

Μέχρι αυτό το στάδιο ασχοληθήκαμε με καρτεσιανές συντεταγμένες για την περιγραφή της θέσης του σωματίδιου. Στην συνέχεια θεωρούμε **ΚΑΝΟΝΙΚΟΓΡΑΜΜΑ** συστήματα συντεταγμένων οι οποίες συντεταγμένες (γωνία) παραμένει και οι πυθμένες. Εδώ θα θυμόμαστε ότι ένας άξονας συντεταγμένων είναι η καρτεσιανή (στα καρτεσιανά σ.σ. ή ευθεία) πάνω στην οποία κινείται μόνο συντεταγμένη. Το πρώτο 'εξωτερικό' σε πολυμερήτητα σ.σ. συν. οι **ΚΥΛΙΝΔΡΙΚΕΣ ΣΥΝΤΕΤΑΓΜΕΝΕΣ** (πολικές σε δύο διαστάσεις) με συντεταγμένες r, ϕ, z (καρτεσιανή παράσταση καρτεσιανών άξονα, x, y, z που είναι εύκολο κέρως r, ϕ, z).

ΕΙΣΕΓΩΓΗ SCHRÖDINGER ΣΕ ΠΟΛΙΚΕΣ (2D) & ΚΥΛΙΝΔΡΙΚΕΣ (3D)Σ.

και στις δύο περιπτώσεις (πολικές/κυλινδρικές) πρέπει να γράψουμε τους όρους κινητικής ενέργειας από καρτεσιανές σε πολικές ή κυλινδρικές. Δηλαδή πρέπει να γράψουμε την έκφραση του $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ σε πολικές (r, ϕ) ή κυλινδρικές (r, ϕ, z) - εδώ θα κληθεί να προσέξουμε

λοισίω $x = r \cos \phi, y = r \sin \phi$ και $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$, $\tan \phi = \frac{y}{x}$ (ή $\arctan \frac{y}{x} = \phi$).

Έχουμε $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \phi} = \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}$ και $\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \phi} = \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}$

και $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

ΚΥΛΙΝΔΡΙΚΟ ΑΠΕΙΡΟΣΤΑΘΟ ΠΗΓΑΛΙ ΔΥΟ ΔΙΑΣΤΑΣΕΩΝ

Επίσης Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi + V(x, y) \psi = E \psi$ με $V(x, y) = \begin{cases} \infty & r > a \\ 0 & r \leq a \end{cases}$

Αντικαθιστούμε σε πολικές συντεταγμένες, όπου έχουμε $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi(r, \phi) + V(r) \psi = E \psi$

Αντί $V(r, \phi) = V(r)$ (δεν έχουμε εξάρτηση από την ϕ συντεταγμένη), εφαρμόζουμε την μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών (με αριθμ. την ίδια 'φιλοσοφία' όπως την αναπτύχναμε στα προηγούμενα μαθήματα για καρτεσιανές συντεταγμένες), δηλ. $\psi(r, \phi) = R(r) Q(\phi)$

Πάρτε στα προηγούμενα μαθήματα για καρτεσιανές συντεταγμένες, δηλ. $\psi(r, \phi) = R(r) Q(\phi)$

Βρίσκουμε $\frac{R''}{R} + \frac{1}{r} \frac{R'}{R} + \frac{1}{r^2} \frac{Q''}{Q} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) = -\frac{2m}{\hbar^2} E$ {για $r \leq a$ } \rightarrow (θέτουμε $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$)

$r^2 \frac{R''}{R} + r \frac{R'}{R} + k^2 r^2 = -\frac{Q''}{Q} = \nu^2$ (για σταθερό, καθ' ύλην λόγο $\nu^2 = \ell(\ell+1)$, δείτε $g(\phi)$)

$r^2 \frac{R''}{R} + r \frac{R'}{R} + k^2 r^2 = -\frac{Q''}{Q} = \nu^2$ (για σταθερό, καθ' ύλην λόγο $\nu^2 = \ell(\ell+1)$, δείτε $g(\phi)$)

$\rightarrow \boxed{Q'' + \nu^2 Q = 0}$ με λύσεις της μορφής $Q(\phi) = e^{i\nu\phi}$ (υ ακέραιος)*

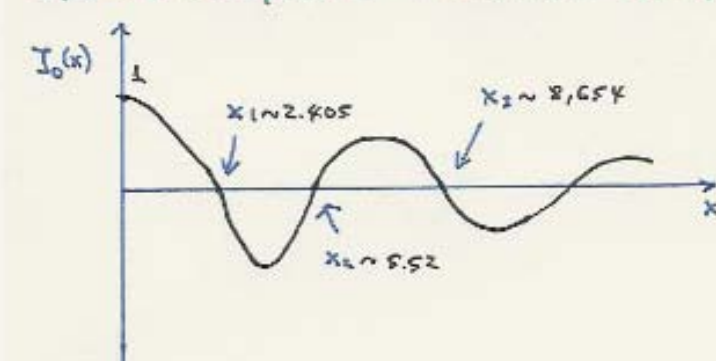
Ενώ το ακτινικό μέρος γίνεται: $r^2 \frac{R''}{R} + r \frac{R'}{R} + k^2 r^2 - \nu^2 = 0$, ορίζουμε καινούργια μεταβλητή την kr , όπου u \otimes γίνεται $\boxed{\frac{d^2 R}{d(kr)^2} + \frac{1}{kr} \frac{dR}{d(kr)} + \left(1 - \frac{\nu^2}{(kr)^2} \right) R = 0}$

Η εξίσωση αυτή είναι η εξίσωση Bessel με λύσεις τις συναρτήσεις Bessel J_ν τάξης $J_\nu(kr)$ και της Νεωμαν (ή Bessel δεύτερης τάξης) $N_\nu(kr)$.

Για το φυσικό μας (κβαντομηχανικό) πρόβλημα, έχουμε την εξίσωση αυτή στο εσωτερικό του κύλινδρου, άρα επιβάλλονται οι λύσεις N_ν που για $kr \rightarrow 0$ είναι κωλύσες του ψ και η N_ν αποκλείεται.

Αν θεωρήσουμε ότι έχουμε αθιμουθιακή συμμετρία, δηλαδή δεν υπάρχει εξάρτηση από την γωνία ϕ . Στην περίπτωση αυτή έχουμε $\nu=0$, αλλά και θα είχαμε ϕ -εξάρτηση. Η ακτινική λύση είναι λοιπόν $R(r) = J_0(kr)$.

Από τις συνοριακές συνθήκες έχουμε: $R(a) = 0 \rightarrow J_0(ka) = 0$



Διχάζει $k_\phi = \chi_\eta$ $\eta = 1, 2, \dots$

όπου χ_η τα σημεία στα οποία μηδενίζεται η J_0 (σχήμα)

$\rightarrow k_\eta = \frac{\chi_\eta}{a} \rightarrow \boxed{E_\eta = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \chi_\eta^2}$ $\eta = 1, 2, \dots$

ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ

ΙΔΙΟΕΝΑΡΤΗΣΕΙΣ

$\psi(r, \phi) = N J_0\left(\frac{\chi_\eta}{a} r\right)$

\uparrow
ν-εμφασισμός

με $\int \psi^* \psi r dr = 1$

*Πρέπει $Q(\phi) = Q(\phi + 2\pi) \rightarrow e^{i\nu\phi} = e^{i\nu(\phi + 2\pi)} = e^{i\nu\phi} \cdot e^{i\nu 2\pi} \rightarrow e^{i\nu 2\pi} = 1 \rightarrow \nu$ είναι ακέραιος

για κάθε 'αριθμ. του' μας πέφτει στο ίδιο ηχητικό σημείο.

-1-

ΚΥΛΙΝΔΡΙΚΟ (ΔΙΣΚΟΙΔΕΣ) ΑΝΕΙΡΟΒΑΘΟ ΠΗΓΑΛΙ ΚΑΙ ΕΛΕΥΘΕΡΟ ΣΩΜΑΤΙΟ ΣΤΟ Ζ.

Εξίσωση Schrödinger σε κυλινδρικές συντεταγμένες:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(r, \phi, z) + V(r, \phi, z) \Psi = E \Psi$$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{για τέτοιες μορφές} \\ \text{συμμετρικά εύκολο μεθόδου} \end{array} \right\}$
 $\left\{ \begin{array}{l} \text{συμμετρική} \\ \text{μεθόδου} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{κυλινδρικών συντεταγμένων} \\ \Psi(r, \phi, z) = R(r) Q(\phi) Z(z) \end{array} \right\}$

$$\rightarrow \frac{1}{R} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{R} \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{Q} \frac{d^2 Q}{d\phi^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

Θέτουμε $\frac{Z''}{Z} = -k_z^2 \rightarrow Z'' + k_z^2 Z = 0 \rightarrow Z = e^{\pm i k_z z}$ (ελεύθερο σωματίδιο)

$\frac{Q''}{Q} = -\nu^2 \rightarrow Q'' + \nu^2 Q = 0 \quad Q(\phi) = e^{\pm i \nu \phi}$ (ν : ακέραιος)

Η κυκλική εξίσωση γίνεται $R'' + \frac{1}{r} R' + \left((k_r^2 - k_z^2) - \frac{\nu^2}{r^2} \right) R = 0$

ορίζουμε $\tilde{r}^2 = r^2 - k_z^2 \rightarrow \frac{d^2 R}{d(\tilde{r})^2} + \frac{1}{\tilde{r}} \frac{dR}{d(\tilde{r})} + \left(1 - \frac{\nu^2}{(\tilde{r})^2} \right) R = 0$

Με λύση για την περίπτωση αγγειοθηκικής συμπεριφοράς (αυτή του φ)

$R(\tilde{r}) = J_0(\tilde{r})$

Από την συνεκτική συνθήκη $J_0(\tilde{r}_a) = 0 \rightarrow \tilde{r}_a = x_n$ (μηδενισμοί ή ρίζες J_0)

$\rightarrow \tilde{r}_a^2 = \frac{x_n^2}{a^2} = r^2 - k_z^2 \rightarrow k_z^2 = r^2 + \frac{x_n^2}{a^2} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m a^2} \frac{x_n^2}{a^2}$

και ιδιοσυναρτήσεις $\Psi(r, \phi, z) = R(r) Z(z) = N J_0(\tilde{r}_a) e^{\pm i k_z z}$

Το κβαντικό σύστημα που μελετούμαστε, 'προσμοιώνεται' καθαυτό εύρη με



ΚΥΛΙΝΔΡΙΚΗ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΤΕΛΕΙΑ



Προφανώς ακολουθούμε αβριβώς την ίδια μεθοδολογία με την προηγούμενη περίπτωση με διαφορά στην διαμόρφωση Φ όπου τώρα έχουμε περιορισμό και εδώ. Θάβτε ίσως διαφορά στην ιδιοσυνάρτηση και την ιδιοσυνάρτηση, είναι ενδεχόμενα

$E_{\psi, m} = \frac{\hbar^2}{2m a^2} x_n^2 + \frac{\hbar^2 n^2}{2m L^2} m^2$

$n = 1, 2, \dots, m = 1, 2, \dots$

~ ιδιοτιμές ανεξάρτητου ηχητικού

και $\Psi(r, \phi, z) = N J_0\left(\frac{x_n r}{a}\right) \sin\left(\frac{m \pi z}{L}\right)$

ΑΣΚΗΣΗ 9 Η διαχωριστική εξίσωση $Q'' + \nu^2 Q = 0$, έχει λύση $e^{\pm i \nu \phi}$ (ν : ακέραιος). Οποιαδήποτε συνάρτηση $f(\phi)$ με περίοδο 2π ($\phi \in [0, 2\pi)$) μπορεί να γραφτεί ως γραμμική συνδυασμός των λύσεων $e^{\pm i \nu \phi}$, $f(\phi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{\pm i n \phi}$ που δεν είναι άλλη από την ανάπτυξη Fourier.

Να αναλυθεί η συνάρτηση $g(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{ό } \phi < \pi \\ 0 & \text{ό } \pi < \phi < 2\pi \end{cases}$

ΑΣΚΗΣΗ 10

Να μελετηθεί η κβαντική τελεία σχήματος "κορμαζιού λίτσας".

Διηρώ να βρείτε την διαχωριστική εξίσωση και να επικριθείτε να την λύσετε.



← ϕ από 'άνω'



← ϕ από το κάτω