ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ ΣΕ ΜΙΑ ΔΙΑΣΤΑΣΗ

Κυματική εξίσωση Schrödinger

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 το 1928 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 μια 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 $\psi(x)$ είναι η κυματοσυνάρτηση ενός υλικού κύματος (κύματος πιθανότητας) σε μια ορισμένη χρονική στιγμή, τότε η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σωματίδιο μεταξύ x και x+dx είναι:

$$\frac{dP}{dx} = |\psi(x)|^2 = \psi^*\psi \qquad \textbf{(1)}$$

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

Οπότε η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο μέσα σε ένα πεπερασμένο μήκος $x_2 - x_1$ προφανώς είναι:

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx \qquad \textbf{(2)}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \qquad \textbf{(3)}$$

Η σχέση **(3)** ονομάζεται **συνθήκη κανονικοποίησης** και εκφράζει τη διατήρηση της ολικής πιθανότητας.

Η κυματοσυνάρτηση ψ των υλικών κυμάτων ικανοποιεί την ακόλουθη κυματική εξίσωση:

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + (E - V)\psi(x) = 0} \qquad \textbf{(4)}$$

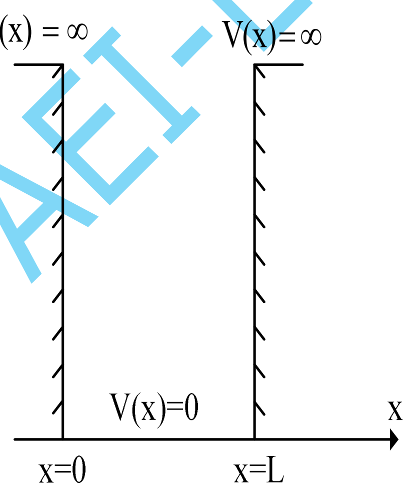
Η σχέση **(4)** αποτελεί τη **χρονικά ανεξάρτητη κυματική εξίσωση Schrödinger** και δίνει καταστάσεις σταθερής συχνότητας, δηλαδή σταθερής ενέργειας. Η κυματική εξίσωση Schrödinger αποτελεί κλειδί στη θεωρία της κβαντομηχανικής και η σημασία της είναι παρόμοια με τη σημασία των νόμων του Newton στην κλασσική μηχανική.

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας

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:

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



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:

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

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:

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

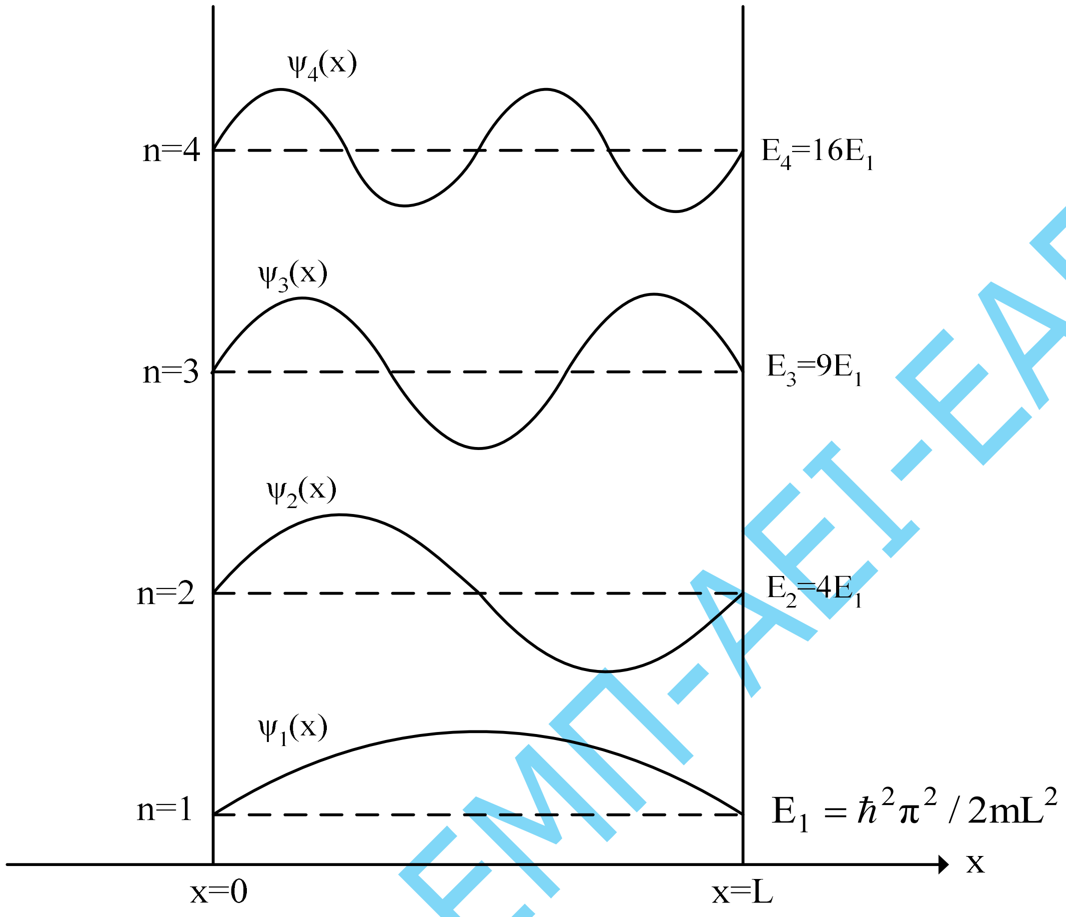
$$= \frac{A^2}{2}\left(L - \frac{1}{2k}\sin 2kL\right) = \frac{A^2}{2}\left(L - \frac{1}{2k}\sin 2n\pi\right) = \frac{A^2}{2}(L-0) = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow$$

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

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 τεσσάρων 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

Άσκηση 1

Ένα ηλεκτρόνιο είναι παγιδευμένο σε μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού εύρους 250pm. Αν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στη βασική κατάσταση ποια είναι τα τρία μεγαλύτερα μήκη μήκος κύματος ενός φωτονίου που όταν απορροφηθεί από το ηλεκτρόνιο μπορούν να το οδηγήσει σε μια διεγερμένη κατάσταση;

(Απ.: λ= 68,73 nm - 25,78nm - 13,75nm**)**

Άσκηση 2

Ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε κατάσταση καθορισμένης ενέργειας απειρόβαθου πηγαδιού πλάτους $L = 200\text{pm}$. Θεωρώντας το πηγάδι ότι εκτείνεται στην περιοχή $0 < x < 200\text{pm}$ η πυκνότητα πιθανότητας μηδενίζεται, εκτός των άκρων, στις θέσεις $x = 0.300L, 0.400L$ και είναι μη μηδενική για οποιαδήποτε άλλη θέση ανάμεσα σ' αυτές τις δύο. Το ηλεκτρόνιο πέφτει στην αμέσως επόμενη ενεργειακή κατάσταση εκπέμποντας ένα φωτόνιο. Ποια είναι η συχνότητα του φωτονίου;

(Απ.: $f=4.32 \times 10^{16}$ Hz**)**

EMC²

ΣΟΛΩΜΟΥ 29 - ΑΘΗΝΑ ☎ 6932 946778
www.pmoiras.weebly.com