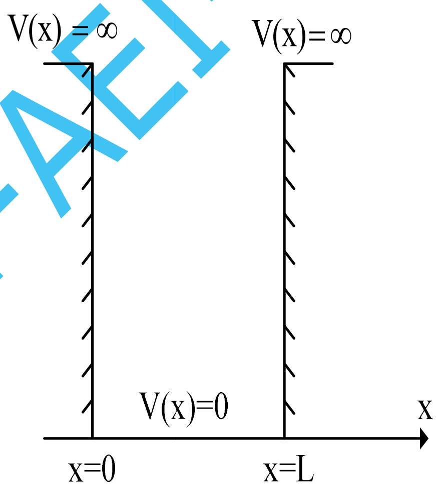
ΑΠΕΙΡΟΒΑΘΟ ΜΟΝΟΔΙΑΣΤΑΤΟ ΠΗΓΑΔΙ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ

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:

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



Σχήμα 1

Η γραφική παράσταση της συνάρτησης δυναμικού φαίνεται στο **Σχήμα 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 ψ(x) μέσα και έξω από το διάστημα 0<x<L θα πρέπει να ισχύουν οι συνοριακές συνθήκες:

$$\psi(x=0)=\psi(x=L)=0 \qquad \textbf{(5)}$$

Επειδή όμως για $0 \le x \le L$ είναι V(x)=0 η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger **(4)** δίνει:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \qquad \text{όπου} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \textbf{(6)}$$

Η γενική λύση της παραπάνω διαφορικής εξίσωσης ως γνωστό είναι:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \qquad \textbf{(7)}$$

Οπότε επιβάλλοντας τις συνοριακές συνθήκες **(5)** στην **(7)** προκύπτει:

$$\psi(x=0) = 0 \overset{(7)}{\Rightarrow} A\sin 0 + B\cos 0 = 0 \Rightarrow B = 0$$

Δηλαδή: $$\psi(x) = A\sin kx \qquad \textbf{(8)}$$

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

$$\Rightarrow kL = n\pi \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1,2,... \qquad \textbf{(9)}$$

Άρα από τις **(6)** και **(9)** προσδιορίζονται οι ενεργειακές ιδιοτιμές ως:

$$\frac{2mE_n}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \Rightarrow E_n = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = n^2 E_1, \quad n = 1,2,... \qquad \textbf{(10)}$$

όπου $E_1 = \hbar^2\pi^2/2mL^2$ είναι η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης.
Επίσης οι ιδιοτιμές της ορμής είναι:

$$p_n = \hbar k \overset{(9)}{\Rightarrow} p_n = n\frac{\hbar\pi}{L}, n = 1,2,... \qquad \textbf{(11)}$$

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)** και **(9)** είναι:

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{L}x, \qquad n = 1,2,... \qquad \textbf{(12)}$$

όπου η σταθερά A υπολογίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης ως:

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^L \sin^2 kx dx = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^L \frac{1}{2}(1-\cos 2kx)dx =$$

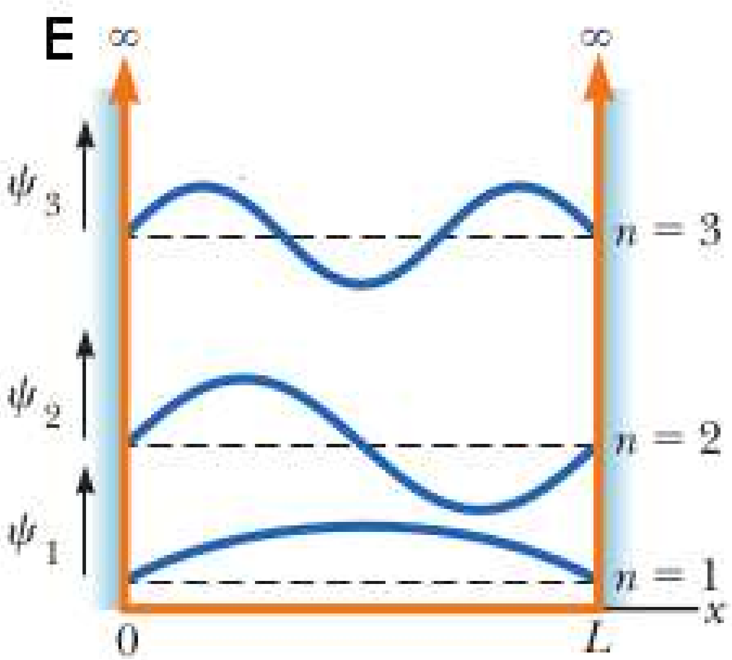
$$= \frac{A^2}{2}\left(L - \frac{1}{2k}\sin 2kL\right) = \frac{A^2}{2}\left(L - \frac{1}{2k}\sin 2n\pi\right) = \frac{A^2}{2}(L-0) = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow$$

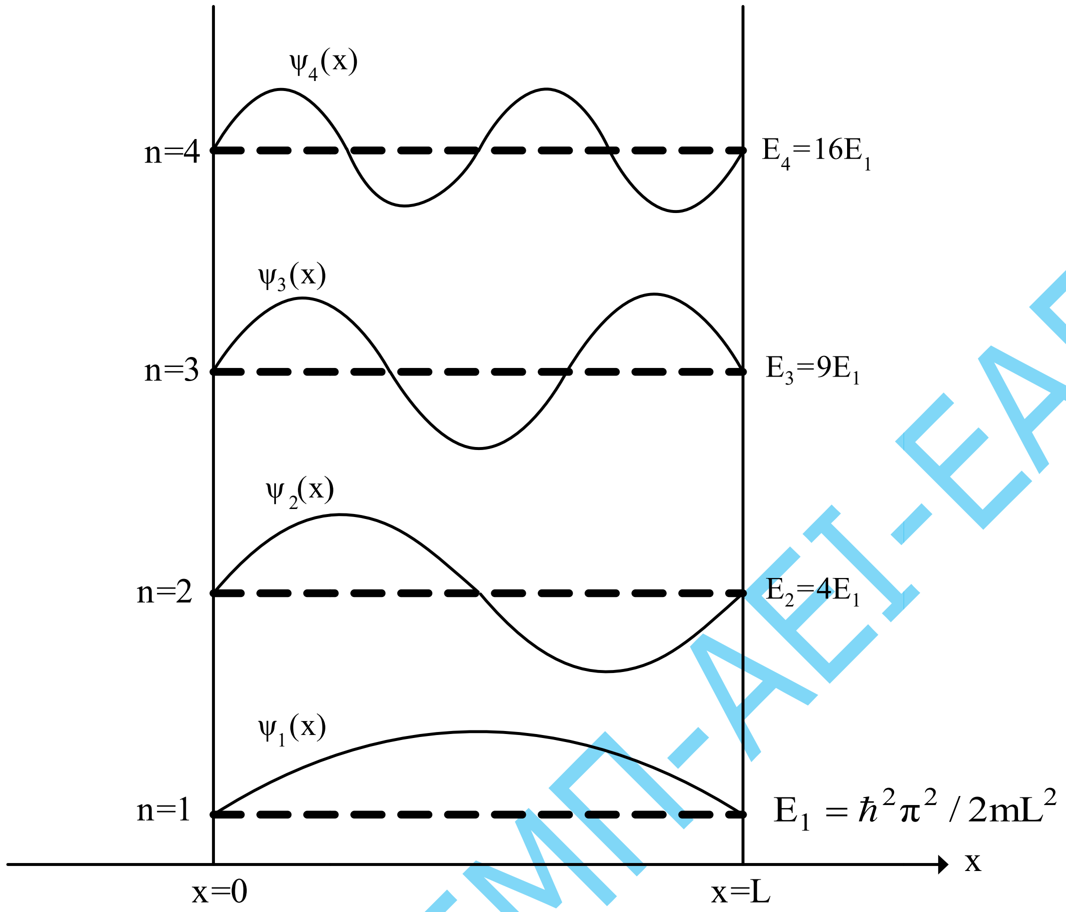
$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Άρα οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις είναι:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x, \qquad n = 1,2,... \qquad \textbf{(13)}$$

Στο ακόλουθο σχήμα φαίνεται η μορφή των πρώτων ιδιοσυναρτήσεων:





Σχήμα 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**.

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας