ΣΥΓΧΡΟΝΗ ΦΥΣΙΚΗ (ΟΔΗΓΟΣ ΜΕΛΕΤΗΣ)

Έκδοση 2023

ΕΝΟΤΗΤΑ 5
Επίλυση της εξίσωσης Schrödinger σε απλά κβαντικά συστήματα

Έκδοση 2023

Ι. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

► Κάθε φυσικά πραγματοποιήσιμη φυσική κατάσταση ενός (μονοσωματιδιακού) κβαντικού συστήματος περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση Ψ(r,t) . Η κυματοσυνάρτηση περιέχει όλες τις φυσικά ελέγξιμες πληροφορίες για την εξεταζόμενη κατάσταση του συστήματος.
Η κυματοσυνάρτηση Ψ(r,t) εκφράζει ένα κύμα πιθανότητας. Το τετράγωνο του μέτρου της είναι η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σωματίδιο σε μία περιοχή του χώρου.

μία διάσταση

$$P(x,t) = \Psi(x,t)\Psi^*(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$

$$\wp(x,t) = |\Psi(x,t)|^2\, dx$$

Πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε διάστημα dx.

τρείς διαστάσεις

$$P(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r},t)\Psi^*(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2$$

$$\wp(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2\, dxdydz$$

Πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε όγκο dxdydz.

► Αφού το τετράγωνο του μέτρου της κυματοσυνάρτησης εκφράζει πυκνότητα πιθανότητας, θα πρέπει όπως λέμε να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη. Δηλαδή:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx = 1$$ μία διάσταση

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r},t)|^2\, dxdydz = 1$$ τρείς διαστάσεις

► Πιθανότητα εύρεσης σωματιδίου σε συγκεκριμένο διάστημα [a,b]:

$$\wp(x,t) = \int_a^b \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx$$

► Πιθανότητα εύρεσης σωματιδίου σε συγκεκριμένο όγκο [a,b]x [c,d]x [e,f]:

$$\wp(x,t) = \int_a^b \int_c^d \int_e^f \left|\Psi(x,t)\right|^2 dxdydz$$

► Μέση τιμή της θέσης και αβεβαιότητα θέσης:.

$$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx$$

μία διάσταση

$$< \vec{r} >= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{r}\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 dxdydz$$

τρείς διαστάσεις

Για ένα μέγεθος που είναι συνάρτηση της θέσης f(x) θα ισχύει:

$$< f(x) >= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx$$

Άρα: $$< x^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx$$

Και επομένως: $$\left(\Delta x\right) = \sqrt{< x^2 > - < x >^2}$$

► Η χρονική εξέλιξη της κατάστασης ενός μονοσωματιδιακού συστήματος δίνεται από την επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t)}$$

μία διάσταση

$$\boxed{\begin{aligned} & i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r},t) \\ & \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{aligned}}$$

τρείς διαστάσεις

ΙΙ. Η ΕΞΙΣΩΣΗ Schrödinger ΓΙΑ ΣΩΜΑΤΙΟ ΚΑΘΟΡΙΣΜΕΝΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ.

► Το ελεύθερο σωμάτιο καθορισμένης ενέργειας περιγράφεται από επίπεδο κύμα πιθανότητας.

$$\Psi(x,t) = \mathrm{A}\, e^{i[kx\ -\ \omega t]} \xrightarrow{p=\hbar k=m\upsilon,\ E=\hbar\omega=\frac{p^2}{2m}} \Psi(x,t) = \mathrm{A}\, e^{\frac{i}{\hbar}[px\ -\ Et]}$$

Στην περίπτωση αυτή

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(-E)\,\mathrm{A}\, e^{\frac{i}{\hbar}[px\ -\ Et]} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi(x,t) \Rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = E\Psi(x,t)$$

και η εξίσωση Schrödinger παίρνει την μορφή:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = E\Psi(x,t)}$$

εξίσωση Schrödinger για ελεύθερο σωμάτιο καθορισμένης ενέργειας E (κινητική μόνο)

► Στην περίπτωση που το σωμάτιο κινείται σε πεδίο δυναμικής ενέργειας U(x) θα έχουμε ότι:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)}$$

εξίσωση Schrödinger για σωμάτιο που βίσκεται υπό την επίδραση συντηρητικής δύναμης και έχει καθορισμένη ενέργεια E (κινητική και δυναμική)

III. ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ Schrödinger ΓΙΑ ΣΩΜΑΤΙΟ ΚΑΘΟΡΙΣΜΕΝΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ - ΣΤΑΣΙΜΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ

► Θα έχουμε ότι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=E\Psi(x,t)$$

► Λύση χωριζομένων μεταβλητών: $\Psi(x,t)=\psi(x)\phi(t)$

$$i\hbar\psi(x)\frac{d\phi(t)}{dt}=E\psi(x)\phi(t)\Rightarrow \boxed{\phi(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$$

(χρονική εξέλιξη κυματοσυνάρτησης)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)\phi(t)=E\psi(x)\phi(t)\Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi(x)=0}$$

(χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger
Δίνει το χωρικό κομάτι της κυματοσυνάρτησης
και την ενέργεια του σωματιδίου)

► Γενική λύση (μιγαδική):

$$\boxed{\Psi(x,t)=\psi(x)\phi(t)=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}} \qquad \boxed{\psi(x)=\Psi(x,0)}$$

ΣΥΝΟΨΗ

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U(x)\Psi(x,t)}$$

Εξίσωση Schrödinger. Ισχύει για κάθε μονοσωματιδιακό σύστημα.

$$\Psi(x,t)=\mathrm{A}\,e^{\frac{i}{\hbar}[px\ -\ Et]}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U(x)\Psi(x,t)=E\Psi(x,t)}$$

Ειδική περίπτωση σωματιδίου καθορισμένης ενέργειας.

Λύση χωριζομένων μεταβλητών. $\Psi(x,t)=\psi(x)\phi(t)$

$$\left.\begin{array}{l}\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\dfrac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi(x)=0\\[2ex] \phi(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\end{array}\right\}$$

$$\boxed{\begin{array}{l}\Psi(x,t)=\psi(x)\phi(t)=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\\ \psi(x)=\Psi(x,0)\end{array}}$$

► Πυκνότητα πιθανότητας:

$$P(x) = \Psi(x,t)\Psi^*(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x)e^{\frac{i}{\hbar}Et} = |\psi(x)|^2$$ (ανεξάρτητη του χρόνου)

Οι καταστάσεις καθορισμένης ενέργειας του σωματιδίου ονομάζονται **στάσιμες**, όχι γιατί δεν εξελίσσονται χρονικά, αλλά γιατί η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο σε μία περιοχή του χώρου δεν αλλάζει με το χρόνο.

► Μέση τιμή της θέσης:

$$\boxed{< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(x)|^2\, dx}$$

► Αβεβαιότητα θέσης:

$$\boxed{(\Delta x) = \sqrt{< x^2 > - < x >^2},\ \text{όπου} < x^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi(x)|^2\, dx}$$

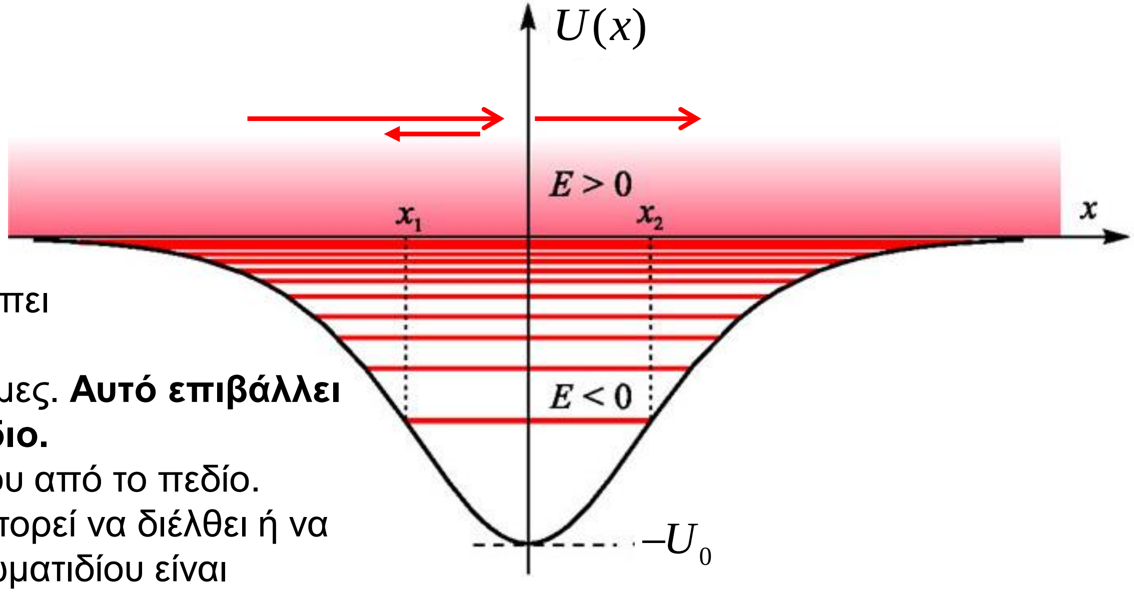
► Ιδιότητες της ψ(x):

(α) Πρέπει να είναι μονότιμη παντού (αφού το τετράγωνο του μέτρου της εκφράζει πυκνότητα πιθανότητας)

(β) Πρέπει τόσο η ψ(x) όσο και η πρώτη της παράγωγος να είναι παντού συνεχείς (για να ορίζεται η δεύτερη παράγωγος), εκτός ίσως από σημεία που η δυναμική ενέργεια παρουσιάζει άπειρη ασυνέχεια.

(γ) Πρέπει να είναι τεραγωνικά ολοκληρώσιμη, δηλαδή:

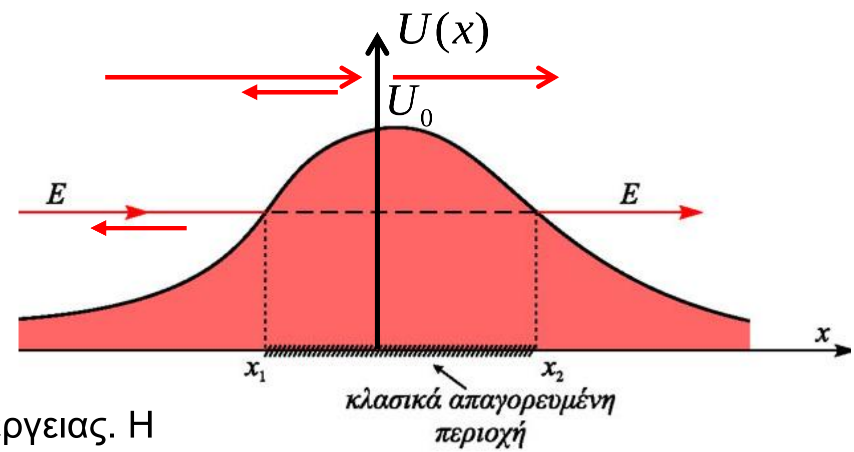
$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1}\ \text{ή}\ \boxed{\psi(\pm\infty) \to 0}$$



► Σε ένα πεδίο δυναμικής ενέργειας όπως του σχήματος:
(α) **Για $-U_0<E<0$ έχουμε τις δέσμιες καταστάσεις** του σωματιδίου. Εδώ το σωματίδιο δεν μπορεί να διαφύγει και η πιθανότητα να βρεθεί εκτός των ορίων του πηγαδιού είναι μηδενική. Άρα εδώ θα πρέπει

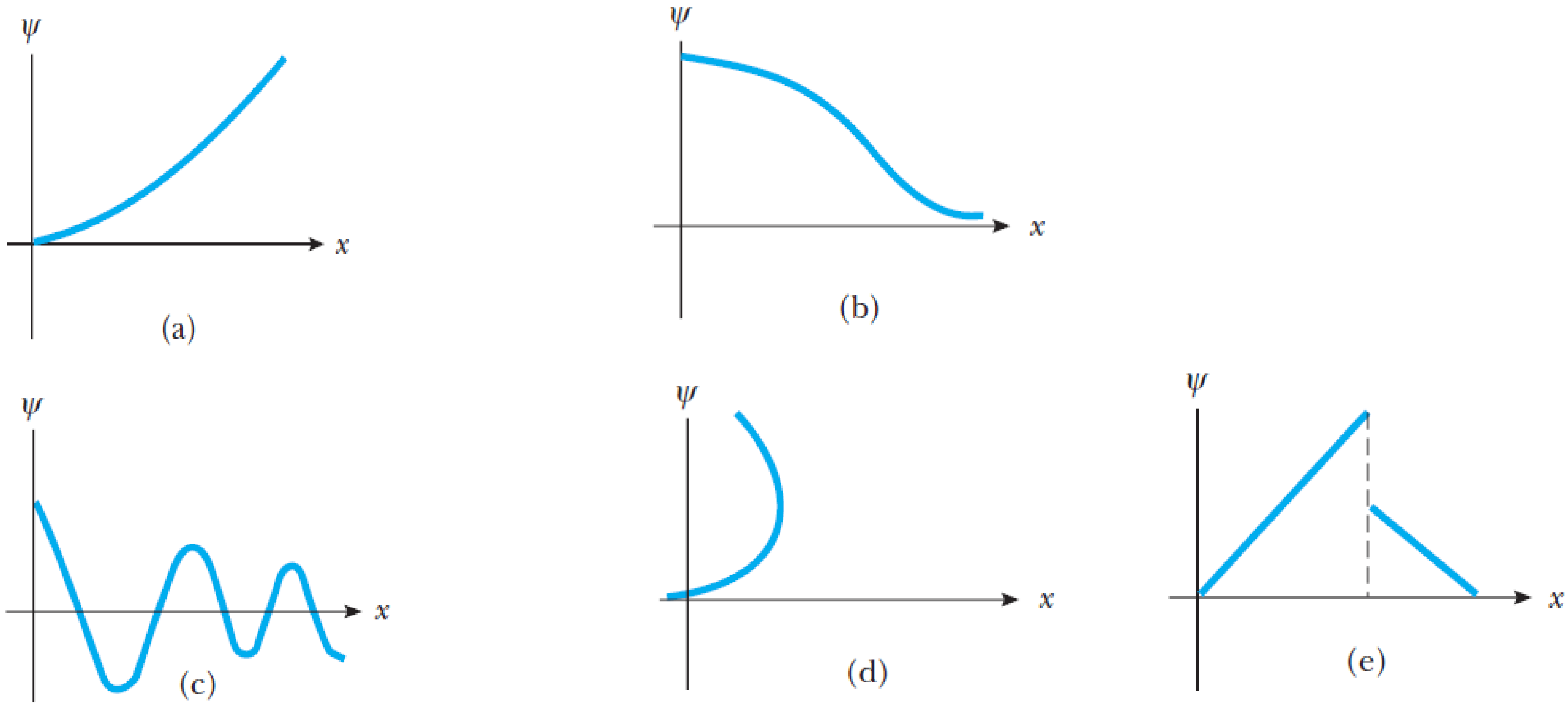
$$\psi(\pm\infty) \to 0$$

και οι λύσεις θα είναι τεραγωνικά ολοκληρώσιμες. **Αυτό επιβάλλει διάκριτο ενεργειακό φάσμα για το σωματίδιο.**
(β) **Για $E>0$** έχουμε τη σκέδαση του σωματιδίου από το πεδίο. Το σωματίδιο, ανάλογα με την ενέργειά του μπορεί να διέλθει ή να ανακλαστεί. Εδώ το ενεργειακό φάσμα του σωματιδίου είναι συνεχές. Το σωματίδιο μπορεί να βρεθεί παντού στο διάστημα $-\infty<x<+\infty$. Οι κυματοσυναρτήσεις στην περίπτωση αυτή δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες.



► Σε ένα πεδίο δυναμικής ενέργειας όπως του σχήματος:
(α) **Για $E>U_0$** έχουμε τη σκέδαση του σωματιδίου από το πεδίο. Το σωματίδιο, ανάλογα με την ενέργειά του μπορεί να διέλθει ή να ανακλαστεί.
(β) **Για $E<U_0$** έχουμε είτε τη σκέδαση του σωματιδίου από το πεδίο ή τη διέλευσή του μέσα από τον φραγμό δυναμικής ενέργειας. Η διέλευση εξαρτάται από την ενέργεια του σωματιδίου και το εύρος του φραγμού. Ονομάζεται φαινόμενο σήραγγος και συνιστά καθαρά κβαντική συμπεριφορά χωρίς κλασικό ανάλογο.
Και στις δύο περιπτώσεις το ενεργειακό φάσμα του σωματιδίου είναι συνεχές.

<u>Παράδειγμα 30:</u> (Λύθηκε στο Μάθημα) Ποιες από τις παρακάτω κυματοσυναρτήσεις είναι δυνατό να αποτελούν λύση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger;



Παράδειγμα 31: (Αυτοδιδασκαλία) Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου που βρίσκεται σε ένα πεδίο συντηρητικής δύναμης δίδεται από την έκφραση:

$$\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{L^2}} \;,\; A, L = \sigma\tau\alpha\theta\varepsilon\rho\acute{\varepsilon}\varsigma$$

Εάν η ολική ενέργειά του είναι E=0, να προσδιοριστεί η συνάρτηση της δυναμικής του ενέργειας U(x).

Λύση: Η κυματοσυνάρτηση θα πρέπει να ικανοποιεί τη χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(x)\right]\psi(x) = 0 \xrightarrow{E=0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}U(x)\psi(x)$$

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -\frac{2A}{L^2}xe^{-\frac{x^2}{L^2}}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2A}{L^2}\left(\frac{2x^2}{L^2} - 1\right)e^{-\frac{x^2}{L^2}}$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση του Schrödinger:

$$\frac{2A}{L^2}\left(\frac{2x^2}{L^2} - 1\right)e^{-\frac{x^2}{L^2}} = \frac{2m}{\hbar^2}U(x)\,\mathrm{A}\,e^{-\frac{x^2}{L^2}} \Rightarrow U(x) = \frac{\hbar^2}{mL^2}\left(\frac{2x^2}{L^2} - 1\right) \Rightarrow U(x) = \frac{\hbar^2}{mL^4}\left(2x^2 - L^2\right)$$

Παράδειγμα 32: (Λύθηκε και στο Μάθημα) Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου δίδεται από την έκφραση:

$$\Psi(x,0)=\psi(x)=Ce^{-\frac{|x|}{x_0}} \quad , \; C, x_0 = \text{θετικές πραγματικές σταθερές}$$

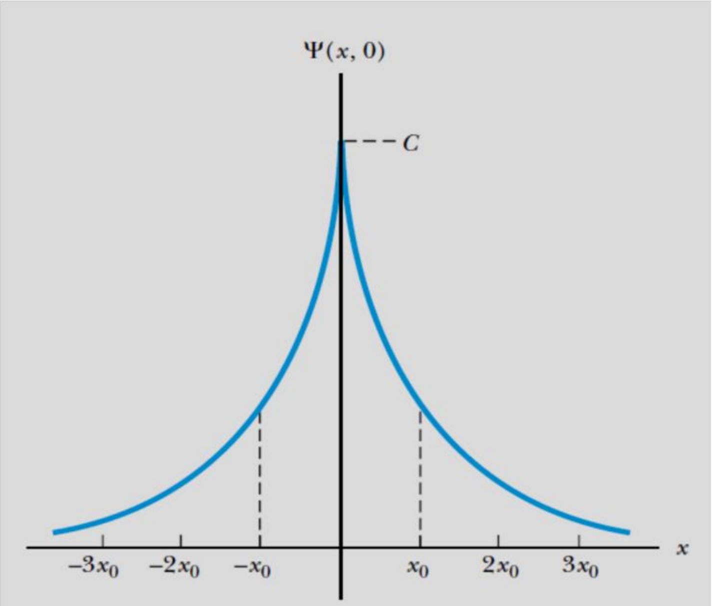
(α) Να υπολογιστεί η σταθερά C , ώστε αυτή να είναι φυσικά αποδεκτή λύση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger.
(β) Να υπολογιστεί η πιθανότητα το σωματίδιο να βρίσκεται σε μία δεδομένη χρονική στιγμή στο διάστημα $-x_0 \le x \le x_0$.
(γ) Να υπολογιστεί η μέση τιμή και η αβεβαιότητα της θέσης του σωματιδίου.

Λύση: (α) Θα πρέπει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow C^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2|x|}{x_0}}dx = 1 \xrightarrow{\text{ΑΡΤΙΑ}} 2C^2\int_0^{+\infty} e^{-\frac{2x}{x_0}}dx = 1 \Rightarrow$$

$$2C^2\left(\frac{x_0}{2}\right)\int_0^{+\infty} e^{-\frac{2x}{x_0}}d\left(\frac{2x}{x_0}\right) = 1 \Rightarrow 2C^2\left(\frac{x_0}{2}\right)\left[-e^{-\frac{2x}{x_0}}\right]_0^{\infty} = 1 \Rightarrow$$

$$2C^2\left(\frac{x_0}{2}\right)[0+1] = 1 \Rightarrow C^2 x_0 = 1 \Rightarrow C = \pm\frac{1}{\sqrt{x_0}}$$



Το (-) εδώ δεν έχει φυσική σημασία αφού ενδιαφέρει το μέτρο της κυματοσυνάρτησης

Άρα:

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-\frac{|x|}{x_0}}$$

(β) Η ζητούμενη πιθανότητα είναι:

$$\wp=\int_{-x_0}^{+x_0}|\psi(x)|^2dx=\frac{1}{x_0}\int_{-x_0}^{+x_0}e^{-\frac{2|x|}{x_0}}dx\xrightarrow{\text{ΑΡΤΙΑ}}\wp=2\frac{1}{x_0}\left(\frac{x_0}{2}\right)\int_0^{x_0}e^{-\frac{2x}{x_0}}d\left(\frac{2x}{x_0}\right)\Rightarrow$$

$$\wp=\left[-e^{-\frac{2x}{x_0}}\right]_0^{x_0}=-e^{-2}+1=0,8647\Rightarrow\wp\approx 86,5\%$$

(γ) Θα έχουμε ότι:

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x|\psi(x)|^2dx=\frac{1}{x_0}\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-\frac{2|x|}{x_0}}dx\xrightarrow{\text{ΠΕΡΙΤΤΗ ΣΕ ΣΥΜΜΕΤΡΙΚΟ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ 0 ΔΙΑΣΤΗΜΑ}}\langle x\rangle=0$$

$$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2|\psi(x)|^2dx=\frac{1}{x_0}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\frac{2|x|}{x_0}}dx=2\frac{1}{x_0}\int_0^{+\infty}x^2e^{-\frac{2x}{x_0}}dx=2\frac{1}{x_0}\left(\frac{x_0}{2}\right)^3=\frac{x_0^{\ 2}}{2}$$

$$(\Delta x)=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}=\sqrt{\frac{x_0^{\ 2}}{2}-0}=\frac{x_0}{\sqrt{2}}$$

Παράδειγμα 33: (Αυτοδιδασκαλία) Η κυματοσυνάρτηση (λύση της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger) ενός σωματιδίου δίνεται από την έκφραση:

$$\psi(x)=\begin{cases}\psi_1(x)=-B(x^2-\alpha^2), & 0\le \mathrm{x}\le \alpha\\ \psi_2(x)=(x-D)^2-C, & \alpha\le \mathrm{x}\le b\\ \psi_3(x)=0, & \mathrm{x}\ge b\end{cases}$$

Να προσδιοριστούν οι σταθερές C και D συναρτήσει των α και B.
Να προσδιοριστεί το b συναρτήσει των α και B.

Λύση: Τόσο η κυματοσυνάρτηση όσο και η πρώτη παράγωγός της θα πρέπει να είναι συνεχείς. Άρα από τη συνέχεια της ψ για x=α έχουμε:

$$\psi_1(x=\alpha)=\psi_2(x=\alpha)\Rightarrow 0=(\alpha-D)^2-C$$

Από τη συνέχεια της dψ/dx για x = α έχουμε:

$$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=\alpha}=\left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=\alpha}\Rightarrow -2\alpha B=2(\alpha-D)$$

Επομένως:

$$D=\alpha(B+1)\qquad C=\alpha^2B^2$$

Από τη συνέχεια της ψ για x=b έχουμε:

$$\psi_2(x=b)=\psi_3(x=b)\Rightarrow\left(b-D\right)^2-C=0\Rightarrow b=D+\sqrt{C}$$
$$\Rightarrow b=\alpha(B+1)+\alpha B\Rightarrow b=\alpha\left(2B+1\right)$$

<u>Παράδειγμα 34:</u> (Αυτοδιδασκαλία) Η κυματοσυνάρτηση (λύση της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger) ενός σωματιδίου δίνεται από την έκφραση:

$$\psi(x)=\begin{cases}C(\alpha^2-x^2),\ \text{-}\alpha\le \mathrm{x}\le\alpha\\ 0, \qquad\qquad \mathrm{x}<-\alpha,\ \mathrm{x}>\alpha\end{cases}$$

όπου C, α θετικές πραγματικές σταθερές.

(α) Υπολογίστε από τη συνθήκη κανονικοποίησης τη σταθερά C συναρτήσει της α.

(β) Υπολογίστε την πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου σε διάστημα 0,01α γύρω από τη θέση x=α/2.

(γ) Υπολογίστε την πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου στο διάστημα [α/2,α].

(δ) Υπολογίστε την πιθανότερη τιμή της θέσης του σωματιδίου σε μια μέτρηση.

Λύση: **(α)** Θα πρέπει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{-a} 0 dx + C^2 \int_{-a}^{a} (a^2 - x^2)^2 dx + \int_{a}^{+\infty} 0 dx = 1 \Rightarrow C^2 \int_{-a}^{a} (a^2 - x^2)^2 dx \Rightarrow$$

$$C^2 \int_{-a}^{a} (a^4 + x^4 - 2\alpha^2 \mathrm{x}^2)^2 dx = 1 \Rightarrow C^2 \left(2a^5 - \frac{4a^5}{3} + \frac{2a^5}{5} \right) = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}$$

(β) Το εύρος του διάστήματος 0,01α είναι πολύ μικρό συγκρινόμενο με το x=α/2. Άρα:

$$\wp = P(x = \frac{a}{2}) dx = \left| \psi(x = \frac{a}{2}) \right|^2 dx = \frac{15}{16a^5} \left[a^2 - \left(\frac{a}{2} \right)^2 \right]^2 0,01a = 0,0053 = 0,53\%$$

(γ) Εδώ το εύρος του θεωρούμενου διαστήματος είναι σημαντικό. Άρα:

$$\wp = \int_{\frac{a}{2}}^{a} |\psi(x)|^2 dx = C^2 \int_{\frac{a}{2}}^{a} (a^2 - x^2)^2 dx = \frac{15}{16a^5} \int_{\frac{a}{2}}^{a} (a^2 - x^2)^2 dx = 0,104 = 10,4\%$$

(δ) Η πιθανότερη τιμή της θέσης του σωματιδίου είναι αυτή για την οποία η πυκνότητα πιθανότητας είναι μέγιστη. Άρα:

$$\frac{dP(x)}{dx}=0\Rightarrow\frac{d\left|\psi(x)\right|^2}{dx}=0\Rightarrow C^2\frac{d}{dx}\left[(a^2-x^2)^2\right]=0\Rightarrow C^2 2(a^2-x^2)(-2x)=0$$

$$\Rightarrow -4C^2(a^2-x^2)x=0\Rightarrow\begin{cases} x=0 \\ x=\pm a\end{cases}$$

$$\left.\frac{d^2\left|\psi(x)\right|^2}{dx^2}\right|_{x=0}=\left[-4C^2(a^2-x^2)+8C^2x^2\right]_{x=0}=-4C^2a^2<0$$

$$\left.\frac{d^2\left|\psi(x)\right|^2}{dx^2}\right|_{x=\pm a}=\left[-4C^2(a^2-x^2)+8C^2x^2\right]_{x=\pm a}=8C^2a^2>0$$

Η πιθανότερη τιμή της θέσης του σωματιδίου είναι η x=0.

IV. ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΕΠΑΛΛΗΛΙΑΣ

►Η εξίσωση του Schrödinger είναι μιγαδική , γραμμική και ομογενής και επομένως θα δέχεται ως λύσεις και έναν γραμμικό συνδυασμό (επαλληλία) λύσεών της της μορφής:

$$\boxed{\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\Psi_n(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}} \qquad c_n = \mu\iota\gamma\alpha\delta\iota\kappa\acute{o}\varsigma\ \varepsilon\nu\ \gamma\acute{\varepsilon}\nu\varepsilon\iota$$

όπου οι κυματοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ αποτελούν λύσεις της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger.

► Μια τέτοια κατάσταση ενός μονοσωματιδιακού κβαντικού συστήματος δεν είναι κατάσταση καθορισμένης ενέργειας (στάσιμη κατάσταση). Εδώ η πυκνότητα πιθανότητας εμφανίζει χρονική εξάρτηση. Π.χ για τον γραμμικό συνδυασμό

$$\Psi(x,t)=c_1\psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}+c_2\psi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}$$

$$P(x,t)=\Psi(x,t)\Psi^*(x,t)=\left(c_1\psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}+c_2\psi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right)\left(c_1^*\psi_1(x)e^{\frac{i}{\hbar}E_1 t}+c_2^*\psi_2(x)e^{\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right)$$

$$=|c_1|^2|\psi_1(x)|^2+|c_2|^2|\psi_2(x)|^2+c_1^*c_2e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t}+c_1c_2^*e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}$$

► Αποδεικνύεται ότι οι πιθανότητα το σύστημα να βρεθεί στην κατάσταση που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\psi_n(x)$ με ενέργεια E_n δίδεται από την έκφραση:

$$\boxed{\wp_n = \left|c_n\right|^2}$$

► ….και ότι μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση ενέργεια του συστήματος και την απροσδιοριστία της από τις εκφράσεις:

$$\boxed{< E >= \left|c_1\right|^2 E_1 + \left|c_2\right|^2 E_2 + ...}$$

$$\boxed{< E^2 >= \left|c_1\right|^2 E_1^{\ 2} + \left|c_2\right|^2 E_2^{\ 2} + ...}$$

$$\boxed{\left(\Delta E\right) = \sqrt{< E^2 > - < E >^2}}$$

► **Καταστάσεις επαλληλίας μπορούν να προκύψουν σε ένα μονοσωματιδιακό κβαντικό σύστημα εάν π.χ διαταραχθεί παροδικά από ένα εξωτερικό αίτιο.**

Παράδειγμα 35: (Αυτοδιδασκαλία) Η κατάσταση ενός σωματιδίου περιγράφεται σε μία ορισμένη χρονική στιγμή από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{3}}\psi_1(x)+\sqrt{\frac{2}{3}}\psi_2(x)$$

όπου $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ λύσεις της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης του Schrödinger απεικονίζοντας στάσιμες καταστάσεις με ενέργειες $E_1=3$ και $E_2=6$ (αυθαίρετες μονάδες ενέργειας) αντίστοιχα.
(α) Ποιες είναι οι πιθανότητες μία μέτρηση της ενέργειας να δώσει για την κατάσταση επαλληλίας $\psi(x)$ τις τιμές E_1 και E_2 ; (β) Υπολογίστε την μέση ενέργεια και την αβεβαιότητα ενέργειας του σωματιδίου στην κατάσταση επαλληλίας $\psi(x)$.

Λύση: **(α)** Θα έχουμε ότι:

$$\wp_1=|c_1|^2=\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2=\frac{1}{3} \qquad \wp_2=|c_2|^2=\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\right)^2=\frac{2}{3}$$

Παρατηρούμε ότι: $\wp_1+\wp_2=1$

(β) Θα έχουμε ότι:

$$<E>=|c_1|^2E_1+|c_2|^2E_2=\frac{1}{3}3+\frac{2}{3}6=1+4=5$$

$$<E^2>=|c_1|^2E_1^{\,2}+|c_2|^2E_2^{\,2}=\frac{1}{3}9+\frac{2}{3}36=3+24=27$$

$$(\Delta E)=\sqrt{<E^2>-<E>^2}=\sqrt{27-25}=\sqrt{2}$$

V. ΕΦΑΡΜΟΓΗ 1: ΤΟ ΕΛΕΥΘΕΡΟ ΣΩΜΑΤΙΟ

(α) Το ελεύθερο σωμάτιο καθορισμένης ενέργειας:

$$\left.\begin{array}{l} E = \hbar\omega = \dfrac{p^2}{2m} \\ p = \hbar k \end{array}\right\} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

•Χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger για U(x)=0:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

• Χαρακτηριστικό πολυώνυμο: $r^2 + k^2 = 0 \Rightarrow r = \pm ik$

• Λύση: $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

• Χρονοεξαρτημένη κυματοσυνάρτηση:

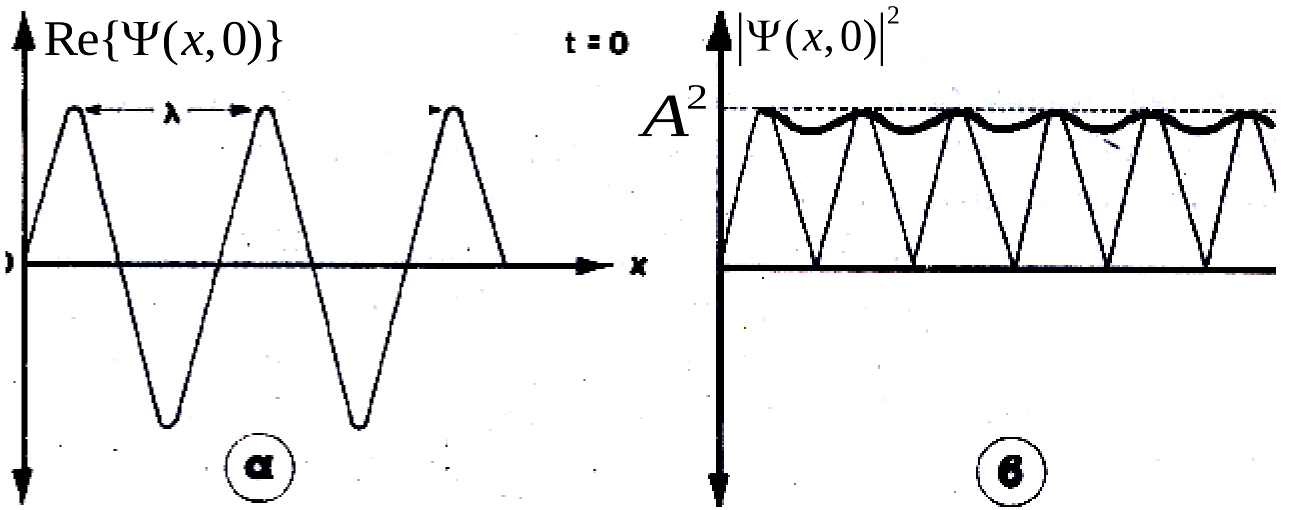
$$\Psi(x,t) = \left[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right] e^{-\frac{iE}{\hbar}t} = \left[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right] e^{-i\omega t} = \underbrace{Ae^{i(kx-\omega t)}}_{\text{Επίπεδο κύμα που οδεύει προς τα δεξιά}} + \underbrace{Be^{-i(kx+\omega t)}}_{\text{Επίπεδο κύμα που οδεύει προς τα αριστερά}}$$

● Για κύμα που οδεύει προς τα δεξιά B=0 και επομένως:

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} = A\left[\cos\left(kx-\omega t\right)+i\sin\left(kx-\omega t\right)\right]$$

● Πυκνότητα πιθανότητας: $P(x,t) = \Psi(x,t)\Psi^*(x,t) = A^2$

Χρονικά σταθερή πυκνότητα πιθανότητας (στάσιμη κατάσταση). Ανεξάρτητη και από τη θέση. Το σωματίδιο έχει την ίδια πιθανότητα να βρεθεί οπουδήποτε στη διεύθυνση x (άπειρη αβεβαιότητα θέσης).



(β) Το ελεύθερο σωμάτιο πεπερασμένης αβεβαιότητας θέσης και ορμής (ενέργειας):

●Μπορεί να περιγραφεί μόνο με κυματόδεμα της μορφής:

$$\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{A(k)}e^{i[kx-\omega(k)t]}dk$$

$$\left.\begin{aligned} E=\hbar\omega=\frac{p^2}{2m} \\ p=\hbar k \end{aligned}\right\}\Rightarrow \omega=\frac{\hbar k^2}{2m}$$

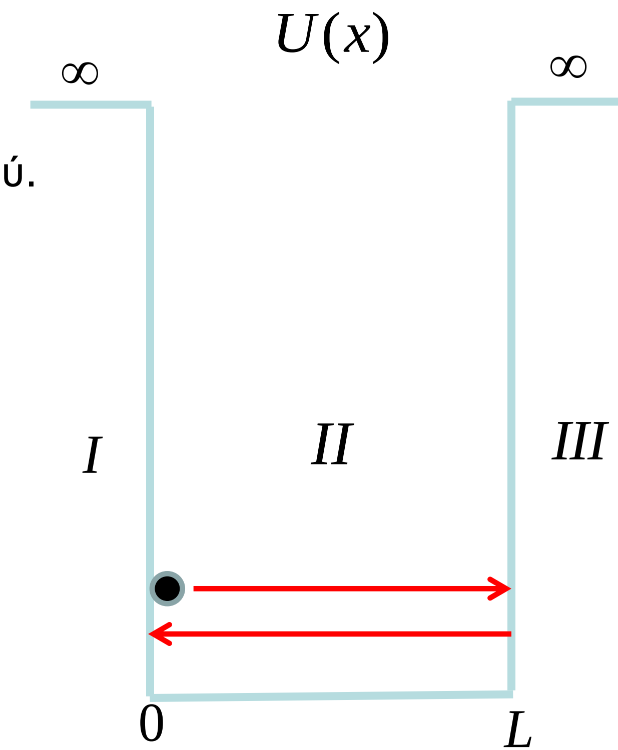
$$\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{A(k)}e^{i\left[kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right]}dk$$

Το είδος του κυματοδέματος εξαρτάται από τον παράγοντα διαμόρφωσης A(k).

Σε κάθε περίπτωση μπορεί να αποδειχθεί μαθηματικά «άπλωμα» του κυματοπακέτου συναρτήσει του χρόνου. Το γκαουσιανό κυματοπακέτο ενδιαφέρει ιδιαίτερα γιατί παρουσιάζει το ελάχιστο γινόμενο αβεβαιότητας ορμής-θέσης. Η διαπραγμάτευση για το γκαουσιανό κυματοπακέτο ξεφεύγει, όμως, από τα πλαίσια του συγκεκριμένου μαθήματος.

VI. ΕΦΑΡΜΟΓΗ 2: ΣΩΜΑΤΙΟ ΣΕ ΑΠΕΙΡΟΒΑΘΟ ΠΗΓΑΔΙ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ-ΔΕΣΜΙΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ

$$U(x)=\begin{cases}0 & ,0\le x\le L\\ \infty, & \alpha\lambda\lambda o\acute{\upsilon}\end{cases}$$



Ελαστικές κρούσεις στα τοιχώματα. Σταθερή ταχύτητα και ορμή.

Το σωματίδιο μάζας m δεν μπορεί να ξεφύγει εκτός του πηγαδιού.

- Στην περιοχή I (x<0) ψ(x)=0
- Στην περιοχή III (x>L) ψ(x)=0
- Στην περιοχή II (0<x<L) U(x)=0 και :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0\Rightarrow\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0,\quad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Χαρακτηριστικό πολυώνυμο: $r^2+k^2=0\Rightarrow r=\pm ik$

Λύση: $\psi(x)=A'e^{ikx}+B'e^{-ikx}$

Συνέχεια στο x=0:

$$\psi(x=0)=0\Rightarrow A'+B'=0\Rightarrow A'=-B'$$

Άρα:

$$\psi(x)=A'\left(e^{ikx}-e^{-ikx}\right)=2iA'\sin kx=A\sin kx\ ,\quad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Συνέχεια στο x=L : $\psi(x=L)=0 \Rightarrow A\sin kL=0 \Rightarrow kL=n\pi \Rightarrow k=n\dfrac{\pi}{L}\ ,\ n=1,2,3...$

Άρα :

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}=n\frac{\pi}{L}\ ,\ n=1,2,3...\Rightarrow \quad \boxed{\mathrm{E}_n=n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}=n^2\frac{h^2}{8mL^2},\quad n=1,2,3...}$$

και επομένως: $\psi_n(x)=A\sin\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right),\ n=1,2,3...$

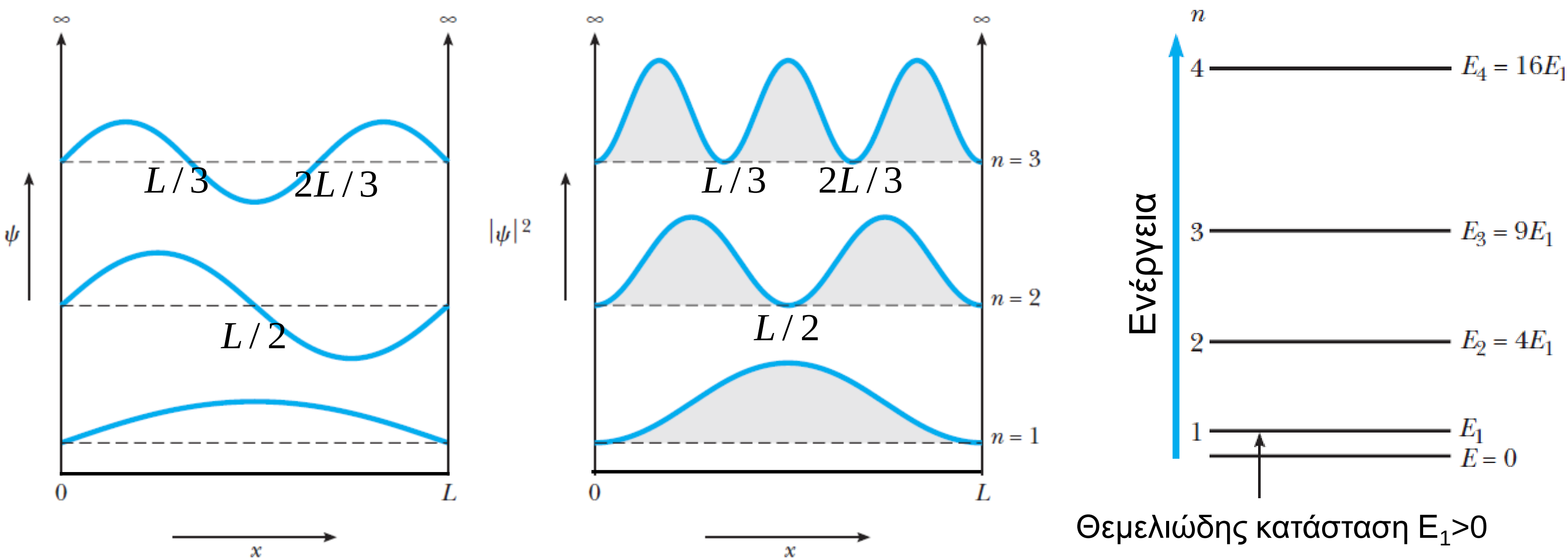
Θα πρέπει επίσης:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_n(x)\right|^2dx=1\Rightarrow\int_0^L\left|\psi_n(x)\right|^2dx=1\Rightarrow\left|A\right|^2\int_0^L\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx=1\Rightarrow A=\sqrt{\frac{2}{L}}$$

Συνοψίζοντας:

$$\boxed{\begin{aligned}&\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right),\ n=1,2,3...\\&\mathrm{E}_n=n^2\frac{h^2}{8mL^2},\quad n=1,2,3...\\&\Psi_n(x,t)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt},\ n=1,2,3...\end{aligned}}$$

$$0<x<L$$



Παρατηρήσεις:

● Για την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του σωματιδίου

$$\mathrm{E}_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \xrightarrow[m\to\infty]{h\to 0} 0$$

Το αποτέλεσμα μεταπίπτει στο κλασικά προβλεπόμενο (κλασικά προβλέπεται μηδενική ελάχιστη ενέργεια-βλ. και διαπραγμάτευση του προβλήματος με τους κανόνες Wilson/Sommerfeld) όταν h→0 ή m →∞ , σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας.

● Κβάντωση της ενέργειας και αρχή της αντιστοιχίας.

$$\Delta \mathrm{E}_n = \mathrm{E}_{n+1} - \mathrm{E}_n = \left[(n+1)^2 - n^2 \right] \frac{h^2}{8mL^2} = (2n+1) \frac{h^2}{8mL^2}$$

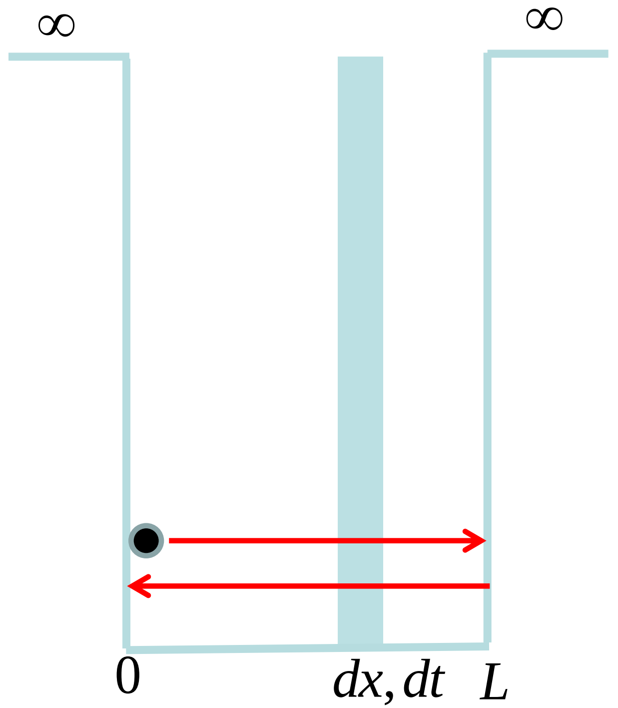
$$\frac{\Delta \mathrm{E}_n}{E_n} = \frac{\mathrm{E}_{n+1} - \mathrm{E}_n}{\mathrm{E}_n} = \frac{(2n+1)}{n^2} \xrightarrow{n\to\infty} 0$$

Παρατηρούμε ότι η σχετική ενεργειακή διαφορά μεταξύ δύο διαδοχικών ενεργειακών σταθμών εκμηδενίζεται πρακτικά για μεγάλες τιμές του κβαντικού αριθμού n. Το σωματίδιο στην περίπτωση αυτή συμπεριφέρεται κλασικά (συνεχές ενεργειακό φάσμα), σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας.

● <u>Κλασική πιθανότητα και αρχή της αντιστοιχίας.</u>

Η κλασική πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου σε ένα διάστημα μήκους dx μέσα στο πηγάδι εξαρτάται πρακτικά από το ποσοστό του χρόνου (2dt) που αυτό «περνάει» μέσα στο διάστημα αυτό σε σχέση με την περίοδο κίνησής του εντός των ορίων του πηγαδιού. Δηλαδή:

$$\wp_{cl} = P_{cl}(x)dx = \frac{2dt}{T} \Rightarrow P_{cl}(x) = \frac{2}{T\upsilon} = \frac{2}{\frac{2L}{\upsilon}\upsilon} = \frac{1}{L}$$



(η ταχύτητα του σωματιδίου είναι σταθερή)

$$< x >_{cl} = \int_0^L x P_{cl}(x)dx = \int_0^L x\frac{1}{L}dx = \frac{L}{2}$$

$$< x^2 >_{cl} = \int_0^L x^2 P_{cl}(x)dx = \int_0^L x^2\frac{1}{L}dx = \frac{L^2}{3}$$

$$(\Delta x)_{cl} = \sqrt{< x^2 >_{cl} - < x >^2_{cl}}$$

Η αντίστοιχη κβαντική πυκνότητα πιθανότητας είναι: $P(x) = \Psi_n(x,t)\Psi^*_n(x,t) = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

$$< x > = \int_0^L xP(x)dx = \frac{L}{2}, \quad < x^2 > = \int_0^L x^2P(x)dx = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2(n\pi)^2} \xrightarrow{n\to\infty} \frac{L^2}{3} = < x^2 >_{cl}$$

Παράδειγμα 36: (Λύθηκε και στο Μάθημα) Για ένα σωμάτιο σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικής ενέργειας που βρίσκεται σε κατάσταση με κβαντικό αριθμό n που περιγράφεται από την κυματοσυνλαρτηση $\psi_n(x)$, να υπολογιστεί η πιθανότητα σε μία μέτρηση της θέσης να βρεθεί στο διάστημα $(x_1 \le x \le x_2)$. Να γίνει εφαρμογή στη θεμελιώδη και την πρώτη διεγερμένη κατάσταση (n=1,2) για x_1=0,45L και x_2=0,55L.

Λύση: Για την κατάσταση n η πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου στο διάστημα $(x_1 \le x \le x_2)$ θα είναι:

$$\wp(x_1 \le x \le x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right]dx = \frac{2}{L}\int_{x_1}^{x_2}\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx =$$

$$= \frac{2}{L}\int_{x_1}^{x_2}\frac{1-\cos\left(2\frac{n\pi}{L}x\right)}{2}dx = \frac{2}{L}\left[\int_{x_1}^{x_2}\frac{dx}{2} - \frac{1}{2}\int_{x_1}^{x_2}\cos\left(2\frac{n\pi}{L}x\right)dx\right] =$$

$$= \frac{2}{L}\int_{x_1}^{x_2}\frac{dx}{2} - \frac{2}{L}\frac{1}{2}\left(\frac{L}{2n\pi}\right)\int_{x_1}^{x_2}\cos\left(2\frac{n\pi}{L}x\right)d\left(2\frac{n\pi}{L}x\right) = \left[\frac{x}{L} - \frac{1}{2n\pi}\sin\left(2\frac{n\pi}{L}x\right)\right]_{x_1}^{x_2}$$

- Για n=1 θα έχουμε ότι:

$$\wp(x_1 \le x \le x_2) = \left[\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi}\sin\left(2\frac{\pi}{L}x\right)\right]_{0,45L}^{0,55L} = 0,198 = 19,8\%$$

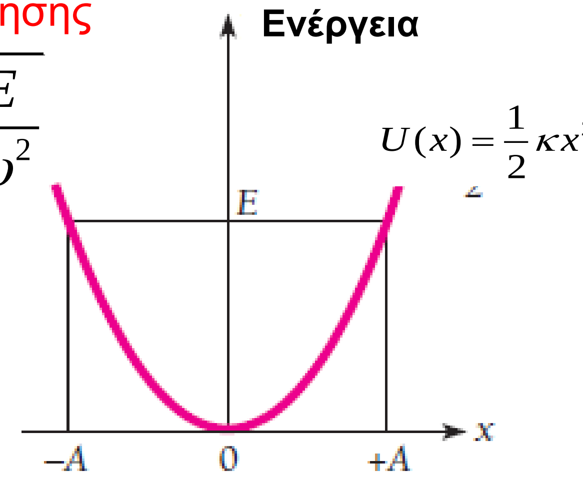
- Για n=2 θα έχουμε ότι: $\wp(x_1 \le x \le x_2) = \left[\frac{x}{L} - \frac{1}{4\pi}\sin\left(4\frac{\pi}{L}x\right)\right]_{0,45L}^{0,55L} = 0,0065 = 0,65\%$

VI. ΕΦΑΡΜΟΓΗ 3: Ο ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΡΜΟΝΙΚΟΣ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗΣ-ΔΕΣΜΙΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ

$$U(x)=\frac{1}{2}\kappa x^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2,\quad \omega=\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$$

Κλασικά όρια κίνησης

$$\pm A=\pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$



•Χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi=0\Rightarrow$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi=0$$

Σταθερά κανονικοποίησης

Λύση :

$$\psi_n(x)=\underbrace{\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{2^{-n}}{n!}\right)^{\frac{1}{2}}}_{}e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\mathrm{H}_n\left(\alpha^{\frac{1}{2}}x\right),\ n=0,1,2,3...$$

$$\mathrm{H}_n(y)=(-1)^n e^{y^2}\frac{d^n\left(e^{-y^2}\right)}{dy^n}$$

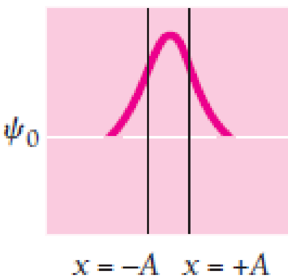
$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ n=0,1,2,3...$$

$$\boxed{\alpha=\frac{m\omega}{\hbar}}$$

n	$H_n(y)$
0	1
1	$2y$
2	$4y^2-2$
3	$8y^3-12y$
4	$16y^4-48y^2+12$
5	$32y^5-160y^3+120y$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

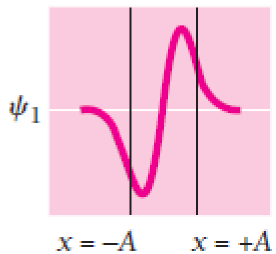
$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{hf}{2}$$



$$A = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (2\alpha)^{\frac{1}{2}} x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

$$E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2} = \frac{3hf}{2}$$

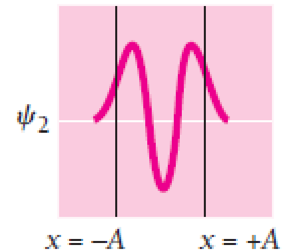


$$A = \pm\sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}$$

Εικονίζονται τα όρια ταλάντωσης κλασικού αρμονικού ταλαντωτή της ίδιας ενέργειας

$$\psi_2(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} 2^{-\frac{3}{2}} \left(4\alpha x^2 - 2\right) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

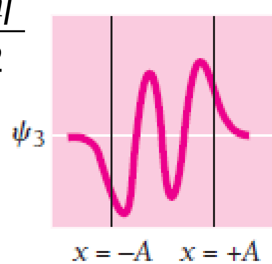
$$E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2} = \frac{5hf}{2}$$



$$A = \pm\sqrt{\frac{5\hbar}{m\omega}}$$

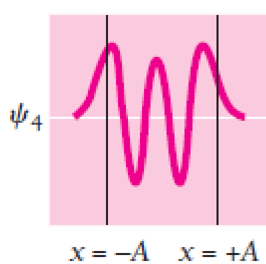
$$\psi_3(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} 48^{-\frac{1}{2}} \left(8\alpha^{\frac{3}{2}} x^2 - 12\alpha^{\frac{1}{2}} x\right) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

$$E_3 = \frac{7\hbar\omega}{2} = \frac{7hf}{2}$$

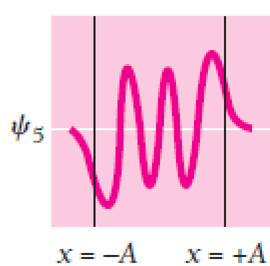


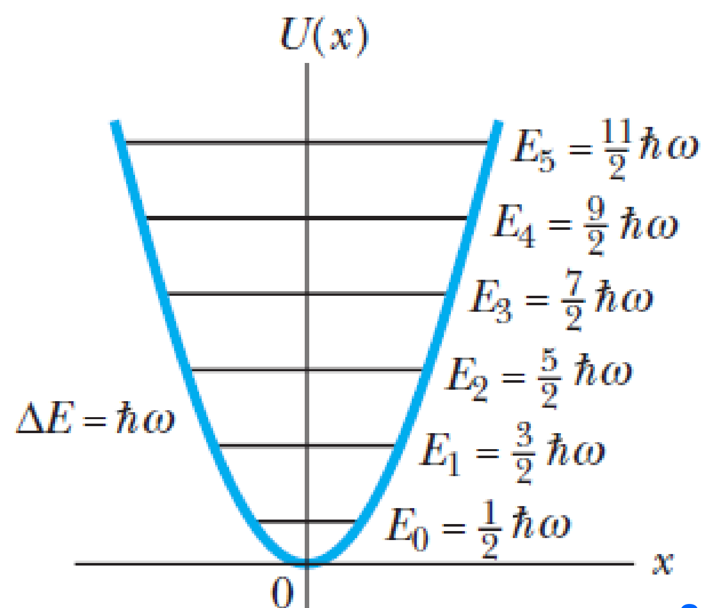
$$A = \pm\sqrt{\frac{7\hbar}{m\omega}}$$

$$A = \pm\sqrt{\frac{9\hbar}{m\omega}}$$



$$A = \pm\sqrt{\frac{11\hbar}{m\omega}}$$





Παρατηρήσεις:

● Ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης. Παρατηρούμε ότι η ελάχιστη ενέργεια του κβαντικού ταλαντωτή (γνωστή και ως ενέργεια μηδενικού σημείου) είναι μη μηδενική σε πλήρη συμφωνία με την αρχή της αβεβαιότητας.

$$\mathrm{E}_0 = \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \xrightarrow[m\to\infty]{h\to 0} 0$$

Το αποτέλεσμα μεταπίπτει στο κλασικά προβλεπόμενο (κλασικά προβλέπεται μηδενική ελάχιστη ενέργεια) όταν h→0 ή m →∞ , σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας.

● Κβάντωση της ενέργειας και αρχή της αντιστοιχίας.

$$\Delta\mathrm{E}_n = \mathrm{E}_{n+1} - \mathrm{E}_n = \left[(n+1) + \frac{1}{2} - n - \frac{1}{2}\right]\hbar\omega = \hbar\omega$$

Ανεξάρτητη του n!!!

$$\frac{\Delta\mathrm{E}_n}{E_n} = \frac{\mathrm{E}_{n+1} - \mathrm{E}_n}{\mathrm{E}_n} = \frac{\hbar\omega}{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega} = \frac{1}{n+\frac{1}{2}} \xrightarrow{n\to\infty} 0$$

Παρατηρούμε ότι η σχετική ενεργειακή διαφορά μεταξύ δύο διαδοχικών ενεργειακών σταθμών εκμηδενίζεται πρακτικά για μεγάλες τιμές του κβαντικού αριθμού n. Ο ταλαντωτής στην περίπτωση αυτή συμπεριφέρεται κλασικά (συνεχές ενεργειακό φάσμα), σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας.

● Κλασική πιθανότητα και αρχή της αντιστοιχίας.

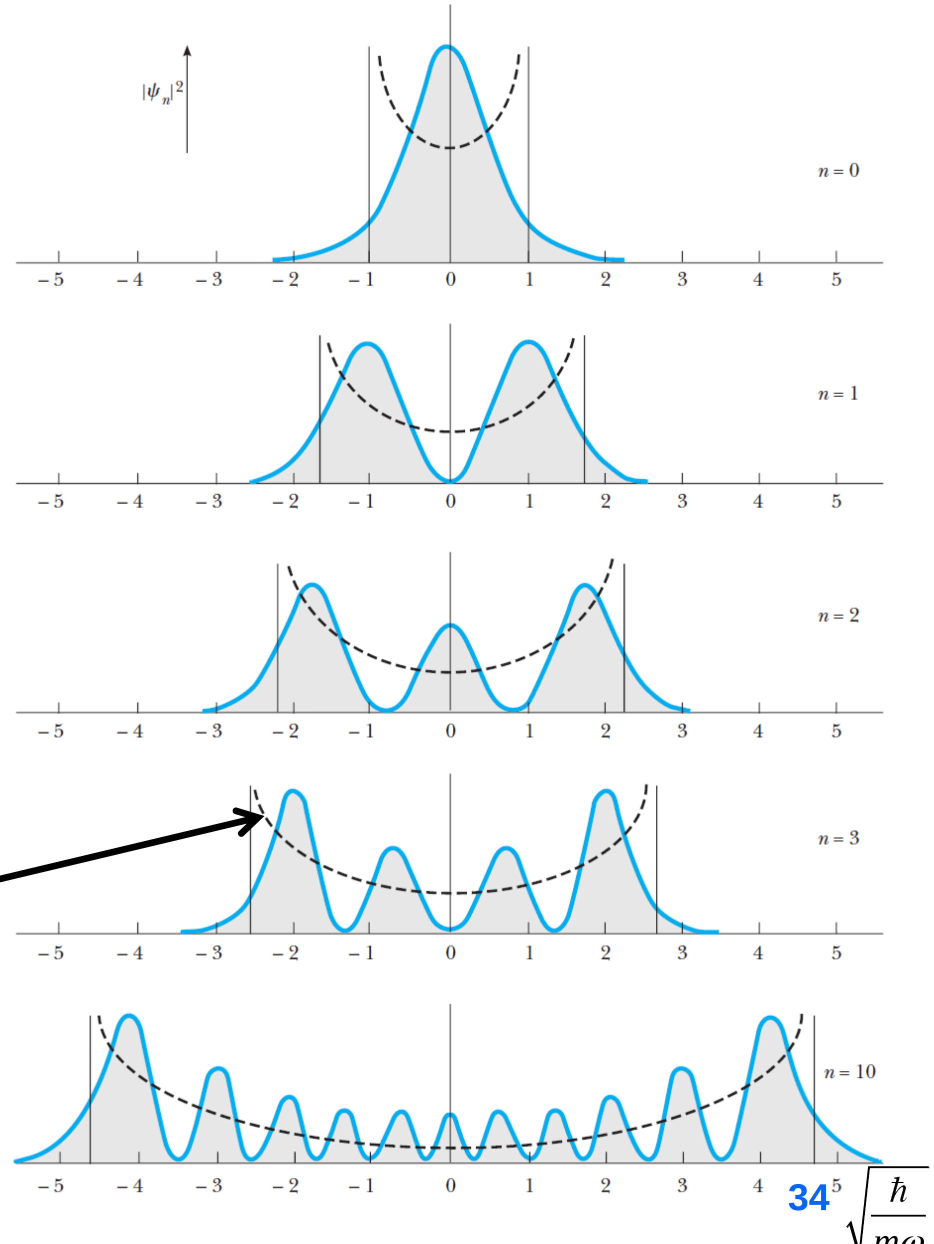
Η κλασική πιθανότητα εύρεσης του ταλαντωτή σε ένα διάστημα μήκους dx μέσα στο πηγάδι εξαρτάται πρακτικά από το ποσοστό του χρόνου (2dt) που αυτός «περνάει» μέσα στο διάστημα αυτό σε σχέση με την περίοδο κίνησής του εντός των ορίων του πηγαδιού. Δηλαδή:

$$\wp_{cl} = P_{cl}(x)dx = \frac{2dt}{T} \Rightarrow P_{cl}(x) = \frac{2}{T\upsilon(x)}$$

$$E = \frac{1}{2}m\upsilon^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \Rightarrow \upsilon(x) = \sqrt{\frac{2E}{m} - \omega^2x^2}$$

$$P_{cl}(x) = \frac{2}{\frac{2\pi}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m} - \omega^2x^2}} = \frac{1}{\pi\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x^2}}$$

$$= \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}$$



Όσο αυξάνεται το n, η κλασική και η κβαντική πιθανότητα τείνουν να συμπέσουν…

● Σύγκριση με την θεωρία του Planck.

Η διαπραγμάτευση της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος από τον Planck , οδήγησε στο ότι η ενέργεια ενός μικροσκοπικού αρμονικού ταλαντωτή είναι κβαντισμένη σύμφωνα με τη σχέση:

$$\boxed{E_n = nhf = n\hbar\omega,\ n = 1, 2, 3...}$$

Planck

Η διαπραγμάτευση του αρμονικού ταλαντωτή κατά Schrödinger οδηγεί στο αποτέλεσμα:

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ n = 0, 1, 2, 3...}$$

Schrödinger

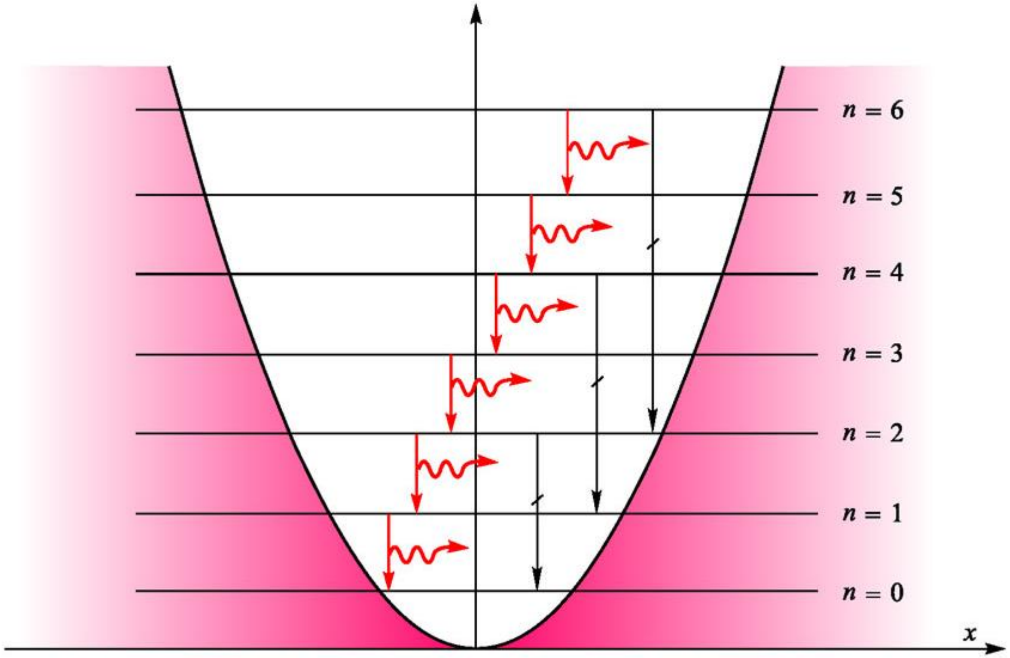
Που οφείλεται η διαφορά;

Παρατηρούμε ότι το αποτέλεσμα του Planck ισοδυναμεί πρακτικά με τις διαφορές ενέργειας μεταξύ των διεγερμένων καταστάσεων και της θεμελιώδους κατάστασης του κατά Schrödinger αρμονικού ταλαντωτή…

Άρα το αποτέλεσμα του Planck πρέπει πρακτικά να σχετίζεται με μεταβάσεις μεταξύ καταστάσεων αρμονικού ταλαντωτή κατά τις οποίες εκπέμπεται ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία (φωτόνια).

Αυτό είναι απόλυτα λογικό , δεδομένου ότι στην ουσία ο Planck μελέτησε την Η/Μ ακτινοβολία που εκπέμπεται από ένα μέλαν σώμα.
Στο μοντέλλο του μέλανος σώματος η Η/Μ ακτινοβολία παράγεται στο εσωτερικό της κοιλότητας από τις ταλαντώσεις των μορίων των τοιχωμάτων της. Η θερμοκρασία διεγείρει τα μόρια, τα οποία κατά την αποδιέγερσή τους σε στάθμες χαμηλότερης ενέργειας εκπέμπουν φωτόνια…..

Εάν ένας απλός αρμονικός ταλαντωτής αποδιεγείρεται με εκπομπή φωτονίου: Στον απλό μικροσκοπικό κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή, επιτρέπονται μόνο μεταβάσεις μεταξύ διαδοχικών ενεργειακών σταθμών (Δn=1) με εκπομπή ενός φωτονίου, όπως στο σχήμα (βλ. Σ.Τραχανάς «Κβαντομηχανική Ι»).



Σχημα 7.9: *Επιτρεπόμενες και απαγορευμένες μεταβάσεις στον αρμονικό ταλαντωτή.* Επιτρεπόμενες είναι μόνο οι μεταβάσεις μεταξύ γειτονικών σταθμών ($\Delta n = 1$), ενώ όλες οι άλλες ($\Delta n > 1$) είναι απαγορευμένες και δείχνονται με «διαγραμμένα» γκρίζα βέλη χωρίς ένδειξη εκπεμπόμενου φωτονίου. Επειδή οι στάθμες του ταλαντωτή είναι ισαπέχουσες, οι επιτρεπόμενες μεταβάσεις παράγουν ακτινοβολία μίας και μοναδικής συχνότητας, όπως και ο αντίστοιχος κλασικός ταλαντωτής.

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega = hf \Rightarrow \omega = 2\pi f$$

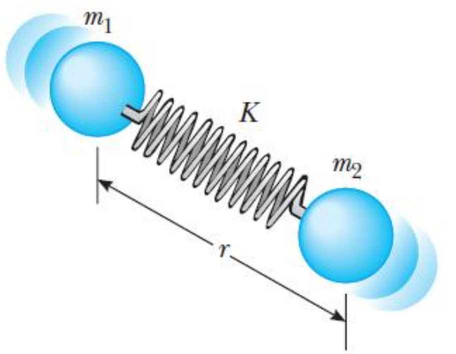
$$E_{n+2} - E_n = 2\hbar\omega = hf \Rightarrow \omega \neq 2\pi f$$

άτοπο

Άρα κατά την ακτινοβολία του μέλανος σώματος θα παρατηρούσαμε μόνο μία συχνότητα εκπεμπόμενης Η/Μ ακτινοβολίας….

Στα ταλαντούμενα (έστω διατομικά) μόρια η κατάσταση είναι διαφορετική.

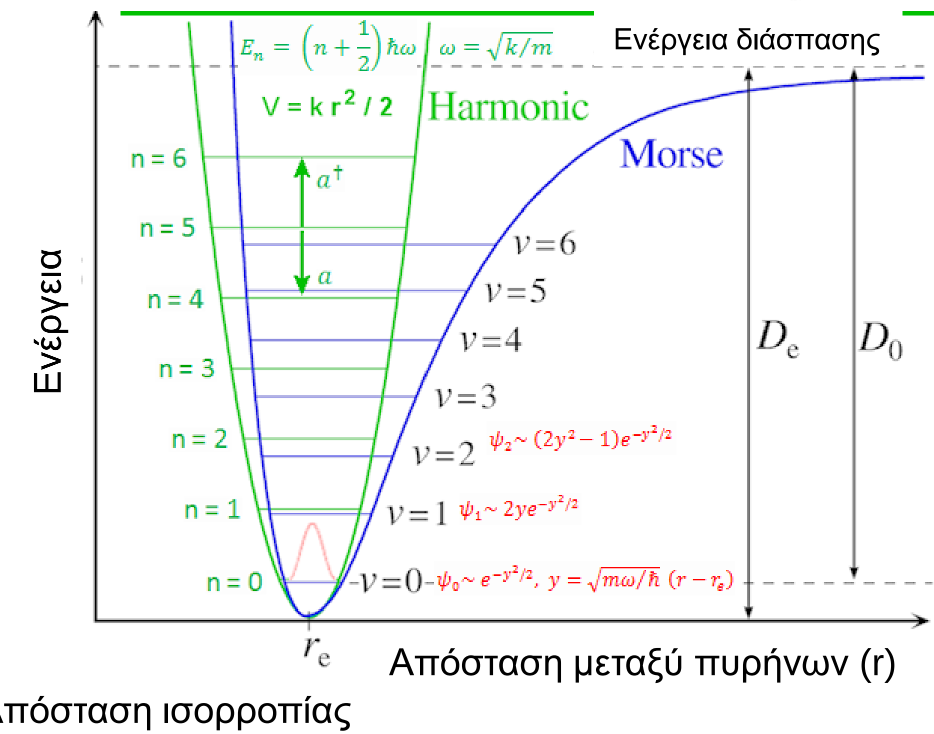
Η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης των ατόμων που τα συγκροτούν είναι π.χ. της μορφής:



$$U(r) = D_e\left(e^{-2ar} - 2e^{-ar}\right)$$ (Δυναμικό Morse)

Προσεγγίζεται ικανοποιητικά (ανάλογα με το μόριο) από το παραβολικό δυναμικό του απλού αρμονικού ταλαντωτή. Οι αποκλίσεις οφείλονται σε αναρμονικούς όρους της ταλάντωσης του μορίου.

Όμως η αναρμονικότητα και η απόκλιση από το παραβολικό δυναμικό επιτρέπει μεταβάσεις με Δn>1. Για το λόγο αυτό στην ακτινοβολία του μέλανος σώματος παρατηρείται πληθώρα συχνοτήτων των εκπεμπομένων φωτονίων.



<u>Παράδειγμα 37:</u> (Λύθηκε στο Μάθημα) (α) Να κατασκευαστεί η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης ενός κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή. (β) Να υπολογιστεί η μέση τιμή της θέσης του ταλαντωτή στη θεμελιώδη του κατάσταση. (γ) Να υπολογιστεί η πιθανότερη τιμή της θέσης του ταλαντωτή στη θεμελιώδη του κατάσταση.

<u>Λύση:</u> Για τον κβαντικό αρμονικό ταλαντωτή έχουμε γενικά ότι:

$$\psi_n(x)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{2^{-n}}{n!}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\mathrm{H}_n\left(\alpha^{\frac{1}{2}}x\right),\ n=0,1,2,3...$$

$$\mathrm{H}_n(y)=(-1)^n\mathrm{e}^{y^2}\frac{d^n\left(\mathrm{e}^{-y^2}\right)}{dy^n} \qquad\qquad \alpha=\frac{m\omega}{\hbar}$$

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ n=0,1,2,3...$$

(α) Για n=0 θα έχουμε ότι: $\mathrm{H}_0(y)=(-1)^0\mathrm{e}^{y^2}\dfrac{d^0\left(\mathrm{e}^{-y^2}\right)}{dy^0}=1\times\mathrm{e}^{y^2}\times\mathrm{e}^{-y^2}=1$

$$\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{2^{-0}}{0!}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\mathrm{H}_0\left(\alpha^{\frac{1}{2}}x\right)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\Rightarrow\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

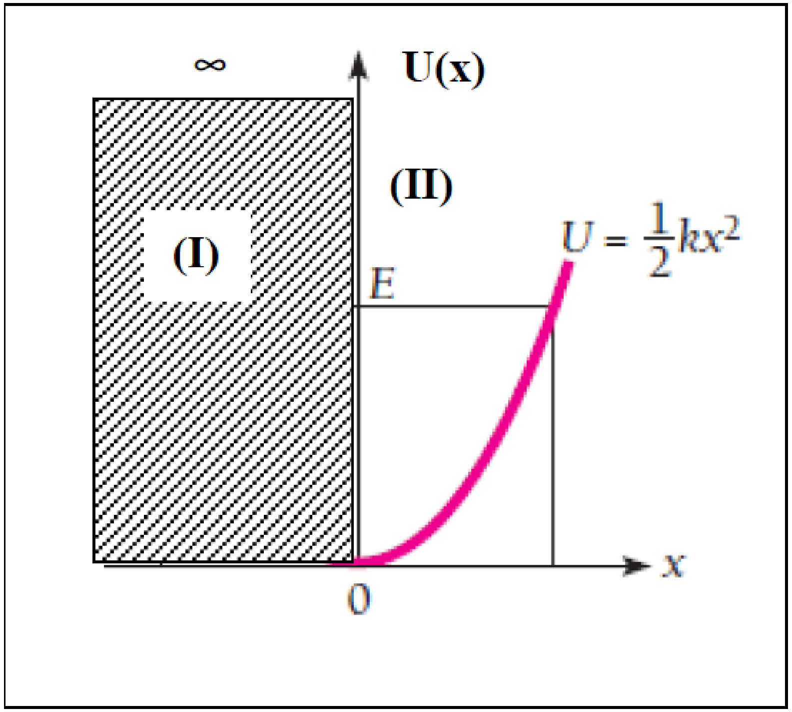
$$\Psi_0(x,t)=\psi_0(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\mathrm{E}_0}{\hbar}t}=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hbar\omega}{2\hbar}t}=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega}{\hbar}t}$$

Κ.λ.π.

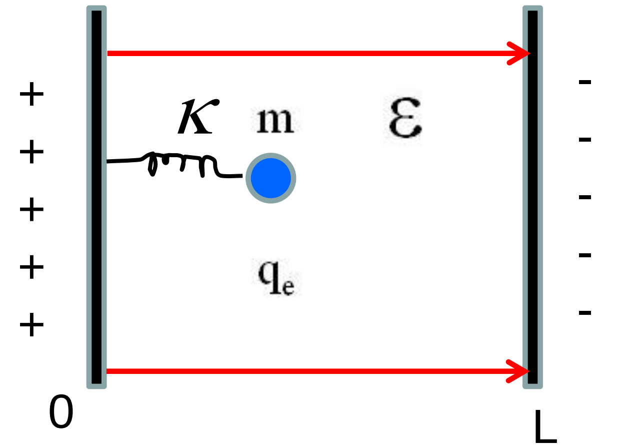
Παράδειγμα 38: (Λύθηκε στο Μάθημα) Σωμάτιο μάζας m κινείται στο πεδίο δυναμικής ενέργειας:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ \frac{1}{2}kx^2, & x > 0 \end{cases}$$

Να βρεθεί το ενεργειακό του φάσμα.



Παράδειγμα 39: (Λύθηκε και στο Μάθημα) Ένας μονοδιάστατος κβαντικός αρμονικόσταλαντωτής έχει φορτίο q_e και βρίσκεται σε ομογενές ηλεκτρικό πεδίο εντάσεως ε. Να βρεθεί το ενεργειακό του φάσμα.



Λύση: Για τον αφόρτιστο κβαντικό ταλαντωτή η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger είναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi=E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\psi=E\psi$$

με:

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ n=0,1,2,3...$$

Για τον φορτισμένο κβαντικό ταλαντωτή: $$U(x)=\frac{1}{2}\kappa x^2-|q_e|\varepsilon x$$

και:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\left(\frac{1}{2}kx^2-q\varepsilon x\right)\psi=E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}\kappa\left(x^2-\frac{2|q_e|\varepsilon}{\kappa}x\right)\psi=E\psi$$

Η παραπάνω γράφεται ισοδύναμα:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}\kappa\left[\left(x-\frac{|q_e|\varepsilon}{\kappa}\right)^2-\frac{|q_e|^2\varepsilon^2}{\kappa^2}\right]\psi=E\psi\Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}\kappa\left(x-\frac{|q_e|\varepsilon}{\kappa}\right)^2\psi=\left(E+\frac{|q_e|^2\varepsilon^2}{2\kappa}\right)\psi$$

Θέτουμε:

$$\xi=x-\frac{|q_e|\varepsilon}{k}\Rightarrow d\xi=dx \qquad \text{και:}\quad E'=E+\frac{|q_e|^2\varepsilon^2}{2\kappa}$$

Επομένως η εξίσωση Schrödinger παίρνει τη μορφή:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\frac{1}{2}\kappa\xi^2\psi=E'\psi$$

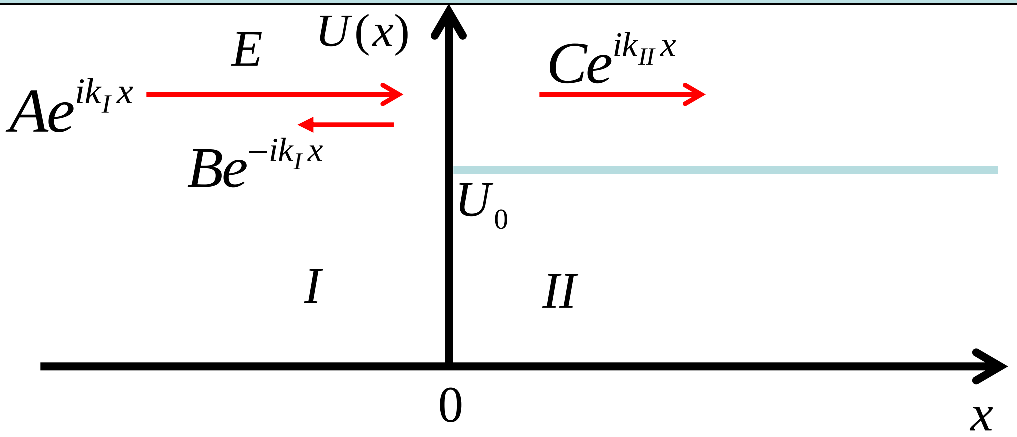
που είναι νέα εξίσωση αρμονικού ταλαντωτή με ενέργεια: $E_n{}'=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ n=0,1,2,3...$

Άρα:

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{|q_e|^2\varepsilon^2}{2\kappa}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{|q_e|^2\varepsilon^2}{2m\omega^2},\ n=0,1,2,3...$$

VI. ΕΦΑΡΜΟΓΗ 4: ΤΟ ΣΚΑΛΟΠΑΤΙ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ- ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΣΚΕΔΑΣΗΣ

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & , x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$



Το σωματίδιο μάζας m προσπίπτει στο σκαλοπάτι με ενέργεια E.

(α) $E>U_0$

● Στην περιοχή I (x<0):

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi_I = 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k_I{}^2\psi_I = 0, \quad k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Λύση: $\psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x}$

● Στην περιοχή II (x>0):

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi_{II} = 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + k_{II}{}^2\psi_{II} = 0, \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} > 0$$

Λύση: $\psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II} x} + De^{-ik_{II} x}$

Προφανώς D=0, γιατί στην περιοχή II το σωματίδιο κινείται μόνο προς τα δεξιά

Συνέχεια στο x=0:

$$\left.\begin{array}{l} \psi_I(x=0)=\psi_{II}(x=0)\Rightarrow A+B=C \\ \left.\dfrac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0}=\left.\dfrac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0}\Rightarrow k_I(A-B)=k_{II}C \end{array}\right\}\Rightarrow\begin{cases} B=\dfrac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}A \\ C=\dfrac{2k_I}{k_I+k_{II}}A \end{cases}$$

Άρα:

$$\boxed{\psi_I(x)=Ae^{ik_Ix}+A\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}e^{-ik_Ix}} \qquad \boxed{\psi_{II}(x)=A\frac{2k_I}{k_I+k_{II}}e^{ik_{II}x}}$$

προσπίπτον ανακλώμενο διερχόμενο

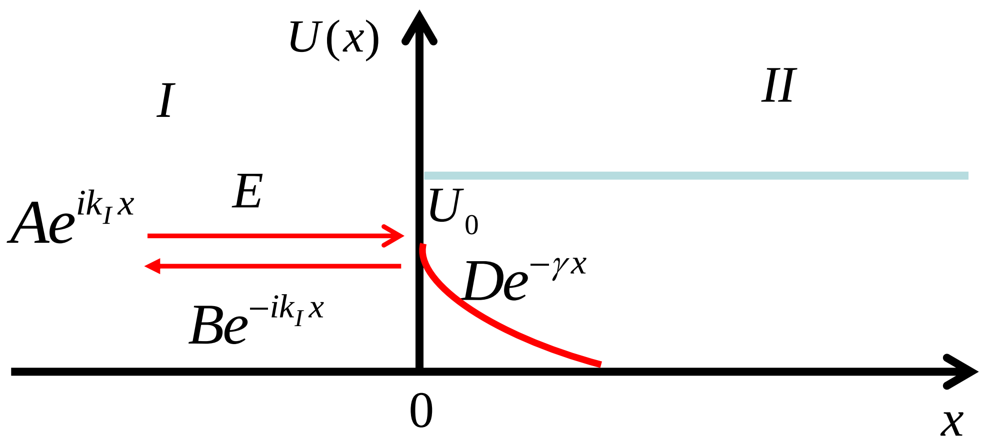
Συντελεστής ανάκλασης:

$$R=\frac{\left(\psi_{I,\alpha\nu}\psi^*{}_{I,\alpha\nu}\right)}{\left(\psi_{I,\pi\rho}\psi^*{}_{I,\pi\rho}\right)}=\frac{|\mathrm{A}|^2}{|\mathrm{A}|^2}\left(\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}\right)^2=\left(\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}\right)^2=\left(\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}}\right)^2\to\begin{cases}1, & E=U_0\\ 0, & E=\infty\end{cases}$$

Συντελεστής διέλευσης:

$$\mathrm{T}=1-R=\frac{4k_Ik_{II}}{\left(k_I+k_{II}\right)^2}=\frac{4\sqrt{E\left(E-U_0\right)}}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}\right)^2}\to\begin{cases}0, & E=U_0\\ 1, & E=\infty\end{cases}$$

(β) $E<U_0$



- Στην περιοχή I (x<0):

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_I=0\Rightarrow$$

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2}+k_I^{\,2}\psi_I=0,\quad k_I=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Λύση: $\psi_I(x)=Ae^{ik_I x}+Be^{-ik_I x}$

- Στην περιοχή II (x>0):

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi_{II}=0\Rightarrow\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+k_{II}^{\,2}\psi_{II}=0,$$

$$k_{II}=\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}=i\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}=i\gamma$$

Λύση: $\psi_{II}(x)=Ce^{\gamma x}+De^{-\gamma x}$ Προφανώς C=0, γιατί στην περιοχή II $\psi_{II}(x\rightarrow\infty)=0$

<u>Συνέχεια στο x=0:</u>

$$\left.\begin{aligned} &\psi_I(x=0)=\psi_{II}(x=0)\Rightarrow A+B=D \\ &\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0}=\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0}\Rightarrow ik_I(A-B)=-\gamma D \end{aligned}\right\}\Rightarrow\begin{cases} B=\dfrac{k_I-i\gamma}{k_I+i\gamma}A \\ D=\dfrac{2k_I}{k_I+i\gamma}A \end{cases}$$

Άρα:

$$\boxed{\psi_I(x)=Ae^{ik_I x}+A\frac{k_I-i\gamma}{k_I+i\gamma}e^{-ik_I x}} \qquad \boxed{\psi_{II}(x)=A\frac{2k_I}{k_I+i\gamma}e^{-\gamma x}}$$

προσπίπτον ανακλώμενο Δεν αντιπροσωπεύει κύμα

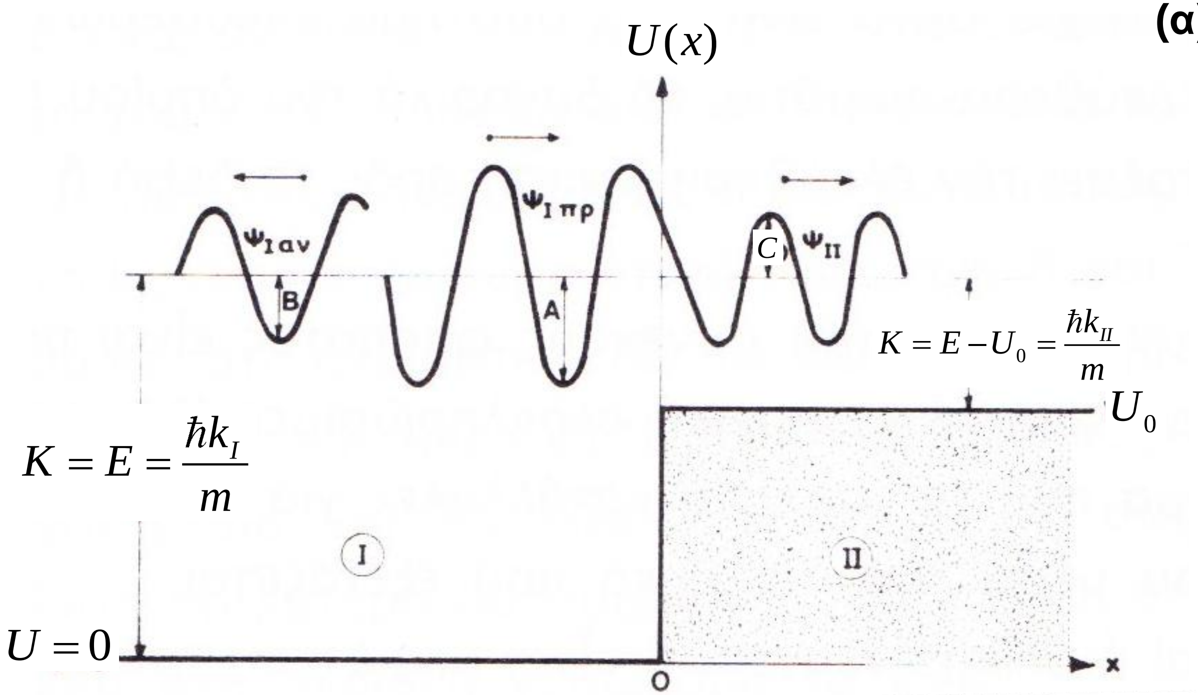
Συντελεστής ανάκλασης:

$$\boxed{R=\frac{\left(\psi_{I,\alpha\nu}\psi^*_{I,\alpha\nu}\right)}{\left(\psi_{I,\pi\rho}\psi^*_{I,\pi\rho}\right)}=\frac{|A|^2}{|A|^2}\left(\frac{k_I-i\gamma}{k_I+i\gamma}\right)^2=\left(\frac{k_I-i\gamma}{k_I+i\gamma}\right)^2=1}$$

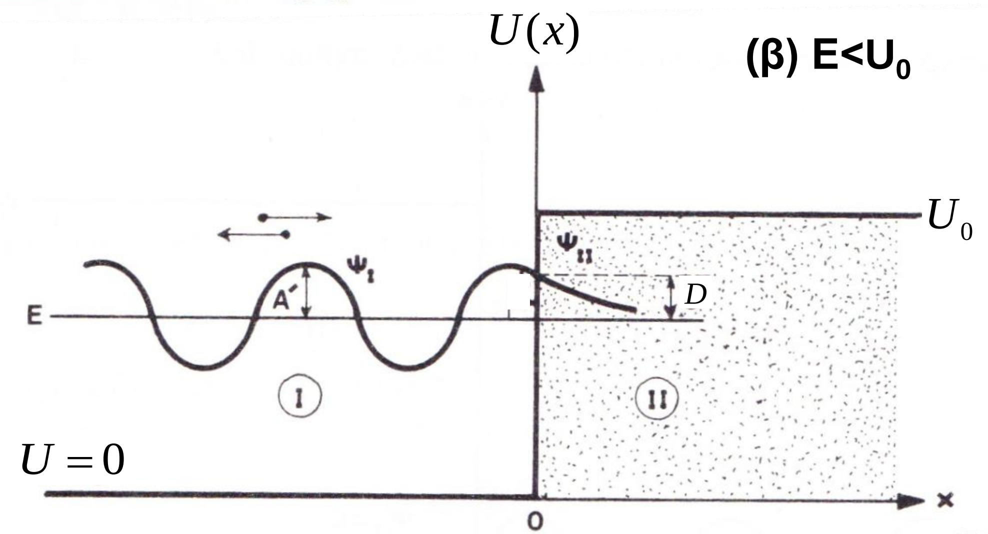
Οπότε ο συντελεστής διέλευσης θα πρέπει να είναι μηδέν $\boxed{T=0}$

Ολική ανάκλαση !!!

(α) E>U$_0$


$U(x)$
$\psi_{I\alpha\nu}$
$\psi_{I\pi\rho}$
ψ_{II}
B
A
C
$K = E - U_0 = \frac{\hbar k_{II}}{m}$
U_0
$K = E = \frac{\hbar k_I}{m}$
I
II
$U = 0$
0
x

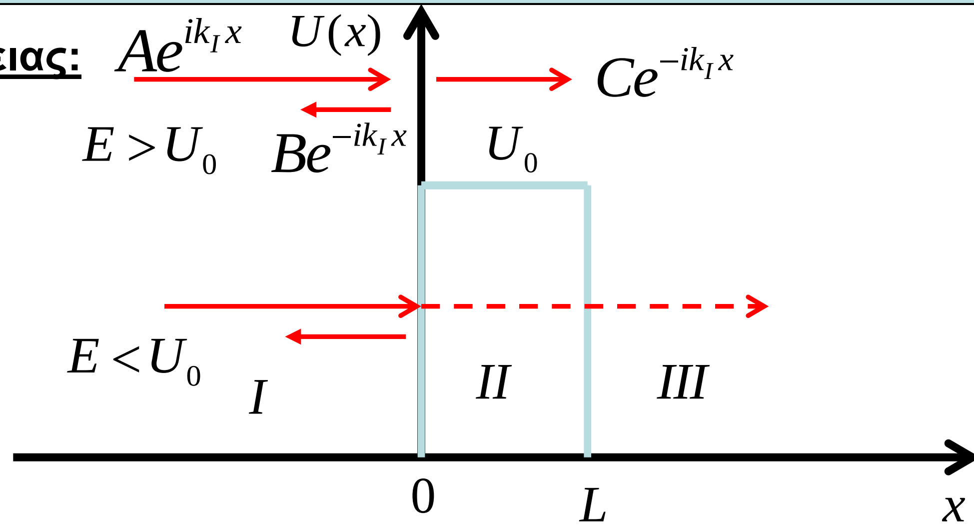
(β) E<U$_0$


$U(x)$
U_0
ψ_{II}
ψ_I
A'
D
E
I
II
$U = 0$
0
x

VI. ΕΦΑΡΜΟΓΗ 5: ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΣΗΡΑΓΓΟΣ

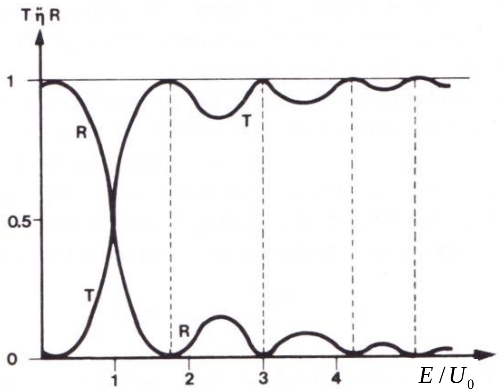
(α) Το ορθογώνιο φράγμα δυναμικής ενέργειας:

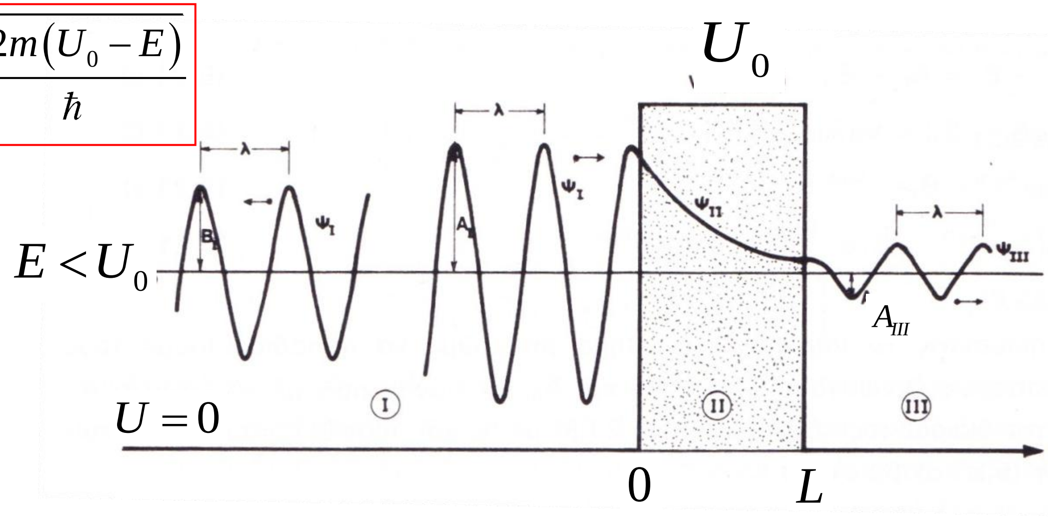
$$U(x)=\begin{cases} 0, & x<0 \\ U_0 & ,0\le x\le L \\ 0, & x>L \end{cases}$$



Θεωρητικά προβλέπεται μη μηδενική πιθανότητα διέλευσης του σωματιδίου μέσα από το φράγμα για $E<U_0$ (φαινόμενο σήραγγος). Αυτή εξαρτάται τόσο από το εύρος όσο από το ύψος και του φράγματος.

$$\boxed{\mathrm{T}(E)=\left\{1+\frac{1}{4}\left[\frac{U_0^{\ 2}}{E(U_0-E)}\right]\sinh^2(\gamma L)\right\}^{-1},\ \gamma=\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}}$$





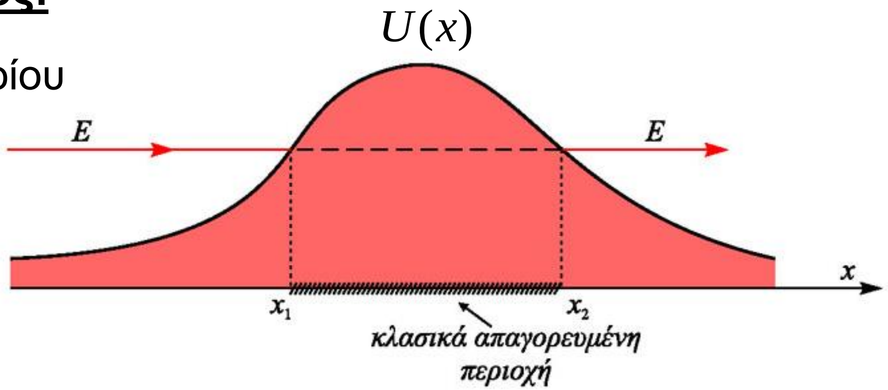
(β) Φράγμα δυναμικής ενέργειας τυχαίου σχήματος:

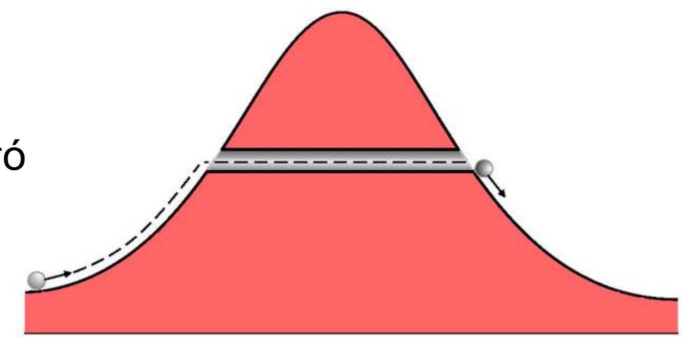
Για ένα φράγμα δυναμικής ενέργειας το ύψος του οποίου είναι συνάρτηση της θέσης μπορεί να αποδειχθεί η προσεγγιστική έκφραση του συντελεστή διέλευσης:

$$\boxed{\mathrm{T}(E) \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{U(x)-E}\,dx\right)}$$

(Προσέγγιση WKB)

Παρατηρούμε ότι όσο μικρότερη είναι η μάζα του σωματιδίου, τόσο αυξάνεται η πιθανότητα διέλευσης από το φράγμα.
Για m →∞ ,έχουμε T →0 (κλασική συμπεριφορά του σωματιδίου
σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας)



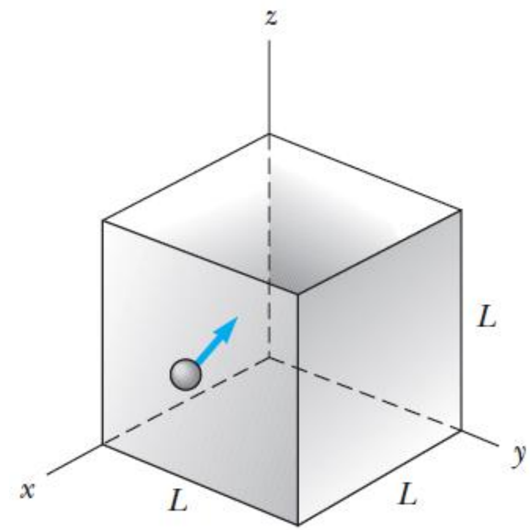


ΣΧΗΜΑ 6.5: *Το κλασικό «ανάλογο» του φαινομένου της σήραγγας.* Το σφαιρίδιο δεν έχει την απαιτούμενη ενέργεια να περάσει πάνω από τον λόφο· τα καταφέρνει όμως να βρεθεί στην άλλη του πλευρά χάρις στη «σήραγγα» που υπάρχει στην πλαγιά του. Ο πιθανοκρατικός χαρακτήρας του κβαντικού φαινομένου —το σωματίδιο άλλοτε περνάει και άλλοτε δεν περνάει— αποδίδεται κλασικά με αντίστοιχο τυχαίο άνοιγμα ή κλείσιμο της εισόδου της σήραγγας!

(βλ. Σ.Τραχανάς «Κβαντομηχανική Ι»)

VI. ΕΦΑΡΜΟΓΗ 6: ΤΟ ΤΡΙΔΙΑΣΤΑΤΟ ΑΠΕΙΡΟΒΑΦΟ ΠΗΓΑΔΙ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ-ΕΚΦΥΛΙΣΜΟΣ

$$U(x,y,z)=\begin{cases} 0 & ,0<x<L,\ 0<y<L,\ 0<z<L \\ \infty, & \alpha\lambda\lambda o\acute{\upsilon} \end{cases}$$



Το σωματίδιο μάζας m δεν μπορεί να ξεφύγει εκτός του πηγαδιού (κιβωτίου).

Το πρόβλημα είναι τριδιάστατο. Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger στον χώρο εντός του πηγαδιού (U=0) και στις τρείς διαστάσεις έχει τη μορφή:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z)+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x,y,z)=0$$

Αναζητούμε λύση χωριζομένων μεταβλητών: $\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$

Άρα:

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2}+\frac{d^2Y(y)}{dy^2}+\frac{d^2Z(z)}{dz^2}+\frac{2m}{\hbar^2}EX(x)Y(y)Z(z)=0\Rightarrow$$

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}+\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z(z)}{dz^2}+k^2=0,\ k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

Το σωματίδιο μέσα στο κιβώτιο κινείται ελεύθερο και επομένως:

$$\left.\begin{array}{l} E=\dfrac{p^2}{2m} \\ p=\hbar k \end{array}\right\} \Rightarrow E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}=\overbrace{\frac{\hbar^2 k_x{}^2}{2m}}^{p_x^2}+\overbrace{\frac{\hbar^2 k_y{}^2}{2m}}^{p_y^2}+\overbrace{\frac{\hbar^2 k_z{}^2}{2m}}^{p_z^2} \Rightarrow k^2=k_x{}^2+k_y{}^2+k_z{}^2$$

Άρα:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}+\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z(z)}{dz^2}+k_x{}^2+k_y{}^2+k_z{}^2=0 \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{d^2X(x)}{dx^2}+k_x{}^2X(x)=0 \\ \dfrac{d^2Y(y)}{dy^2}+k_y{}^2Y(y)=0 \\ \dfrac{d^2Z(z)}{dz^2}+k_z{}^2Z(z)=0 \end{cases}$$

Οριακές συνθήκες:

$$\boxed{\begin{array}{l} \psi(x,y,z)\big|_{x=0}=0 \Rightarrow X(0)Y(y)Z(z)=0 \Rightarrow X(0)=0 \\ \psi(x,y,z)\big|_{x=L}=0 \Rightarrow X(L)Y(y)Z(z)=0 \Rightarrow X(L)=0 \end{array}}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \psi(x,y,z)\big|_{y=0}=0 \Rightarrow X(x)Y(0)Z(z)=0 \Rightarrow Y(0)=0 \\ \psi(x,y,z)\big|_{y=L}=0 \Rightarrow X(x)Y(L)Z(z)=0 \Rightarrow Y(L)=0 \end{array}}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \psi(x,y,z)\big|_{z=0}=0 \Rightarrow X(x)Y(y)Z(0)=0 \Rightarrow Z(0)=0 \\ \psi(x,y,z)\big|_{z=L}=0 \Rightarrow X(x)Y(y)Z(L)=0 \Rightarrow Z(L)=0 \end{array}}$$

Κάθε μία από τις παραπάνω εξισώσεις μαζί με τις αντίστοιχες οριακές συνθήκες αντιπροσωπεύει το πρόβλημα του μονοδιάστατου απειρόβαθου πηγαδιού στην αντίστοιχη διάσταση. Επομένως:

$$\left.\begin{aligned} X(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\Bigg(\underbrace{\frac{n_x\pi}{L}}_{k_x}x\Bigg),\ n_x = 1,2,3..., \\ Y(y) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\Bigg(\underbrace{\frac{n_y\pi}{L}}_{k_y}y\Bigg),\ n_y = 1,2,3..., \\ Z(z) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\Bigg(\underbrace{\frac{n_z\pi}{L}}_{k_z}z\Bigg),\ n_z = 1,2,3..., \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\boxed{\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right),\ \text{με}\ n_x, n_y, n_z = 1,2,3..}\qquad \begin{aligned} &0<x<L \\ &0<y<L \\ &0<z<L \end{aligned}$$

Επίσης:

$$\boxed{E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_x{}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y{}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z{}^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x{}^2 + n_y{}^2 + n_z{}^2),\ \mu\varepsilon\ n_x, n_y, n_z = 1,2,3..}$$

Τέλος:

$$\boxed{\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z,t)=\sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right)e^{-i\frac{E_{n_x n_y n_z}}{\hbar}t},\ \mu\varepsilon\ n_x,n_y,n_z=1,2,3..}$$

$$0<x<L,\ 0<y<L,\ 0<z<L$$

● Η θεμελιώδης κατάσταση του σωματιδίου έχει ενέργεια που αντιστοιχεί στις τιμές

$$n_x,n_y,n_z=1\Rightarrow E_{111}=\frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

και περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi_{111}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}z\right)$$

● Στις διεγερμένες καταστάσεις εμφανίζεται το φαινόμενο του εκφυλισμού, όπου σε κάθε ενέργεια αντιστοιχούν περισσότερες από μία κυματοσυναρτήσεις.
Π.χ η πρώτη διεγερμένη κατάσταση έχει ενέργεια που αντιστοιχεί στους συνδυασμούς:

$$(n_x=2,n_y=1,n_z=1),(n_x=1,n_y=2,n_z=1),(n_x=1,n_y=1,n_z=2)\Rightarrow E_{(211),(121),(112)}=\frac{6\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

και στις κυματοσυναρτήσεις: $\psi_{211}(x,y,z),\psi_{121}(x,y,z),\psi_{112}(x,y,z)$

5η διεγερμένη (εξαπλά εκφυλισμένη)

4η διεγερμένη (μη εκφυλισμένη)

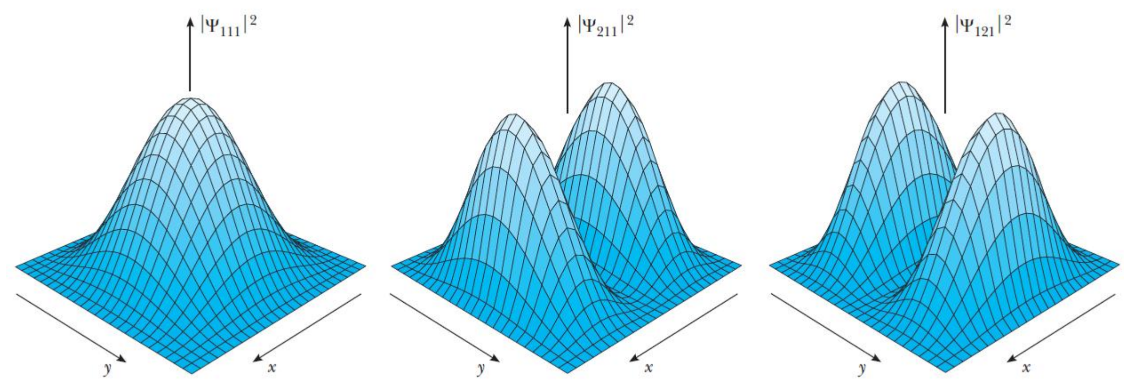
3η διεγερμένη (τριπλά εκφυλισμένη)

2η διεγερμένη (τριπλά εκφυλισμένη)

1η διεγερμένη (τριπλά εκφυλισμένη)

Θεμελιώδης κατάσταση (μη εκφυλισμένη)

- Ο εκφυλισμός είναι απόρροια της χωρικής συμμετρίας του προβλήματος και αίρεται όταν αυτή «σπάσει» για κάποιο λόγο. Δεν εμφανίζεται π.χ όταν το κιβώτιο έχει διαστάσεις L_1, L_2, L_3.



Παράδειγμα 40: (Αυτοδιδασκαλία) Να κατασκευαστούν οι κυματοσυναρτήσεις Ψ(x,t) που αντιστοιχούν στη δεύτερη διεγερμένη κατάσταση ενός σωματιδίου μάζας m που βρίσκεται εγκλωβισμένο σε τριδιάστατο κιβώτιο ακμής L.

Λύση:

Η δεύτερη διεγερμένη κατάσταση αντιστοιχεί στους συνδυασμούς:

$$\left(n_x, n_y, n_z\right) = (2,2,1),(2,1,2),(1,2,2)$$

με ενέργεια:

$$E_{221} = E_{212} = E_{122} = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

Άρα:

$$\Psi_{221}(x,t) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}z\right)e^{-i\frac{9\hbar\pi^2}{2mL^2}t}$$

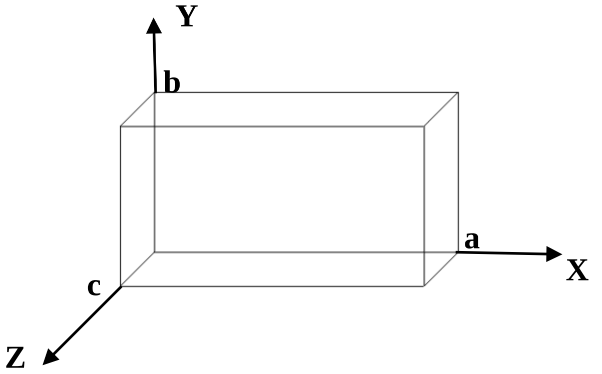
$$\Psi_{212}(x,t) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}z\right)e^{-i\frac{9\hbar\pi^2}{2mL^2}t}$$

$$\Psi_{122}(x,t) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}z\right)e^{-i\frac{9\hbar\pi^2}{2mL^2}t}$$

Παράδειγμα 41: (Λύθηκε και στο Μάθημα) Σωμάτιο μάζας m βρίσκεται εγκλωβισμένο στο παραλληλεπίπεδο κιβώτιο του σχήματος έχοντας δυναμική ενέργεια:

$$U(x)=\begin{cases}0, & \mathrm{a}<x<0,\ \ b<y<0,\ \ c<z<0\\ & \infty,\ \text{αλλού}\end{cases} \qquad \mathrm{a}>b>c$$

Τι συμβαίνει με τον εκφυλισμό της πρώτης διεγερμένης κατάστασής του;



Λύση: Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία με το συμμετρικό κιβώτιο καταλήγουμε στο αποτέλεσμα:

$$E_{n_x n_y n_z}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x}{\mathrm{a}}\right)^2+\left(\frac{n_y}{b}\right)^2+\left(\frac{n_z}{c}\right)^2\right]$$

Η θεμελιώδης κατάσταση αντιστοιχεί στον μοναδικό συνδυασμό:

$$\left(n_x,n_y,n_z\right)=(1,1,1)$$

Η πρώτη διεγερμένη αντιστοιχεί στον επίσης μοναδικό συνδυασμό (2,1,1): $E_{211}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\left(\frac{2}{\mathrm{a}}\right)^2+\left(\frac{1}{b}\right)^2+\left(\frac{1}{c}\right)^2\right]$

[Δεδομένου ότι a>b>c, οποιοσδήποτε άλλος συνδυασμός π.χ ο 1,1,2 ή ο 1,2,1 θα έδινε μεγαλύτερη ενέργεια που θα είναι επίσης μη εκφυλισμένη.]

Παρατήρηση: Εάν a>b=c τότε

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x}{\mathrm{a}}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{b}\right)^2\right]$$

στην πρώτη διεγερμένη αντιστοιχούν δύο συνδυασμοί με την ίδια ενέργεια και είναι εκφυλισμένη. Ποιοί;

ΤΙ ΝΑ ΔΙΑΒΑΣΕΤΕ ΠΡΟΣΕΚΤΙΚΑ

Η ύλη της Ενότητας αυτής βρίσκεται στον Krane [σελ. 184-219] και στον Serway [σελ. 162-189, 226-231]. Διαβάστε κυρίως από τον παρόντα Οδηγό Μελέτης.

Θα θεωρήσετε τις Εφαρμογές 1,2,4,6 της παρούσας Ενότητας του Οδηγού Μελέτης σαν λυμένα παραδείγματα.