Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 21: Δέλτα πηγάδι δυναμικού

Ανδρέας Τερζής
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να μελετήσει το δέλτα πηγάδι δυναμικού, το οποίο αποτελεί μια οριακή περίπτωση του τετραγωνικού.

Περιεχόμενα ενότητας

- Εφαρμογή στο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού
- Δέλτα πηγάδι-ορισμός
- Δέλτα πηγάδι-δέσμιες καταστάσεις

Άσκηση στο τετραγωνικό πηγάδι

- Θεωρούμε τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού πάχους $2L$ και ύψους V_0. Έστω ότι το σύστημα βρίσκεται στην πρώτη του διεγερμένη κατάσταση E_1. Να βρεθεί η νορμαλισμένη κυματοσυνάρτηση του συστήματος.

➢ Επίλυση:

Έχουμε περιττές λύσεις(πρώτη διεργερμένη) της μορφής $\psi_\mathrm{A} = \mathrm{A}e^{\gamma x}, \psi_\mathrm{B} = \mathrm{Bsinkx}, \psi_C = -Ae^{-\gamma x}$.

Νορμαλισμός

- Θα έχουμε:

$$\int_{-\infty}^{-L} {\psi_{\mathrm{A}}}^2 dx + \int_{-L}^{L} {\psi_{\mathrm{B}}}^2\, dx + \int_{L}^{+\infty} {\psi_C}^2\, dx =$$

$$B^2 \int_{-\mathrm{L}}^{L} sin^2 kx dx + 2A^2 \int_{L}^{+\infty} e^{2\gamma x}\, dx =$$

$$B^2 L - \frac{B^2}{2k} sin2kL + \frac{A^2}{\gamma} e^{-2\gamma L}.$$

Ξέρουμε ότι $\mathrm{BsinkL} = \mathrm{A}e^{-\gamma L}$. Άρα συνεχίζοντας τις πράξεις παίρνουμε

$$\mathrm{B}^2 sin^2 kL \left[\frac{L}{sin^2 kL} - \frac{1}{ktankL} + \frac{1}{\gamma}\right].$$

Τελικά αποτελέσματα

- Ισχύει ότι $tankL = -\frac{k}{\gamma}$. Επομένως έχουμε:

$$\mathrm{B}^2 sin^2 kL\left[\frac{1}{\gamma}+\frac{\gamma}{k^2}+\frac{L(k^2+\gamma^2)}{k^2}\right] = B^2\left[\frac{1+L\gamma}{\gamma}\right] = 1$$

- Άρα $B = \left[\frac{\gamma}{1+L\gamma}\right]^{\frac{1}{2}}$.
- Ο συντελεστής Α προσδιορίζεται από την σχέση

$$\mathrm{A} = \mathrm{BsinkL}e^{\gamma L} = \sqrt{\frac{\gamma}{1+L\gamma}}\frac{k}{\sqrt{k^2+\gamma^2}}.$$

- Τα k, γ προσδιορίζονται από τις γνωστές σχέσεις :

$$k = \sqrt{\frac{2mE_1}{\hbar^2}}, \qquad \gamma = \sqrt{\frac{2m(\mathrm{V}_0 - E_1)}{\hbar^2}}$$

Το δέλτα πηγάδι δυναμικού ως οριακή περίπτωση του τετραγωνικού

- Έστω το τετραγωνικό πηγάδι

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

- Πραγματοποιώντας την ανάλυση που κάναμε και στην προηγούμενη ενότητα βρίσκουμε ότι $\gamma = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}, \mathrm{k} = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$.
- Το δέλτα πηγάδι δυναμικού, που είναι της μορφής $V(x) = -c\delta(x)$, μπορεί να θεωρηθεί ως μια οριακή περίπτωση του τετραγωνικού, καθώς $L \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty$, έτσι ώστε το εμβαδόν του εσωτερικού του πηγαδιού να είναι σταθερό.
- Η παραπάνω συνθήκη μεταφράζεται ως $2LV_0 = c$. (1)
- Ας πάρουμε τώρα την περίπτωση των άρτιων λύσεων.

Εύρεση ιδιοενεργειών

- Οι ιδιοενέργειες σ' αυτό το τετραγωνικό πηγάδι και στην περίπτωση των άρτιων λύσεων δίνονται από την σχέση

$tankL = \frac{-\gamma}{k} = tanz = \sqrt{\frac{{z_0}^2}{z^2} - 1}$, με $z_0 = \frac{L}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$,
$z = \frac{L}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}$.

- Αντικαθιστούμε το V_0 από την (1) και έχουμε:

$$z_0 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{mcL}, z = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mL^2E + mLc}$$

- Καθώς $L \longrightarrow 0$, $z_0/z \longrightarrow 1$ κι έτσι μπορούμε να θεωρήσουμε $tanz \approx z$.

- Επομένως μπορούμε να γράψουμε $z = \sqrt{\frac{{z_0}^2}{z^2} - 1}$.

Τελική έκφραση

- Αντικαθιστώντας τα $z_{0,}$ z με τις εκφράσεις τους και λύνοντας ως προς E καταλήγουμε στην ιδιοενέργειες του πηγαδιού δέλτα:

$$\mathrm{E} = \frac{-mc^2}{2\hbar^2}$$

- Παρακάτω θα δούμε πώς προκύπτουν αυτές με την κλασική μεθοδολογία των εξισώσεων Schrödinger.

Εξίσωση Schrödinger για δέλτα πηγάδι δυναμικού

- Το δυναμικό τώρα θα έχει την μορφή
$$V(x) = -c\delta(x),$$

όπου c είναι μια θετική σταθερά.

- Αυτή λοιπόν η μορφή του δυναμικού, αναπαριστά ένα πηγάδι με άπειρο βάθος και απειροελάχιστο πλάτος.
- Αφού η $\delta(x)$ απειρίζεται για $x = 0$ ανεξάρτητα από την τιμή της σταθεράς c, η c δεν εκφράζει το βάθος του πηγαδιού, αλλά την «ισχύ» του πηγαδιού. Θα δούμε και παρακάτω τι ακριβώς εννοούμε με αυτό.
- Αφού $\delta(x) = 0$ παντού εκτός από το $x = 0$, η εξίσωση Schrödinger είναι
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi.$$
- Θα θεωρήσουμε δέσμιες καταστάσεις. Έτσι θα πρέπει $\mathrm{E} < 0$ (αφού η ενέργεια θα πρέπει να είναι μικρότερη από το δυναμικό που έχει μέγιστη τιμή $V(x) = 0$).

Εξίσωση Schrödinger-Λύσεις

- Η εξίσωση μπορεί να γραφεί ως

$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \gamma^2\psi$ με $\gamma = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$ (αφού $\mathrm{E} < 0$).

- Οι λύσεις στις δύο περιοχές θα είναι της γενικής μορφής

$$\psi = Ce^{\gamma x} + \mathrm{D}e^{-\gamma x}.$$

- Επειδή πρέπει να είναι και τετραγωνικά ολοκληρώσιμες θα έχουμε: $\psi_{\mathrm{I}} = \mathrm{Ae}^{\gamma x}, \psi_{II} = Be^{-\gamma x}$.
- Εφαρμόζοντας την συνοριακή συνθήκη $\psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{II}(0)$ συμπεραίνουμε ότι $\mathrm{A} = \mathrm{B}$.

Συνοριακές συνθήκες

- Το δυναμικό απειρίζεται για $x = 0$. Άρα δεν μπορούμε να εγγυηθούμε για την συνέχεια της πρώτης παραγώγου όπως κάναμε συνήθως.
- Η λύση σε αυτήν την περίπτωση είναι να ολοκληρώσουμε την Schrödinger σε μια πολύ μικρή περιοχή κοντά στο σύνορο.
- Η εξίσωση Schrödinger είναι

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - c\delta(x)\psi = \mathrm{E}\psi$$

- Ολοκληρώνοντας έχουμε

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

Ιδιοενέργειες

- Υπολογίζουμε τα ολοκληρώματα

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{d\psi}{dx}\Big|_{\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx}\Big|_{-\varepsilon}\right] - c\psi(0) = \mathrm{E}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi dx$$

- Παίρνοντας το ολοκλήρωμα του αριστερού μέλους καθώς $\varepsilon \longrightarrow 0$, αυτό μηδενίζεται γιατί είναι το ολοκλήρωμα μιας συνεχούς συνάρτησης σε ένα απειροελάχιστο διάστημα. Ο πρώτος όρος του αριστερού μέλους δεν θα είναι μηδέν διότι η συνάρτηση προς ολοκλήρωση δεν είναι συνεχής.

- Άρα έχουμε $\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\psi_{\mathrm{I}}'(0) - \psi_{\mathrm{II}}{}'(0)\right) = cB \Longrightarrow$

$$\frac{\hbar^2}{m}\gamma B = cB \Rightarrow \gamma = \frac{mc}{\hbar^2} \Rightarrow \mathrm{E} = \frac{-mc^2}{2\hbar^2}$$

Νορμαλισμός

- Όπως και στην περίπτωση του απειρόβαθου πηγαδιού, η συνθήκη που αφορά την πρώτη παράγωγο καταλήγει να μας παρέχει μια έκφραση για τις ιδιοενέργειες και όχι για την σταθερά νορμαλισμού.
- Έτσι την σταθερά B την υπολογίζουμε με τον γνωστό τρόπο:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2dx = |B|^2\left(\int_{-\infty}^{0}e^{2\gamma x}dx + \int_{0}^{\infty}e^{-2\gamma x}dx\right) = 1 \Rightarrow$$

$$\mathrm{B} = \sqrt{\gamma} = \frac{\sqrt{mc}}{\hbar}$$

Λίγα σχόλια

- Παρατηρήσαμε ότι η σταθερά c εμφανίζεται στις ιδιοενέργειες. Όσο πιο μεγάλη είναι η σταθερά, τόσο πιο χαμηλή (πιο αρνητική) είναι η ενέργεια.
- Γι’ αυτό, μπορούμε να πούμε ότι εκφράζει πόσο «ισχυρό» είναι το πηγάδι. Καθορίζει τον βαθμό που ένα σωμάτιο είναι δέσμιο στο πηγάδι.

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.

Σημείωμα Αναφοράς

Σημείωμα Αδειοδότησης