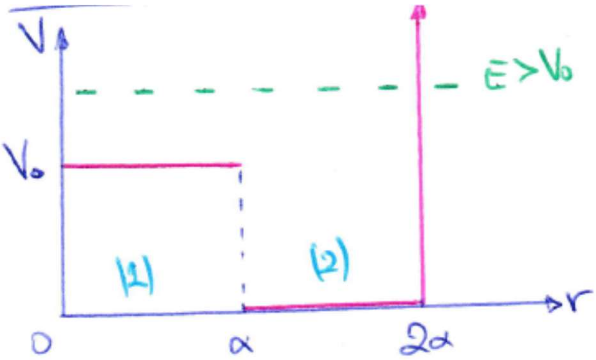
*Μεθοδικά, απλά & κατανοητά…*

## Θέμα

Σωματίδιο μάζας $m$ βρίσκεται στο κεντρικό δυναμικό

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & 0 < r < a \\ 0 & a < r < 2a \\ +\infty & 2a < r \end{cases}$$

όπου $V_0$, $a$ θετικές σταθερές με τις κατάλληλες διαστάσεις. Έστω ότι $E > V_0$.
(α) Εξηγήστε ποιο θα είναι το γωνιακό μέρος της κυματοσυνάρτησης.
(β) Στην περίπτωση $\ell = 0$ βρείτε τη γενική μορφή της κυματοσυνάρτησης και τις εξισώσεις που προσδιορίζουν τις σταθερές που υπεισέρχονται.
(γ) Στην περίπτωση $\ell = 0$ βρείτε την εξίσωση που προσδιορίζει τις δυνατές τιμές της ενέργειας.




$$V(r) = \begin{cases} V_0 \ , & 0<r<\alpha \\ 0 \ , & \alpha<r<2\alpha \\ +\infty \ , & r>2\alpha \end{cases}$$

α) Επειδή το σωματίδιο βρίσκεται σε κεντρικό δυναμικό $V(r)$ η λύση της εξίσωσης Schrödinger έχει τη μορφή:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

Δηλαδή το γωνιακό μέρος της κυματοσυνάρτησης αποτελούν οι σφαιρικές αρμονικές $Y_l^m(\theta,\varphi)$, όπου $l=0,1,2,\dots,n-1$ και $m=0,\pm1,\pm2,\dots,\pm l$.

β) Η διαφορική εξίσωση που διέπει το ακτινικό μέρος της κυματοσυνάρτησης είναι η ακτινική εξίσωση Schrödinger που έχει τη μορφή:

$$\frac{d^2 y(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right] y(r) = 0 \quad (1)$$

*Μεθοδικά, απλά & κατανοητά...*

όπου $y(r) = r R(r)$ η σύνδεση της λύσης $y(r)$ με την ακτινική συνάρτηση $R(r)$ των ιδιοσυναρτήσεων $\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\varphi)$.

Για $l=0$ (καταστάσεις s) η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου έχει τη μορφή: $\Psi_{n00} = R_{n0}(r) Y_0^0(\theta,\varphi)$ και η εξίσωση (1) γίνεται:

$$\frac{d^2y}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r)\right)y = 0 \quad (2)$$

Η επίλυση της διαφορικής εξίσωσης (2) σε κάθε περιοχή δίνει:

• Περιοχή 1: Για $0<r<\alpha$ είναι $V(r) = V_0$ οπότε η (2) δίνει:

$$y_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)y_1 = 0$$

Θέτουμε $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$ οπότε: $y_1'' + k_1^2 y_1 = 0$ η οποία έχει

γενική λύση: $y_1(r) = A\sin k_1 r + B\cos k_1 r \quad (3)$

Αλλά: $y_1(r=0) = 0 \xrightarrow{(3)} A\underbrace{\sin 0}_{0} + B\underbrace{\cos 0}_{1} = 0 \rightarrow B = 0$

Δηλαδή: $\boxed{y_1(r) = A\sin k_1 r} \quad (3)$

• Περιοχή 2: Για $\alpha < r < 2\alpha$ είναι $V(r) = 0$ οπότε η (2) δίνει:

$$y_2'' + \frac{2m}{\hbar^2} E y_2 = 0$$

Θέτουμε $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0$ οπότε $y_2'' + k_2^2 y_2 = 0$ η οποία έχει γενική

λύση: $y_2(r) = C \sin k_2 r + D \cos k_2 r$ (4)

Οριακές συνθήκες:

$r = 2\alpha$: $y_2(r=2\alpha) = 0 \xrightarrow{(4)} C \sin 2k_2\alpha + D\cos 2k_2\alpha = 0 \rightarrow$

$\rightarrow D\cos 2k_2\alpha = -C\sin 2k_2\alpha \rightarrow D = -C\frac{\sin 2k_2\alpha}{\cos 2k_2\alpha} \rightarrow$

$\rightarrow D = -C \tan 2k_2\alpha.$ (5)

Οπότε η (4) λόγω της (5) γίνεται:

$$\boxed{y_2 = C\sin k_2 r - C\tan 2k_2\alpha \cos k_2 r} \quad (6)$$

$r = \alpha$: $y_1(r=\alpha) = y_2(r=\alpha) \xrightarrow{(3,6)} A\sin k_1\alpha = C\sin k_2\alpha - C\tan 2k_2\alpha\cos k_2\alpha \rightarrow$

$\rightarrow A\sin k_1\alpha - C(\sin k_2\alpha - \tan 2k_2\alpha\cos k_2\alpha) = 0$ (7)

$y_1'(r=\alpha) = y_2'(r=\alpha) \xrightarrow{(3),(6)} k_1 A\cos k_1\alpha = k_2 C\cos k_2\alpha + k_2 C\tan 2k_2\alpha \sin k_2\alpha \rightarrow$

$\rightarrow k_1 A\cos k_1\alpha - Ck_2(\cos k_2\alpha + \tan 2k_2\alpha\sin k_2\alpha) = 0$ (8)

Οι εξισώσεις (7), (8) και η συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int_0^{\alpha} \psi_1^2(x)\,dx + \int_{\alpha}^{2\alpha} \psi_2^2(x)\,dx = 1$$ προσδιορίζουν τις σταθερές που υπεισέρχονται.

γ) Οι εξισώσεις (7), (8) αποτελούν ομογενές σύστημα με αγνώστους τα A, C το οποίο έχει μη μηδενική λύση όταν:

$$\begin{vmatrix} \sin k_1\alpha & -(\sin k_2\alpha - \tan 2k_2\alpha \cos k_2\alpha) \\ k_1 \cos k_1\alpha & -k_2(\cos k_2\alpha + \tan 2k_2\alpha \sin k_2\alpha) \end{vmatrix} = 0 \rightarrow$$

$$\rightarrow -k_2 \sin k_1\alpha (\cos k_2\alpha + \tan 2k_2\alpha \sin k_2\alpha) + k_1 \cos k_1\alpha (\sin k_2\alpha - \tan 2k_2\alpha \cos k_2\alpha) = 0 \rightarrow$$

$$\rightarrow k_1 \cos k_1\alpha (\sin k_2\alpha - \tan 2k_2\alpha \cos k_2\alpha) = k_2 \sin k_1\alpha (\cos k_2\alpha + \tan 2k_2\alpha \sin k_2\alpha) \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{\sin k_2\alpha - \tan 2k_2\alpha \cos k_2\alpha}{\cos k_2\alpha + \tan 2k_2\alpha \sin k_2\alpha} = \frac{k_2}{k_1} \frac{\sin k_1\alpha}{\cos k_1\alpha} \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{\frac{\sin k_2\alpha}{\sin k_2\alpha} - \tan 2k_2\alpha \frac{\cos k_2\alpha}{\sin k_2\alpha}}{\frac{\cos k_2\alpha}{\sin k_2\alpha} + \tan 2k_2\alpha \cancel{\frac{\sin k_2\alpha}{\sin k_2\alpha}}} = \frac{k_2}{k_1} \tan k_1\alpha \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{1-\frac{\tan 2k_2\alpha}{\tan k_2\alpha}}{\frac{1}{\tan k_2\alpha}+\tan 2k_2\alpha}=\frac{k_2}{k_1}\tan k_1\alpha \rightarrow$$

$$\tan(a-b)=\frac{\tan a-\tan b}{1+\tan a\tan b}$$

$$\rightarrow \frac{\tan k_2\alpha-\tan 2k_2\alpha}{1+\tan k_2\alpha\cdot\tan 2k_2\alpha}=\frac{k_2}{k_1}\tan k_1\alpha \rightarrow$$

$$\rightarrow \tan(k_2\alpha-2k_2\alpha)=\frac{k_2}{k_1}\tan k_1\alpha \rightarrow \tan(-k_2\alpha)=\frac{k_2}{k_1}\tan k_1\alpha \rightarrow$$

$$\rightarrow -\tan k_2\alpha=\frac{k_2}{k_1}\tan k_1\alpha \rightarrow \boxed{\tan k_2\alpha=-\frac{k_2}{k_1}\tan k_1\alpha}$$

όπου $k_1=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}$ και $k_2=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$

Η τελευταία υπερβατική εξίσωση προσδιορίζει τις δυνατές τιμές της ενέργειας του σωματιδίου.