Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 27: Γενική μελέτη κβαντικών συστημάτων δύο και τριών διαστάσεων

Ανδρέας Τερζής

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να παρουσιάσει την μελέτη κβαντομηχανικών συστημάτων σε περισσότερες από μια διαστάσεις.

Περιεχόμενα ενότητας

- Σύστημα δύο διαστάσεων
- Ελεύθερο σωμάτιο σε δύο διαστάσεις
- Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού δύο διαστάσεων
- Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού τριών διαστάσεων

Κβαντομηχανική σωματιδίου σε δύο διαστάσεις

- Έχουμε το πρόβλημα ενός σωματίου μάζας m σε δυναμικό $V(x,y) = V_x(x) + V_y(y)$.
- Η εξίσωση Schrödinger έχει την μορφή

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y^2} + V_x(x)\psi(x,y) + V_y(y)\psi(x,y) = E\psi(x,y)$$

- Για την επίλυση της κάνουμε χρήση της μεθόδου χωριζομένων μεταβλητών. Θεωρούμε δηλ. λύση της μορφής

$$\psi(x,y) = X(x)Y(y).$$

- Αντικαθιστούμε την λύση στην εξίσωση και έχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{X}''(x)\mathrm{Y}(y) - \frac{\hbar^2}{2m}Y''(y)X(x) + V_x(x)X(x)\mathrm{Y(y)} + V_y(y)X(x)\mathrm{Y(y)} = \mathrm{EX(x)Y(y)}$$

Συνέχεια μεθόδου χωριζομένων μεταβλητών

- Διαιρούμε και τα δύο μέλη της εξίσωσης με

$\psi(x,y) = X(x)Y(y)$ και έχουμε

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{X}''}{\mathrm{X}} + V_x(x) = \mathrm{E} - [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''}{\mathrm{Y}} + V_y(y)]$. Παρατηρούμε ότι το αριστερό μέλος που είναι μια συνάρτηση του x ισούται με το δεξί μέλος που είναι μια συνάρτηση του y. Αυτό είναι δυνατόν μόνο στην περίπτωση που και τα δύο μέλη είναι ίσα με μια σταθερά, έστω E_x.

- Άρα οι εξισώσεις στις οποίες καταλήγουμε είναι

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{X}''}{\mathrm{X}} + V_x(x) = \mathrm{E}_x$ και $\mathrm{E} - [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''}{\mathrm{Y}} + V_y(y)] = \mathrm{E}_x$

- Η δευτερη εξίσωση μπορεί να γραφεί ως $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''}{\mathrm{Y}} + V_y(y) = \mathrm{E}_y$, όπου $\mathrm{E}_y = E - E_x$.

Συμπέρασμα

- Καταλήξαμε επομένως στις εξισώσεις

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{X}''}{\mathrm{X}} + V_x(x) = \mathrm{E}_x \text{ και } -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''}{\mathrm{Y}} + V_y(y) = \mathrm{E}_y.$$

- Ανάλογα με την μορφή που έχει το δυναμικό τις επιλύουμε. Η τελική λύση θα είναι το γινόμενο των λύσεων αυτών των δύο επιμέρους εξισώσεων.

- Προφανώς η γενίκευση για τρισδιάστατο πρόβλημα είναι τετριμμένη. Το δυναμικό θα είναι της μορφής

$V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$. Η ολική ενέργεια θα είναι

$\mathrm{E} = \mathrm{E}_x + \mathrm{E}_y + \mathrm{E}_z$ και η γενική λύση της μορφής

$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$.

Ελεύθερο σωμάτιο σε δύο διαστάσεις

- Θα εφαρμόσουμε τα παραπάνω για το ελεύθερο σωμάτιο, όπου $V(x,y) = 0 \Rightarrow V_x(x) \ + V_y(y) = 0$. ($V_x(x) = 0$ και $V_y(y) = 0$).
- Έτσι οι εξισώσεις είναι

$X'' + {k_x}^2 X = 0, \mu\varepsilon\ {k_x}^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}$ και

$Y'' + {k_y}^2 Y = 0, \mu\varepsilon\ {k_y}^2 = \frac{2mE_y}{\hbar^2}$.

- Οι επιμέρους λύσεις είναι

$X(x) = e^{ik_x x}, Y(y) = e^{ik_y y}$.

- Η γενική λύση είναι $\psi(x,y) = X(x)Y(y) = e^{i(k_x x + k_y y)}$ με ενέργεια $E = E_x + E_y = \frac{\hbar^2}{2m}({k_x}^2 + {k_y}^2)$

Ελεύθερο σωμάτιο σε τρεις διαστάσεις

- Με την ίδια μεθοδολογία στις τρεις διαστάσεις καταλήγουμε στα εξείς αποτελέσματα:

$\psi(x,y,z) = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$ και $\mathrm{E} = \frac{\hbar^2}{2m}\left({k_x}^2 + {k_y}^2 + {k_z}^2\right)$.

Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού δύο διαστάσεων

- Το δυναμικό σε αυτήν την περίπτωση εκφράζεται ως

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y \\ \infty, x < 0, x > L_x, y < 0, y > L_y. \end{cases}$$

- L_x, L_y είναι το μήκος του πηγαδιού στις διαστάσεις x, y αντίστοιχα.
- Έχουμε δύο εξισώσεις Schrödinger:

$-\frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{X}'' + V_x(x)X = \mathrm{E}_x$ και$-\frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{Y}'' + V_y(y) = \mathrm{E}_y Y.$

- Οι λύσεις είναι $\mathrm{X(x)} = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right), n_x = 1,2,..$

$$Y(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right), n_y = 1,2,..$$

με $\mathrm{E}_x = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m{L_x}^2}{n_x}^2, E_y = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m{L_y}^2}{n_y}^2.$

- Η συνολική μορφή της λύσης είναι $\psi(x,y) = \frac{2}{\sqrt{L_x L_y}}\sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right).$

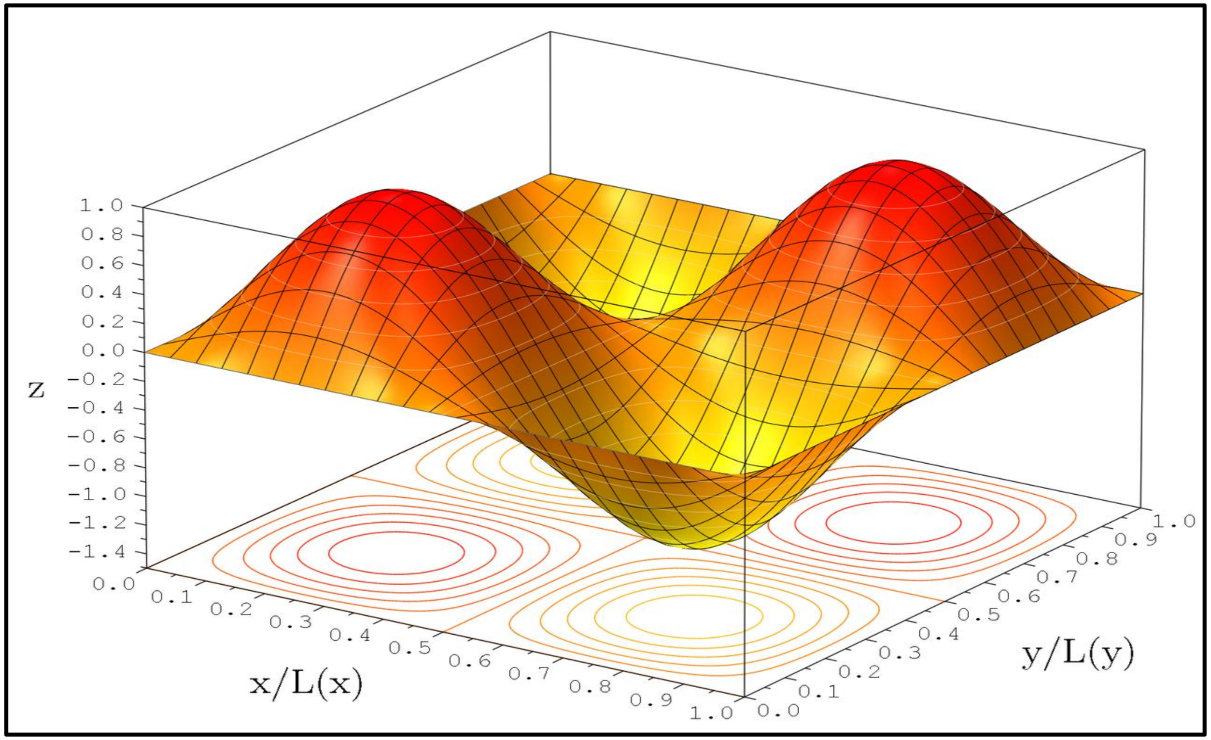
Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού δύο διαστάσεων-Τελικά αποτελέσματα

- Η συνολική μορφή της λύσης είναι $\psi(x,y) = \frac{2}{\sqrt{L_x L_y}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) = \psi_{n_x,n_y}(x,y)$.
- Η συνολική ενέργεια είναι $\mathrm{E}_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{{n_x}^2}{{L_x}^2} + \frac{{n_y}^2}{{L_y}^2}\right)$.
- Αν $\mathrm{L}_x = L_y = L$, τότε $\mathrm{E}_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\mathrm{L}^2}\left({n_x}^2 + {n_y}^2\right)$. Σ’ αυτήν την περίπτωση έχουμε εκφυλισμό, δηλαδή είναι δυνατόν διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις ν’ αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή της ενέργειας.
- Για παράδειγμα για $n_x = 1, n_y = 2 \rightarrow \mathrm{E}_{1,2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(1^2 + 2^2) = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ και

$\psi_{1,2} = \frac{2}{\mathrm{L}} sin\frac{\pi x}{L} sin\frac{2\pi y}{L}$.

Για $n_x = 2, n_y = 1 \rightarrow \mathrm{E}_{2,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(2^2 + 1^2) = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ και
$\psi_{2,1} = \frac{2}{\mathrm{L}} sin\frac{2\pi x}{L} sin\frac{\pi y}{L}$.

Απεικόνιση της κυματοσυνάρτησης



Απεικόνιση της κυματοσυνάρτησης σε διδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι για $n_x = n_y = 2$.

Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού τριών διαστάσεων

- Η γενίκευση είναι προφανής με αποτέλεσμα

$$\psi_{n_{x,}\, n_y, n_z}(x, y, z) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{L_x L_y L_z}} sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right) \text{ και}$$

$$\mathrm{E}_{n_{x,}\, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{{n_x}^2}{{L_x}^2} + \frac{{n_y}^2}{{L_y}^2} + \frac{{n_z}^2}{{L_z}^2}\right)$$

Σχόλιο: Το σύστημα αυτό αποτελεί μια ικανοποιητική προσέγγιση κυβικής κβαντικής τελείας. Οι κβαντικές τελείες είναι «τεχνητά άτομα» (κατασκευασμένα δηλαδή στο εργαστήριο με πολλές εφαρμογές (πχ στην κβαντική οπτική).

Μη ύπαρξη εκφυλισμού σε μονοδιάστατα συστήματα-Απόδειξη

- Θα αποδείξουμε ότι σε μονοδιάστατα συστήματα και σε ότι αφορά τις δέσμιες καταστάσεις δεν έχουμε εκφυλισμό.

- Η εξίσωση Schrödinger είναι

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V_x(x)\psi(x) = E\psi(x)$. Έστω $\psi_1(x), \psi_2(x)$ δύο λύσεις. Είναι δυνατόν να ισχύει $\mathrm{E}_1 = \mathrm{E}_2$ και ταυτόχρονα $\psi_1(x) \neq \psi_2(x)$;

- Κατασκευάζουμε την Wronskian των δύο λύσεων:

$$W(x) = \begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \\ \psi_1{}'(x) & \psi_2{}'(x) \end{vmatrix} = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1{}'(x) \Rightarrow$$

$$W'(x) = \psi_1(x)\psi_2''(x) - \psi_2(x)\psi_1''(x) =$$

$\frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - E_1)\psi_1(x)\psi_2(x) = 0$, αφού $\mathrm{E}_1 = \mathrm{E}_2$.

Συνέχεια απόδειξης

- Άρα $W'(x) = 0 \Rightarrow W(x) = c$. Επομένως θα ισχύει ότι και

$W(\pm\infty) = c$. Όμως $W(\pm\infty) = \psi_1(\infty)\psi_2'(\infty) - \psi_2(\infty)\psi_1'(\infty) = 0$, διότι εφ' όσον έχουμε δέσμιες καταστάσεις, αυτές είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Άρα $c = 0 \Rightarrow$

$$\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x) = 0 \Rightarrow$$
$$\psi_1(x)\psi_2'(x) = \psi_2(x)\psi_1'(x) \Rightarrow$$

$\frac{d\psi_1}{\psi_1} = \frac{d\psi_2}{\psi_2} \Longrightarrow ln\psi_1 = ln\psi_2 + k \Longrightarrow \psi_1 = A\psi_2$,όπου A σταθερά.

- Καταλήξαμε λοιπόν ότι αν ισχύει $\mathrm{E}_1 = \mathrm{E}_2$, $\psi_1 = A\psi_2$.Δηλαδή σε μονοδιάστατα συστήματα δεν υπάρχει εκφυλισμός, αφού ίδιες τιμές ενέργειας αντιστοιχούν σε ίσες κυματοσυναρτήσεις. (Η σταθερά A δεν επιφέρει ουσιαστικά κάποια αλλαγή).

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 ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι. Γενική μελέτη των συστημάτων δύο και τριών διαστάσεων». 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:2D_Wavefunction_(2,2)_Surface_Plot.png