Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 7: Διερεύνηση εξίσωσης Schrödinger και απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού

Ανδρέας Τερζής

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να σκιαγραφηθεί η λύση της εξίσωσης Schrödinger.
- Η λύση της Schrödinger εξαρτάται από την μορφή που έχει το δυναμικό. Σε αυτήν την ενότητα θα μελετηθεί το ελεύθερο σωμάτιο (σταθερό δυναμικό) και το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού.

Περιεχόμενα ενότητας

- Χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger
- Ελεύθερο σωμάτιο
- Πρόβλημα ιδιοτιμών ορμής
- Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού

Ο τελεστής της χαμιλτονιανής

- Όπως έχουμε αναφέρει η μορφή της χρονοεξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger είναι
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\Psi(x,t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$
- Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφεί ως
$$\widehat{\mathrm{H}}\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$
- Ο τελεστής $\widehat{\mathrm{H}}$ είναι ο τελεστής της χαμιλτονιανής και ορίζεται ως $\widehat{\mathrm{H}}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{V(x)}$. Είναι γραμμικός, όπως όλοι οι τελεστές που έχουν φυσική σημασία στην κβαντομηχανική.

Επίλυση της εξίσωσης Schrödinger

- Στα πλαίσια αυτού του μαθήματος ασχολούμαστε με δυναμικά που έχουν μόνο χωρική εξάρτηση.
- Αυτός είναι και ο λόγος που μπορούμε να κάνουμε χρήση της μεθόδου χωριζομένων μεταβλητών για την επίλυση της εξίσωσης.
- Σύμφωνα με την μέθοδο χωριζομένων μεταβλητών μπορούμε να γράψουμε την γενική μορφή της λύσης ως $\Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$.

Μέθοδος χωριζομένων μεταβλητών

- Αντικαθιστούμε την μορφή της λύσης στην εξίσωση και έχουμε:

$$\widehat{\mathrm{H}}\psi(x)T(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)T(t)$$

- Διαιρούμε με $\psi(x)T(t)$ και καταλήγουμε:

$$i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)$$

Το πρώτο μέλος της εξίσωσης που εξαρτάται μόνο από τον χρόνο, ισούται με το δεύτερο μέλος που εξαρτάται μόνο από την θέση. Για να είναι αυτό δυνατό, θα πρέπει τα δύο μέλη να είναι ίσα με μια σταθερά.

Αποτελέσματα της μεθόδου

- Αν θέσουμε λοιπόν τα δύο μέλη με μια σταθερά, παίρνουμε τις εξείς δύο εξισώσεις:

1. $\frac{d\mathrm{T}(t)}{dt} = -i\frac{C}{\hbar}\mathrm{T}(t)$ με λύση $\mathrm{T(t)} = e^{-\frac{iCt}{\hbar}}$.
2. $\widehat{\mathrm{H}}\psi(x) = \mathrm{C}\psi(x)$, που είναι ένα πρόβλημα ιδιοτιμών και η λύση του εξαρτάται κάθε φορά από την μορφή του δυναμικού.

Σχόλια:

- Η σταθερά C είναι ουσιαστικά η ολική ενέργεια του συστήματος.
- Αν θέλουμε να είμαστε τυπικοί, η λύση (1) έχει έναν συντελεστή μπροστά. Ο λόγος που τον παραλείπουμε είναι ότι «απορροφάται» από την σταθερά νορμαλισμού.
- Αν λοιπόν E είναι η ολική ενέργεια του συστήματος έχουμε ότι $\widehat{\mathrm{H}}\psi(x) = \mathrm{E}\psi(x)$. Αυτή η εξίσωση ιδιοτιμών είναι η λεγόμενη **χρονοανεξάρτητη εξίσωση** Schr$\ddot{o}$dinger . Η συνέχεια του μαθήματος θα επικεντρωθεί στις λύσεις αυτής για διάφορα δυναμικά.

Στάσιμες καταστάσεις

- Η λύση λοιπόν της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης Schrödinger γράφεται ως

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Αυτές οι καταστάσεις ονομάζονται **στάσιμες**. Η κυματοσυνάρτηση εξαρτάται μεν από τον χρόνο, όμως η πυκνότητα πιθανότητας $\mathrm{p}(x,t) = |\psi(x,t)|^2 =$ $= |\psi(x)|^2$ είναι χρονοανεξάρτητη.

Ελεύθερο σωμάτιο

- Γενικά στην φυσική το ελεύθερο σωμάτιο είναι εκείνο το σωμάτιο στο οποίο δεν ασκείται καμία εξωτερική δύναμη. Στην κβαντομηχανική με αυτόν τον όρο αναφερόμαστε σε μια περιοχή σταθερού δυναμικού(συνήθως μηδενικού δυναμικού).
- Θέτοντας επομένως $V(x) = 0$ η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schr$\ddot{o}$dinger παίρνει την μορφή $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x)$ ή

$$\frac{d^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

Θέτουμε $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, και άρα η εξίσωση γίνεται $\psi'' + k^2\psi = 0$.

Επομένως $\mathrm{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ με το k να παίρνει συνεχείς τιμές. Οι λύσεις της εξίσωσης είναι της μορφής $\psi(x) = e^{ikx}, k \in \ (-\infty, +\infty)$.

Πρόβλημα ιδιοτιμών ορμής

- Η εξίσωση ιδιοτιμών για την ορμή είναι

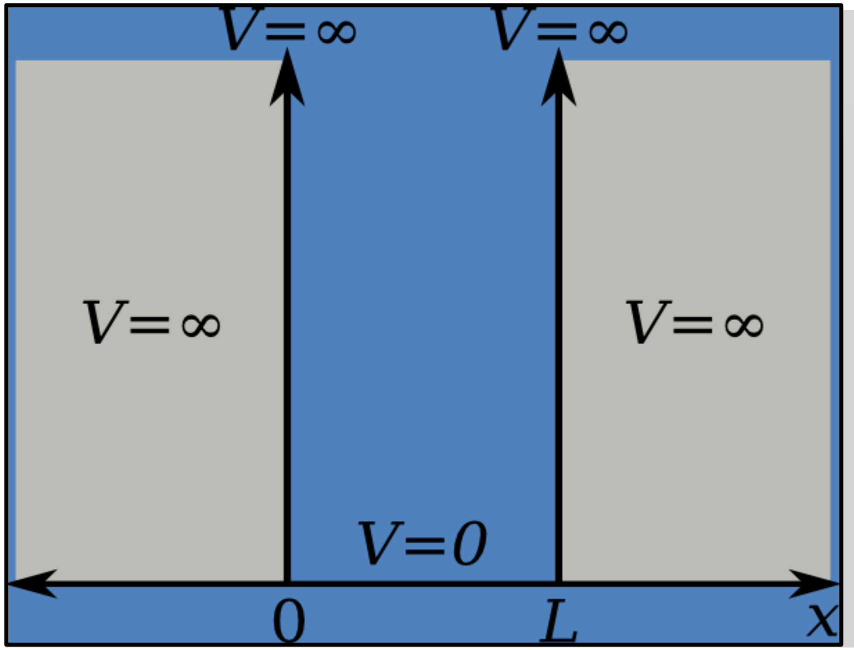
$$\hat{p}\psi = p\psi \Longrightarrow -i\hbar\frac{d\psi}{dx} = p\psi \Longrightarrow \int\frac{d\psi}{\psi} = \frac{ip}{\hbar}\int dx \Longrightarrow$$

$$\psi_p = Ce^{ipx/\hbar}$$

Αυτές είναι οι ιδιοσυναρτήσεις της ορμής.

Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού

Εικόνα 1: Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού



- Όταν λέμε ότι ένα σωμάτιο βρίσκεται σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού εννοούμε ότι έχει εγκλωβιστεί σε μια πεπερασμένη περιοχή του χώρου(σύμφωνα με την διπλανή εικόνα θα είναι εγκλωβισμένο στην περιοχή από 0 έως L).

Μελέτη-Εξωτερικά του πηγαδιού

- Το δυναμικό που περιγράφει το απειρόβαθο πηγάδι (όπως φαίνεται και στην εικόνα (1))έχει την μορφή
- $V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ \infty, & x < 0, x > L \end{cases}$
- Θα χωρίσουμε ουσιαστικά το πρόβλημά μας σε δύο περιοχές επειδή δύο είναι και οι τιμές των δυνατών δυναμικών.

1. Εξωτερικά του πηγαδιού.

Στις περιοχές $x < 0$ και $x > L$ έχουμε άπειρη δυναμική ενέργεια. Έχουμε αναφέρει ότι όταν $x \rightarrow \pm\infty$ θα πρέπει $\psi(x) = 0$, για να είναι η $\psi(x)$ γενικά τετραγωνικά ολοκληρώσιμη. Άρα σε αυτές τις περιοχές, η κυματοσυνάρτηση θα είναι μηδέν , που σημαίνει ότι δεν υπάρχει πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο.

Μελέτη-Εσωτερικά του πηγαδιού

2. Εσωτερικά του πηγαδιού:

Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger θα έχει την μορφή: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)^2 \psi =$
$$= -k^2\psi \quad (1)$$

Η γενική λύση αυτής της εξίσωσης είναι
$$\psi(x) = Asinkx + Bcoskx \quad (2)$$

Συνοριακές συνθήκες

- Εφ'όσον έχουμε την γενική λύση, κάνουμε χρήση των συνοριακών συνθηκών, $\psi(0) = 0, \psi(\mathrm{L}) = 0$. Συμπεραίνουμε:

1. $\psi(0) = 0 \Rightarrow \mathrm{B} = 0$
2. $\psi(L) = 0 \Rightarrow AsinkL = 0 \Rightarrow A = 0$ ή $sinkL = 0$.

- Αν $\mathrm{A} = 0$, θα ισχύει ότι $\psi(x) = 0$ (επειδή έχουμε και $\mathrm{B} = 0$). Κάτι τέτοιο όμως δεν έχει φυσική σημασία στο πρόβλημά μας, καθώς υπονοεί ότι δεν υπάρχει σωμάτιο.
- Άρα επιλέγουμε $sinkL = 0 \Rightarrow \mathrm{kL} = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi$ …

Συνοριακές συνθήκες(συνέχεια)

- Για $k = 0$ θα είχαμε $\psi(x) = 0$, που όπως είπαμε είναι άτοπο.
- Άρα $kL = \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi$ …
- Πιο συγκεκριμένα, μπορούμε να γράψουμε

$$kL = \pi, 2\pi, 3\pi..$$

αφού το «-» δεν προσθέτει κάποια καινούρια πληροφορία απ' ότι το «+». Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι απορροφάται στο πλάτος A της κυματοσυνάρτησης.

Τελική έκφραση για την ενέργεια

- Άρα $k_n L = n\pi \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{\mathrm{L}}, n = 1,2,3,..$ (3)
- Από την σχέση (1) έχουμε για τις ιδιοτιμές τις ενέργειας $E_n = \frac{\hbar^2 {k_n}^2}{2m}$ (4)
- Αντικαθιστώντας την (3) στην (4) παίρνουμε την σχέση: $\mathrm{E}_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \;\; (n = 1,2,3,..)$, που είναι η τελική έκφραση για τις ιδιοτιμές της ενέργειας.

Τελική έκφραση για τις ιδιοσυναρτήσεις

- Αντικαθιστώντας την (3) στην (2) (και λαμβάνοντας υπ' όψη ότι $\mathrm{B} = 0$) έχουμε για τις ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας ότι

$$\psi_n(x) = A_n sin\frac{n\pi}{L}x$$

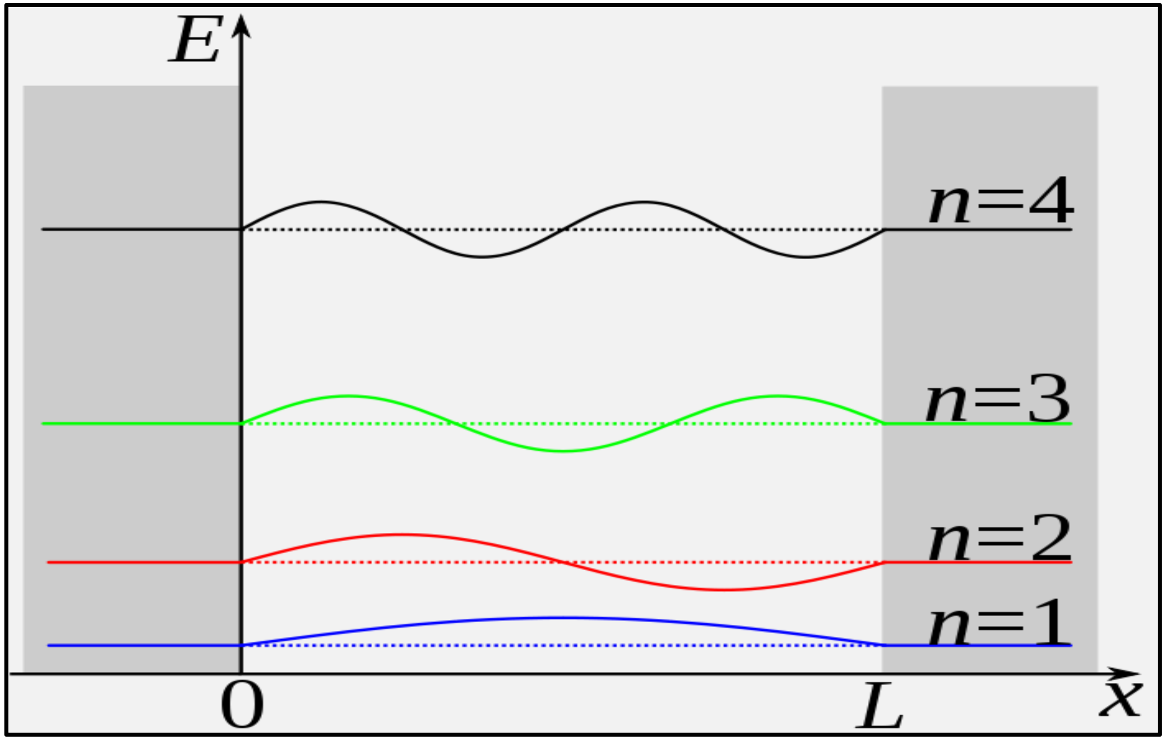
Τα πλάτη A_n θα προσδιοριστούν από την συνθήκη νορμαλισμού. Δηλαδή:

$$1 = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = |A_n|^2 \frac{L}{2} \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Άρα η τελική μορφή των ιδιοσυναρτήσεων είναι

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L}.$$

Ιδιοσυναρτήσεις απειρόβαθου



Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών, Ανδρέας Τερζής. Ανδρέας Τερζής «Κβαντική Φυσική Ι. Διερεύνηση εξίσωσης Schrödinger και απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης

Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

Εικόνα 1: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Infinite_potential_well.svg

Εικόνα 2: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Particle_in_a_box_wavefunctions.svg