαστάσεις, οι κβαντικοί αυτοί αριθμοί χαρακτηρίζουν την ακτινική ορμή  $p_r$  και τις συνιστώσες της στροφορμής  $p_\varphi$  και  $p_\theta$ , οι οποίες υπεισέρχονται στην έκφραση της ενέργειας. Για δυναμικά με σφαιρική, όπως το απειρόβαθο σφαιρικό δυναμικό, οι στροφορμή (και οι αντίστοιχες συνιστώσες της) διατηρείται. **Οι αριθμοί  $n, l, m_l$  είναι καλοί κβαντικοί αριθμοί** για το συγκεκριμένο πρόβλημα και γενικότερα για όλα τα προβλήματα με σφαιρικό δυναμικό. Τέτοιο είναι και το πρόβλημα ενός ηλεκτρονίου σε ένα σφαιρικό δυναμικό Coulomb, δηλαδή για το άτομο του υδρογόνου. Αντίθετα προς τους  $n, l, m_l$ , οι κβαντικοί αριθμοί  $n_x, n_y, n_z$  είναι κακοί κβαντικοί αριθμοί για το συγκεκριμένο πρόβλημα και γενικότερα για προβλήματα με σφαιρική συμμετρία (σφαιρικά δυναμικά) τα οποία δεν έχουν επίπεδη συμμετρία.

Ο κβαντικός αριθμός  $n$  περιγράφει την ακτινική ορμή, ο αριθμός  $l$  το μέτρο της στροφορμής, ενώ ο κβαντικός αριθμός  $m_l$  περιγράφει την προβολή της στροφορμής πάνω στον άξονα  $z$ .

Λόγω της σφαιρικής συμμετρίας αναμενόμενο είναι να έχουμε εκφυλισμό.

Δηλαδή καταστάσεις  $|n, l, m_l\rangle$  με διαφορετική τριάδα  $n, l, m_l$  θα έχουν την ίδια τιμή ενέργειας. Πράγματι, για το άτομο του υδρογόνου, η ενέργεια εξαρτάται μόνο από τον κβαντικό αριθμό  $n$ .

### **\*12.2.3 Το σφαιρικό απειρόβαθο δυναμικό: ποσοτική θεώρηση**

Για την λύση της εξίσωσης του Schrödinger σ' ένα σφαιρικό δυναμικό  $V=V(r)$ , γράφουμε τον διαφορικό τελεστή του Laplace τελεστή  $\nabla^2$ , στην τρισδιάστατη εξίσωση του Schrödinger  $\left[ \nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E-V(r)) \right] \Psi(\vec{r})=0$  (12.51),

Σε πολικές σφαιρικές συντεταγμένες, οι οποίες ορίζονται συναρτήσει των καρτεσιανών συντεταγμένων από τις σχέσεις (12.52):

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi, \quad 0 < r < \infty \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi, \quad 0 \leq \theta \leq \pi \\ z &= r \cos \theta, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{aligned}$$

Γράφοντας τώρα τον τελεστή  $\nabla^2$  σε σφαιρικές πολικές συντεταγμένες βρίσκουμε:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (12.53).$$

Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (12.54),$$

στην εξίσωση του Schrödinger (12.51) καταλήγουμε στις εξισώσεις :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R = 0 \quad (12.55)$$

και 
$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \lambda Y = 0 \quad (12.56),$$

όπου  $\lambda$  μια σταθερά διαχωρισμού.

Παρατηρούμε ότι για κάθε σφαιρικά συμμετρικό δυναμικό, η εξίσωση του Schrödinger διαχωρίζεται σε μια εξίσωση που εξαρτάται μόνο από το μέτρο  $r$  και μια εξίσωση που εξαρτάται μόνο από τις γωνίες  $\theta$  και  $\varphi$ . Επειδή η γωνιακή εξίσωση είναι ανεξάρτητη από το δυναμικό  $V(r)$ , συμπεραίνουμε ότι η εξάρτηση των κυματοσυναρτήσεων  $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$  από τις γωνίες  $\theta, \varphi$ , θα είναι ίδια για όλα τα σφαιρικά δυναμικά. Δεν θα επεκταθούμε παραπέρα στη λύση των ανωτέρω εξισώσεων. Απλά σημειώνουμε ότι η γενική λύση δίνεται από την σχέση:

$$|n, l, m\rangle = \Psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \quad (12.57),$$

όπου  $R_{nl}(r)$ , η ακτινική συνάρτηση και  $Y_l^m(\theta, \phi)$ , η γωνιακή συνάρτηση. Οι γωνιακές συναρτήσεις  $Y_l^m(\theta, \phi)$  ονομάζονται σφαιρικές αρμονικές.

Περαιτέρω, οι σφαιρικές αρμονικές ορίζονται από την σχέση:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = C(l, m) P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \text{ με } l=0,1, n-1, \dots \text{ και } m=-l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l \text{ (12.58).}$$

Η ποσότητα  $C(l, m)$  είναι μια σταθερά νορμαλισμού, η οποία αποδεικνύεται ότι

$$\text{δίνεται από τη σχέση: } C(l, m) = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

### 12.3 Οι κβαντικοί αριθμοί του ατόμου του υδρογόνου

Το άτομο του υδρογόνου, ως γνωστόν αποτελείται από ένα πρωτόνιο με θετικό φορτίο  $e$  και μάζα  $M$  (θεωρητικά άπειρη) και από ένα ηλεκτρόνιο φορτίου  $-e$  και μάζας  $m$ . Η αλληλεπίδραση, μεταξύ πρωτονίου-ηλεκτρονίου, θα δίνεται από την (σφαιρικά συμμετρική) δυναμική ενέργεια Coulomb:

$$V(\vec{r}) = -k \frac{e^2}{r} \quad (12.59),$$

όπου  $r$  η απόσταση, μεταξύ πρωτονίου-ηλεκτρονίου, και  $k$  η σταθερά του νόμου του Coulomb.

Σύμφωνα με το προηγούμενο εδάφιο, οι καλοί κβαντικοί αριθμοί για το άτομο του υδρογόνου είναι οι  $n, l, m_l$ , οι οποίοι χαρακτηρίζουν τις καταστάσεις  $|n, l, m_l\rangle$ .

Οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger, έχουν την μορφή:

$$\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \quad (12.60) \quad \text{\textit{κυματοσυνάρτηση.}}$$

Η αντίστοιχες ενέργειες  $E_{n,l,m_l}$  είναι τριπλά εκφυλισμένες λόγω της σφαιρικής συμμετρίας του δυναμικού και δίνονται από τον γνωστό (ίδιο με τον τύπο από το

$$\text{μοντέλο του Bohr) τύπο: } E_n = \frac{-13,6(eV)}{n^2}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.61) \quad \text{\textit{Ενέργεια.}}$$

Στην κατάσταση  $|n, l, m_l\rangle$ , το μέτρο της στροφορμής του ηλεκτρονίου δίνεται από την

$$\text{σχέση } |\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar, l = 0, 1, \dots, n-1 \quad (12.62) \quad \text{\textit{Μέτρο της στροφορμής.}}$$

Τέλος, η  $z$  συνιστώσα της στροφορμής δίνεται από την σχέση

$$|\vec{l}_z| = l_z = m_l \hbar, m_l = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, +l. \quad (12.63) \quad \text{\textit{προβολή της στροφορμής.}}$$

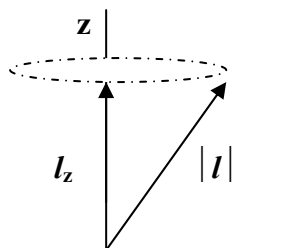
Βλέπουμε ότι οι παραπάνω σχέσεις είναι σε πλήρη αρμονία με το νόημα και την βαθύτερη σημασία των κβαντικών αριθμών, την οποία περιγράψαμε στο προηγούμενο υποκεφάλαιο.

***Όμως, όπως διαπιστώνουμε, οι κβαντικοί αριθμοί  $n, l, m_l$ , οι οποίοι καθορίζουν***



πλήρως την κατάσταση του ηλεκτρονίου,  $|n, l, m_l\rangle$ , καθώς και την ενέργεια του, δεν καθορίζουν όλες τις προβολές (καρτεσιανές συνιστώσες) της στροφορμής. Μόνο η z-συνιστώσα καθορίζεται από την (12.63), καθώς και το μέτρο της στροφορμής, (12.62). Σαν αποτέλεσμα, οι x και y συνιστώσες της στροφορμής  $|\vec{L}_x|, |\vec{L}_y|$  δεν είναι δυνατόν να προσδιοριστούν χωριστά, πάρα μόνο το άθροισμα των τετραγώνων τους (σαν διαφορά τετραγώνων:  $|\vec{L}|^2 - |\vec{L}_z|^2$ ).

Θα πρέπει να φανταστούμε ότι το άκρο του διανύσματος της στροφορμής, σε μια συγκεκριμένη κατάσταση  $|n, l, m_l\rangle$ , διαγράφει την επιφάνεια ενός κώνου με ύψος  $|\vec{L}_z|$  και ακμή  $|\vec{L}|$ , χωρίς να μπορούμε να προσδιορίσουμε την ακριβή του θέση, σχήμα 12.4.



#### Σχήμα 12.4

*Παράσταση του διανύσματος  $\vec{L}$ .*

Βλέπουμε λοιπόν ότι η στροφορμή στην Κβαντομηχανική παρουσιάζει μια σημαντική διαφορά και ιδιαιτερότητα, από την αντίστοιχη κλασικά ποσότητα. Περισσότερα, για τις «περίεργες» ιδιότητες της στροφορμής στην Κβαντομηχανική θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο. Θα πρέπει να επισημάνουμε ότι τα πράγματα γίνονται πολύ πιο πολύπλοκα, όταν αρχίζουμε να εξετάζουμε βαρύτερα άτομα από το άτομο του υδρογόνου, με πολύ περισσότερα ηλεκτρόνια, οπότε θα πρέπει να συνθέσουμε τις στροφορμές τους για να βρούμε την ολική στροφορμή του ατόμου. Θα επανέλθουμε σ' αυτό το θέμα στα κεφάλαια 13 και 14.

Πριν κλείσουμε όμως το κεφάλαιο, θα θέσουμε ένα ερώτημα (μάλλον, δύο σχετιζόμενα ερωτήματα), την απάντηση του οποίου θα αφήσουμε, προς το παρόν, να αιωρείται.

#### **Ερώτηση 12.1**

Τι το ιδιαίτερο έχει ο άξονας z σε σχέση με τους άξονες x και y, σε ένα πρόβλημα

με σφαιρική συμμετρία;

Η **Ερώτηση 12.2**

Έστω ότι έχουμε δύο παρατηρητές στην ίδια θέση, εκτελώντας το ίδιο πείραμα μέτρησης της στροφορμής, υπό τις ίδιες συνθήκες. Ο ένας επιλέγει τον άξονα  $z$  οριζόντιο και ο άλλος κατακόρυφο. Σύμφωνα με τα όσα έχουμε εκθέσει μέχρι τώρα, θα περιμέναμε ο ένας παρατηρητής να παρατηρεί κβάντωση της οριζόντιας συνιστώσας της στροφορμής και ο άλλος της κατακόρυφης. Τι, πράγματι, συμβαίνει;

## Κεφάλαιο 13. Στροφορμή και Σύνθεση στροφορμών

### Εισαγωγή

Σ' αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε τις περίεργες ιδιότητες της στροφορμής στην Κβαντομηχανική, τις οποίες συναντήσαμε στο τέλος του προηγούμενου κεφαλαίου. Θα εξετάσουμε ένα νέο είδος στροφορμής το σπιν (spin) του ηλεκτρονίου και θα ασχοληθούμε με την σύνθεση στροφορμών, η οποία δεν έχει το αντίστοιχο ανάλογο στην Κλασική Φυσική.

### **13.1 Η τροχιακή στροφορμή του ηλεκτρονίου**

#### **13.1.1 Οι κβαντικοί αριθμοί της στροφορμής του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου.**

Εξετάζοντας το πρόβλημα του ατόμου του υδρογόνου (με το σύστημα αναφοράς στο κέντρο του πυρήνα) βρήκαμε ότι το ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου χαρακτηρίζεται από τρεις κβαντικούς αριθμούς:  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ , οι οποίοι καθορίζουν την κβαντομηχανική του κατάσταση  $|n, l, m_l\rangle$  καθώς και την ενέργεια του.

Ο κβαντικός αριθμός  $n$  ονομάζεται κύριος κβαντικός αριθμός, ο  $l$  είναι ο τροχιακός κβαντικός αριθμός (ή κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής) και ο  $m_l$  λέγεται μαγνητικός τροχιακός κβαντικός αριθμός (ή μαγνητικός κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής). Υπάρχουν περιορισμοί στις τιμές που μπορούν να πάρουν αυτοί οι αριθμοί. Πιο συγκεκριμένα:

Ο  $n$  παίρνει τιμές από το 1 έως το  $\infty$ .

Ο  $l$  παίρνει τιμές από το 0 έως το  $n-1$ .

Ο  $m_l$  παίρνει τιμές από το  $-l$  έως το  $l$ .

Γνωρίζοντας τον κβαντικό αριθμό της στροφορμής  $l$ , μπορούμε να ορίσουμε:

- το μέτρο της τροχιακής στροφορμής:

$$|l|^2 = l(l+1) \hbar^2 \quad (13.1)$$

όπου  $l$  το διάνυσμα της στροφορμής με τιμές  $l = 0, 1, \dots, n-1$ .

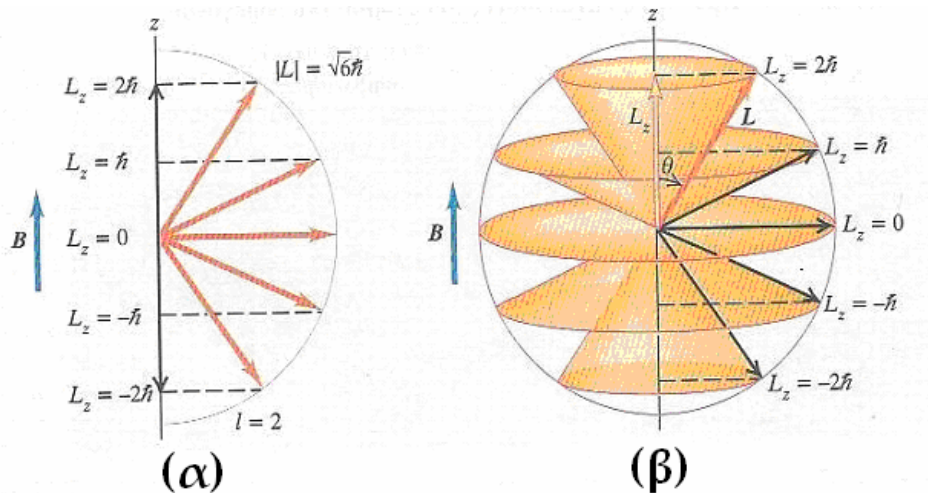
- την προβολή της τροχιακής στροφορμής στον άξονα z:

$$L_z = m_l \hbar \quad (13.2)$$

όπου  $m_l$  ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής με τιμές  $m_l = -l, \dots, l$ .

Από τον ορισμό της προβολής της τροχιακής στροφορμής  $L_z$ , παρατηρούμε ότι η κατεύθυνση της στροφορμής σε σχέση με τον άξονα z (ο οποίος επιλέγεται να συμπίπτει με την διεύθυνση ενός εξωτερικού πεδίου, είναι κβαντισμένη.

Το φαινόμενο αυτό λέγεται **κβάντωση της κατεύθυνσης** και περιγράφεται στο σχήμα 13.1.



**Σχήμα 13.1**

**Το φαινόμενο της κβάντωσης της κατεύθυνσης της στροφορμής.**

Ένα ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου με κβαντικό αριθμό της στροφορμής  $l=2$ , η στροφορμή του μπορεί να έχει προβολές στον άξονα z  $+2\hbar, +\hbar, 0, -\hbar, -2\hbar$  (α), ενώ το διάνυσμα της στροφορμής, ανάλογα με την τιμή της προβολής, μπορεί να θεωρηθεί ότι διαγράφει έναν από τους πέντε κώνους (β) στο δεξιό μέρος του σχήματος

(για  $m_l=0$ , ο αντίστοιχος κώνος εκφυλίζεται σε κύκλο).

Υπάρχουν και οι άλλες δύο συνιστώσες της στροφορμής,  $I_x$  και  $I_y$ , που βρίσκονται κάπου στο επίπεδο xy και που συνδέονται μεταξύ τους με τη σχέση

$$|I|^2 = I_x^2 + I_y^2 + I_z^2 \quad (13.3)$$

Όμως, δεν μπορούμε να καθορίσουμε το διάνυσμα της στροφορμής μονοσήμαντα, αφού δεν μπορούμε να ξέρουμε ταυτόχρονα όλες τις συνιστώσες του διανύσματος  $I$  (εκτός βέβαια, όταν και οι τρεις συνιστώσες είναι μηδενικές, για  $l=0$ ).

**13.1.2 Οι κβαντικοί αριθμοί της στροφορμής σε πολύ-ηλεκτρονικά άτομα.**

Όπως θα δούμε στο κεφάλαιο 14, όταν έχουμε ένα άτομο με πολλά ηλεκτρόνια μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο του μέσου πεδίου και να θεωρήσουμε ότι κάθε ένα ηλεκτρόνιο είναι ανεξάρτητο από τα άλλα ηλεκτρόνια «κατά μέσον όρο», αλλά βρίσκεται μέσα σε ένα κοινό μέσο πεδίο, το οποίο δημιουργείται από όλα τα ηλεκτρόνια (συμπεριλαμβανομένου και του ίδιου). Τότε, ουσιαστικά έχουμε ένα «τροποποιημένο» άτομο υδρογόνου για το κάθε ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο μπορούμε να λύσουμε και να προσδιορίσουμε τους κβαντικούς αριθμούς και την στροφορμή καθενός ηλεκτρονίου. Η ολική στροφορμή του ατόμου προκύπτει, κατά συνέπεια, από την σύνθεση των στροφορμών όλων των ηλεκτρονίων του (ο πυρήνας, η θέση του οποίου συμπίπτει με την αρχή των αξόνων  $O$ , θεωρούμενος ως υλικό σημείο, έχει στροφορμή μηδέν ως προς το σημείο  $O$ ). Εάν συμβολίσουμε με  $\vec{L}$  το διάνυσμα της ολικής στροφορμής ενός ατόμου θα έχουμε:

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^Z \vec{l}_i \quad (13.4) \text{ στροφορμή του ατόμου.}$$

Θα υπάρχουν λοιπόν, οι αντίστοιχοι κβαντικοί αριθμοί της ατομικής στροφορμής,  $L, M_L$ , τέτοιοι ώστε:

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar \quad (13.5)$$

$$\text{και } |\vec{L}_z| = M_L\hbar, M_L = -L, -L+1, \dots, 0, 1, \dots, +L \quad (13.6).$$

Ο υπολογισμός τους, με βάση τους κβαντικούς  $l_i, m_{l_i}$ , είναι στην γενική περίπτωση πολύπλοκη περίπτωση.

## **13.2 Το σπιν του ηλεκτρονίου**

Εκτός από τους τρεις κβαντικούς αριθμούς  $n, l, m_l$ , του ηλεκτρονίου υπάρχει και ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός  $m_s$ , ο οποίος ονομάζεται (μαγνητικός) κβαντικός αριθμός της ιδιοστροφορμής σπιν, ο οποίος δεν συνδέεται με «χωρικούς» βαθμούς ελευθερίας. Η εισαγωγή του σπιν ήταν απαραίτητη για να εξηγηθούν πλήρως κάποια πειραματικά αποτελέσματα. Πιο συγκεκριμένα, φασματογραφικές μετρήσεις των ατμών κάποιων αερίων έδειξαν ότι πολλές φασματικές γραμμές ήταν ουσιαστικά διπλές γραμμές, πολύ κοντά μεταξύ τους. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται λεπτή υφή και ερμηνεύεται ως αποτέλεσμα της ύπαρξης μαγνητικής ροπής, λόγω σπιν του ηλεκτρονίου. Είναι γνωστό (όπως θα δείξουμε παρακάτω) ότι ένα φορτισμένο σωματίδιο το οποίο έχει στροφορμή, έχει και μαγνητική ροπή ανάλογη προς την στροφορμή του.

Το δεύτερο πείραμα, που επιβεβαίωσε την ύπαρξη του σπιν ήταν αυτό των *Stern* και

*Gerlach*, το οποίο θα περιγράψουμε αναλυτικά. Το φαινόμενο *Stern Gerlach* βασίζεται στην εκτροπή ενός μαγνητικού δίπολου μέσα ένα ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο, εξ αιτίας της δύναμης που ασκείται επάνω του από την βαθμίδα μεταβολής του μαγνητικού πεδίου. Σε ένα ομογενές μαγνητικό πεδίο  $\vec{B}$ , ένα μαγνητικό δίπολο υφίσταται μια ροπή  $\vec{\tau}$  ίση προς το εξωτερικό γινόμενο της μαγνητικής ροπής  $\vec{\mu}$  και του μαγνητικού πεδίου  $\vec{B}$ :  $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$  (13.7).

Η ενέργεια  $U_B$  του δίπολου, μέσα στο μαγνητικό πεδίο δίνεται από τη σχέση:

$$U_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (13.8).$$

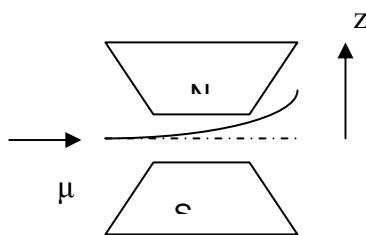
Αν βάλουμε ένα άτομο σε ανομοιογενές πεδίο, εφόσον το μαγνητικό πεδίο είναι συνάρτηση του  $z$  βλέπουμε ότι και η δυναμική ενέργεια είναι και αυτή συνάρτηση του  $z$

$$U_B(z) = -\vec{\mu} \vec{B}(z) \quad (13.9).$$

Έτσι, υπάρχει μια μεταβολή αυτής της δυναμικής ενέργειας από θέση σε θέση. Όπως γνωρίζουμε, ενέργεια, η οποία εξαρτάται από τη θέση παίζει ρόλο δυναμικής ενέργειας. Η δύναμη λοιπόν η οποία θα ασκείται στο δίπολο δίνεται από τη σχέση:

$$F_z = -\frac{\partial U_B(z)}{\partial z} \quad (13.10)$$

Σαν αποτέλεσμα αυτής της δύναμης, το μαγνητικό δίπολο εκτρέπεται, όπως φαίνεται στο σχήμα 13.2.



**Σχήμα 13.2**

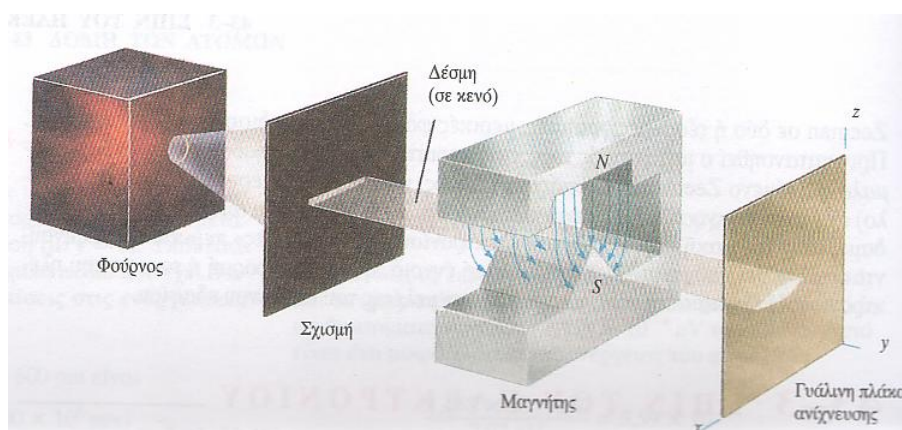
**Εκτροπή ενός μαγνητικού δίπολου σε ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο.**

Εάν λοιπόν περάσει μέσα από ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο μια δέσμη σωματιδίων, π.χ. ατόμων αργύρου, τα οποία έχουν κάποια μαγνητική ροπή (γνωρίζοντας ότι το άτομο σαν σύνολο έχει μαγνητική ροπή λόγω της ροπής των ηλεκτρονίων) θα εκτραπεί, όπως στο σχήμα 13.2.

Κάθε άτομο αργύρου θα δεχθεί κάποια δύναμη ανάλογα με τη φορά της μαγνητικής του ροπής, είτε προς τα πάνω είτε προς τα κάτω. Η δύναμη αυτή θα τείνει να το

εκτρέψει λιγότερο ή περισσότερο, ανάλογα με τη γωνία και το μέγεθος της μαγνητικής ροπής, σχέσεις (13.9), (13.10).

Στο σημείο που η δέσμη εξέρχεται του πεδίου τοποθετούμε ανιχνευτή για να μας δείξει τις θέσεις των ατόμων, όπως στο σχήμα 13. 3. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα που έχουμε άτομα αργύρου, ο ανιχνευτής είναι ουσιαστικά μια γυάλινη πλάκα, σαν φωτογραφικό φιλμ πάνω στην επιφάνεια της οποίας αποτυπώνεται το ίχνος της δέσμης με τη μορφή μαύρης κουκίδας για κάθε άτομο. Περιμένουμε να παρατηρήσουμε κατά μήκος της βαθμίδας του μαγνητικού πεδίου μια λωρίδα που θα πηγαίνει από τη μέγιστη έως την ελάχιστη γωνία που σχηματίζει η μαγνητική ροπή. Όμως παρατηρούμε ότι πάνω στην γυάλινη πλάκα υπάρχουν δύο συγκεκριμένα σημεία (στιγμάτα) αντί για μια συνεχή γραμμή, εκατέρωθεν της αρχικής διεύθυνσης της δέσμης.



**Σχήμα 13.3**

**Πειραματική διάταξη για το πείραμα Stern- Gerlach.**

Ο μοναδικός τρόπος για να εξηγηθούν τα πειραματικά αποτελέσματα είναι να καταφύγουμε στην κβάντωση της διεύθυνσης της στροφορμής. Δηλαδή, ότι υπάρχουν συγκεκριμένες γωνίες και, άρα, και συγκεκριμένες κουκίδες στην πλάκα. Αν η στροφορμή των ατόμων ήταν ίση με την μονάδα, θα περιμέναμε να παρατηρήσουμε τρεις κουκίδες. Αρχικά, η ύπαρξη δύο στιγμάτων φάνηκε σαν πρόβλημα διότι εκτός από την τροχιακή στροφορμή έπρεπε και κάτι άλλο να συνεισφέρει στη μαγνητική ροπή. Από την ανάλυση προκύπτει ότι πρόκειται για στροφορμή λόγω σπιν  $s$  με τιμή  $\frac{1}{2}$  οπότε η μαγνητική ροπή έχει τη διεύθυνση  $\pm$ , ανάλογα με τη διεύθυνση του μαγνητικού πεδίου. Άρα, υπάρχουν μόνο δύο δυνατές διευθύνσεις και κατά συνέπεια υπάρχουν δύο μόνο κουκίδες στην πλάκα.

Δεχόμαστε δηλαδή ότι  $s = \frac{1}{2}$  (13.11),

Οπότε, κατ' αναλογία με την τροχιακή στροφορμή θα υπάρχει και ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός του σπιν  $m_s$  οποίος θα παίρνει τιμές από  $-s$  έως  $+s$ . Άρα:

$$m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \text{ (13.12).}$$

Το πείραμα των *Stern-Gerlach* αποδεικνύει ταυτόχρονα με την κβάντωση της κατεύθυνσης της στροφορμής και την ύπαρξη του σπιν με τιμές ημιακέραιες. Οι δύο διαφορετικοί προσανατολισμοί προκύπτουν επειδή η στροφορμή παίρνει ημιακέραιες τιμές και η προβολή της είναι  $\pm \frac{1}{2}$  (ο αριθμός των 2 κουκίδων προκύπτει από τη σχέση  $2=2 \times \frac{1}{2} + 1$ ). Όσον αφορά το άτομο του αργύρου είναι γνωστό ότι έχει τροχιακή στροφορμή ίση προς μηδέν. Άρα δεν υπάρχει μαγνητική ροπή λόγω τροχιακής στροφορμής, αλλά μόνο λόγω σπιν..

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω δεν υπολογίσαμε καθόλου την μαγνητική ροπή των πυρήνων στα άτομα της δέσμης και τούτο διότι η πυρηνική μαγνητική ροπή δεν παίζει ουσιαστικό ρόλο στο συγκεκριμένο πείραμα. Πράγματι, παρατηρούμε ότι στον τύπο  $\mu = - (q / 2m) l$ , που δίνει την τιμή της μαγνητικής ροπής υπεισέρχεται η τιμή της μάζας του σώματος. Επειδή η μάζα του πυρήνα είναι 2000 φορές μεγαλύτερη της μάζας του ηλεκτρονίου, η μαγνητική ροπή του πυρήνα θα είναι τουλάχιστον μερικές χιλιάδες φορές μικρότερη της αντίστοιχης ροπής των ηλεκτρονίων. Επομένως, η τόσο μικρή τιμή της πυρηνικής μαγνητικής ροπής δεν φαίνεται να επηρεάζει το αποτέλεσμα.

Αν και δεν είναι ακριβές, μπορούμε, αν μας εξυπηρετεί, να φανταστούμε (σε αντιστοιχία με το ηλιακό σύστημα όπου οι πλανήτες εκτός από την περιφορά τους γύρω από τον ήλιο κάνουν και περιστροφή γύρω από τον εαυτό τους) ότι το ηλεκτρόνιο περιστρέφεται γύρω από τον άξονά του. Αυτή η περιστροφή δίνει στο ηλεκτρόνιο έναν πρόσθετο βαθμό ελευθερίας, το spin. Η ιδιοστροφορμή (spin) είναι ίδια για όλα τα ηλεκτρόνια και περιγράφεται με τον κβαντικό αριθμό  $s$ , του οποίου η απόλυτη τιμή είναι πάντα ίση με  $1/2$ . Η κατάσταση spin του ηλεκτρονίου προσδιορίζεται τον κβαντικό αριθμό  $m_s$ . Έχουμε λοιπόν ένα πρόσθετο κβαντικό αριθμό, ο οποίος σε αντίθεση με τους άλλους κβαντικούς αριθμούς, δεν είναι ακέραιος, αλλά ημιακέραιος. **Η κατάσταση, λοιπόν, των ηλεκτρονίων μέσα στα άτομα θα περιγράφεται από τέσσερις κβαντικούς αριθμούς, ως οι  $n, l, m_l, m_s$ .**

Γνωρίζοντας τον κβαντικό αριθμό της ιδιοστροφορμής ( $s$ ) ορίζουμε:

- το μέτρο της ιδιοστροφορμής:  $|s|^2 = s(s+1) \hbar^2$



όπου  $\mathbf{s}$  το διάνυσμα της ιδιοστροφορμής με τιμή  $s=1/2$ .

- την προβολή της ιδιοστροφορμής στον άξονα  $z$ :  $\mathbf{s}_z = m_s \hbar$   
όπου  $m_s$  ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός της προβολής της ιδιοστροφορμής με τιμές  $m_s = -s, \dots, s$  δηλαδή  $m_s = \pm 1/2$ .

Η εξήγηση που δόθηκε παραπάνω για το διάνυσμα της στροφορμής  $\mathbf{l}$  καθώς και η σχηματική απεικόνισή του, ομοίως ισχύει και για το διάνυσμα της ιδιοστροφορμής  $\mathbf{s}$ .

### 13.3 Σύνθεση στροφορμών των ηλεκτρονίων

Όπως είδαμε στο προηγούμενο υποκεφάλαιο, το ηλεκτρόνιο όμως δεν έχει μόνο τροχιακή στροφορμή αλλά και ιδιοστροφορμή ή spin ( $s$ ). Για να υπολογίσουμε τη συνολική στροφορμή του ηλεκτρονίου ( $\mathbf{j}$ ), πρέπει να βρούμε το διανυσματικό άθροισμα  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$  (13.13) συνολική στροφορμή του ηλεκτρονίου.

Σε αναλογία με τα παραπάνω, η συνολική στροφορμή ενός ατόμου δίνεται από το διανυσματικό άθροισμα:

$$\Sigma \mathbf{j}_i = \Sigma \mathbf{l}_i + \Sigma \mathbf{s}_i \quad \text{με } i = 1, 2, \dots, Z \quad (13.14) \quad \text{συνολική στροφορμή του ατόμου.}$$

(όπου  $Z$ : ο ατομικός αριθμός του ατόμου).

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (13.15),$$

$$\text{όπου: } \mathbf{J} = \Sigma \mathbf{j}_i, \quad \mathbf{L} = \Sigma \mathbf{l}_i, \quad \mathbf{S} = \Sigma \mathbf{s}_i \quad (13.16).$$

Παρατηρούμε ότι η εύρεση του  $\mathbf{J}$  μπορεί να γίνει με δύο τρόπους, είτε με εύρεση των  $j$  όλων των ηλεκτρονίων και διανυσματική πρόσθεσή τους ( $\mathbf{J} = \Sigma \mathbf{j}_i$ ) είτε με εύρεση των  $\Sigma \mathbf{l}_i$  και  $\Sigma \mathbf{s}_i$  και πρόσθεση τους  $\mathbf{J} = \Sigma \mathbf{l}_i + \Sigma \mathbf{s}_i$ .

Πριν συνεχίσουμε, πρέπει να αναφέρουμε το συμβολισμό που θα ακολουθηθεί, ούτως ώστε να υπάρξει ευκολότερη κατανόηση. Χρησιμοποιούμε κεφαλαία γράμματα για τα μεγέθη που αναφέρονται σε άτομα και μικρά γράμματα για τα μεγέθη που αναφέρονται σε μεμονωμένα ηλεκτρόνια. Επιπλέον, ο συμβολισμός με διάνυσμα αντιστοιχεί στην  $\alpha$  τελεστής ενώ ο συμβολισμός χωρίς διάνυσμα αντιστοιχεί σε κβαντικό αριθμό. Ο επόμενος πίνακας περιέχει συνοπτικά όλους αυτούς τους συμβολισμούς.

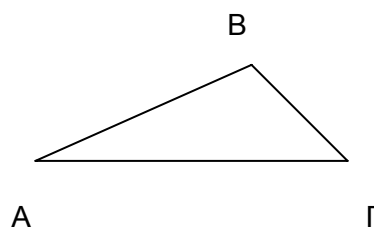
#### Ορισμοί:

1	$\vec{l}, l_z$	Τροχιακή στροφορμή ενός ηλεκτρονίου και η προβολή της στον άξονα $z$ .
2	$l, m_l$	Οι αντίστοιχοι κβαντικοί αριθμοί της τροχιακής στροφορμής ενός

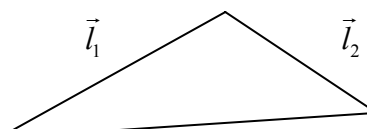
		ηλεκτρονίου.
3	$\vec{s}, s_z$	Στροφορμή σπιν ενός ηλεκτρονίου και η προβολή της στον άξονα $z$ .
4	$s, m_s$	Οι αντίστοιχοι κβαντικοί αριθμοί της στροφορμής σπιν ενός ηλεκτρονίου.
5	$\vec{j}, j_z$	Ολική στροφορμή (τροχιακή και σπιν) ενός ηλεκτρονίου και η προβολή της στον άξονα $z$ .
6	$j, m_j$	Οι αντίστοιχοι κβαντικοί αριθμοί της ολικής στροφορμής ενός ηλεκτρονίου.
7	$\vec{L}, L_z, \vec{S}, S_z,$ $\vec{J}, J_z$	Οι ανάλογοι με τους ορισμούς 1,3,5 για το συνολικό πλήθος ηλεκτρονίων σε ένα άτομο (π.χ. $\vec{L}$ , η ατομική τροχιακή στροφορμή και $\vec{J}$ , η ολική ατομική στροφορμή).
8	$L, M_L, S, M_S,$ $J, M_j$	Οι αντίστοιχοι κβαντικοί αριθμοί με τους 2,4,6 για ένα άτομο (π.χ. $L$ , ατομικός κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής).

Το ερώτημα που τίθεται τώρα, είναι πως μπορούμε να αθροίσουμε τέτοια διανύσματα όπως αυτά των στροφορμών. Το εργαλείο που θα μας βοηθήσει προέρχεται από την διανυσματική ανάλυση και είναι αυτό της τριγωνικής ανισότητας. Σύμφωνα με την ιδιότητα αυτή, όποια πλευρά και να διαλέξουμε θα είναι μεγαλύτερη από την απόλυτη διαφορά των άλλων δύο πλευρών και μικρότερη από το άθροισμά τους. Άρα σε ένα οποιοδήποτε τρίγωνο ΑΒΓ, ισχύει για μια πλευρά του π.χ. την ΑΒ:

$$|(ΒΓ) - (ΑΓ)| \leq (ΑΒ) \leq |(ΒΓ) + (ΑΓ)|$$



Στην περίπτωση της σύνθεσης στροφορμών, δημιουργούμε πάντοτε τρίγωνο του οποίου η συνισταμένη είναι το άθροισμα των στροφορμών που έχουμε επιλέξει. Π.χ. για την τροχιακή στροφορμή ενός ατόμου με δύο ηλεκτρόνια, έχω δύο κβαντικούς αριθμούς  $l_1$  και  $l_2$  αντίστοιχα, για κάθε ηλεκτρόνιο, και η σύνθεσή τους θα είναι  $\vec{l}_1 + \vec{l}_2$ . Οπότε, το τρίγωνο που δημιουργείται είναι το εξής:



$$\vec{l}_1 + \vec{l}_2 = \vec{L}$$

Επομένως, για τους κβαντικούς αριθμούς των στροφορμών θα ισχύει :

$$|l_1 - l_2| \leq L \leq |l_1 + l_2|$$

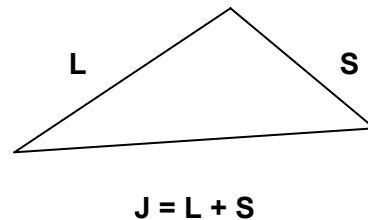
Παρόμοιες ανισότητες θα ισχύουν και για το J και για το S:

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq |j_1 + j_2|$$

$$|s_1 - s_2| \leq S \leq |s_1 + s_2|$$

Όμως, γνωρίζουμε ότι το J υπολογίζεται και μέσω της σχέσης:  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ . Άρα, θα ισχύει η παρακάτω ανισότητα που αναφέρεται στην περίπτωση ολικής στροφορμής του ατόμου:

$$|L - S| \leq J \leq |L + S|$$



και για την περίπτωση ενός ηλεκτρονίου η τριγωνική ιδιότητα μετασχηματίζεται και γίνεται η εξής:

$$|l - s| \leq j \leq |l + s|$$

(Η ισότητα στις προηγούμενες σχέσεις ισχύει στις περιπτώσεις που το τρίγωνο εκφυλίζεται σε ευθύγραμμο τμήμα.)

Παραδείγματα σύνθεσης στροφορμών θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο μετά τη συζήτηση για την αρχή του Pauli.

### **13.4 Αλληλεπίδραση τροχιακής στροφορμής-**

Έως τώρα δεν έχει γίνει καθόλου λόγος για το ρόλο του spin στην ενέργεια. Η ενέργεια του ηλεκτρονίου καθορίζεται από τους συνηθισμένους «χωρικούς»

κβαντικούς αριθμούς. Έτσι, ενδεχομένως να δημιουργήθηκε η εσφαλμένη εντύπωση ότι το spin και ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός του δεν παίζουν κανένα ρόλο στην ενέργεια (παρουσία ή όχι μαγνητικού πεδίου).

Παρατηρώντας καλύτερα τις φασματικές γραμμές ενός ατόμου (π.χ. χρησιμοποιώντας ένα όργανο μεγάλης διακριτικής ικανότητας), θα δούμε ότι υπάρχει διαχωρισμός πολλών γραμμών. Στην πραγματικότητα, κάποιες γραμμές είναι διπλές, με μικρές ενεργειακές διαφορές μεταξύ τους και γι' αυτό οι διπλές αυτές γραμμές απέχουν πολύ μικρή απόσταση η μια από την άλλη. Αυτό είναι το φαινόμενο της *λεπτής υφής*. Πού οφείλεται;

Έχει καμία σχέση με το spin;

Ας θυμηθούμε τους όρους της ενέργειας ενός ατόμου. Θα διαπιστώσουμε ότι πήραμε υπόψη μας για κάθε ηλεκτρόνιο, μόνο την έλξη του πυρήνα και την άπωση που δημιουργούν τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια μέσω του μέσου δυναμικού. Υπάρχουν άλλοι όροι στην ενέργεια;

Αλλάζοντας το σύστημα αναφοράς στο σύστημα ηλεκτρόνιο-πυρήνας και θεωρώντας τον πυρήνα να κινείται γύρω από το ηλεκτρόνιο, δηλαδή αν τοποθετούμε τον παρατηρητή να βρίσκεται στο ηλεκτρόνιο και όχι στον πυρήνα, τότε μπορούμε να θεωρήσουμε ότι δημιουργείται ένα μαγνητικό πεδίο (φαινόμενο μαγνητικό πεδίο  $B_z$ ) λόγω της κίνησης του πυρήνα. Επομένως, υπάρχει επιπλέον ενέργεια για το ηλεκτρόνιο  $U$  που δίνεται από τη σχέση:

$$U = -\mu_s B_z. \quad (13.17).$$

Το ηλεκτρόνιο σ' αυτή την περίπτωση έχει μαγνητική ροπή  $\mu_s$  λόγω του spin και όχι λόγω της τροχιακής του στροφορμής. Το φαινόμενο μαγνητικό πεδίο που «βλέπει» το ηλεκτρόνιο οφείλεται στην τροχιακή στροφορμή. Γράφουμε λοιπόν:

$$B_z \sim L \quad \text{και} \quad \mu_s = (q/m) \mathbf{S} \quad (13.18)$$

Τότε:  $U = (\text{σταθ.}) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (13.19),$

ή για ένα ηλεκτρόνιο:  $U = (\text{σταθ.}) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \quad (13.20).$

Υπάρχει λοιπόν μια αλληλεπίδραση, ενέργεια, η οποία εξαρτάται και από την τροχιακή στροφορμή και από το spin.

**Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται σύζευξη spin-στροφορμής και είναι κάτι καινούργιο για την υπόσταση του spin.**

Για τον υπολογισμό του εσωτερικού γινομένου  $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$  παίρνουμε το εσωτερικό γινόμενο της ολικής στροφορμής του ηλεκτρονίου  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$  με τον εαυτό της. Δηλαδή υψώνουμε τη σχέση  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$  στο τετράγωνο και βρίσκουμε:

$$\mathbf{j}^2 = (\mathbf{l} + \mathbf{s})^2 \Rightarrow |\mathbf{j}|^2 = |\mathbf{l}|^2 + |\mathbf{s}|^2 + 2 \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \Rightarrow \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2} (|\mathbf{j}|^2 - |\mathbf{l}|^2 - |\mathbf{s}|^2)$$

$$\Rightarrow \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2} [j(j+1)\hbar^2 - l(l+1)\hbar^2 - s(s+1)\hbar^2] \quad (13.21)$$

Παρατηρούμε ότι ο καινούργιος όρος κάνει την ενέργεια να εξαρτάται από το  $l$  αλλά και από τα  $m_l, m_s$ .

## Ανακεφαλαίωση

### ΣΧΕΣΕΙΣ:

$$|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$l_z = m_l \hbar, \quad m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad s = \frac{1}{2}$$

$$s_z = m_s \hbar, \quad m_s = \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

$$|\vec{j}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad j = |\ell - s|, |\ell - s| + 1, \dots, \ell + s - 1, \ell + s = \left| \ell - \frac{1}{2} \right|, \dots, \ell + \frac{1}{2}$$

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad j_z = l_z + s_z \quad (\text{θεώρημα προβολών})$$

$$(|\ell - s| \leq j \leq \ell + s) \quad (\text{τριγωνική ιδιότητα})$$

$$j_z = m_j \hbar, \quad m_j = -(m_l + m_s), \dots, (m_l + m_s)$$

$$(m_j = m_l + m_s)$$

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i$$

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$$

$$L_z = M_L \hbar, \quad M_L = -L, \quad -L+1, \dots, 0, \dots, L-1, L$$

$$|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$$

$$S_z = M_S \hbar, \quad M_S = -S, -S+1, \dots, 0, S-1, S$$

$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar \quad J = |L-S|, |L-S|+1, \dots, L+S$$

$$(|L-S| \leq J \leq L+S)$$

$$J_z = M_j \hbar,$$

$$M_j = -J, -J+1, \dots, 0, \dots, -1, J$$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (|\vec{J}|^2 - |\vec{L}|^2 - |\vec{S}|^2) = \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \hbar^2$$

$$(|\vec{J}|^2 = (\vec{L} + \vec{S}))^2$$

Για άτομα με συμπληρωμένες ηλεκτρονικές στιβάδες ισχύει  $L = 0, S = 0, J = 0$ .