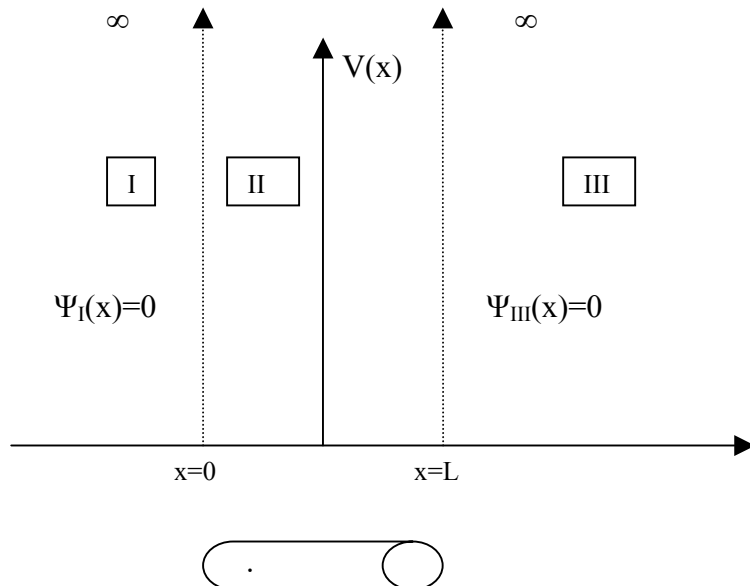


Μάθημα 11^ο, 23 Οκτωβρίου 2008 (9:00-11:00).

ΣΩΜΑΤΙΟ ΣΕ ΑΠΕΙΡΟΒΑΘΟ ΠΗΓΑΔΙ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ

Ουσιαστικά, ένας μονοδιάστατος σωλήνας όπου υπάρχει ένα σωματίο εγκλωβισμένο.



π.χ. Μονοδιάστατη αλυσίδα ανθράκων, όπου ‘κυκλοφορεί’ ένα e^- .

$$\begin{array}{cccc} \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ c & c & c & c \end{array}$$
$$c - c = c - c = c - c = c - c$$



Ένα ηλεκτρόνιο εγκλωβισμένο μέσα σε ένα μόριο περιγράφεται στην κβαντομηχανική, ως απειρόβαθο πηγάδι.

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + V(x)\Psi = E\Psi$$

$$\Rightarrow \Psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\Psi = 0$$

Εξίσωση Schrödinger

Εξίσωση ιδιοτιμών ενέργειας ή χρονοανεξάρτητη

Χωρίζω το απειρόβαθο πηγάδι σε 3 περιοχές (I, II και III).

- $\Psi_I(x) = 0$, καθώς $\Psi_I^* \Psi_I dx$ είναι η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίο στην περιοχή I. Αλλά ξέρω πως δεν μπορεί να βρεθεί εκεί, άρα η πιθανότητα και έτσι και η κυματοσυνάρτηση είναι μηδέν.

- Ομοίως στην τρίτη περιοχή $\Psi_{III}(x) = 0$

- Περιοχή II. $\Psi_{II}'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - 0)\Psi_{II} = 0$

$$\Psi_{II}'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_{II} = 0, \text{ με } E > 0 \text{ άρα } \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\text{έτσι θέτουμε } \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$$

$$\boxed{\Psi_{II}'' + k^2\Psi_{II} = 0}$$

Λύσεις:

$$\Psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \text{ ή } \Psi_{II}(x) = \tilde{A}\sin kx + \tilde{B}\cos kx$$

Θα εφαρμόσουμε τις συννοριακές συνθήκες στα όρια των περιοχών ($x=0$ και $x=L$):

$$\text{i) } x=0: \Psi_I(x=0) = \Psi_{II}(x=0) \quad (1)$$

$$\text{ii) } x=L: \Psi_{II}(L) = \Psi_{III}(L) \quad (2)$$

Έστω ότι χρησιμοποιούμε τη γενική λύση της μορφής $\Psi_{II} = \tilde{A}\sin kx + \tilde{B}\cos kx$

$$(1) \Rightarrow 0 = \tilde{A}\sin 0 + \tilde{B}\cos k0 \Rightarrow \tilde{B} = 0$$

$$(2) \Rightarrow \tilde{A}\sin kL = 0 \quad \begin{matrix} \swarrow \\ \searrow \end{matrix} \quad \begin{matrix} \tilde{A} = 0 \text{ άτοπο (γιατί τότε το ηλεκτρόνιο δεν θα} \\ \text{βρίσκεται πουθενά!, παντού μηδενική} \\ \text{πιθανότητα)} \end{matrix}$$

$$\boxed{\sin kL = 0}$$

$$\sin kL = \sin(n\pi)$$

$$\boxed{kL = n\pi}, n=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

$$\boxed{k = \frac{n\pi}{L}}, n=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Άρα από την σχέση: $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ θα βρω το E, δηλαδή

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, n=1, 2, \dots} \quad \text{Επιτρεπτές τιμές (ΙΔΙΟΤΙΜΕΣ) ενέργειας!}$$

$$\text{Άρα } \boxed{\Psi_n(x) = \tilde{A} \sin \frac{n\pi x}{L}} \rightarrow \text{ΙΔΙΟΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ. Ισχύει για } \boxed{0 \leq x \leq L}$$

- Η $\boxed{n=0}$ ΔΕΝ είναι επιτρεπτή τιμή για την ενέργεια, γιατί το $\Psi_0(x) = \tilde{A} \sin \frac{0\pi x}{L} = 0$.

- Το ίδιο ισχύει και για τα αρνητικά n ($n=-1, -2, -3, \dots$), για τι φυσική σημασία έχει το $\Psi^*\Psi$ που είναι η πιθανότητα (δεν αλλάζει αν βάλουμε (-) στην κυματοσυνάρτηση Ψ).

Άρα, χρησιμοποιούμε μόνο τα θετικά n ($\neq 0, -1, -2, -3, \dots$).

Παρατηρούμε ότι σε αυτό το κβαντικό σύστημα οι ενεργειακές καταστάσεις δεν παίρνουν συνεχείς τιμές, αλλά είναι κβαντισμένες (διακριτές τιμές).

Στην κλασική αυτό συμβαίνει στα στάσιμα κύματα (π.χ. χορδή). Εδώ από την ιδέα του DeBroglie, το αναμένουμε καθώς το ηλεκτρόνιο έχει και κυματική φύση;

Τώρα θα υπολογίσουμε τον άγνωστο συντελεστή \tilde{A} , από την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης, δηλαδή πρέπει $\int \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$.

$$\text{Άρα θέλω } \int \tilde{A}^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1 \Rightarrow \frac{\tilde{A}^2 L}{2} = 1 \Rightarrow \boxed{\tilde{A} = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

Ποια είναι η λύση του απειρόβαθου πηγαδιού;

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0, & -\infty < x < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, & 0 < x < L \\ 0, & x > L \end{cases}$$

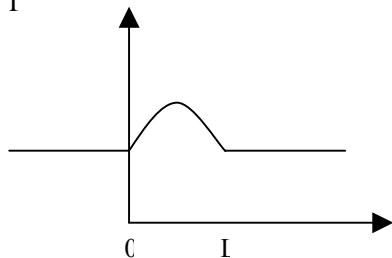
Μπορεί να γραφεί πιο 'συμπαγέμενα' με την βοήθεια της συνάρτησης βήματος, $\Theta(x)$ (ή συνάρτηση Heaviside). Η οποία ορίζεται ως

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}$$

$$\text{Δηλαδή } \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \Theta(x) \Theta(L-x).$$

Αυτή η λύση είναι έτσι όπως γίνεται φανερό και από την γραφική της παράσταση (σχήμα για την ιδιοκατάσταση της θεμελιώδους ιδιοκατάστασης) δεν είναι ούτε άρτια ούτε περιττή.

f



Πρέπει να την μεταφέρω κατά $\frac{L}{2}$ για να υπάρχει συμμετρία στο δυναμικό, οπότε τότε θα υπάρχει συμμετρία στην κυματοσυνάρτηση.

ΑΣΚΗΣΗ ΓΙΑ ΤΟ ΣΠΙΤΙ

Να λυθεί το πρόβλημα του απειρόβαθου πηγαδιού, χρησιμοποιώντας την λύση της μορφής $\Psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$.

ΝΑ ΤΗΝ ΚΑΝΕΤΕ ΜΟΝΟΙ ΣΑΣ ΚΑΙ ΜΕΤΑ ΝΑ ΔΙΑΒΑΣΕΤΕ ΤΗΝ ΛΥΣΗ. ΠΡΩΤΑ ΠΡΟΣΠΑΘΗΣΤΕ ΜΟΝΟΙ. ΘΑ ΑΠΟΖΗΜΙΩΘΕΙΤΕ ΓΙΑΥΤΟ!!

Έστω ότι χρησιμοποιούμε τη γενική λύση

$$\Psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$(1) \Rightarrow 0 = Ae^{ik0} + Be^{-ik0} = A + B \Rightarrow \boxed{A = -B}$$

$$(2) \Rightarrow Ae^{ikL} + Be^{-ikL} = 0 \Rightarrow A(e^{ikL} - e^{-ikL}) = 0$$

$$2iA \sin kL = 0$$

$$\sin kL = 0$$

$$k = \frac{n\pi}{L}, n=1,2,3,4,\dots$$

$$E_n = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, n=1,2,3,\dots$$

Άρα και $\Psi_n(x) = \tilde{A} \sin \frac{n\pi x}{L}$ για $0 \leq x \leq L$

ΑΣΚΗΣΗ ΓΙΑ ΤΟ ΣΠΙΤΙ

Να λυθεί το πρόβλημα του απειρόβαθου κβαντικού πηγαδιού, όταν το πηγάδι εκτείνεται από $-L/2$ έως $L/2$. Προφανώς αναμένω ίδιες ιδιοτιμές ενέργειας και συμμετρικές ιδοσυναρτήσεις.

Πλήρης κυματοσυνάρτηση, $\Psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$, η οποία είναι λύση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης Schrödinger.

ΑΛΛΑ Η ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRÖDINGER ΕΙΝΑΙ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ, ΑΡΑ ΟΠΟΙΟΔΗΠΟΤΕ ΓΡΑΜΜΙΚΟΣ ΣΥΝΔΥΑΣΜΟΣ ΛΥΣΕΩΝ ΕΙΝΑΙ ΚΑΙ ΑΥΤΟΣ ΛΥΣΗ.

Έτσι η πιο γενική λύση είναι της μορφής (για διακριτές τιμές ενέργειας)

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \Psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

ΓΙΑ ΙΔΙΟΤΙΜΕΣ ΕΝΕΡΓΕΙΕΣ ΣΕ ΕΝΑ ΣΥΝΕΧΕΣ ΦΑΣΜΑ ΘΑ ΕΙΝΑΙ

Π.χ. για το ελεύθερο σωματίο:

$$\Psi(x,t) = \sum_p A_p \Psi_p(x) e^{-iE(p)t/\hbar}.$$

Επειδή P =συνεχής μεταβλητή που παίρνει τιμές από το $-\infty$ ως το $+\infty$ βάζω \int (ολοκλήρωμα). Δηλαδή

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) \Psi(p;x) e^{-iE(p)t/\hbar} dp = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{-ipx/\hbar} e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp$$

ΥΠΕΡΘΕΣΗ ιδιοσυναρτήσεων ελευθέρων σωμάτων δίνει ένα \rightarrow ΚΥΜΑΤΟΠΑΚΕΤΟ ή ΚΥΜΑΤΟΔΕΜΑ!

ΑΣΚΗΣΗ ΓΙΑ ΤΟ ΣΠΙΤΙ (ΝΑ ΠΑΡΑΔΟΘΕΙ ΣΕ ΕΝΑ ΜΕ ΕΝΑΜΙΣΗ ΜΗΝΑ).

Να γίνει μια σύντομη αλλά και σαφής παρουσίαση των κυματοπακέτων και της χρήσης τους στην κβαντομηχανική.

Να γραφεί σε αρχείο word (έκδοση 1997-2003).

Όχι κάτω από 10 σελίδες όχι πάνω από 15-20.

ΦΥΣΙΚΗ ΣΗΜΑΣΙΑ ΤΩΝ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΩΝ ΣΤΟ ΑΝΑΠΤΥΓΜΑ ΤΗΣ ΚΥΜΑΤΟΣΥΝΑΡΤΗΣ.

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \Psi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}.$$

Παράδειγμα. **Άσκηση 8**

Έστω ένα κβαντικό σύστημα που χαρακτηρίζεται από δύο ιδιοκαταστάσεις ενέργειας E_1 και E_2 . Να βρεθεί η μέση ενέργεια του συστήματος.

Έχουμε $\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Psi_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} = C_1 \Psi_1(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + C_2 \Psi_2(x) e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}$. Οπότε η μέση

ενέργεια υπολογίζεται από την σχέση

$$\begin{aligned} \langle \hat{E} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \hat{H} \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[C_1 \Psi_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + C_2 \Psi_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right]^* \hat{H} \left[C_1 \Psi_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + C_2 \Psi_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right] dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[C_1^* \Psi_1^* e^{+i\frac{E_1 t}{\hbar}} + C_2^* \Psi_2^* e^{+i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right] \left[C_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} \hat{H} \Psi_1 + C_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \hat{H} \Psi_2 \right] dx = \end{aligned}$$

Ξέρω πως $\hat{H} \Psi_1(x) = E_1 \Psi_1(x)$, $\hat{H} \Psi_2(x) = E_2 \Psi_2(x)$ οπότε

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[C_1^* \Psi_1^* e^{+i\frac{E_1 t}{\hbar}} + C_2^* \Psi_2^* e^{+i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right] \left[C_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} E_1 \Psi_1 + C_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} E_2 \Psi_2 \right] dx$$

Δηλαδή

$$\begin{aligned} \langle \hat{E} \rangle &= E_1 C_1^* C_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \Psi_1 dx + E_2 C_1^* C_2 e^{+i\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \Psi_2 dx + \\ &+ E_1 C_2^* C_1 e^{+i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* \Psi_1 dx + E_2 C_2^* C_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^* \Psi_2 dx \end{aligned}$$

Ξέρω πως $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Psi_m dx = \delta_{nm} \rightarrow$ σχέση ορθογωνιότητας ιδιοσυναρτήσεων

Και έτσι καταλήγω πως $\langle \hat{E} \rangle = E_1 |C_1|^2 + E_2 |C_2|^2$

Ποια η **Φυσική σημασία των συντελεστών;**