

ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας

EMC²

Αρχή κυματοσωματιδιακού δυϊσμού Σχέσεις Einstein – De Broglie

Η κβαντομηχανική του Schrödinger και ο φορμαλισμός που εισήχθει από τον Heisenberg αποτελούν τη βάση αυτού που είναι γνωστό ως **Σύγχρονη Φυσική**, με τις θεωρίες της οποίας αντικαταστάθηκε ή επεκτάθηκε με επιτυχία η κλασική μηχανική σε όλη την περιοχή της φυσικής σε ατομικό και μοριακό επίπεδο. Το κεφάλαιο αυτό ασχολείται μόνο με την κυματομηχανική του Schrödinger και τον τρόπο με τον οποίο αναδεικνύει τη δυϊκή κυματο-σωματιδιακή φύση της ύλης.

Η δυϊκή αυτή φύση θεμελιώθηκε πρώτα για την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία με την παραδοχή του Planck και ολοκληρώθηκε με την υπόθεση των φωτονίων του Einstein. Σύμφωνα με την παραδοχή του Planck η ενέργεια ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος δεν μπορεί να κατέχει οποιαδήποτε τιμή, αλλά μόνο ορισμένες διάκριτες τιμές (κβάντωση ενέργειας) και συγκεκριμένα είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της ποσότητας $h\nu$. Δηλαδή:

$$E_n = n h \nu \quad , n = 1, 2, \dots \quad (8-1)$$

όπου $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Joule sec είναι η **σταθερά του Planck**, ν είναι η συχνότητα και η ποσότητα $h\nu$ ονομάζεται **κβάντουμ ενέργειας**.

Στη συνέχεια ο Einstein με την Ειδική Θεωρία της Σχετικότητας ερμήνευσε τη διάδοση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας όχι μέσω κυμάτων, αλλά σωματιδίων που τα ονόμασε **φωτόνια**. Τα σωματίδια αυτά έχουν ενέργεια $E=h\nu$, διαδίδονται με την ταχύτητα του φωτός, έχουν μηδενική μάζα ηρεμίας και ορμή :

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda}$$

Δηλαδή συνδέθηκαν τα κυματικά χαρακτηριστικά συχνότητα και μήκος κύματος με τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά ενέργεια και ορμή του φωτονίου.

Οι παραπάνω σχέσεις μπορούν να γραφούν σε μια πολύ πιο κομψή μορφή αν περιγραφούν τα κυματικά χαρακτηριστικά του φωτονίου μέσω της κυκλικής συχνότητας $\omega=2\pi\nu$ και του κυματάριθμου $k=2\pi/\lambda$, τα οποία είναι πολύ πιο βολικά για τη μαθηματική περιγραφή των κυμάτων. Δηλαδή:

$$E = \frac{h}{2\pi} \omega = \hbar \omega \quad \text{και} \quad p = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k \quad \text{όπου} \quad \hbar = h / 2\pi \quad (8-2)$$

Οι σχέσεις (8-2) αποτελούν τις **σχέσεις Einstein**, οι οποίες συνδέουν τα κυματικά με τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά του φωτονίου και επιβεβαιώνουν τον κυματοσωματιδιακό δυϊσμό του φωτός.

Αργότερα ο de Broglie αντιστρέφοντας την υπόθεση του Einstein, με σκοπό να εξηγήσει την κβάντωση των ενεργειακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων μέσα στα άτομα, θεώρησε ότι ένα υλικό σωματίο μάζας m , ενέργειας E και ορμής p αντιστοιχεί σε κύμα, που ονομάζεται **υλικό κύμα de Broglie** συχνότητας $\nu = E/h$ και μήκους κύματος $\lambda = h/p$. Παρατηρείται ότι για $\lambda = 2\pi/k$, $\nu = 2\pi/\omega$ και $\hbar = h/2\pi$ οι παραπάνω σχέσεις οδηγούν στις (8-2).

Άρα σύμφωνα με τα προηγούμενα θεμελιώνεται η **αρχή του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού**, η οποία εκτείνεται σε όλη τη φυσική πραγματικότητα και εκφράζεται ποσοτικά από τις **σχέσεις Einstein – De Broglie**:

$$E = \hbar\omega \quad \text{και} \quad p = \hbar k \quad (8-3)$$

✍ Εφαρμογή

Να υπολογιστεί η φασική και η ομαδική ταχύτητα των υλικών κυμάτων de Broglie σύμφωνα με τη Νευτώνεια Μηχανική και σύμφωνα με τη θεωρία της Σχετικότητας.

Λύση

Από τις σχέσεις Einstein – De Broglie είναι $\omega = E/\hbar$ και $k = p/\hbar$

Σύμφωνα με τη Νευτώνεια Μηχανική

Η φασική ταχύτητα είναι:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{p/\hbar} = \frac{E}{p}$$

Αλλά: $E = p^2/2m$ οπότε : $v_{ph} = \frac{p^2/2m}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{mv}{2m} \Rightarrow v_{ph} = \frac{v}{2}$

Δηλαδή η φασική ταχύτητα είναι το μισό της ταχύτητας του σωματιδίου.

Η ομαδική ταχύτητα είναι:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(E/\hbar)}{d(p/\hbar)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d\left(\frac{p^2}{2m}\right)}{dp} = \frac{2p}{2m} = \frac{p}{m} = \frac{mv}{m} \Rightarrow v_g = v$$

Σύμφωνα με τη θεωρία της Σχετικότητας

Η φασική ταχύτητα είναι:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{p/\hbar} = \frac{E}{p}$$

Αλλά: $E = \gamma m_0 c^2$ και $p = \gamma m_0 v$, όπου $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ οπότε:

$$v_{ph} = \frac{\gamma m_0 c^2}{\gamma m_0 v} \Rightarrow v_{ph} = \frac{c^2}{v} > c \quad (\text{αφού } v < c)$$

Η ομαδική ταχύτητα είναι: $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(E/\hbar)}{d(p/\hbar)} = \frac{dE}{dp}$

Αλλά: $E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$ οπότε:

$$v_g = \frac{d}{dp} (\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}) = \frac{2pc^2}{2\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{\gamma m_0 v c^2}{\gamma m_0 c^2} \Rightarrow v_g = v$$

Δηλαδή η ομαδική ταχύτητα ενός υλικού κύματος de Broglie αντιστοιχεί στη σωματιδιακή ταχύτητα v σύμφωνα και με την Κλασική Μηχανική και με τη Σχετικότητα.

Θεωρία Bohr

Η θεωρία του Bohr εξηγεί τα υδρογονοειδή, δηλαδή τα συστήματα εκείνα των οποίων ο πυρήνας αποτελείται από Z πρωτόνια έλκει ένα και μόνο ένα ηλεκτρόνιο. Ο Bohr ερμήνευσε κλασικά τη συμπεριφορά τους εισάγοντας τρεις αυθαίρετες παραδοχές:

α) Το ηλεκτρόνιο κινείται με διάκριτες κυκλικές τροχιές γύρω από τον ακλόνητο πυρήνα. Κάθε τέτοια τροχιά χαρακτηρίζεται από την αντίστοιχη κβαντισμένη ενέργεια.

β) Ακτινοβολία εκπέμπεται ή απορροφάται μόνο κατά τις μεταπτώσεις από τη μία ενεργειακή στάθμη στην άλλη, δηλαδή η αντίστοιχη συχνότητα είναι:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} \quad (8-4)$$

γ) Η στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι επίσης κβαντισμένη, δηλαδή :

$$L = mvr = n\hbar \quad , n = 1, 2, \dots \quad (8-5)$$

Από τη σχέση (8-5) προκύπτει:

$$mvr = n\hbar \Rightarrow pr = n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow 2\pi r = n \frac{h}{p} \Rightarrow 2\pi r = n\lambda$$

Δηλαδή η περιφέρεια μιας στάσιμης τροχιάς αποτελεί ένα σύστημα στάσιμων κυμάτων και περιέχει ένα ακέραιο πλήθος n μηκών κύματος de Broglie λ .

Με βάση τις τρεις παραπάνω παραδοχές και θεωρώντας ως κεντρομόλο την ελκτική δύναμη Coulomb $F = -Ze^2/r^2$ ο Bohr υπολόγισε τις επιτρεπόμενες τροχιές και ενέργειες ως:

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{e^2 mZ} \quad \text{και} \quad E_n = \frac{-mZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8-6)$$

Για $n=1$ και $Z=1$ προκύπτει η πρώτη ακτίνα του Bohr $r_1 = \hbar^2 / e^2 m = 0,5 \text{ \AA}$ και η πρώτη ενεργειακή στάθμη $E_1 = -me^4 / 2\hbar^2 = -13,6 \text{ eV}$.

Η αναζήτηση μιας γενικότερης συνθήκης, που θα ήταν εφαρμόσιμη και για διαφορετικού τύπου περιοδικές κινήσεις (όπως ελλειπτικές τροχιές ή απλές αρμονικές ταλαντώσεις) οδήγησε στην ακόλουθη **γενικευμένη συνθήκη κβάντωσης του Bohr**:

Επιτρεπόμενες είναι μόνο εκείνες οι περιοδικές τροχιές που η δράση τους είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς του Planck h . Η δράση μιας περιοδικής τροχιάς είναι το φασικό ολοκλήρωμα $\oint p dq$, όπου q είναι μια γενικευμένη συντεταγμένη της κίνησης και p η αντίστοιχη γενικευμένη ορμή.

$$\Delta \text{δηλαδή:} \quad \oint p dq = nh, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8-7)$$

Κύμα πιθανότητας – Αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg

Η δυνατότητα ενός σωματιδίου να συμπεριφέρεται ταυτόχρονα και ως κύμα, δηλαδή να είναι εντοπισμένο και αδιαίρετο αφενός και εκτεταμένο και διαιρετό αφετέρου, ερμηνεύτηκε από τον M. Born με την **πιθανοκρατική ερμηνεία των υλικών κυμάτων**.

Σύμφωνα με αυτή το κύμα που περιγράφει την κίνηση ενός σωματιδίου στο χώρο δεν αντιπροσωπεύει μια μετρήσιμη φυσική διαταραχή (όπως ένα ηλεκτρομαγνητικό, ακουστικό ή οποιοδήποτε άλλο μηχανικό κύμα), αλλά είναι μια καθαρά μαθηματική οντότητα που περιγράφει απλώς την **πιθανότητα** να βρεθεί το σωματίδιο στη μία ή την άλλη περιοχή του χώρου. Δηλαδή πρόκειται για ένα **κύμα πιθανότητας**.

Έτσι όπου το κύμα είναι ισχυρό, η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο είναι μεγάλη και αντιστρόφως, όπου το κύμα είναι ασθενές, η πιθανότητα να βρεθεί εκεί το σωματίδιο είναι αντίστοιχα μικρή.

Αν $\Psi(x, y, z, t)$ είναι η κυματοσυνάρτηση ενός υλικού κύματος (κύματος πιθανότητας) σε μια ορισμένη χρονική στιγμή, τότε η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σωματίδιο στο στοιχειώδη όγκο γύρω από το σημείο (x, y, z) είναι:

$$\frac{dP}{dV} = |\Psi(x, y, z, t)|^2 = \Psi^* \Psi \quad (8-8)$$

όπου Ψ^* είναι η μιγαδική συζυγής της Ψ όταν αυτή είναι εκφρασμένη μιγαδικά.

Οπότε η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο μέσα σε ένα πεπερασμένο όγκο V προφανώς είναι:

$$P = \int_V |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz \quad (8-9)$$

Ενώ επειδή το σωματίδιο πρέπει πάντοτε να βρίσκεται κάπου στο χώρο, αν το ολοκλήρωμα επεκταθεί σε όλο το χώρο, η πιθανότητα γίνεται βεβαιότητα, δηλαδή ισούται με τη μονάδα και ισχύει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = 1 \quad (8-10)$$

Η σχέση (8-10) ονομάζεται **συνθήκη κανονικοποίησης** και εκφράζει τη διατήρηση της ολικής πιθανότητας.

Άρα με την πιθανοκρατική ερμηνεία των υλικών κυμάτων η αντίφαση σωματίδιο-κύμα αίρεται αυτόματα. Το σωματίδιο δεν είναι πια υποχρεωμένο να αρνηθεί τη σωματιδιακή του υπόσταση και να απλωθεί σε όλο τον όγκο του κύματος που συνοδεύει την κίνησή του, γιατί το κύμα περιγράφει απλώς την πιθανότητα να βρεθεί αυτό εδώ ή εκεί, αλλά ποτέ εδώ και εκεί ταυτόχρονα.

Μια άμεση συνέπεια της αρχής του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού και της πιθανοκρατικής του ερμηνείας είναι μια θεμελιώδης αρχή της Κβαντομηχανικής, η **αρχή της**

αβεβαιότητας του Heisenberg. Σύμφωνα με αυτή στα πλαίσια της Κβαντομηχανικής, σε αντίθεση με την Κλασική Φυσική, δεν είναι δυνατόν να μετρηθούν ταυτόχρονα με απόλυτη ακρίβεια η θέση και η ορμή ενός σωματιδίου. Δηλαδή:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad (8-11)$$

Διαπιστώνεται έτσι ότι η ταυτόχρονη γνώση της θέσης και της ορμής ενός κβαντικού σωματιδίου είναι αδύνατη. Έτσι αν ένα σωματίδιο έχει απόλυτα καθορισμένη ορμή ($\Delta p=0$) τότε η θέση του θα είναι τελείως απροσδιόριστη ($\Delta x = \infty$), ενώ αντίθετα αν η θέση του σωματιδίου είναι απόλυτα καθορισμένη ($\Delta x=0$) τότε η αβεβαιότητα της ορμής του γίνεται άπειρη ($\Delta p = \infty$).

Επίσης ισχύει η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας – χρόνου, σύμφωνα με την οποία η απροσδιοριστία της ενέργειας ΔE σε μια μέτρηση που διαρκεί χρονικό διάστημα Δt επαληθεύει την ανισότητα:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \quad (8-12)$$

Δηλαδή αν ένα σωματίδιο παραμένει μόνιμα σε κάποια ενεργειακή στάθμη, τότε η ενέργειά του είναι πλήρως καθορισμένη ($\Delta E=0$), ενώ ο χρόνος ζωής της στάθμης είναι απροσδιόριστος ($\Delta t = \infty$). Αντίθετα αν το σωματίδιο εκτελεί μεταπτώσεις σε ενεργειακές στάθμες ($\Delta t=0$) τότε υπάρχει πλήρης αδυναμία εντοπισμού του σε μια στάθμη ($\Delta E = \infty$).

📖 Παρατήρηση:

Πολύ συχνά κάνοντας χρήση της αρχής της αβεβαιότητας, πραγματοποιείται εκτίμηση για την τάξη μεγέθους της θεμελιώδους στάθμης διάφορων κβαντικών συστημάτων, θεωρώντας ότι στη θεμελιώδη κατάσταση ισχύει η προσέγγιση:

$$\Delta x \cdot \Delta p \cong \hbar \quad (8-13)$$

Κυματική εξίσωση Schrödinger

Για την εξαγωγή της κυματικής εξίσωσης Schrödinger που περιγράφει τη συμπεριφορά ενός σωματιδίου θεωρείται ότι το σωματίδιο περιγράφεται από ένα υλικό κύμα ενέργειας $E = \hbar\omega$, ορμής $p = \hbar k$ και ταχύτητας $v_g = d\omega/dk$. Το υλικό αυτό κύμα αν είναι μονοδιάστατο περιγράφεται μαθηματικά από την κυματοσυνάρτηση:

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = Ae^{i(px - Et)/\hbar} \quad (8-14)$$

της οποίας το τετράγωνο $|\Psi(x, t)|^2$ παριστάνει την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στο σημείο x .

Η ολική ενέργεια ενός σωματιδίου μάζας m και ορμής p μέσα σε ένα συντηρητικό πεδίο δυναμικού V δίνεται από τη σχέση:

$$E = K + V \Rightarrow E = \frac{p^2}{2m} + V \Rightarrow p^2 = 2m(E - V) \quad (8-15)$$

Παραγωγίζοντας την $\Psi(x, t)$ προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= \frac{-p^2}{\hbar^2} \Psi(x, t) \stackrel{(8-15)}{\Rightarrow} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{-2m}{\hbar^2} (E - V) \Psi(x, t) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + (E - V) \Psi(x, t) = 0 \end{aligned} \quad (8-16)$$

Αν τώρα γραφεί $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$ και αντικατασταθεί στην παραπάνω, τότε απαλείφεται ο κοινός παράγοντας $e^{-i\omega t}$ και προκύπτει:

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + (E - V)\psi(x) = 0} \quad (8-17)$$

Η σχέση (8-17) αποτελεί τη **χρονικά ανεξάρτητη κυματική εξίσωση Schrödinger** και δίνει καταστάσεις σταθερής συχνότητας, δηλαδή σταθερής ενέργειας.

Για τις καταστάσεις που δεν έχουν σταθερή ενέργεια πρέπει να διατηρηθεί η χρονική εξάρτηση στην εξίσωση Schrödinger και αυτό επιτυγχάνεται αν ληφθεί υπόψη ότι:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{-iE}{\hbar} \Psi(x, t) \Rightarrow E\Psi(x, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

Αντικαθιστώντας την παραπάνω στην (8-16) προκύπτει η χρονικά εξαρτημένη κυματική εξίσωση Schrödinger:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}} \quad (8-18)$$

📖 Παρατήρηση:

Στο βιβλίο αυτό θα θεωρηθούν μόνο καταστάσεις σταθερής ενέργειας, οπότε θα γίνεται χρήση μόνο της χρονικά ανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger. Στις τρεις διαστάσεις αυτή έχει τη μορφή:

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

Στον ακόλουθο πίνακα παρουσιάζεται η ιστορική πορεία θεμελίωσης της Κβαντομηχανικής.

ΤΟ ΧΡΟΝΙΚΟ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ		
Χρονολογία	Όνομα Ερευνητή	Ανακάλυψη
1900	Planck	Ακτινοβολία του μέλανος σώματος Η ενέργεια ενός φωτεινού κύματος είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της ποσότητας $E=hn$.
1905	Einstein	Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο Το φως έχει ταυτόχρονα και σωματιδιακή υφή, με σωματιδιακό φορέα τα φωτόνια.
1913	Bohr	Άτομο του υδρογόνου – Θεωρία των κβαντωμένων τροχιών Το ηλεκτρόνιο μπορεί να κινείται μόνο σε εκείνες τις τροχιές των οποίων η στροφορμή είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της ποσότητας $\hbar = h/2\pi$.
1923	Compton	Φαινόμενο Compton Αναμφίβολη πειραματική απόδειξη της σωματιδιακής φύσης του φωτός. Εκτός από ενέργεια $E=hn$ τα φωτόνια έχουν και ορμή $p=h/\lambda$.
1923	De Broglie	Η υπόθεση των υλικών κυμάτων Κάθε σωματίδιο ενέργειας E και ορμής p συμπεριφέρεται ως κύμα συχνότητας ν και μήκους κύματος λ ίσων με $\nu=E/h$ και $\lambda=h/p$.
1924	Pauli	Απαγορευτική αρχή Δεν είναι δυνατό να τοποθετηθούν στο ίδιο άτομο περισσότερα από ένα ηλεκτρόνια με τα ίδια φυσικά χαρακτηριστικά.
1925	Heisenberg	Μηχανική των μητρών Εισαγωγή των μητρών για την περιγραφή των φυσικών μεγεθών.

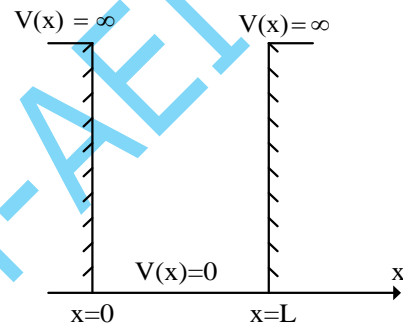
1926-27	Schrödinger	Κυματομηχανική – Η εξίσωση των υλικών κυμάτων Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x,y,z)$ ενός υλικού κύματος ικανοποιεί την εξίσωση : $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x, y, z)]\psi = 0$
	Born	Η πιθανοκρατική ερμηνεία των υλικών κυμάτων Το τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης ενός υλικού κύματος παριστάνει την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε μια ορισμένη περιοχή του χώρου.
	Heisenberg	Η αρχή της αβεβαιότητας Το γινόμενο των αβεβαιοτήτων θέσης και ορμής ενός σωματιδίου δεν μπορεί να γίνει μικρότερο από τη σταθερά του Planck. Δηλαδή: $\Delta x \cdot \Delta p \geq h$.

	Davisson Germer	Πειραματική επιβεβαίωση της κυματικής συμπεριφοράς των ηλεκτρονίων.
--	----------------------------	--

Απειρόβαθο μονοδιάστατο πηγάδι δυναμικού

Θεωρείται η περίπτωση ενός σωματιδίου που είναι περιορισμένο να κινείται σε μια περιοχή μεταξύ του $x=0$ και $x=L$ στην οποία το δυναμικό είναι $V=0$. Στα $x=0$ και $x=L$ τα τοιχώματα του δυναμικού έχουν άπειρο ύψος. Αυτό αποτελεί μια εξιδανικευμένη μορφή του δυναμικού που βλέπει ένα ηλεκτρόνιο στις χαμηλές ενεργειακές στάθμες κοντά στον πυρήνα ενός ατόμου. Συνεπώς το απλό αυτό κβαντομηχανικό πρόβλημα περιγράφει την κίνηση σωματιδίου υπό την επίδραση του δυναμικού:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \text{για } 0 \leq x \leq L \\ \infty & , \text{για } x > L \text{ και } x < 0 \end{cases}$$



Σχήμα 8.1

Η γραφική παράσταση της συνάρτησης δυναμικού φαίνεται στο **Σχήμα 8.1**.

Το γεγονός ότι το δυναμικό είναι άπειρο έξω από το πηγάδι, σημαίνει ότι το σωματίδιο δεν έχει καμία πιθανότητα να ξεφύγει από το διάστημα $0 < x < L$ και επομένως η κυματοσυνάρτηση θα είναι μηδέν παντού έξω από το πηγάδι και θα έχει μη μηδενικές τιμές μόνο μέσα σε αυτό. Συνεπώς για να υπάρχει συνέχεια των τιμών της $\psi(x)$ μέσα και έξω από το διάστημα $0 < x < L$ θα πρέπει να ισχύουν οι συνοριακές συνθήκες:

$$\psi(x=0) = \psi(x=L) = 0 \quad (8-19)$$

Επειδή όμως για $0 \leq x \leq L$ είναι $V(x)=0$ η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger (8-17) δίνει:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad \text{όπου } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (8-20)$$

Η γενική λύση της παραπάνω διαφορικής εξίσωσης ως γνωστό είναι:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (8-21)$$

Οπότε επιβάλλοντας τις συνοριακές συνθήκες (8-19) στην (8-21) προκύπτει:

$$\psi(x=0) = 0 \stackrel{(8-21)}{\Rightarrow} A \sin 0 + B \cos 0 = 0 \Rightarrow B = 0$$

Δηλαδή: $\psi(x) = A \sin kx$ (8-22)

και $\psi(x=L) = 0 \stackrel{(8-22)}{\Rightarrow} A \sin kL = 0 \Rightarrow \sin kL = 0 \Rightarrow$

$$\Rightarrow kL = n\pi \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8-23)$$

Άρα από τις (8-20) και (8-23) προσδιορίζονται οι ενεργειακές ιδιοτιμές ως:

$$\frac{2mE_n}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \Rightarrow E_n = n^2 \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = n^2 E_1, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8-24)$$

όπου $E_1 = \hbar^2\pi^2 / 2mL^2$ είναι η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης.

Επίσης οι ιδιοτιμές της ορμής είναι:

$$p_n = \hbar k \stackrel{(8-23)}{\Rightarrow} p_n = n \frac{\hbar\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8-25)$$

Δηλαδή παρατηρείται ότι σε ένα άπειρο πηγάδι δυναμικού, ένα σωματίδιο δεν μπορεί να έχει μια αυθαίρετη τιμή ενέργειας, αλλά θα πρέπει να πάρει μόνο τις κβαντισμένες τιμές E_n .

Οι ιδιοσυναρτήσεις του σωματιδίου σύμφωνα με τις (8-22) και (8-23) είναι:

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8-26)$$

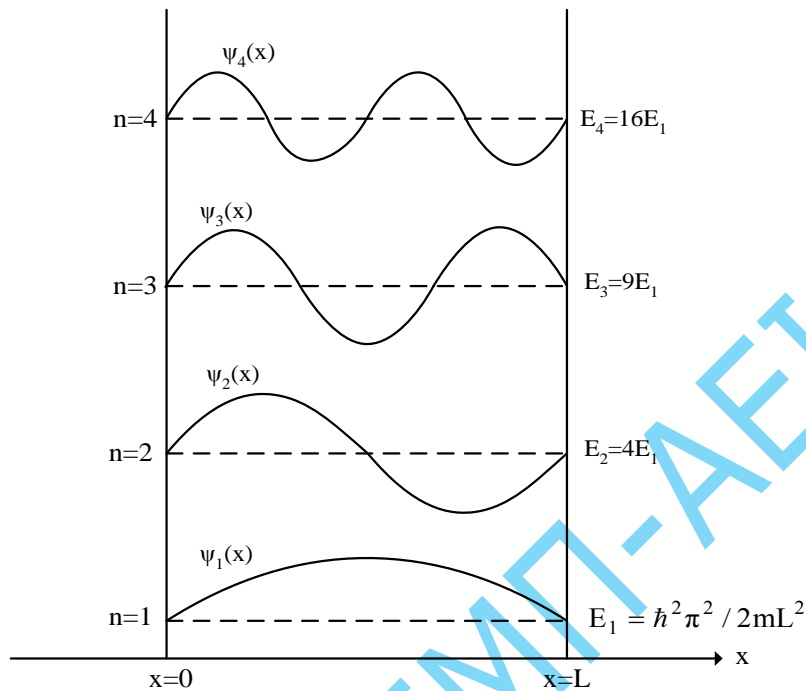
όπου η σταθερά A υπολογίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης ως:

$$\begin{aligned} \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1 &\Rightarrow A^2 \int_0^L \sin^2 kx dx = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^L \frac{1}{2} (1 - \cos 2kx) dx = \\ &= \frac{A^2}{2} \left(L - \frac{1}{2k} \sin 2kL \right) = \frac{A^2}{2} \left(L - \frac{1}{2k} \sin 2n\pi \right) = \frac{A^2}{2} (L - 0) = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow \\ &\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned}$$

Άρα οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις είναι:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8-27)$$

Στο ακόλουθο σχήμα φαίνεται η μορφή των τεσσάρων πρώτων ιδιοσυναρτήσεων:



Σχήμα 8.2

📖 Παρατηρήσεις:

Από το παραπάνω σχήμα διαπιστώνεται ότι:

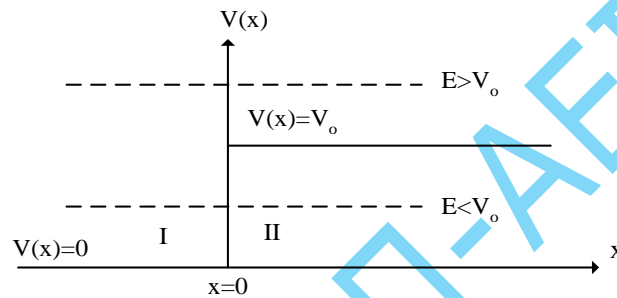
- α)** Οι ιδιοσυναρτήσεις είναι εναλλάξ άρτιες και περιττές ως προς το κέντρο του φρέατος δυναμικού και αυτό είναι γενικό χαρακτηριστικό όλων των δυναμικών $V(x)$ που είναι συμμετρικά ως προς κάποιο σημείο, δηλαδή είναι άρτια (κατοπτρικά) δυναμικά $V(x)=V(-x)$.
- β)** Όσο περισσότερο διεγερμένη είναι μια στάθμη, τόσο περισσότερους κόμβους εμφανίζει η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση. Η ιδιότητα αυτή είναι γενική, ισχύει για όλα τα κβαντικά συστήματα και είναι γνωστή ως **κομβικό θεώρημα**.

Βήμα δυναμικού

Έστω ένα σωματίδιο μάζας m το οποίο προσπίπτει από τα αριστερά στο δυναμικό:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \text{για } x < 0 \\ V_0 & , \text{για } x > 0 \end{cases}, \quad \text{όπου } V_0 \text{ θετική σταθερά}$$

Η γραφική παράσταση της συνάρτησης αυτής δυναμικού φαίνεται στο **Σχήμα 8.3**.



Σχήμα 8.3

Το κβαντομηχανικό αυτό σύστημα αντιστοιχεί σε ένα πείραμα σκέδασης μιας δέσμης σωματιδίων στην επιφάνεια ενός μετάλλου (ορθογώνιο σκαλοπάτι δυναμικού). Δηλαδή αν σταλεί ένα σωματίδιο από τα αριστερά θα βρεθεί η πιθανότητα να ανακλαστεί στο μέταλλο και να επιστρέψει και η πιθανότητα να περάσει το σκαλοπάτι. Ένα δυναμικό με αυτή τη μορφή δεν μπορεί προφανώς να συγκρατήσει το σωματίδιο σε δέσμη κατάσταση και επομένως το φάσμα θα είναι συνεχές σε όλη την ενεργειακή περιοχή $E > 0$.

Είναι απαραίτητο να μελετηθούν ξεχωριστά οι δύο περιπτώσεις όπου η ολική ενέργεια του σωματιδίου είναι $E > V_0$ και $E < V_0$, όπου $E = p^2 / 2m + V(x)$.

- **1^η περίπτωση: $E > V_0$**

Για τον προσδιορισμό της πλήρης λύσης της $\psi(x)$ για το βήμα δυναμικού πρέπει να λυθεί η εξίσωση Schrödinger στις ξεχωριστές περιοχές $x < 0$ (περιοχή I) και $x > 0$ (περιοχή II).

Οπότε στην περιοχή I είναι $V(x)=0$ και η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger δίνει:

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1 = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad \text{όπου } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

η γενική λύση της οποίας είναι:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (8-28)$$

Παρατηρείται ότι ο όρος Ae^{ik_1x} είναι η κυματική περιγραφή ενός προσπίπτοντος σωματιδίου που κινείται προς τα δεξιά, ενώ ο όρος Be^{-ik_1x} παριστάνει ένα ανακλώμενο σωματίδιο που κινείται προς τα αριστερά.

Στην περιοχή II είναι $V(x) = V_0$ και η εξίσωση Schrödinger δίνει:

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi_2 = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_2 = 0$$

$$\text{όπου } k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} > 0$$

επειδή $E > V_0 \Rightarrow E - V_0 > 0$ και η γενική λύση της είναι:

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad (8-29)$$

Η οριακή συνθήκη σκέδασης είναι $D=0$, λόγω του ότι δεν υπάρχει αίτιο ανάκλασης στην περιοχή II. Έτσι οι άγνωστες σταθερές A, B, C προσδιορίζονται από τις οριακές συνθήκες συνέχειας (συνθήκες συναρμογής) στο $x=0$:

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) \Rightarrow A + B = C$$

$$\left. \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=0} \Rightarrow ik_1 A - ik_1 B = ik_2 C$$

Λύνοντας το παραπάνω σύστημα προσδιορίζονται οι συντελεστές B, C ως:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad \text{και} \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

Άρα οι (8-28) και (8-29) γίνονται:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} Ae^{-ik_1x} \quad \text{και} \quad \psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} Ae^{ik_2x} \quad (8-30)$$

όπου η σταθερά A υπολογίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης:

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

Παρατηρείται ότι το $|\psi_1|^2$ και $|\psi_2|^2$ δίνει την πυκνότητα πιθανότητας ή την ένταση του σωματιδίου να βρεθεί στην περιοχή I και II αντίστοιχα.

Οι πειραματικά ενδιαφέρουσες ποσότητες σε ένα πείραμα μονοδιάστατης σκέδασης είναι οι συντελεστές ανάκλασης R και διέλευσης T, που ορίζονται από τις σχέσεις:

$$R = \frac{|\text{πλάτος ανακλώμενου}|^2 \cdot \text{κυματάριθμο περιοχής}}{|\text{πλάτος προσπίπτοντος}|^2 \cdot \text{κυματάριθμο περιοχής}} = \frac{|B|^2 k_1}{|A|^2 k_1} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad (8-31\alpha)$$

$$T = \frac{|\text{πλάτος διερχόμενου}|^2 \cdot \text{κυματάριθμο περιοχής}}{|\text{πλάτος προσπίπτοντος}|^2 \cdot \text{κυματάριθμο περιοχής}} = \frac{|C|^2 k_2}{|C|^2 k_1} =$$

$$= \frac{4k_1^2 k_2}{(k_1 + k_2)^2 k_1} \Rightarrow T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (8-31\beta)$$

Από τις σχέσεις (8-31) εύκολα φαίνεται ότι $R+T=1$, επειδή το σωματίδιο ή ανακλάται ή διέρχεται.

• **2^η περίπτωση:** $E < V_0$

Στην περιοχή I ($x < 0$), όπως και πριν, επειδή $V(x)=0$ η εξίσωση Schrödinger δίνει:

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1 = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad \text{όπου } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

και η γενική λύση αυτής είναι: $\psi_1(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \quad (8-32)$

Ενώ στην περιοχή II ($x > 0$) είναι $V(x) = V_0$ και η εξίσωση Schrödinger δίνει:

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi_2 = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} - k_2^2 \psi_2 = 0$$

$$\text{όπου } -k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} < 0$$

αφού $E < V_0 \Rightarrow E - V_0 < 0$ και η γενική λύση της είναι:

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

Επειδή η λύση $\psi_2(x)$ πρέπει να μην απειρίζεται όταν $x \rightarrow +\infty$ ($e^{+\infty} \rightarrow +\infty$) προκύπτει ότι $D=0$. Άρα :

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} \quad (8-33)$$

Οι οριακές συνθήκες συνέχειας στο $x=0$ δίνουν τις τιμές για τις σταθερές A, B, C :

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) \Rightarrow A + B = C$$

$$\left. \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=0} \Rightarrow ik_1 A - ik_1 B = -k_2 C$$

Λύνοντας το παραπάνω σύστημα προκύπτει:

$$B = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} A \quad \text{και} \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} A$$

Άρα οι κυματοσυναρτήσεις (8-32) και (8-33) για τις ξεχωριστές περιοχές γράφονται:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} Ae^{-ik_1x} \quad \text{και} \quad \psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} Ae^{-k_2x} \quad (8-34)$$

όπου η σταθερά A υπολογίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης

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

Οι συντελεστές ανάκλασης R και διέλευσης T τώρα είναι:

$$R = \frac{|B|^2 k_1}{|A|^2 k_1} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 \Rightarrow R = 1$$

και

$$T = 1 - R \Rightarrow T = 0$$

(8-35)

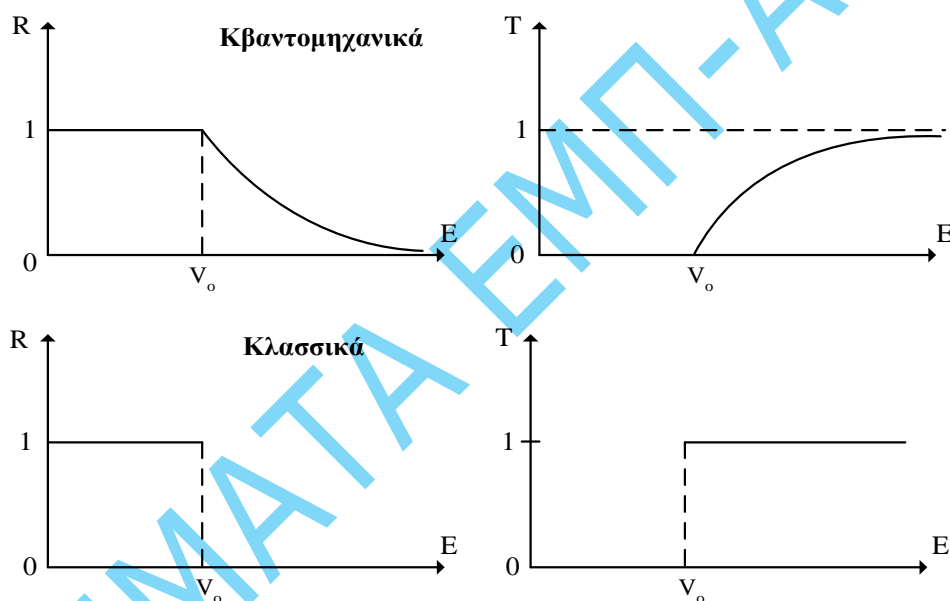
Δηλαδή παρατηρείται ότι για κάθε ενέργεια $E < V_0$ προκύπτει ολική ανάκλαση του σωματιδίου (όπως και στην κλασική περίπτωση), ακόμα και για εκείνα τα σωματίδια που διεισδύουν στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή $x > 0$, όπου η $\psi_2(x)$ δεν είναι μηδενική. Η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην περιοχή II είναι:

$$P(x) = |\psi_2(x)|^2 = |Ce^{-k_2x}|^2 = \left| \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} Ae^{-k_2x} \right|^2 = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2} A^2 e^{-2k_2x}$$

Έτσι αφού ο εκθετικός συντελεστής k_2 εξαρτάται από τη V_0 , όσο μεγαλύτερη είναι η V_0 , τόσο γρηγορότερα η κυματοσυνάρτηση $\psi_2(x)$ τείνει στο μηδέν στην περιοχή II, για ορισμένη ενέργεια $E < V_0$.

Επίσης παρατηρείται ότι όταν $V_0 \rightarrow \infty$, δηλαδή στην περίπτωση του άπειρου φρέατος δυναμικού, η $\psi_2(x)$ γίνεται μηδενική και δεν υπάρχει διείσδυση στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή.

Στο ακόλουθο σχήμα παριστάνονται οι γραφικές παραστάσεις των συντελεστών R και T συναρτήσει της ενέργειας, τόσο στην κβαντομηχανική όσο και στην κλασική περίπτωση.



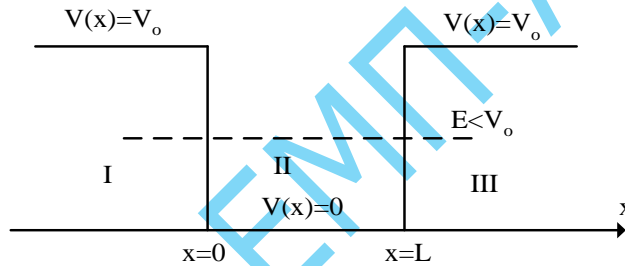
Σχήμα 8.4

Τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού

Έστω ένα σωματίδιο με ενέργεια $E < V_0$ που κινείται στο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού με εύρος L του **Σχήματος 8.5**. Μέσα στο πηγάδι το δυναμικό είναι μηδέν και η τιμή V_0 του ύψους του δυναμικού είναι πεπερασμένη. Δηλαδή το κβαντομηχανικό αυτό πρόβλημα περιγράφει την κίνηση σωματιδίου υπό την επίδραση του δυναμικού:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{για } 0 \leq x \leq L \\ V_0, & \text{για } x > L \text{ και } x < 0 \end{cases}$$

Η γραφική παράσταση της συνάρτησης αυτής δυναμικού φαίνεται στο **Σχήμα 8.5**.



Σχήμα 8.5

Γράφοντας την χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger για κάθε μια από τις τρεις περιοχές προκύπτει:

- Για την περιοχή I ($x < 0$):

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi_1 = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} - k_1^2 \psi_1 = 0$$

$$\text{όπου } -k_1^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} < 0$$

επειδή $E < V_0 \Rightarrow E - V_0 < 0$ και η γενική της λύση είναι:

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x} + Be^{-k_1 x}$$

Για να παραμείνει πεπερασμένη η $\psi_1(x)$ καθώς $x \rightarrow -\infty$ (συνθήκη κανονικοποίησης) πρέπει $B=0$, οπότε:

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad (8-36)$$

- Για την περιοχή II ($0 \leq x \leq L$) :

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_2 = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_2 = 0, \quad \text{όπου } k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

και η γενική λύση αυτής είναι:

$$\psi_2(x) = C \cos k_2 x + D \sin k_2 x \quad (8-37)$$

- Για την περιοχή III ($x > L$):

$$\frac{\partial^2 \psi_3}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi_3 = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial x^2} - k_1^2 \psi_3 = 0$$

$$\text{όπου } -k_1^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} < 0$$

και η γενική λύση της είναι: $\psi_3(x) = Fe^{k_1x} + Ge^{-k_1x}$

Επειδή η λύση $\psi_3(x)$ πρέπει να μην απειρίζεται, αλλά να είναι πεπερασμένη, όταν $x \rightarrow +\infty$ πρέπει $F=0$, οπότε:

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1x} \quad (8-38)$$

Οι οριακές συνθήκες συνέχειας, δηλαδή ότι οι $\psi(x)$ και $\partial\psi/\partial x$ πρέπει να είναι συνεχείς, στα σημεία $x=0$ και $x=L$ δίνουν:

$$\text{Στο } x=0: \quad \psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) \Rightarrow A = C$$

$$\left. \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=0} \Rightarrow k_1 A = k_2 D$$

$$\text{Στο } x=L: \quad \psi_2(x=L) = \psi_3(x=L) \Rightarrow C \cos k_2 L + D \sin k_2 L = Ge^{-k_1 L}$$

$$\left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=L} = \left. \frac{\partial \psi_3}{\partial x} \right|_{x=L} \Rightarrow -k_2 C \sin k_2 L + k_2 D \cos k_2 L = -k_1 G e^{-k_1 L}$$

Για να ικανοποιείται το παραπάνω σύστημα πρέπει να επιβληθούν ορισμένες συνθήκες στα k_1 και k_2 , δηλαδή στην τιμή της E . Επομένως επιτρέπονται μόνο ορισμένες τιμές για την E , οι οποίες προκύπτουν αν διαιρεθούν κατά μέλη οι πρώτες δυο και οι δεύτερες δύο εξισώσεις του προηγούμενου συστήματος:

$$\frac{C}{D} = \frac{k_2}{k_1} \quad (1) \quad \text{και}$$

$$\frac{C \cos k_2 L + D \sin k_2 L}{-k_2 C \sin k_2 L + k_2 D \cos k_2 L} = -\frac{1}{k_1} \Rightarrow \frac{\frac{C}{D} + \tan k_2 L}{-k_2 \frac{C}{D} \tan k_2 L + k_2} = -\frac{1}{k_1} \quad (1)$$

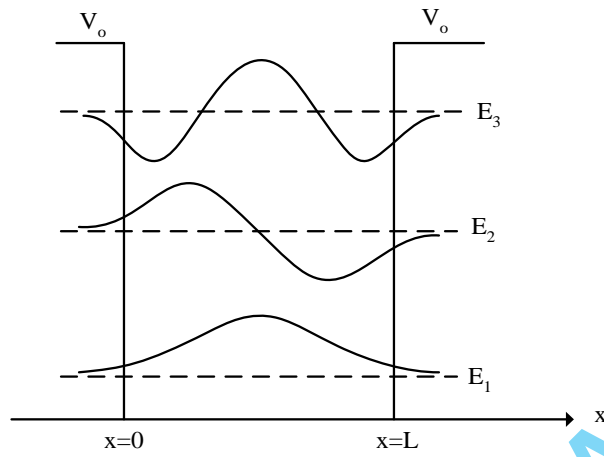
$$\Rightarrow \frac{\frac{k_2}{k_1} + \tan k_2 L}{-k_2 \frac{k_2}{k_1} \tan k_2 L + k_2} = -\frac{1}{k_1} \Rightarrow \frac{k_2 + k_1 \tan k_2 L}{-k_2 \tan k_2 L + k_1} = \frac{k_2^2}{k_1^2} \tan k_2 L - \frac{k_2}{k_1}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{k_2^2}{k_1^2} - 1 \right) \tan k_2 L = \frac{2k_2}{k_1} \Rightarrow \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1^2} \tan k_2 L = \frac{2k_2}{k_1} \Rightarrow \boxed{\tan k_2 L = \frac{2k_1 k_2}{k_2^2 - k_1^2}}$$

Η αντικαθιστώντας τις τιμές των k_1, k_2 προκύπτει:

$$\tan L \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\sqrt{E(V_0 - E)}}{2E - V_0} \quad (8-39)$$

Συνεπώς επιτρεπόμενες ενεργειακές καταστάσεις προκύπτουν μόνο για εκείνες τις τιμές της ενέργειας E που ικανοποιούν την εξίσωση (8-39) και οι τιμές αυτές μπορούν να υπολογιστούν με αριθμητικές ή γραφικές μεθόδους. Οι κυματοσυναρτήσεις $\psi(x)$ του τετραγωνικού πηγαδιού έχουν την ίδια γενική μορφή με εκείνες του απειρόβαθου πηγαδιού (Σχήμα 8.2), μόνο που τώρα δεν μηδενίζονται στα άκρα $x=0$ και $x=L$, αλλά έχουν και εκθετικά φθίνουσες ουρές που εκτείνονται στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή $x<0$ και $x>L$. Η κυματοσυναρτηση της θεμελιώδους στάθμης είναι άρτια χωρίς κανένα κόμβο, η αμέσως επόμενη περιττή με ένα κόμβο στο $x=L/2$ κ.ο.κ. Στο ακόλουθο σχήμα παριστάνονται οι τρεις πρώτες κυματοσυναρτήσεις για ένα σωματίδιο σε τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού με τις τρεις χαμηλότερες επιτρεπόμενες ενέργειες E_1, E_2 και E_3 .



Σχήμα 8.6

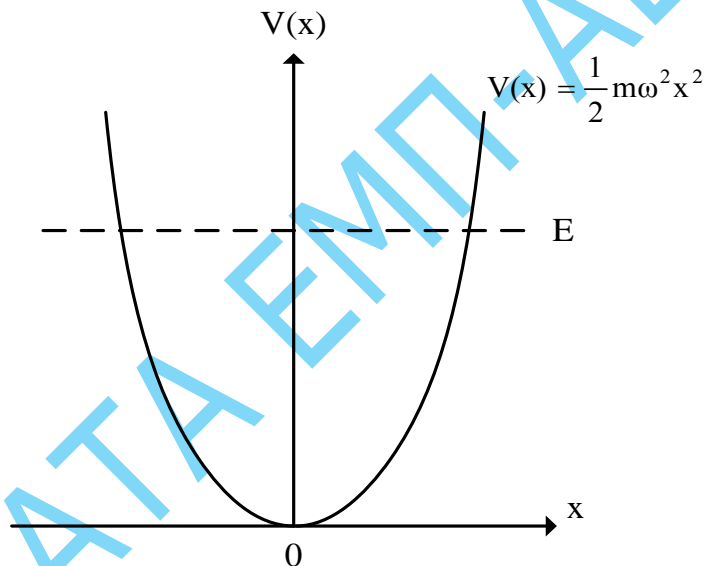
Αρμονικός ταλαντωτής

Στις προηγούμενες παραγράφους εξετάστηκαν προβλήματα όπου το δυναμικό λάμβανε σταθερή τιμή ανά περιοχή. Σαν τελευταίο παράδειγμα και ένα από τα σημαντικότερα κβαντομηχανικά συστήματα, όπου το δυναμικό δεν έχει σταθερή τιμή, είναι το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή, όπου μελετάται η συμπεριφορά σωματιδίου μάζας m υπό την επίδραση του δυναμικού:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

όπου ω είναι η σταθερή κυκλική συχνότητα του ταλαντωτή.

Το σύστημα αυτό βρίσκει άμεση αξιοποίηση στη μελέτη της ταλαντωτικής κίνησης των μορίων και η γραφική παράσταση της συνάρτησης αυτής δυναμικού αποδίδεται στο ακόλουθο σχήμα.



Σχήμα 8.7

Η εξίσωση Schrödinger (8-17) για το σύστημα αυτό δίνει:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + [E - V(x)]\psi &= 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi \Rightarrow \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) &= E\psi(x) \end{aligned} \quad (8-40)$$

Η γενική λύση της (8-40) σε ότι αφορά στις κυματοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ και στις ενεργειακές ιδιοτιμές E_n είναι πολύπλοκη και απαιτεί τη λύση της διαφορικής εξίσωσης του Hermite, πράγμα το οποίο είναι έξω από τα πλαίσια αυτού του βιβλίου. Συνοπτικά τα αποτελέσματα είναι τα ακόλουθα:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8-41)$$

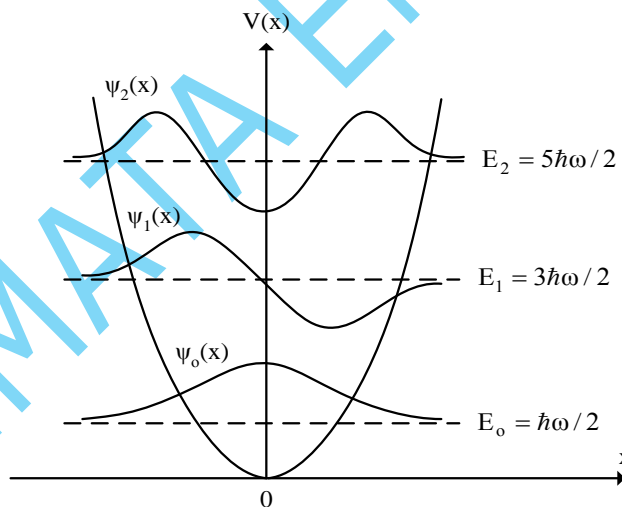
ενώ οι τρεις πρώτες ιδιοσυναρτήσεις είναι:

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

$$\psi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} (2\alpha)^{1/2} x e^{-\alpha x^2/2}, \quad \text{όπου } \alpha = m\omega/\hbar$$

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

Οι κυματοσυναρτήσεις $\psi(x)$ για τις τρεις πρώτες ενεργειακές στάθμες του αρμονικού ταλαντωτή φαίνονται στο ακόλουθο σχήμα.



Σχήμα 8.8

Παρατηρείται ότι οι ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή, λόγω της συμμετρίας του δυναμικού είναι εναλλάξ άρτιες (όταν n άρτιος) και περιττές (όταν n περιττός). Επίσης παρατηρείται ότι, ενώ ένας κλασικός αρμονικός ταλαντωτής δεν μπορεί ποτέ να ξεπεράσει το μέγιστο πλάτος απομάκρυνσης, ένα σωματίδιο που υπακούει σε μια κυματομηχανική περιγραφή έχει μια πεπερασμένη πιθανότητα να βρεθεί πέρα από το όριο αυτό και αυτό φαίνεται από τις εκθετικά φθίνουσες ουρές των κυματοσυναρτήσεων που εκτείνονται στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή.