Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 20: Τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού- Δέσμιες καταστάσεις

Ανδρέας Τερζής

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να μελετήσει τις δέσμιες καταστάσεις σε τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού.

Περιεχόμενα ενότητας

- Μη συμμετρικό τετραγωνικό πηγάδι-σκιαγράφηση διαδικασίας
- Συμμετρικό τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού

Ασύμμετρο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού

- Η συνάρτηση του δυναμικού μας έχει ως εξής:

$$V(x) = \begin{cases} V_1, x < 0 \\ 0, 0 < x < L \\ V_3\ , x > L \end{cases}$$

όπου L είναι το πάχος του πηγαδιού και $\mathrm{V}_3 > V_1$.

- Ακόμη, έχουμε δέσμια κατάσταση με $\mathrm{E} < V_1$. (Συνεπώς ικανοποιείται το κριτήριό μας $V(\pm\infty) > E$ για τις δέσμιες καταστάσεις).

Εξίσωση Schrödinger

- Το πρόβλημά μας έχει τρεις διαφορετικές περιοχές, έστω I (δυναμικό V_1), II (δυναμικό V_2) και III (δυναμικό V_3). Άρα το πρόβλημά μας θα απαρτίζεται από τρεις εξισώσεις Schrödinger.
- Οι εξισώσεις μας λοιπόν θα είναι:

$$\psi_{\mathrm{I}}'' + \frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}(E - V_1)\psi_{\mathrm{I}} = 0,$$

$$\psi_{\mathrm{II}}'' + \frac{2\mathrm{mE}}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{II}} = 0,$$

$$\psi_{\mathrm{III}}'' + \frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}(E - V_3)\psi_{\mathrm{III}} = 0$$

Εξισώσεις Schrödinger-απλοποιημένη γραφή

- Για να απλοποιήσουμε την γραφή των εξισώσεων θέτουμε

$$\gamma_1{}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E),$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

$$\gamma_3{}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_3 - E).$$

- Έτσι οι εξισώσεις μας γράφονται ως:

$$\psi_{\mathrm{I}}'' - \gamma_1{}^2\psi_{\mathrm{I}} = 0,$$

$$\psi_{\mathrm{II}}'' + k^2\psi_{\mathrm{II}} = 0,$$

$$\psi_{\mathrm{III}}'' - \gamma_3{}^2\psi_{\mathrm{III}} = 0.$$

Οι λύσεις

- Η γενική μορφή των λύσεων, έτσι όπως την επιβάλλουν τα μαθηματικά, είναι:

$$\psi_{\mathrm{I}} = \mathrm{A}_{+}e^{\gamma_1 x} + A_{-}e^{-\gamma_1 x},$$
$$\psi_{\mathrm{II}} = \mathrm{B}_{+}\mathrm{e}^{ikx} + B_{-}e^{-ikx},$$
$$\psi_{\mathrm{III}} = \mathrm{C}_{+}e^{\gamma_3 x} + C_{-}e^{-\gamma_3 x}.$$

- Θέτουμε τώρα τους φυσικούς περιορισμούς. Απαιτούμε οι κυματοσυναρτήσεις μας στο $\pm\infty$ να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες.
- Πιο συγκεκριμένα πρέπει $\psi_{\mathrm{I}}(x \to -\infty) = 0$. Άρα $\mathrm{A}_{-} = 0$. Ακόμη, $\psi_{\mathrm{III}}(x \to +\infty) = 0$. Άρα $C_{+} = 0$.
- Η τελική μορφή των λύσεών μας είναι λοιπόν

$$\psi_{\mathrm{I}} = \mathrm{A}_{+}e^{\gamma_1 x}$$
$$\psi_{\mathrm{II}} = \mathrm{B}_{+}\mathrm{e}^{ikx} + B_{-}e^{-ikx},$$
$$\psi_{\mathrm{III}} = C_{-}e^{-\gamma_3 x}.$$

Συνοριακές συνθήκες

- Όπως είπαμε και στην προηγούμενη ενότητα, στα σημεία που αλλάζει το δυναμικό, παίρνουμε δύο συνθήκες: 1)την συνέχεια της κυματοσυνάρτησης, 2)την συνέχεια της πρώτης παραγώγου της. Επομένως:
- Για $x = 0$: $\psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0), \psi'_{\mathrm{I}}(0) = \psi'_{\mathrm{II}}(0)$.
- Για $x = L$: $\psi_{\mathrm{II}}(L) = \psi_{\mathrm{III}}(L), \psi'_{\mathrm{II}}(L) = \psi'_{\mathrm{III}}(L)$.
- Από τις παραπάνω συνθήκες καταλήγουμε στις εξής εξισώσεις:

$$-\mathrm{A}_+ + \mathrm{B}_+ + \mathrm{B}_- + 0\mathrm{C}_- = 0,$$
$$\gamma_1 A_+ + ikB_+ - ikB_- + 0C_- = 0,$$
$$0A_+ + B_+e^{ikL} + B_-e^{-ikL} - C_-e^{-\gamma_3 L} = 0,$$
$$0A_+ + ikB_+e^{ikL} - ikB_-e^{-ikL} + \gamma_3 C_-e^{-\gamma_3 L} = 0.$$

Επίλυση του συστήματος

- Το σύστημά μας σε μορφή πινάκων είναι:

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & 0 \\ -\gamma_1 & ik & -ik & 0 \\ 0 & e^{ikL} & e^{-ikL} & -e^{-\gamma_3 L} \\ 0 & ike^{ikL} & -ike^{-ikL} & \gamma_3 e^{-\gamma_3 L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_+ \\ B_+ \\ B_- \\ C_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Για να επιλύσουμε το σύστημα προχωράμε με την μέθοδο οριζουσών Cramer.

Συμμετρικό τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού

- Η συνάρτηση του δυναμικού στην δεδομένη περίπτωση θα είναι

$$V = \begin{cases} V_0, x < -L \\ 0, -L < x < L \\ V_0, x > L \end{cases}$$

Έχουμε πάλι την περίπτωση των δέσμεων καταστάσεων και θεωρούμε $\mathrm{E} < \mathrm{V}_0$.

- Το δυναμικό μας παρουσιάζει συμμετρία. Θυμηθείτε ότι όταν $V(-x) = V(x)$, διατηρείται η αρτιότητα. Με λίγα λόγια, οι λύσεις μας θα είναι αυστηρά είτε άρτιες, είτε περιττές.

Εξισώσεις Schrödinger

- Έχουμε πάλι τρεις περιοχές και οι εξισώσεις μας έχουν την μορφή:

$$\psi_{\mathrm{I}}'' + \frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_{\mathrm{I}} = 0,$$

$$\psi_{\mathrm{II}}'' + \frac{2\mathrm{mE}}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{II}} = 0,$$

$$\psi_{\mathrm{III}}'' + \frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_{\mathrm{III}} = 0.$$

- Για να απλοποιήσουμε την γραφή των εξισώσεων θέτουμε

$$\gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E),$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

- Έτσι οι εξισώσεις μας γράφονται ως:

$$\psi_{\mathrm{I}}'' - \gamma^2\psi_{\mathrm{I}} = 0,$$
$$\psi_{\mathrm{II}}'' + k^2\psi_{\mathrm{II}} = 0,$$
$$\psi_{\mathrm{III}}'' - \gamma^2\psi_{\mathrm{III}} = 0.$$

Λύσεις

- Λαμβάνοντας υπ’ όψη ότι οι λύσεις μας είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες καταλήγουμε στις εξής μορφές:

$$\psi_{\mathrm{I}} = \mathrm{A}e^{\gamma x}$$
$$\psi_{\mathrm{II}} = \mathrm{Bcoskx} + B' sinkx,$$
$$\psi_{\mathrm{III}} = Ce^{-\gamma x}.$$

Άρτιες λύσεις

- Δεδομένου ότι οι κυματοσυναρτήσεις μας θα πρέπει να είναι είτε άρτιες είτε περιττές, θα διαχωρίσουμε δύο περιπτώσεις:

1. ΑΡΤΙΕΣ ΛΥΣΕΙΣ

Για την περιοχή II θα έχουμε $\psi_{\mathrm{II}} = \mathrm{Bcoskx}$. Κρατάμε μόνο το κομμάτι του συνημιτόνου, που είναι άρτια συνάρτηση(ενώ το ημίτονο, περιττή). Επιπλέον για να έχουμε άρτια λύση θα πρέπει $\mathrm{A} = \mathrm{C}$.

Άρα οι λύσεις μας για τις τρεις περιοχές γράφονται ως:

$$\psi_{\mathrm{I}} = \mathrm{A}e^{\gamma x}, \psi_{\mathrm{II}} = \mathrm{Bcoskx}, \psi_{\mathrm{III}} = \mathrm{A}e^{-\gamma x}.$$

Συνοριακές συνθήκες

Οι συνοριακές μας συνθήκες έχουν ως εξής:

- Για $x = -L$: $\psi_{\mathrm{I}}(-L) = \psi_{\mathrm{II}}(-L) \Rightarrow$

$Ae^{-\gamma L} = BcoskL$ και

$$\psi_{\mathrm{I}}'(-\mathrm{L}) = \psi_{\mathrm{II}}{}'(-\mathrm{L}) \Rightarrow$$

$A\gamma e^{-\gamma L} = BksinkL.$

- Για $x = L$: $\psi_{\mathrm{II}}(L) = \psi_{\mathrm{III}}(L) \Rightarrow$

$Ae^{-\gamma L} = BcoskL$ (1) και

$$\psi_{\mathrm{II}}'(\mathrm{L}) = \psi_{\mathrm{III}}{}'(\mathrm{L}) \Rightarrow$$

$A\gamma e^{-\gamma L} = BksinkL.$ (2)

Όπως παρατηρούμε, οι συνθήκες καταλήγουν στις ίδιες εξισώσεις. Διαιρούμε την σχεση (2) με την (1) και καταλήγουμε στην συνθήκη

$$\boldsymbol{tankL = \frac{\gamma}{k}}$$

Περιττές λύσεις

2. ΠΕΡΙΤΤΕΣ ΛΥΣΕΙΣ

Για την περιοχή II θα έχουμε $\psi_{\mathrm{II}} = \mathrm{B}'\mathrm{sinkx}$. Κρατάμε μόνο το κομμάτι του ημιτόνου, που είναι περιττή συνάρτηση. Επιπλέον για να έχουμε περιττή λύση θα πρέπει $\mathrm{A} = -\mathrm{C}$.

Άρα οι λύσεις μας για τις τρεις περιοχές γράφονται ως:

$$\psi_{\mathrm{I}} = -\mathrm{C}e^{\gamma x}, \psi_{\mathrm{II}} = \mathrm{B}'\mathrm{sinkx}, \psi_{\mathrm{III}} = \mathrm{C}e^{-\gamma x}.$$

Συνοριακές συνθήκες

- Για $x = L$: $\psi_{\mathrm{II}}(\mathrm{L}) = \psi_{\mathrm{III}}(\mathrm{L}) \Rightarrow$

$B' sinkL = Ce^{-\gamma \mathrm{L}}$ (1)

$$\psi_{\mathrm{II}}'(\mathrm{L}) = \psi_{\mathrm{III}}{}'(\mathrm{L}) \Rightarrow$$

$kB' coskL = -C\gamma \mathrm{e}^{-\gamma L}$ (2)

- Διαιρούμε την (1) με την (2) και έχουμε:

$$\boldsymbol{tankL = -\frac{k}{\gamma}}$$

Διερεύνηση Ι

- Έχουμε $\mathrm{k}^2 + \gamma^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = U_0$.
- Σύμφωνα με τα παραπάνω μπορούμε να γράψουμε

$$k = \sqrt{U_0} cos\theta$$
$$\gamma = \sqrt{\mathrm{U}_0} sin\theta$$

(αφού $cos^2\theta + sin^2\theta = 1$)

- Εφ’ όσον $k, \gamma > 0$, $\theta \exists \left(0, \frac{\pi}{2}\right)$.

Διερεύνηση ΙΙ

- Για την περίπτωση των άρτιων λύσεων θα έχουμε:

$$tankL = \frac{\gamma}{k} = \frac{\sqrt{\mathrm{U}_0}sin\theta}{\sqrt{U_0}cos\theta} = tan\theta$$

- Καταλήξαμε στην τριγωνομετρική εξίσωση $tankL = tan\theta$, η οποία έχει ως λύση την

$kL = \theta + n\pi$ ή $\boldsymbol{kL = \theta + 2n\frac{\pi}{2}}$ με $n = 0,1,2 \dots$

- Για την περίπτωση των περιττών λύσεων θα έχουμε:

$$tankL = -\frac{k}{\gamma} = -\frac{\sqrt{\mathrm{U}_0}\cos\theta}{\sqrt{U_0}\sin\theta} = -\frac{cos\theta}{sin\theta} = \frac{\sin\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right)}{\cos\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right)} = \tan\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right)$$

Άρα η λύση θα είναι $kL = n'\pi + \theta + \frac{\pi}{2}$ ή $\boldsymbol{kL = \theta + (2n' + 1)\frac{\pi}{2}}$ με $n' = 0,1,2..$

Τελικά συμπεράσματα

- Καταλήξαμε λοιπόν στις τριγωνομετρικές λύσεις

$kL = \theta + 2n\frac{\pi}{2}$, με $n = 0,1,2 \ldots$ για την περίπτωση των άρτιων κυματοσυναρτήσεων και

$kL = \theta + (2n' + 1)\frac{\pi}{2}$ με $n' = 0,1,2..$

- Οι λύσεις αυτές μπορούν να ενοποιηθούν σε μια, διότι παρατηρούμε ότι ο συντελεστής του $\frac{\pi}{2}$ μπορεί να είναι και άρτιος και περιττός.
- Άρα μπορούμε να εκφράσουμε την λύση μας ως

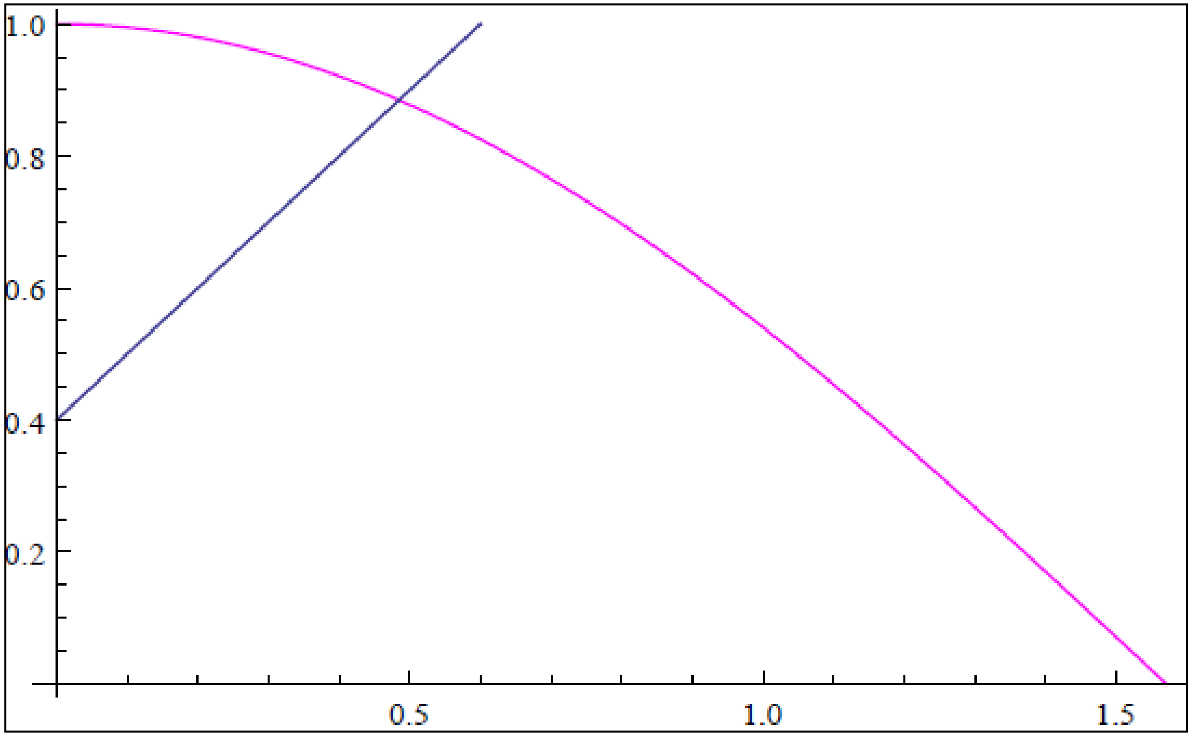
$$\boldsymbol{kL = \theta + \frac{n\pi}{2}}$$

με $n = 0,1,2 \ldots$ και για τις δύο περιπτώσεις.

Γραφική διερεύνηση των λύσεων

- Θα δούμε τώρα με συντομία πώς μπορούμε να διερευνήσουμε γραφικά τις λύσεις:
- $kL = \theta + \frac{n\pi}{2} \Rightarrow \sqrt{U_0}Lcos\theta = \theta + \frac{n\pi}{2}$.
- Ορίζουμε $\lambda = \sqrt{U_0}\mathrm{L}$ και η εξίσωση λαμβάνει την μορφή: $cos\theta = \frac{\theta}{\lambda} + \frac{n\pi}{2\lambda}$.
- Η τομή των γραφικών $y_1 = \frac{\theta}{\lambda} + \frac{n\pi}{2\lambda}$ και $y_2 = cos\theta$, αποτελεί την ζητούμενη λύση και προφανώς αντιστοιχεί σε δέσμια κατάσταση. Αν οι παράμετροι της εξίσωσης ήταν τέτοιοι ώστε να μην υπάρχει τομή, τότε δεν θα είχαμε δέσμια κατάσταση.
- Παρακάτω φαίνεται γραφικά ένα παράδειγμα.

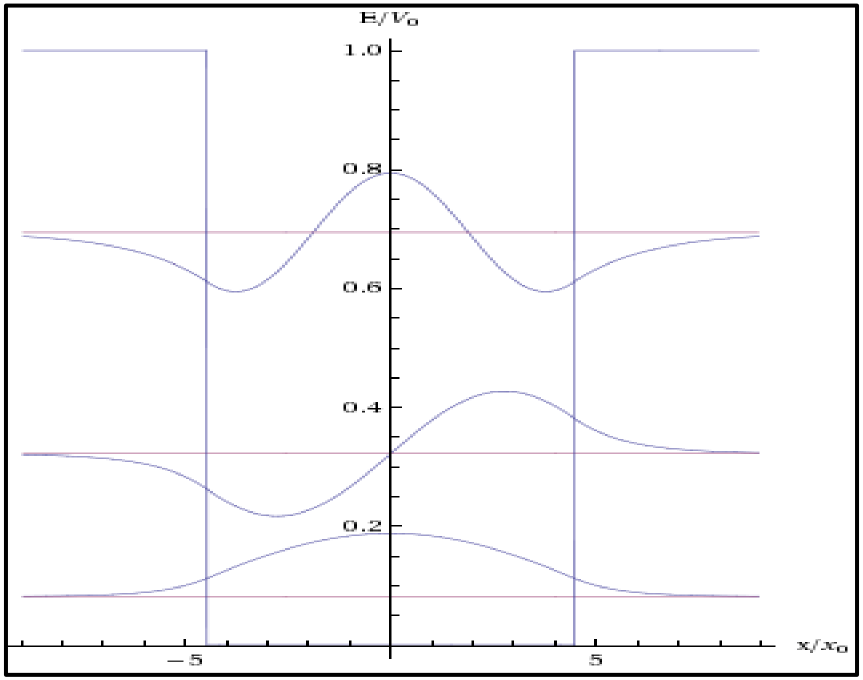
Παράδειγμα δέσμιας κατάστασης



Η συνάρτηση y_2 αναπαρίσταται με ροζ χρώμα, ενώ με μπλε συμβολίζεται η $y_1 = \frac{\theta}{\lambda} + \frac{n\pi}{2\lambda}$. Το σημείο τομής τους αποτελεί την λύση.

Απεικόνιση ιδιοσυναρτήσεων

Εικόνα 1: Δέσμιες καταστάσεις σε τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού



- Ο κάθετος άξονας είναι ο λόγος $\frac{\mathrm{E}}{V_0}$ και ο οριζόντιος ο λόγος x/x_0. Έχουμε διατήρηση της αρτιότητας: Η θεμελιώδης κατάσταση είναι άρτια (συμμετρία ως προς τον κάθετο άξονα), η πρώτη διεγερμένη περιττή (συμμετρία ως προς την αρχή των αξόνων), η δεύτερη διεγερμένη πάλι άρτια και αν είχαμε περισσότερες καταστάσεις, θα είχαμε αυτού του είδους τις εναλλαγές.

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.

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών,Ανδρέας Τερζής ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι. Τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού-Δέσμιες καταστάσεις». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2014. 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:Finite-well-solutions.gif