Ε. Λιαροκάπης Σ. Παπαδόπουλος Κ. Χριστοδουλίδης

Τομέας Φυσικής, Γενικό Τμήμα
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Η ΔΟΜΗ ΤΗΣ ΥΛΗΣ

Αθήνα 1999

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

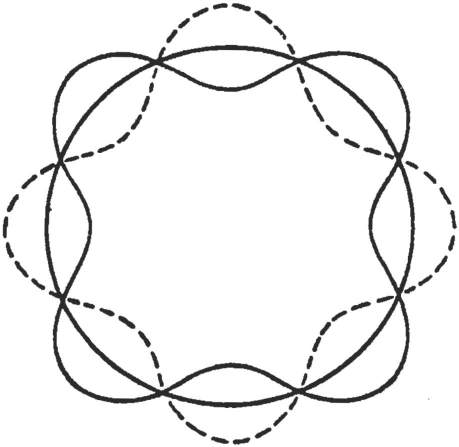
Η ΚΥΜΑΤΙΚΗ ΥΦΗ ΤΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ

Παράδειγμα 1.1

Βασιζόμενοι στην αρχή του de Broglie μπορούμε να βρούμε τις επιτρεπόμενες τροχιές του ηλεκτρονίου στο άτομο.

Στην τροχιά n, το ηλεκτρόνιο, που έχει ορμή p , ισοδυναμεί με ένα κύμα μήκους κύματος $\lambda_n = h/p_n$. Για να έχουμε μονοσήμαντα καθορισμένη τιμή της έντασης του κύματος σε κάθε σημείο της τροχιάς, θα πρέπει αυτό να δημιουργεί πάνω σε αυτή στάσιμα κύματα (Σχ.1.1).

Σχ.1.1 Το στάσιμο κύμα του ηλεκτρονίου στην τροχιά με n=4, στο άτομο του υδρογόνου, σύμφωνα με τον Bohr.



Θα πρέπει κατά τα γνωστά από την κλασσική Κυματική να ισχύει:
(μήκος τροχιάς) = $2\pi r_n$ = (ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος) =

$$= n\lambda_n = nh/p_n \tag{1.5}$$

ή ότι

$$p_n r_n = nh/2\pi \quad \text{και} \quad \text{επομένως} \quad m\, \upsilon_n r_n = n\hbar \tag{1.6}$$

που είναι η σχέση που υπέθεσε ο Bohr.

Παρά τον ακριβή υπολογισμό της τροχιάς του ηλεκτρονίου, θα πρέπει να είμαστε προσεκτικοί γιατί, όπως θα δούμε αμέσως μετά, το ηλεκτρόνιο στην κίνησή του δεν έχει ούτε συγκεκριμένη ορμή, ούτε συγκεκριμένη ακτίνα, ούτε καν συγκεκριμένη τροχιά. Στην πραγματικότητα θα πρέπει να μιλάμε για κατανομή ηλεκτρονίου με διάφορες πιθανότητες γύρω από τον πυρήνα σε διάφορες περιοχές του χώρου.

Παράδειγμα 1.2

Φασική, ομαδική και σωματιδιακή ταχύτητα.

Ενα σωματίδιο με μάζα ηρεμίας m_o, που κινείται με ταχύτητα υ, έχει σύμφωνα με τη θεωρία της σχετικότητας, μάζα m, ορμή p και ενέργεια E, που συνδέονται μέσω των σχέσεων $m = m_o\gamma$ όπου $\gamma = (1-\upsilon^2/c^2)^{-1/2}$ και

$$p = m\upsilon \quad E = mc^2 \quad E^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2$$

Σύμφωνα με την υπόθεση του de Broglie, το σωματίδιο σχετίζεται με κύμα συχνότητας ν και μήκους κύματος λ, όπου

$$E = h\nu = \hbar\omega \qquad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

Η σωματιδιακή ταχύτητα είναι υ.

Η φασική ταχύτητα είναι $\upsilon_\varphi = \lambda\nu = \dfrac{\omega}{k}$.

Η ομαδική ταχύτητα $\upsilon_g = \dfrac{d\omega}{dk}$ βρίσκεται από τη σχέση

$$E^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2 \qquad \text{ή} \qquad \hbar^2\omega^2 = m_0^2c^4 + c^2\hbar^2k^2$$

η οποία με παραγώγιση δίνει $\hbar^2 2\omega\, d\omega = c^2\hbar^2 2k\, dk$ ή

$$\upsilon_g = \frac{d\omega}{dk} = c^2\frac{k}{\omega} = \frac{c^2}{\upsilon_\varphi}$$

Επομένως $\upsilon_\varphi\, \upsilon_g = c^2$ και

$$\upsilon_g = \frac{c^2}{\upsilon_\varphi} = c^2\frac{k}{\omega} = c^2\frac{p\,\hbar}{\hbar\, E} = \frac{p}{m} = \upsilon$$

Οι τρεις ταχύτητες συνδέονται μέσω των σχέσεων:

$\upsilon_g = \upsilon \quad \upsilon_g\, \upsilon_\varphi = c^2$ και $\upsilon_\varphi\, \upsilon = c^2$.

Η ομαδική ταχύτητα του κυματοπακέτου είναι η σωματιδιακή ταχύτητα, ενώ η φασική ταχύτητα είναι $\upsilon_\varphi = c^2/\upsilon$ που είναι μεγαλύτερη από την ταχύτητα του φωτός. Αυτό δεν διαφωνεί με τη θεωρία της σχετικότητας, γιατί με την ταχύτητα αυτή δεν κινείται μάζα ή ενέργεια (ούτε πληροφορία).

Παράδειγμα 1.3

Να βρεθεί η έκφραση για το μήκος κύματος de Broglie ενός σωματιδίου με μάζα ηρεμίας m_o, που κινείται με σχετικιστική ταχύτητα, συναρτήσει της ταχύτητάς του ή της κινητικής του ενέργειας.

Από τις σχέσεις $k = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$. $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{m_o \upsilon}\sqrt{1-\frac{\upsilon^2}{c^2}}$

και $E_{o\lambda} = \frac{m_o c^2}{\left(1-\upsilon^2/c^2\right)^{1/2}} = m_o c^2 + E_k$,

προκύπτει ότι $\upsilon = \frac{c}{m_o c^2 + E_k}\sqrt{E_k\left(E_k + 2m_o c^2\right)}$

Επομένως, $\lambda = \frac{ch}{\sqrt{E_k\left(E_k + 2m_o c^2\right)}}$ ή $\lambda = \frac{ch/E_k}{\sqrt{1+2m_o c^2/E_k}}$

Παράδειγμα 1.4

Δείκτης διάθλασης για ηλεκτρόνια.

Ηλεκτρόνια κινούνται με ταχύτητα υ_1 σε υλικό όπου η δυναμική τους ενέργεια είναι V_1 και μπαίνουν σε υλικό όπου η δυναμική τους ενέργεια είναι V_2 και η ταχύτητά τους γίνεται υ_2. Αν Ε είναι η ολική ενέργεια του κάθε ηλεκτρονίου, η διατήρηση της ενέργειας δίνει

$$E = \frac{1}{2}m\upsilon_1^2 + V_1 = \frac{1}{2}m\upsilon_2^2 + V_2 \quad \text{ή} \quad E = \frac{p_1^2}{2m} + V_1 = \frac{p_2^2}{2m} + V_2 \,.$$

Επομένως, οι αντίστοιχες ορμές είναι:

$$p_1 = \sqrt{2m(E - V_1)} \qquad \text{και} \qquad p_2 = \sqrt{2m(E - V_2)}$$

Σύμφωνα με την υπόθεση του de Broglie, τα μήκη κύματος είναι:

$$\lambda_1 = \frac{h}{p_1} \quad \text{και} \quad \lambda_2 = \frac{h}{p_2} \quad \text{ο δε λόγος τους είναι:}$$

$$n_{12} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{p_2}{p_1} = \frac{\upsilon_2}{\upsilon_1} = \left(\frac{E - V_2}{E - V_1}\right)^{1/2} .$$

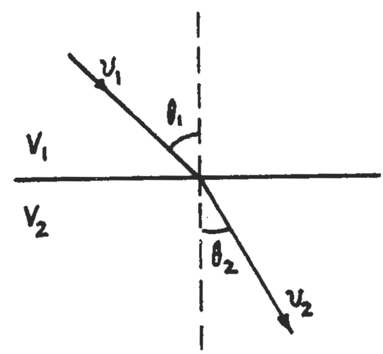
Κατ' αναλογία με την οπτική, ονομάζουμε το n_{12} **δείκτη διάθλασης** του μέσου 2 σε σχέση με το μέσον 1.

Αν η μεταβολή στην ταχύτητα οφείλεται σε δυνάμεις κάθετες στη διαχωριστική επιφάνεια των δύο μέσων, τότε μόνο η συνιστώσα της ταχύτητας που είναι κάθετη στη διαχωριστική επιφάνεια των δύο μέσων μεταβάλλεται. Η παράλληλη συνιστώσα της ορμής μένει αμετάβλητη. Αν θ_1 και θ_2 είναι οι γωνίες που σχηματίζει το διάνυσμα της ορμής με την κάθετη στη διαχωριστική επιφάνεια, μέσα στα μέσα 1 και 2 αντίστοιχα, τότε

$$p_1 \sin\theta_1 = p_2 \sin\theta_2$$

και επομένως:

$$n_{12} = \frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2} = \left(\frac{E - V_2}{E - V_1}\right)^{1/2}$$



που δίνει την αλλαγή στην κατεύθυνση κίνησης των ηλεκτρονίων. Ας σημειωθεί ότι αν $V_1 > V_2$, δηλαδή αν η δύναμη που ασκείται πάνω στα ηλεκτρόνια από το μέσον 2 είναι ελκτική, τότε $n_{12} > 1$ και $\theta_1 > \theta_2$ καθώς και $\upsilon_2 > \upsilon_1$.

Αυτή η συμπεριφορά φαίνεται να είναι αντίθετη από εκείνην του φωτός, το οποίο, όταν $\theta_1 > \theta_2$, κινείται με μικρότερη ταχύτητα μέσα στο μέσον 2 από ότι στο μέσον 1. Θα πρέπει όμως να ληφθεί υπόψη ότι στον ορισμό του δείκτη διάθλασης ενός μέσου χρησιμοποιείται η φασική ταχύτητα του κύματος στο μέσον ($n=c/\upsilon_\varphi$) και ότι για τα σωματίδια $\upsilon_\varphi = c^2/\upsilon_g$ όπου υ_g είναι η ομαδική ή σωματιδιακή ταχύτητα. Με αυτόν τον ορισμό, φως και σωματίδια συμπεριφέρονται με τον ίδιο τρόπο. Με τον ορισμό του δείκτη διάθλασης ενός μέσου για τα ηλεκτρόνια ως $n=c/\upsilon_p$ (όπως για το φως), ισχύει ότι

$$n_{12} = \frac{\upsilon_{g1}}{\upsilon_{g2}} = \frac{\upsilon_{p1}}{\upsilon_{p2}} = \frac{n_2}{n_1} n \quad \text{και επομένως} \quad n_1 \sin\theta_1 = n_2 \sin\theta_2$$

που είναι ο γνωστός από την οπτική νόμος του Snell.

Συμπεριφορά ίδια με αυτήν που παρατηρείται στα σωματίδια είχε επικαλεσθεί ο Newton για να ερμηνεύσει τη διάθλαση του φωτός, το οποίο υπέθετε ότι αποτελείται από σωματίδια. Πειραματικός έλεγχος της υπόθεσης αυτής με τη μέτρηση της ταχύτητας του φωτός στα δύο μέσα δεν ήταν τότε δυνατός.

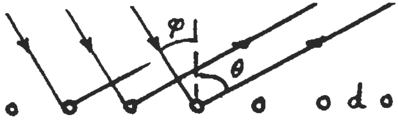
Παράδειγμα 1.5

Ο O.Stern μελέτησε τη σκέδαση ατόμων He από επιφάνεια κρυστάλλου LiF. Εστω ότι η δέσμη έχει γωνία πρόσπτωσης φ και γωνία ανάκλασης θ, ενώ η απόσταση μεταξύ των ατόμων στο επίπεδο της ανάκλασης είναι d. Να βρεθεί η σχέση που δίνει τις κατευθύνσεις στις οποίες η ένταση της ανακλωμένης δέσμης είναι μέγιστη.

Η διαφορά δρόμων μεταξύ διαδρομών για δύο γειτονικά άτομα θα είναι $d \cos(\pi/2 - \theta) - d \cos(\pi/2 - \varphi) = d (\sin\theta - \sin\varphi)$.

Ενισχυτική συμβολή έχουμε όταν αυτή είναι ίση με ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος λ δηλαδή

$d (\sin\theta - \sin\varphi) = n\lambda$.



Παράδειγμα 1.6

Στηριζόμενοι στην κλασική αντίληψη εντοπισμού ενός σωματιδίου σε ορθογώνιο δυναμικό βάθους - V_o και εύρους L και με βάση την αρχή της αβεβαιότητας, υπολογίστε την ελάχιστη τιμή του V_o (>0) για την οποία υπάρχει μία δέσμια κατάσταση στο δυναμικό:

Για αβεβαιότητα στη θέση ίση με $\Delta x \cong L$, η αβεβαιότητα στην ορμή είναι: $\Delta p \cong \hbar/L$, οπότε και η ορμή του σωματιδίου θα είναι της τάξης του $p \cong \Delta p \cong \hbar/L$.

Για να υπάρξει μια δέσμια κατάσταση, οριακά, θα πρέπει το V_o να είναι τέτοιο ώστε η ενέργεια E να είναι στο χείλος του πηγαδιού και αρνητική, δηλαδή $E \leq 0$.

Ετσι, είναι: $\dfrac{p^2}{2m} + V \leq 0$, δηλαδή $\dfrac{1}{2m}\left(\dfrac{\hbar}{L}\right)^2 - V \leq 0$

οπότε έχουμε $V \geq \dfrac{\hbar^2}{2mL^2}$ και η ελάχιστη τιμή θα είναι $V_{min} = \dfrac{\hbar^2}{2mL^2}$.

Η πλήρης κβαντική λύση του προβλήματος αποδεικνύει (εδάφιο 5.2) ότι πάντα υπάρχει μια δέσμια ενεργειακή κατάσταση ανεξάρτητα από το βάθος του δυναμικού. Η αιτία της διαφοράς αυτής είναι η παραδοχή για περιορισμό του σωματιδίου σε διαστάσεις L κατά την κλασική αντίληψη. Στην πραγματικότητα το σωματίδιο έχει ένα εύρος διείσδυσης αντίστοιχο με εκείνο της κλασικής κυματικής που εξαρτάται από το βάθος δυναμικού, μέσω του μήκους κύματος. Οσο μειώνεται το βάθος δυναμικού, μειώνεται ο κυματαριθμός και αυξάνει το μήκος κύματος. Με τον τρόπο αυτό το σωματίδιο "ξεχειλίζει" έξω από το δυναμικό σε διαστάσεις που συμφωνούν με την αρχή της απροσδιοριστίας.

ΠΡΟΒΛΗΜΑ

1.1 Φωτόνια μήκους κύματος λ πέφτουν σε μια λεπτή σχισμή πλάτους α. Πώς η αρχή της απροσδιοριστίας μας βοηθά να κάνουμε προβλέψεις για τη γωνιακή κατανομή των φωτονίων αφού αυτά περάσουν από τη σχισμή;

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Η ΝΕΑ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ

Παράδειγμα 2.1

Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου με ενέργεια Ε δίνεται από τη σχέση $\Psi(x,t) = 0$ για $x<0$ και $\Psi(x,t) = Ce^{-\alpha x}(1- e^{-\alpha x})\exp(-iEt/\hbar)$ για $x>0$ όπου α είναι μια γνωστή σταθερά.

Να προσδιοριστεί η τιμή της σταθεράς C. Σε ποιο σημείο είναι μέγιστη η πυκνότητα πιθανότητας για τη θέση του σωματιδίου;

Από την κανονικοποίηση προκύπτει ότι

$$\int_0^\infty |\Psi|^2 dx = C^2 \int e^{-2\alpha x}\left(1-e^{-\alpha x}\right)^2 dx = 1 \text{ και τελικά } C=\sqrt{12\alpha}\,.$$

Η πυκνότητα πιθανότητας $|\psi(x)|^2$ έχει μέγιστο όταν $\frac{d}{dx}|\psi(x)|^2 = 0$ δηλαδή για $x = 0$ ή $x = \ln 2/\alpha$.

Παράδειγμα 2.2

Σε μια περιοχή του χώρου (σε μια διάσταση), η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου με μηδενική ολική ενέργεια είναι: $\psi(x) = A\exp(-x^2/\alpha^2)$, όπου α είναι κάποια σταθερά. Ποια είναι η συνάρτηση V(x) της δυναμικής ενέργειας; Σχολιάστε το αποτέλεσμα.

Η εξίσωση του Schrödinger είναι: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi = 0$ όπου η ολική ενέργεια είναι $E = 0$.

Με αντικατάσταση της $\psi(x)$ στην εξίσωση του Schrodinger προκύπτει ότι:

$$V = -\frac{\hbar^2}{m\alpha^2}\left(1 - \frac{2x^2}{\alpha^2}\right) = -V_o + \frac{1}{2}\left(\frac{4\hbar^2}{m\alpha^4}\right)x^2$$

που είναι η δυναμική ενέργεια αρμονικού ταλαντωτή σταθεράς ελατηρίου ίσης με $k = 4\hbar^2/m\alpha^4$, δηλαδή γωνιακής συχνότητας $\omega = 2\hbar/m\alpha^2$.

Παράδειγμα 2.3

Για $\Psi(x,t) = C\exp(bx-ft)$ ποιές είναι οι τιμές της ορμής p, της ολικής ενέργειας E και της κινητικής ενέργειας K=p /2m;

Προσδιορίστε τις παραμέτρους b και f συναρτήσει των p και E.

Από τις εξισώσεις των τελεστών, προκύπτει ότι:

$$\hat{p}\Psi(x,t) = -i\hbar\frac{\partial}{xt}\Psi(x,t) = \hbar b\Psi(x,t) \quad \text{και επομένως} \quad p = \hbar b$$

$$\hat{E}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hbar f\Psi(x,t) \quad \text{και επομένως} \quad E = \hbar f$$

Από τη σχέση $K = p^2/2m$, προκύπτει ο τελεστής της κινητικής ενέργειας,

$$\hat{K} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad \text{Επομένως,}$$

$$\hat{K}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \frac{b^2\hbar^2}{2m}\Psi(x,t) \quad \text{και έτσι,} \quad K = \frac{b^2\hbar^2}{2m}$$

Από τις σχέσεις που βρέθηκαν, έχουμε:

$b = p/\hbar$, $f = E/\hbar$.

Παράδειγμα 2.4

Η κυματοσυνάρτηση ενός συστήματος που εκτελεί απλή αρμονική ταλάντωση με γωνιακή συχνότητα ω είναι της μορφής:

$\Psi(x,t)= Ae^{-\alpha^2 x^2} e^{-i(\omega/2)t}$ όπου A και $\alpha^2 = m\omega/2\hbar$ είναι σταθερές.

(a) Προσδιορίστε το A.

(b) Βρείτε τις μέσες τιμές της θέσης x, της ορμής p και της δυναμικής ενέργειας $V(x) = m\omega^2 x^2/2$.

Δίνονται: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-qx^2}dx = \sqrt{\pi/q}$ και $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-qx^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi/q^3}$ για $q>0$.

(a) Η κανονικοποίηση της $\Psi(x,t)$ δίνει:

$$1= \int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x,t)|^2dx = A^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha^2x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}A^2}{\sqrt{2}\alpha} \quad \text{και επομένως} \quad A = \sqrt{\alpha}\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4}.$$

(b) Οι μέσες τιμές είναι:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x,t)|^2 x dx =0 \qquad \langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi dx =0$$

$$\langle V\rangle = \left\langle\frac{m\omega^2x^2}{2}\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2\frac{m\omega^2x^2}{2}dx = \frac{\hbar\omega}{4}$$

Παράδειγμα 2.5

Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου είναι: $\psi(x)= A\exp(-|x|/x_o)$ (x_o θετική σταθερά).

Να προσδιοριστούν: Το A και οι μέσες τιμές $<x>$ και $<x^2>$.

Αν $(\Delta x)^2 = <x^2> - <x>^2$, να βρεθεί το (Δx) και η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε θέσεις μεταξύ $<x> - (\Delta x)$ και $<x> + (\Delta x)$ (δηλαδή να διαφέρει η συντεταγμένη x του σωματιδίου από τη μέση της τιμή $<x>$ κατά λιγότερο από μια τυπική της απόκλιση).

Από την κανονικοποίηση της $\psi(x)$:

$$1= \int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx =2A^2\int_{0}^{\infty}\exp(-2x/x_o)dx = x_oA^2 \qquad A =1/\sqrt{x_o}$$

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2 x dx =0$$

$$\langle x^2\rangle = \int|\psi|^2x^2dx =2A^2\int_{0}^{\infty}\exp(-2x/x_o)x^2dx =2A^2\frac{x_o^3}{4} = \frac{x_o^2}{2}$$

$$(\Delta x)^2= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle = x_o^2/2 \qquad \text{και} \qquad \Delta x = x_o/\sqrt{2}$$

$$P(-x_o/\sqrt{2},+x_o/\sqrt{2})= \int_{-x_o/\sqrt{2}}^{x_o/\sqrt{2}}|\psi|^2dx =1-\exp(-\sqrt{2})$$

Παράδειγμα 2.6

Ο μεταθέτης δύο τελεστών $\hat{A}$ και $\hat{B}$ ορίζεται ως: $\left[\hat{A},\hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$.

Να δειχθεί ότι: $\left[\hat{x},\hat{x}\right]=0$ $\quad\left[\hat{x},\hat{y}\right]=0$ $\quad\left[\hat{x},\hat{z}\right]=0$

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=i\hbar \qquad \left[\hat{x},\hat{p}_y\right]=0 \qquad \left[\hat{x},\hat{p}_z\right]=0$$

$$\left[\hat{p}_x,\hat{p}_x\right]=0 \qquad \left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right]=0 \qquad \left[\hat{p}_x,\hat{p}_z\right]=0$$

(και αντίστοιχες σχέσεις με κυκλική εναλλαγή $x\to y\to z\to x$).

Η δράση των μεταθετών σε μια γενική συνάρτηση $\Psi(x,y,z,t)$ δίνει:

$\left[\hat{x},\hat{y}\right]\Psi=\left(\hat{x}\hat{y}-\hat{y}\hat{x}\right)\Psi=(xy-yx)\Psi=0$ για κάθε Ψ.

Επομένως, $\left[\hat{x},\hat{y}\right]=0$. Ομοίως, $\left[\hat{x},\hat{x}\right]=0$ και $\left[\hat{x},\hat{z}\right]=0$.

Για τους τελεστές της ορμής,

$$\left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right]\Psi=\left(\hat{p}_x\hat{p}_y-\hat{p}_y\hat{p}_x\right)\Psi=\left(\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)-\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)\Psi=$$

$$=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}-\frac{\partial^2}{\partial y\partial x}\right)\Psi=0$$

Επομένως, $\left[\hat{p}_x,\hat{p}_x\right]=0$, καθώς και $\left[\hat{p}_x,\hat{p}_x\right]=0$ $\quad\left[\hat{p}_x,\hat{p}_z\right]=0$

Επίσης,

$$\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]\Psi=\left(x\hat{p}_y-\hat{p}_y x\right)\Psi=\left(x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)-\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)x\right)\Psi=-i\hbar\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial y}(x\Psi)\right)=0$$

Επομένως, $\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]=0$, και $\left[\hat{x},\hat{p}_z\right]=0$.

Επίσης,

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\Psi=\left(x\hat{p}_x-\hat{p}_x x\right)\Psi=\left(x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)-\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\right)\Psi=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}x\right)\Psi=$$

$$=-i\hbar\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\right)=-i\hbar\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial x}-x\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\right)=i\hbar\Psi$$, για κάθε $\Psi(x,y,z,t)$.

και επομένως, $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=i\hbar$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΣΤΑΣΙΜΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΚΑΙ ΣΚΕΔΑΣΗ ΑΠΟ ΔΥΝΑΜΙΚΟ

Παράδειγμα 3.1

Δίνεται το δυναμικό:

$V(x) = 0$ για $x < 0$ (περιοχή I)

$V(x) = V_o$ για $x > 0$. (περιοχή II).

Ποιά μαθηματική μορφή έχει η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ στις περιοχές I και II για σωματίδιο που έχει ενέργεια (α) $E > V_o$ και (β) $E < V_o$;

(α) Η κυματοσυνάρτηση του κινούμενου σωματιδίου θα έχει την μορφή:

Για $x < 0$ $\Psi_I(x,t) = \left(Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}\right)e^{-i\omega t} = Ae^{i(k_1x-\omega t)} + Be^{-i(k_1x+\omega t)}$

όπου $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ και

για $x > 0$ $\Psi_{II}(x,t) = \left(Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}\right)e^{-i\omega t} = Ce^{i(k_2x-\omega t)} + De^{-i(k_2x+\omega t)}$

όπου $k_2 = \sqrt{2m\left(E - V_o\right)/\hbar^2}$.

(β) Στην περίπτωση που $E < V_o$, **τότε το k_2 θα πάρει μιγαδικές τιμές στην** παραπάνω σχέση. Εστω ότι $k_3 = \sqrt{2m(V_o - E)/\hbar^2}$. Τότε,

για $x > 0$ $\quad \Psi_{II}(x,t) = \left(Ce^{k_3 x} + De^{-k_3 x}\right)e^{-i\omega t}$.

Παράδειγμα 3.2

Ηλεκτρόνιο κινείται μέσα σε μονοδιάστατο κουτί μήκους L, και βρίσκεται στη βασική του κατάσταση. Αν με κάποια διαδικασία το μήκος L διπλασιαστεί, σε ποιά κατάσταση (n') η ενέργεια του ηλεκτρονίου θα είναι ίση με την αρχική του;

Η ενέργεια του ηλεκτρονίου δίνεται από την σχέση 3.6:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2} E \ (n=1,2,3,...).$$

Αν διπλασιασιαστεί το μήκος L σε 2L, τότε $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8mL^2}$ και $E'_n = E_1$ για n' = 2n.

Παράδειγμα 3.3

Η δυναμική ενέργεια σωματιδίου μάζας m είναι:

$$V(x) = \infty \quad \text{για} \quad x < 0$$
$$= 0 \quad \text{για} \quad 0 \le x \le \alpha$$
$$= V_o \quad \text{για} \quad x > \alpha$$

όπου V_o είναι μια θετική σταθερά.

(α) Να βρεθούν οι επιτρεπόμενες ενεργειακές στάθμες του σωματιδίου στις δέσμιες καταστάσεις και οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις.

(β) Ποιος είναι ο λόγος της πιθανότητας να βρεθεί το σωματίδιο στην περιοχή $0<x<\alpha$ προς την πιθανότητα να βρεθεί στην περιοχή $x>\alpha$;

(γ) Ποιες είναι οι τιμές του πλάτους α για τις οποίες μια από τις επιτρεπτές ενεργειακές στάθμες είναι η $E = V_o/2$;

(α) Για $x<0$ $\quad \psi_1(x) = 0$

Για $0 \le x \le \alpha$ $\quad \psi_2(x) = A \sin kx + B \cos kx$ $\quad$ με $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$,

και επειδή $\psi_2(0)=0$, πρέπει να είναι $B=0$ και $\psi_2(x) = A \sin kx$.

Για $x > \alpha$ $\quad \psi_3(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$ $\quad$ όπου $\kappa = (2m(V_o - E)/\hbar^2)^{1/2}$

και επειδή η $\psi_3(x)$ πρέπει να είναι πεπερασμένη και για $x \to \infty$, έπεται ότι $D=0$ και $\psi_3(x) = Ce^{-\kappa x}$.

Από τη συνέχεια της ψ και της $d\psi/dx$ στο $x = \alpha$ έπεται ότι

$$A \sin k\alpha = C e^{-\kappa\alpha} \quad \text{και} \quad kA \cos k\alpha = -\kappa C e^{-\kappa\alpha}.$$

Ο λόγος των δύο σχέσεων δίνει: $\quad k \cot k\alpha = -\kappa$

από την οποία βρίσκονται οι επιτρεπόμενες ενέργειες E_n, τα αντίστοιχα k και κ, και οι κυματοσυναρτήσεις.

(β) Για να βρούμε το λόγο των πιθανοτήτων υποθέτουμε ότι έχουμε βρει τις τιμές των A και C που κανονικοποιούν τις κυματοσυναρτήσεις $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$.

Η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην περιοχή $0 \le x \le \alpha$ είναι:

$$P_2 = \int_0^a |\psi_2|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 kx dx = \frac{A^2}{2}\left(a - \frac{1}{2k}\sin 2ka\right)$$

Η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην περιοχή $x \ge \alpha$ είναι:

$$P_3 = \int_0^a |\psi_3|^2 dx = C^2 \int_a^\infty e^{-2\kappa x} dx = \frac{C^2}{2\kappa} e^{-2\kappa a} = \frac{A^2}{2\kappa}\sin^2 ka$$

Ο λόγος των πιθανοτήτων είναι:

$$\frac{P_2}{P_3} = \frac{1}{\sin^2 ka}\left(\kappa a - \frac{\kappa}{2k}\sin 2ka\right) = \frac{\kappa a}{\sin^2 ka} - \frac{\kappa}{k}\cot ka$$

Επειδή $\cot k\alpha = -\kappa/k$, $\dfrac{1}{\sin^2 ka} = 1 + \cot^2 ka = 1 + \dfrac{\kappa^2}{k^2}$, και $\dfrac{\kappa^2}{k^2} = \dfrac{V_o}{E} - 1$ θα είναι:

$$\frac{P_2}{P_3} = \kappa a\left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2}\right) + \frac{\kappa^2}{k^2} = \frac{aV_o}{\hbar E}\sqrt{2m(V_o - E)} + \frac{V_o}{E} - 1$$

Ο λόγος των πιθανοτήτων έχει διαφορετική τιμή για κάθε μια από τις επιτρεπόμενες ενέργειες E.

(γ) Για $E = V_o/2$ έχουμε $\kappa/k = 1$ και επομένως $\tan k\alpha = -1$.

Οι λύσεις αυτής της εξίσωσης είναι: $k\alpha = 3\pi/4, 7\pi/4, 11\pi/4, \ldots$ ή

$\alpha_n = \left(n - \dfrac{1}{4}\right)\dfrac{\pi}{k}$ και τελικά, $\alpha_n = \left(n - \dfrac{1}{4}\right)\dfrac{\pi\hbar}{\sqrt{mV_o}}$.

Παράδειγμα 3.4

Για τον κλασικό απλό αρμονικό ταλαντωτή που κινείται πάνω στον άξονα x και έχει πλάτος α, να αποδειχθεί ότι η πυκνότητα πιθανότητας για τη θέση του είναι

$$P_{κλ}(x)=\frac{1}{\pi\left(a^2-x^2\right)^{1/2}}$$

Να βρεθούν οι πυκνότητες πιθανότητας για τον κβαντομηχανικό απλό αρμονικό ταλαντωτή στην πρώτη διεγερμένη ενεργειακή κατάσταση που εκφράζεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi_1(x) = A\frac{x}{x_o}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{x^2}{x_o^2}\right)$$

Να σχεδιαστούν οι πυκνότητες πιθανότητας στις δύο περιπτώσεις, να συγκριθούν, και να σχολιαστούν οι διαφορές τους.

Η κλασική πιθανότητα να βρεθεί ο ταλαντωτής μεταξύ x και x+dx είναι ίση με τον λόγο του ολικού χρόνου 2dt που δαπανά ο ταλαντωτής στο διάστημα αυτό σε κάθε πλήρη ταλάντωση, προς την περίοδο T=2π/ω της ταλάντωσης. Συγκεκριμένα,

$$P_{\kappa\lambda}(x)dx = 2\frac{dt}{T} = 2\frac{\omega}{2\pi}\frac{dx}{|\upsilon|} = \frac{\omega}{\pi}\frac{dx}{|\upsilon|}$$

όπου $\upsilon(x) = dx/dt$ είναι η ταχύτητα του ταλαντωτή στη θέση x.

Η μετατόπιση δίνεται από τη σχέση $x(t) = \alpha \sin\omega t$ όπου α είναι το πλάτος της ταλάντωσης. Η ταχύτητα είναι:

$$\upsilon(t) = \alpha\omega\cos\omega t \quad \text{και} \quad |\upsilon(x)| = a\omega\sqrt{1-\sin^2\omega t} = \omega\left(a^2 - x^2\right)^{1/2}$$

Ετσι, $P_{\kappa\lambda}(x) = \dfrac{1}{\pi\left(a^2 - x^2\right)^{1/2}}$.

Η $P_{\kappa\lambda}(x)$ είναι κανονικοποιημένη γιατί $\int_{-a}^{a} P_{\kappa\lambda}(x)dx = 1$.

Για τον κβαντομηχανικό αρμονικό ταλαντωτή στην πρώτη του διεγερμένη ενεργειακή κατάσταση, η πυκνότητα πιθανότητας είναι:

$$P_{\kappa\beta}(x) = |\psi_1(x)|^2 = A^2\left(\frac{x}{x_o}\right)^2 \exp\left(-x^2/x_o^2\right)$$

Η σταθερά Α βρίσκεται από την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_1(x)|^2 dx = A^2\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{x}{x_o}\right)^2 \exp\left(-x^2/x_o^2\right)dx = 1,$$

από την οποία βρίσκουμε: $A = \left(\dfrac{2}{x_o\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$. Επομένως,

$$\psi_1(x) = \left(\frac{2}{x_o\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\frac{x}{x_o}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{x^2}{x_o^2}\right)$$

και η κβαντομηχανική πυκνότητα πιθανότητας για την κατάσταση ψ (x) είναι:

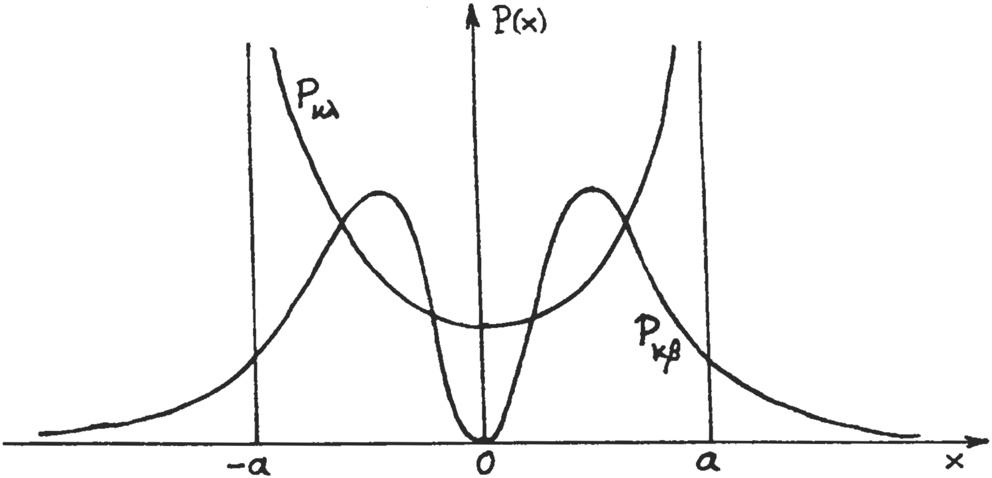
$$P_{\kappa\beta} = \frac{2}{x_o\sqrt{\pi}}\left(\frac{x}{x_o}\right)^2 \exp\left(-\frac{x^2}{x_o^2}\right).$$

Οι δύο πυκνότητες πιθανότητας είναι συμμετρικές ως προς το σημείο x = 0.

Η κλασική πυκνότητα πιθανότητας ορίζεται μόνο μεταξύ x = - α και x = α. Εχει ελάχιστο, ίσο με 1/πα, στο σημείο x = 0. Απειρίζεται στα σημεία x = ± α.

Η κβαντική πυκνότητα πιθανότητας είναι παντού διάφορη του μηδενός, εκτός από τα σημεία x = 0 και x = ± ∞. Εχει μέγιστα στα σημεία $x = x_o = \pm\alpha/\sqrt{3}$, όπου α είναι το κλασικό πλάτος της ταλάντωσης για την ενέργεια $E_1 = 3\hbar\omega/2$ της κατάστασης $\psi_1(x)$. Από την σχέση $E = m\omega^2\alpha^2 = 3\hbar\omega/2$ προκύπτει ότι

$\alpha = \pm\sqrt{3}\sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$. Η κβαντομηχανική προβλέπει ότι ο ταλαντωτής μπορεί να βρεθεί και στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή.



Παράδειγμα 3.5

Ενα σωματίδιο κινείται μέσα στο ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο που ορίζεται από τις σχέσεις: $0 < x < L_1$ $0 < y < L_2$ $0 < z < L_3$.

Μέσα στο παραλληλεπίπεδο η δυναμική ενέργεια του σωματιδίου είναι ίση με μηδέν, ενώ έξω από αυτό είναι άπειρη.

(α) Με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών, να βρεθούν οι κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις του σωματιδίου, αν υποτεθεί ότι αυτές είναι της μορφής: $\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\cdot\psi_2(y)\cdot\psi_3(z)$.
(β) Να αποδειχθεί ότι οι επιτρεπόμενες ενέργειες του σωματιδίου δίνονται από τη σχέση:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{n_1}{L_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{L_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{L_3}\right)^2\right\} \quad (n_1, n_2, n_3 = 1,2,3,4,...).$$

(γ) Για την περίπτωση $L_1 = L_2 = L_3 = L$ (κυβικό κουτί), να βρεθούν οι δυνατές ενέργειες του σωματιδίου για n_1, n_2, $n_3 \leq 2$. Να σχολιαστούν τα αποτελέσματα.

(α,β) Ψάχνοντας για λύση με χωριζόμενες μεταβλητές $\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\cdot\psi_2(y)\cdot\psi_3(z)$ η εξίσωση του Schrödinger ανάγεται στη μορφή

$$\frac{1}{\Psi}\nabla^2\Psi + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{1}{\Psi_1}\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{1}{\Psi_2}\frac{d^2\Psi_2}{dy^2} + \frac{1}{\Psi_3}\frac{d^2\Psi_3}{dz^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

Επειδή οι τρεις όροι είναι συναρτήσεις διαφορετικών και ανεξάρτητων μεταβλητών, θα πρέπει ο καθένας από αυτούς να είναι ίσος με μια σταθερά. Ετσι, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι

$$\frac{1}{\Psi_1}\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} = -k_1^2$$

$$\frac{1}{\Psi_2}\frac{d^2\Psi_2}{dy^2} = -k_2^2$$

$$\frac{1}{\Psi_3}\frac{d^2\Psi_3}{dz^2} = -k_3^2$$

όπου οι k_1, k_2 και k_3 είναι σταθερές και από την εξίσωση του Schrödinger προκύπτει ότι:

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{και} \quad E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_1^2 + k_2^2 + k_3^2\right)$$

Οι λύσεις των παραπάνω εξισώσεων, κατά τα γνωστά, είναι οι ακόλουθες:

$\psi_1(x) = A\cos k_1x + B\sin k_1x$

$\psi_2(y) = C\cos k_2y + D\sin k_2y$

$\psi_3(z) = F\cos k_3z + G\sin k_3z$.

Από τις οριακές συνθήκες στα άκρα των τοιχωμάτων ($\psi(x,y,z)= 0$ λόγω συνέχειας της ψ με την εξωτερική περιοχή όπου $V= \infty$) καταλήγουμε στις συνθήκες,

Από $\psi_1(0) = \psi_2(0) = \psi_3(0) = 0$ έπεται ότι $A = C = F = 0$

Από $\psi_1(L_1) = \psi_2(L_2) = \psi_3(L_3) = 0$ έπεται ότι

$\sin k_1L_1 = 0$ ή $k_1 = \frac{n_1\pi}{L_1}$ $(n_1=1,2,3,...)$ και

$\sin k_2L_2 = 0$ ή $k_2 = \frac{n_2\pi}{L_2}$ $(n_2=1,2,3,...)$ και

$\sin k_3L_3 = 0$ ή $k_3 = \frac{n_3\pi}{L_3}$ $(n_3=1,2,3,...)$.

Από τις σχέσεις αυτές έπεται ότι η ενέργεια θα είναι

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{n_1}{L_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{L_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{L_3}\right)^2\right\} \quad (n_1, n_2, n_3 = 1,2,3,4,\ldots).$$

Η κανονικοποίηση των κυματοσυναρτήσεων υπαγορεύει τη συνθήκη

$$\int_V |\psi(x,y,z)|^2 dV = 1 \,. \quad \text{Επομένως,}$$

$$\int_0^{L_3} dz \int_0^{L_2} dy \int_0^{L_1} |\psi_1(x)\cdot \psi_2(y)\cdot \psi_3(z)|^2 dx = 1 \,.$$

Μετά την κανονικοποίηση των κυματοσυναρτήσεων, βρίσκουμε ότι

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{2}{V}}\sin\left(\frac{n_1\pi x}{L_1}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi y}{L_2}\right)\sin\left(\frac{n_3\pi z}{L_3}\right) \quad \text{όπου} \quad V = L_1L_2L_3 \,.$$

(γ) Για κυβικό κουτί, $L_1 = L_2 = L_3 = L$ και επομένως οι ενέργειες είναι:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\left\{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right\} \qquad (n_1, n_2, n_3 = 1,2,3,4,\ldots).$$

Οι ενέργειες που αντιστοιχούν στους κβαντικούς αριθμούς $n_1, n_2, n_3 \leq 2$ είναι, (σε μονάδες $\hbar^2/2mL^2$):

n_1	n_2	n_3	$\dfrac{E_{n_1,n_2,n_3}}{\hbar^2/2mL^2}$
1	1	1	3
1	1	2	6
1	2	1	6
1	2	2	9
2	1	1	6
2	1	2	9
2	2	1	9
2	2	2	12

Παρατηρείται ότι το σύστημα έχει μία κατάσταση με ενέργεια $3\times(\hbar^2/8mL^2)$, τρεις καταστάσεις με ενέργεια $6\times(\hbar^2/2mL^2)$ και τρεις καταστάσεις με ενέργεια $9\times(\hbar^2/2mL^2)$ και **μία κατάσταση** με ενέργεια $12\times(\hbar^2/2mL^2)$. Η πολλαπλότητα καταστάσεων με την ίδια ενέργεια ονομάζεται **εκφυλισμός**.

Παράδειγμα 3.6

Υπολογίστε την ενέργεια της δέσμιας κατάστασης στο δυναμικό $V(x) = -\lambda\,\delta(x)$ όπου $\lambda>0$ και $\delta(x)$ είναι η συνάρτηση δ του Dirac.

Η εξίσωση του Schrödinger στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \lambda\delta(x)\psi = E\psi$$

Επειδή η συνάρτηση $\delta(x)$ είναι ίση με 0 παντού εκτός από μια απειροστή περιοχή γύρω από το σημείο $x = 0$, το σωματίδιο θα είναι δέσμιο στη θέση $x = 0$. όπου η δυναμική του ενέργεια είναι αρνητική. Θα πρέπει επίσης και η ολική του ενέργεια να είναι $E<0$. Εστω ότι $E = -|E|$.

Εστω ότι η συνάρτηση $\delta(x)$ είναι διάφορη του μηδενός σε μια περιοχή μεταξύ $-\varepsilon$ και ε, όπου στο όριο $\varepsilon \to 0$. Ολοκληρώνουμε την εξίσωση του Schrodinger από $-\varepsilon$ έως ε,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi''dx - \lambda\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\psi(x)dx = E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)dx$$

Επειδή για $\varepsilon \to 0$ είναι $\lambda\,\delta(x) >> E$, το ολοκλήρωμα στα δεξιά μπορεί να αγνοηθεί σε σύγκριση με το $\lambda\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\psi(x)dx$. Αυτό δε το ολοκλήρωμα, σύμφωνα με τις ιδιότητες της συνάρτησης δ είναι ίσο με $\lambda\,\psi(0)$. Ετσι,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)\right]-\lambda\psi(0)=0 \qquad \text{για} \qquad \varepsilon\to 0\,.$$

Επομένως,

$$\psi'(0+) - \psi'(0-) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0) \qquad \text{στην περιοχή του } x=0.$$

Για $x \neq 0$, είναι $\delta(x) = 0$ και η εξίσωση του Schrödinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)= -|E|\psi(x)$$

της οποίας η λύση είναι

$$\psi(x) = A\,e^{kx} + B\,e^{-kx} \qquad \text{όπου} \quad k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}.$$

Η $\psi(x)$ πρέπει να είναι πεπερασμένη για $x \to \pm\infty$ και έτσι

για $x < 0$ $\quad B = 0 \quad$ και $\quad \psi_1(x) = A\,e^{kx}$

για $x>0$ $\quad A = 0 \quad$ και $\quad \psi_2(x) = B\,e^{-kx}$.

Ομως $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ και επομένως $A = B$.

Στην περιοχή του $x=0$, οι κυματοσυναρτήσεις θα πρέπει να ικανοποιούν τη συνθήκη $\psi'(0+) - \psi'(0-) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)$ που βρέθηκε πιο πάνω. Επομένως,

$$\psi'(0+) - \psi'(0-) = -2Ak = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}A \quad \text{ή} \quad k = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$$

και οι ενέργεια της δέσμιας κατάστασης είναι $|E| = \dfrac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$.

Η σταθερά A υπολογίζεται από την κανονικοποίηση,

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx = |A|^2\int_{-\infty}^{0}e^{kx}dx + |A|^2\int_{0}^{\infty}e^{-kx}dx = 2\frac{|A|^2}{k} = 1$$

και $|A| = \sqrt{k/2} = \dfrac{\sqrt{m\lambda/2}}{\hbar}$ η δε κυματοσυνάρτηση είναι

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\lambda/2}}{\hbar}\exp\left(-\frac{m\lambda}{\hbar^2}|x|\right) \qquad (-\infty < x < \infty).$$

ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ

3.1 Σωματίδιο ενέργειας $E > 0$, κινούμενο προς τα θετικά x, συναντά το δυναμικό:

$$V(x) = 0 \quad \text{για } x < 0 \text{ και για } x > \alpha$$
$$= - V_o \quad \text{για } 0 < x < \alpha.$$

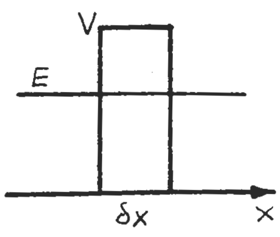
Να βρεθεί ο συντελεστής ανάκλασης και ο συντελεστής μετάδοσης του σωματιδίου.

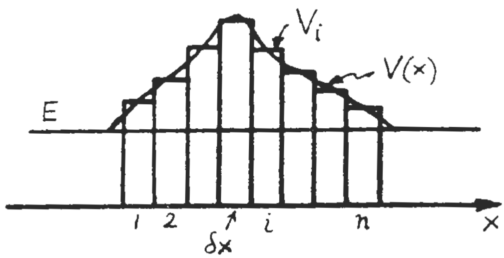
3.2 Να βρεθεί ο συντελεστής ανάκλασης για σωματίδιο μάζας m και ενέργειας E που συναντά δυναμικό $V(x) = \lambda \cdot \delta(x)$, όπου $\delta(x)$ είναι η συνάρτηση δ του Dirac.

Σημ.: Η συνάρτηση $\delta(x)$ μπορεί να θεωρηθεί και ως το όριο μιας συνάρτησης τετραγωνικής μορφής, με πλάτος ε και ύψος $1/\varepsilon$ όταν $\varepsilon \to 0$, δηλαδή : $\delta(x) = 0$ για $x < 0$, $\delta(x) = 1/\varepsilon$ για $0 < x < \varepsilon$, $\delta(x) = 0$ για $x > \varepsilon$, στο όριο $\varepsilon \to 0$.

(Απ.: Συντελεστής ανάκλασης $= \lambda^2 /[\lambda^2 + 2E\hbar^2 /m]$)

3.3 Ενα σωματίδιο που προσπίπτει σε τετραγωνικό φράγμα δυναμικού, ύψους $V_o > E$ και πλάτους δx, έχει πιθανότητα διέλευσης περίπου ίση με
$P = C \exp(-2\kappa\delta x)$ όπου $C =$ σταθ. και $\kappa = \sqrt{2m(V_o - E)} / \hbar$, (Εξ.(3.95)).





Αν το φράγμα δυναμικού έχει το γενικό σχήμα V(x), υποθέτοντας ότι αυτό αποτελείται από n διαδοχικά τετραγωνικά φράγματα πλάτους δx και ύψους V_i για i = 1, 2, ...n (βλ. σχήμα), υπολογίστε την πιθανότητα διέλευσης του σωματιδίου μέσα από το φράγμα, Εξ.(3.96).

3.4 Εστω αρμονικός ταλαντωτής σε δύο διαστάσεις, τις x και y, του οποίου η δυναμική ενέργεια δίνεται από τη σχέση $V(x,y) = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2)$.

(α) Υποθέστε λύσεις της μορφής $\psi(x,y) = u(x) \cdot v(y)$ και με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών βρείτε τις διαφορικές εξισώσεις για τις u(x) και v(y).
(β) Δείξετε ότι με τις ταλαντώσεις κατά μήκος των αξόνων x και y σχετίζονται, αντίστοιχα, ενέργειες $E_q = (q+½)\,\hbar\omega$ και $E_r = (r+½)\,\hbar\omega$ (q,r=0,1,2,...), στις οποίες και αντιστοιχούν οι συναρτήσεις $u_q(x)$ και $v_r(y)$. Αποδείξετε επίσης ότι οι ενεργειακές στάθμες του ταλαντωτή είναι $E = (q+r+1)\,\hbar\omega$.
(γ) Γράψετε τις λύσεις $\psi_{qr}(x,y)$ για q = 0, 1 και r = 0, 1. Παρατηρείται εκφυλισμός;

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

Παράδειγμα 4.1

Η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου στη θεμελιώδη στάθμη του ατόμου του υδρογόνου είναι ανεξάρτητη των γωνιών θ και φ και δίνεται από τη σχέση:

$$\psi = \frac{e^{-r/a_o}}{\left(\pi a_o^3\right)^{1/2}}$$ όπου r είναι η απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα.

(α) Ποια είναι η μέση τιμή της απόστασης r;

(β) Ποιά είναι η πιο πιθανή τιμή της απόστασης r;

Δίνεται ότι : $\int_0^\infty r^3 e^{-kr} dr = \frac{6}{k^4}$.

(α) Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε απόσταση μεταξύ r και r+dr από το κέντρο είναι

$P(r)dr = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$ και επομένως η μέση τιμή του r είναι

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty |\psi|^2 r\, 4\pi r^2 dr = \frac{3a}{2}.$$

(β) Η πιό πιθανή απόσταση προκύπτει από τη συνθήκη

$$\frac{dP}{dr} = 0 \qquad \text{ή} \qquad \frac{d}{dr}\left(r^2 e^{-2r/a}\right) = \left(2r - \frac{2}{a} r^2\right) e^{-2r/a_o} = 0$$

η οποία δίνει ως πιο πιθανή απόσταση την $r = a_o$.

Παράδειγμα 4.2

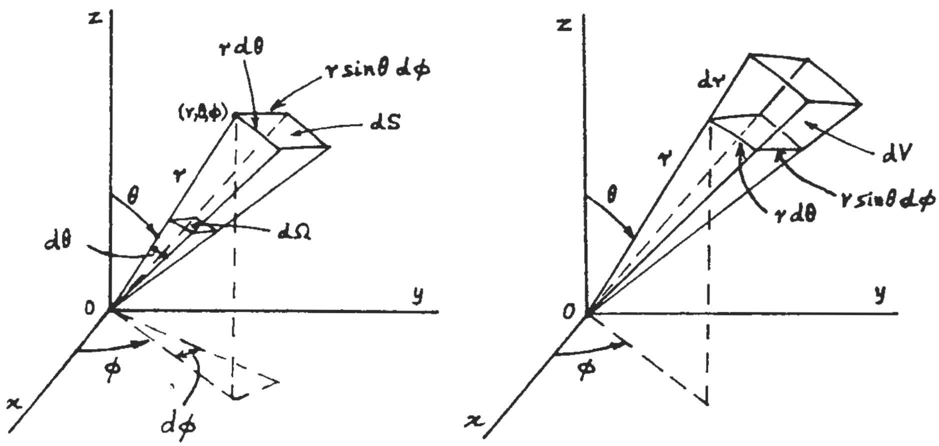
Να υπολογιστεί η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο του ατόμου του υδρογόνου σε αποστάσεις από τον πυρήνα μεταξύ r και r+dr.

Η γενική λύση είναι: $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_\ell^m(\theta,\varphi)$

Η πυκνότητα πιθανότητας (ανά μονάδα όγκου) είναι: $\left|\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)\right|^2$

Σε σφαιρικές πολικές συντεταγμένες, το στοιχείο όγκου το οποίο περικλείεται από τις τιμές θ μέχρι θ+dθ, φ μέχρι φ+dφ και r μέχρι r+dr (Σχ.4.2) είναι:

$$dV = r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \, dr. \qquad (4.40)$$



$$dS = r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \qquad d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \qquad dV = r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dr$$

Σχ.4.2 Τα στοιχεία επιφάνειας, dS, στερεάς γωνίας, dΩ, και όγκου, dV, σε σφαιρικές πολικές συντεταγμένες.

Επομένως, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε σημεία με συντεταγμένες μεταξύ θ και θ+dθ, φ και φ+dφ και r και r+dr είναι:

$$d^3P(r,\theta,\varphi) = \left|\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)\right|^2 dV = \left|R_{n\ell}(r)\right|^2 \left|Y_\ell^m(\theta,\varphi)\right|^2 r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dr \tag{4.41}$$

Ολοκληρώνοντας ως προς φ μεταξύ 0 και 2π και ως προς θ μεταξύ 0 και π, έχουμε την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε αποστάσεις μεταξύ r και r+dr

$$dP(r) = r^2 \left|R_{n\ell}(r)\right|^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \left|Y_\ell^m(\theta,\varphi)\right|^2 d\varphi \tag{4.42}$$

Επειδή $\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} \left|Y_\ell^m(\theta,\varphi)\right|^2 d\varphi = 1$, έπεται ότι

$$dP(r) = r^2 \left|R_{n\ell}(r)\right|^2 dr \tag{4.43}$$

Για παράδειγμα, για την $\psi_{211}(r,\theta,\varphi) = R_{21}(r)\, Y_1^1(\theta,\varphi)$,

$$dP(r) = r^2 \left|R_{21}(r)\right|^2 dr = \frac{1}{24}\left(\frac{r}{a_o}\right)^4 \exp\left(-\frac{r}{a_o}\right) d\left(\frac{r}{a_o}\right) \tag{4.44}$$

για την οποία πράγματι ισχύει:

$$\int dP(r) = \frac{1}{24}\int_0^{\infty}\left(\frac{r}{a_o}\right)^4 \exp\left(-\frac{r}{a_o}\right) d\left(\frac{r}{a_o}\right) = 1 \tag{4.45}$$

Παράδειγμα 4.3

Να βρεθούν οι ιδιοτιμές του τετραγώνου της στροφορμής, L^2 , και της προβολής της στροφορμής σε άξονα, L_z.

Οι εξισώσεις ιδιοτιμών για τα δύο μεγέθη είναι:

$$\hat{L}^2\psi_L = L^2\psi_L \tag{4.53}$$

$$\hat{L}_z\psi_{Lz} = L_z\psi_{Lz} \tag{4.54}$$

όπου ψ_L και ψ_{Lz} είναι ιδιοσυναρτήσεις των L και L_z αντίστοιχα.

Οι τελεστές $\hat{L}_z$ και $\hat{L}^2$ θα βρεθούν σύμφωνα, με όσα αναφέρθηκαν στο Κεφ.4, από τους κλασικούς ορισμούς των δύο μεγεθών. Συγκεκριμένα, από τον ορισμό της στροφορμής,

$$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p} \tag{4.55}$$

προκύπτουν οι συνιστώσες της στροφορμής και οι αντίστοιχοι τελεστές:

$$L_x = y\,p_z - z\,p_y \qquad \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \tag{4.56}$$

$$L_y = z\,p_x - x\,p_z \qquad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \tag{4.57}$$

$$L_z = x\,p_y - y\,p_x \qquad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \tag{4.58}$$

Επειδή: $\hat{x} = x \qquad \hat{y} = y \qquad \hat{z} = z$

και $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $\quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ $\quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$ έπεται ότι

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{4.59}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{4.60}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{4.61}$$

Από τον κανόνα παραγώγισης $\quad \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi}$

και τις αντίστοιχες παραστάσεις για τα x και y, καθώς και τις σχέσεις

$$x = r\sin\theta\cos\varphi \quad y = r\sin\theta\sin\varphi \quad z = r\cos\theta$$

βρίσκουμε ότι

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{4.62}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{4.63}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{4.64}$$

και τελικά, επειδή $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, έχουμε

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{4.65}$$

Οι (4.53) και (4.65) δίνουν:

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi_L = L^2\psi_L \tag{4.66}$$

Ομως, από την (4.11),

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi) = \lambda\hbar^2 Y(\theta,\varphi)$$

όπου $\lambda = \ell(\ell+1)$. Σύγκριση αυτής της εξίσωσης με την (4.66) δείχνει ότι η $Y(\theta,\varphi)$ είναι ιδιοσυνάρτηση της L^2, με ιδιοτιμές τις $L^2 = \hbar^2\ell(\ell+1)$ σε συμφωνία με την (4.51).

Για την L_z, με $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ έχουμε

$$\hat{L}_z Y(\theta,\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Y(\theta,\varphi) \tag{4.67}$$

ή, απλοποιόντας την $\Theta(\theta)$,

$$\hat{L}_z\Phi(\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi(\varphi) \tag{4.68}$$

Ομως, η (4.21) δίνει $\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$ (m=0,±1,±2,...±l)

και επομένως, $L_z\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$

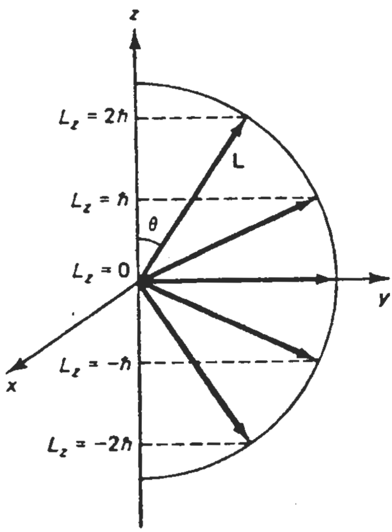
και τελικά: $L_z=\hbar m$ (m=0,±1,±2,...±l) (4.69)
όπως έχει ήδη αναφερθεί.

Οι Y(θ,φ) και Φ(φ) είναι επομένως ιδιοσυναρτήσεις της L_z, με ιδιοτιμές $\hbar m$.

Οι διάφοροι προσανατολισμοί του διανύσματος της στροφορμης **L** (το οποίον έχει μέτρο $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$) ώστε η προβολή του στον άξονα z να είναι ίση με $L_z=\hbar m$ με (m=0,±1,±2,...±l), φαίνονται στο Σχ.4.3. Αυτό υποδηλώνει ότι αν μετρηθεί το μέτρο της στροφορμής και βρεθεί ίσο με $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ για κάποια τιμή του ℓ, τότε μια επόμενη μέτρηση της προβολής της στροφορμής σε κάποιο άξονα (π.χ. τον z), δεν μπορεί παρά να δώσει κάποια από τις τιμές της 4.69.

Αποδεικνύεται (κοιτάξτε και το παράδειγμα 4.7), ότι αυτή είναι η μέγιστη πληροφορία που μπορούμε να έχουμε για την στροφορμή. Κάθε προσπάθεια μέτρησης κάποιας άλλης συνιστώσας (π.χ. L_x) θα αλλοιώσει την τιμή της L_z και το σύστημα θα βρεθεί σε μια νέα κατάσταση που θα περιγράφεται από τις τιμές της συνολικής στροφορμής L και της συνιστώσας L_x. Ετσι το L_z θα είναι απροσδιόριστο.

Μια απλουστευτική αναπαράσταση από την κλασική φυσική είναι εκείνη του στρόβου που περιστρέφεται γύρω από τον εαυτό του με κάποια στροφορμή L και μεταπίπτει γύρω από κάποιο άξονα z υπό την επίδραση του βαρυτικού πεδίου (προβολή στροφορμής L_z), έχοντας μη-ορισμένες τις άλλες δύο τιμές της στροφορμής L_x και L_y.



Σχ.4.3 Οι δυνατοί προσανατολισμοί του διανύσματος της στροφορμής **L** και οι αντίστοιχες προβολές του στον άξονα z, L_z, για $\ell=2$, για το οποίο είναι $|\vec{L}|=\sqrt{6}\hbar$.

Παράδειγμα 4.4

Ποια είναι η διαφορά στις ενέργειες ιονισμού του υδρογόνου και του ισοτόπου του, του δευτερίου;

Τα δύο άτομα διαφέρουν μόνο ως προς τη μάζα του πυρήνα τους. Αυτή επηρεάζει τις ενέργειες του ηλεκτρονίου μόνο μέσω της ανηγμένης μάζας του συστήματος ηλεκτρονίου-πυρήνα. Ετσι, οι ενέργειες δίνονται από τη σχέση

$$E_n = -\frac{k^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}\mu$$

η δε ανηγμένη μάζα μ είναι $\mu = \dfrac{Mm}{M+m}$

όπου m και M είναι οι μάζες του ηλεκτρονίου και του πυρήνα αντίστοιχα. Η μάζα του πρωτονίου είναι περίπου ίση με 1836 φορές τη μάζα του ηλεκτρονίου. Η μάζα του νετρονίου είναι λίγο μεγαλύτερη από αυτήν, και του πυρήνα του δευτερίου, που αποτελείται από ένα πρωτόνιο και ένα νετρόνιο, μπορεί να ληφθεί ως ίση με 3672 ηλεκτρονικές μάζες περίπου.

Η ενέργεια ιονισμού βρίσκεται για n = 1 και είναι περίπου ίση με E = 13,6 eV για το υδρογόνο (H) και το δευτέριο (D) σε πρώτη προσέγγιση. Ο λόγος των δύο ενεργειών ιονισμού είναι ίσος με

$$\frac{E_H}{E_D} = \frac{\mu(H)}{\mu(D)} = \frac{\dfrac{1836\times 1}{1836+1}}{\dfrac{3672\times 1}{3672+1}} = \frac{1-\dfrac{1}{1837}}{1-\dfrac{1}{3673}} \approx 1 - \frac{1}{3672}$$

Ετσι, αν ΔE είναι η διαφορά στις ενέργειες ιονισμού, $\Delta E = E_D - E_H$, τότε,

$$\frac{E_H}{E_D} = \frac{E_D - \Delta E}{E_D} = 1 - \frac{\Delta E}{E_D} \approx 1 - \frac{\Delta E}{E}$$

Επομένως, $\dfrac{\Delta E}{E} \approx \dfrac{1}{3672}$ και $\Delta E = \dfrac{13{,}6}{3672}\,\mathrm{eV}$

ή, τελικά, $\Delta E = 3{,}70\ \text{meV}$.

Φασματοσκοπικώς, αυτή η διαφορά μπορεί να παρατηρηθεί ως μια διαφορά στα μήκη κύματος των δύο αντίστοιχων φασματικών γραμμών. Το μήκος κύματος που αντιστοιχεί στην ενέργεια των E = 13,6 eV είναι:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} = \frac{hc}{E} = 91\text{nm}$$

και επομένως: $d\lambda = -\frac{hc}{E^2}dE$ ή $\frac{d\lambda}{\lambda} = -\frac{dE}{E}$

από την οποία, προσεγγιστικά, $\Delta\lambda \approx -\frac{\lambda}{E}\Delta E$.

Ετσι, $\Delta\lambda \approx -\frac{91}{13{,}6}\times 3{,}70\times 10^{-3} = -0{,}025\text{nm}$, διαφορά που είναι παρατηρήσιμη.

Παράδειγμα 4.5

Η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση μιας μόνιμης κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου δίνεται σε σφαιρικές πολικές συντεταγμένες από τη συνάρτηση:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{3}(2a_o)^{3/2}}\frac{r}{a_o}\exp\left(-\frac{r}{2a_o}\right)Y(\theta,\varphi) \quad \text{όπου}$$

$$Y(\theta,\varphi) = -\frac{1}{2}\left(\frac{3}{2\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\, e^{i\varphi}.$$

Να υπολογιστούν:

(α) Η πιο πιθανή απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα.

(β) Το μέτρο της στροφορμής του, και

(γ) Η προβολή της στροφορμής του πάνω στον άξονα z.

(α) Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στην περιοχή όγκου dV γύρω από την θέση r=(r,θ,φ) είναι $|\psi(r,\theta,\varphi)|^2 dV$.

Το στοιχείο όγκου σε σφαιρικές συντεταγμένες είναι: $dV = r^2\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dr$. Επομένως, $|\psi(r,\theta,\varphi)|^2 dV = |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 r^2\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dr$.

Αν ολοκληρώσουμε ως προς τις γωνιακές μεταβλητές θ και φ, θα βρούμε την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στο σφαιρικό φλοιό μεταξύ r και r+dr. Από τη μορφή της συνάρτησης προκύπτει ότι αυτή η πιθανότητα θα είναι

$$P(r)dr = Ar^4 e^{-r/a_o}dr \quad \text{όπου A είναι μια σταθερά.}$$

Η πιο πιθανή απόσταση είναι εκείνη που μεγιστοποιεί την P(r). Από τη σχέση dP/dr=0 προκύπτει ότι αυτή είναι η $r_m = 4a_o$.

(β) Η εξίσωση ιδιοτιμών της L^2 είναι: $\hat{L}^2\psi(r,\theta,\varphi) = L^2\psi(r,\theta,\varphi)$.

Από το παράδειγμα 4.2, $\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$.

Ετσι,

$$\tilde{L}^2\psi(r,\theta,\varphi)= \frac{1}{\sqrt{3}(2a_o)^{3/2}}\frac{r}{a_o}\exp\left(-\frac{r}{2a_o}\right)\left(-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{3}{2\pi}\right)^{1/2}\tilde{L}^2\left(\sin\theta e^{i\varphi}\right).$$

Επειδή βρίσκουμε ότι είναι $\tilde{L}^2\left(\sin\theta e^{i\varphi}\right)=2\hbar^2\left(\sin\theta e^{i\varphi}\right)$ και

$\tilde{L}^2\psi(r,\theta,\varphi)= L^2\psi(r,\theta,\varphi)$, προκύπτει ότι $L^2\psi(r,\theta,\varphi) = 2\hbar^2\,\psi(r,\theta,\varphi)$.

Επομένως, $|L| = \sqrt{2}\hbar$.

Επειδή $L^2 = \hbar^2\ell(\ell+1)$, έπεται επίσης ότι $\ell=1$.

(γ) Η εξίσωση ιδιοτιμών της L_z είναι: $\tilde{L}_z\psi(r,\theta,\varphi)= L_z\psi(r,\theta,\varphi)$.

Αν στην $\tilde{L}_z\psi(r,\theta,\varphi)= -\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)$

απλοποιήσουμε όλους τους όρους του $\psi(r,\theta,\varphi)$ εκτός από το $e^{i\varphi}$, προκύπτει ότι

$$L_z e^{i\varphi} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{i\varphi} = \hbar e^{i\varphi} \quad \text{ή} \quad L_z = \hbar .$$

Από την σχέση $L_z\,\psi = m\hbar\psi$ έπεται επίσης ότι $m = 1$.

Παράδειγμα 4.6

Η κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου 1s ενός ατόμου με ατομικό αριθμό Z που έχει ένα μόνο ηλεκτρόνιο, είναι

$$\psi(r,\theta,\varphi)= \frac{1}{\pi^{1/2}a_o^{3/2}}\exp(-r/a_o) \quad \text{όπου } \alpha_o = 0{,}53\times10^{-10}/Z \text{ m}.$$

Αν υποθέσουμε ότι η $\psi(r,\theta,\varphi)$ ισχύει και στο εσωτερικό του πυρήνα, ποιά είναι η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο μέσα στον πυρήνα του ατόμου, αν αυτός έχει ακτίνα **R**;

Να υπολογιστεί η αριθμητική τιμή της πιθανότητας για Z = 5 και **R** = 2 $\times10^{-15}$ m

---

Επειδή η $\psi(r,\theta,\varphi)$ δεν εξαρτάται από τις θ και φ, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε απόσταση μεταξύ r και r + dr είναι

$$P(r)dr = |\psi|^2 dV$$

όπου dV είναι ο όγκος του σφαιρικού φλοιού μεταξύ r και r + dr. Επομένως,

$$P(r)dr = \frac{1}{\pi a_o^3}\exp(-2r/a_o)\,4\pi r^2 dr .$$

Η πιθανότητα να βρεθεί στο εσωτερικό του πυρήνα θα είναι,

$$P(r<R)= \frac{4}{a^3}\int_0^R \exp(-2r/a_o)\,r^2dr =1-\exp(-2R/a_o)\left[1+\frac{2R}{a_o}+\frac{2R^2}{a_o^2}\right] \approx \frac{4}{3}\left(\frac{R}{a_o}\right)^3 .$$

Για $Z=5$ $R/\alpha_o = 1{,}9\times10^{-4} << 1$ και η παραπάνω πιθανότητα είναι $\cong 10^{-11}$.

Στην πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στο εσωτερικό του πυρήνα οφείλεται το φαινόμενο της **αρπαγής ηλεκτρονίου** (Electron capture, EC), κατά το οποίο ένα τροχιακό ηλεκτρόνιο ενσωματώνεται στον πυρήνα, μετατρέποντας ένα πρωτόνιο σε νετρόνιο και προκαλώντας έτσι τη μεταστοιχείωση του ισοτόπου σε ένα άλλο με τον ίδιο μαζικό αριθμό αλλά με ατομικό αριθμό μικρότερο κατά μία μονάδα.

Παράδειγμα 4.7

Ο μεταθέτης δύο τελεστών $\hat{A}$ και $\hat{B}$ ορίζεται ως: $\left[\hat{A},\hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Αφού αποδείξετε ότι $\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$, $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_z\right]=0$ (και αντίστοιχες σχέσεις για κυκλική εναλλαγή των x, y, z), να εξηγήσετε τι συνεπάγονται οι σχέσεις αυτές ως προς τη δυνατότητα ταυτόχρονης μέτρησης των συνιστωσών της στροφορμής L.

Αρχικά παρατηρούμε ότι

$$\left(\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z}\right)\psi = \left(z\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)z\right)\psi = -i\hbar z\frac{\partial\psi}{\partial z} + i\hbar\frac{\partial}{\partial z}(z\psi)=$$

$$= -i\hbar z\frac{\partial\psi}{\partial z} + i\hbar z\frac{\partial\psi}{\partial z} + i\hbar\frac{\partial z}{\partial z}\psi = i\hbar\psi$$

και επομένως,

$$\left[\hat{z},\hat{p}_z\right] = \left(\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z}\right) = i\hbar\ .$$

Ομοίως αποδεικνύονται και οι σχέσεις $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right] = i\hbar$ και $\left[\hat{y},\hat{p}_y\right] = i\hbar$.

Οι τελεστές $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ και $\hat{L}_z$ είναι ήδη γνωστοί από το Παράδειγμα 6.3. Ετσι,

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right) - \left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right)\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{z}^2\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{y}\hat{x}\hat{p}_z^2 + \hat{z}\hat{x}\hat{p}_y\hat{p}_z - \hat{z}\hat{y}\hat{p}_x\hat{p}_z + \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z^2 + \hat{z}^2\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_x\hat{p}_z\hat{z} + \hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z - \hat{y}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_y\hat{p}_z\hat{z} =$$

$$= \left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right)\left(\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z}\right) = i\hbar\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) = i\hbar\hat{L}_z\ .$$

Επομένως, $\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$.

Ομοίως αποδεικνύονται και οι κυκλικά συμμετρικές σχέσεις:

$$\left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x \quad \text{και} \quad \left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y\ .$$

Οι άλλες σχέσεις για την συνολική στροφορμή αποδεικνύονται ως εξής:

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_z\right] = \left[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,\hat{L}_z\right] = \left[\hat{L}_x^2,\hat{L}_z\right] + \left[\hat{L}_y^2,\hat{L}_z\right] = \hat{L}_x^2\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y^2 =$$

$$= \hat{L}_x\left(\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x\right) + \left(\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x\right)\hat{L}_x + \hat{L}_y\left(\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y\right) + \left(\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y\right)\hat{L}_y =$$

$$= -i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y = 0$$

Παρομοίως αποδεικνύονται και οι κυκλικά συμμετρικές σχέσεις:

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_x\right]=0 \quad \text{και} \quad \left[\hat{L}^2,\hat{L}_y\right]=0.$$

Οι παραπάνω σχέσεις υπονοούν ότι δεν είναι δυνατόν να παρατηρηθούν ταυτόχρονα παρά μόνο η συνολική στροφορμή και η μία συνιστώσα της σε κάποιον άξονα.

Παράδειγμα 4.8

Σωματίδιο κινείται σε σφαιρικό πηγάδι δυναμικού ακτίνας R. Μέσα στο πηγάδι (για $0 < r < R$) η δυναμική του ενέργεια είναι ίση με μηδέν, ενώ έξω από αυτό (για $r > R$) η δυναμική του ενέργεια είναι άπειρη.

Να βρεθούν οι κυματοσυναρτήσεις ψ(r), για εκείνες τις καταστάσεις που δεν εξαρτώνται από τις γωνίες θ και φ. Να κανονικοποιηθούν οι κυματοσυναρτήσεις και να βρεθούν οι ενέργειές τους.
Σημ.: Η λύση της εξίσωσης του Schrödinger μπορεί να επιτευχθεί σε σφαιρικές πολικές συντεταγμένες με τη χρήση της νέας μεταβλητής $\chi(r) = r\,\psi(r)$.

Η εξίσωση του Schrödinger στη μόνιμη κατάσταση είναι

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0.$$

Λόγω σφαιρικής συμμετρίας αναπτύσσουμε το $\nabla^2\psi$ σε σφαιρικές συντεταγμένες, βλ. Εξ.(4.5). Επειδή ενδιαφερόμαστε μόνο για τις λύσεις που είναι ανεξάρτητες των θ και φ η εξίσωση απλοποιείται σε:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0.$$

Ψάχνουμε για λύσεις της μορφής $\psi = \chi(r)/r$. Τότε $\frac{d\psi}{dr} = \frac{1}{r}\frac{d\chi}{dr} - \frac{\chi}{r^2}$ και

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(r\frac{d\chi}{dr} - \chi\right) = \frac{d\chi}{dr} + r\frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{d\chi}{dr} = r\frac{d^2\chi}{dr^2}.$$

Επομένως, η εξίσωση του Schrodinger γράφεται ως

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\chi.$$

Η λύση της είναι η $\chi(r) = A\cos kr + B\sin kr$
όπου A, B = σταθερές. Επομένως,

$$\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r} = \frac{A}{r}\cos kr + \frac{B}{r}\sin kr \quad \text{όπου} \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

Από τις οριακές συνθήκες:
για $r = 0$ $\psi =$ πεπερασμένη, προκύπτει ότι $A = 0$
για $r = R$ $\psi = 0$, ή $\sin kR = 0$, προκύπτει ότι $kR = n\pi$, $k = n\pi/R$.
Οι ενεργειακές στάθμες είναι:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mR^2} \qquad (n = 1,2,3,\ldots).$$

και οι κυματοσυναρτήσεις $\quad \psi(r) = \frac{B}{r}\sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right).$

Κανονικοποιώντας τη συνάρτηση, προκύπτει η τιμή της σταθεράς B

$$1 = \int|\psi|^2 dV = \int_0^\infty|\psi|^2 4\pi r^2 dr = \int_0^R|\psi|^2 4\pi r^2 dr \qquad B = 1/\sqrt{2\pi R}.$$

Παράδειγμα 4.9

Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου εξαρτάται μόνο από την απόστασή του, r, από ένα σημείο (και όχι από την κατεύθυνση), και είναι

$\psi(r) = \frac{A}{r}e^{-r/a}$ όπου α είναι μια θετική σταθερά.

Να βρεθεί η πυκνότητα πιθανότητας και η μέση απόσταση του σωματιδίου από το κέντρο.

Από την κανονικοποίηση προκύπτει ότι

$$1= \int |\psi|^2 dV = A^2 \int_0^\infty \frac{1}{r^2} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) 4\pi r^2 dr \qquad A = 1/\sqrt{2\pi a}\,.$$

Η πυκνότητα πιθανότητας θα είναι

$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2$$

και η μέση απόσταση του σωματιδίου από το κέντρο είναι

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r|\psi|^2 dV = \int_0^\infty r P(r)\, dr = A^2 \int_0^\infty r \frac{1}{r^2} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) 4\pi r^2 dr = \frac{a}{2}\,.$$

Παράδειγμα 4.10

Σωματίδιο μάζας m περιστρέφεται σε κυκλική τροχιά ακτίνας R. Ξεκινώντας από την κλασική έκφραση για την ενέργεια του σωματιδίου, γράψετε την κυματοσυνάρτηση και τις επιτρεπτές ενεργειακές καταστάσεις του. Αν τη χρονική στιγμή t=0, το σωματίδιο περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\psi(\varphi) = A \sin^2\varphi$, να βρεθεί η τιμή της σταθεράς A και η κυματοσυνάρτηση που εκφράζει το σωματίδιο σε κάθε χρονική στιγμή t.

Κατά τα γνωστά από την Κλασική Μηχανική, η ενέργεια είναι $E = \dfrac{L^2}{2mR^2}$ όπου L είναι η στροφορμή.

Με την αντικατάσταση $L \to -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ προκύπτει η εξίσωση ιδιοτιμών

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = E\psi \quad \text{που έχει τις λύσεις}$$

$$\psi(\varphi) = C \exp(\pm ik\varphi) \quad \text{με} \quad k = \sqrt{2mR^2E/\hbar^2}\,.$$

Από το μονοσήμαντο της συνάρτησης έπεται ότι $\psi(\varphi + 2n\pi) = \psi(\varphi)$ για κάθε ακέραιο n. Προκύπτει επομένως ότι ο k είναι ακέραιος (0,1,2,...). Από την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης έπεται ότι

$$|C|^2 \int_0^{2\pi} |\exp(ik\varphi)|^2 d\varphi = 1 \qquad \text{δηλαδή} \qquad C = 1/\sqrt{2\pi}\,.$$

Επομένως, οι κυματοσυναρτήσεις $u_k^{\pm} = \exp(\pm ik\varphi)/\sqrt{2\pi}$ ή ένας οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός αυτών με το ίδιο k, αντιστοιχούν σε ενέργεια $E_k = \hbar^2 k^2/2mR^2$, (k=0,1,2,...).

Ας πάρουμε ως λύσεις τις κυματοσυναρτήσεις

$$u_k(\varphi) = \cos(k\varphi) = \left(e^{ik\varphi} + e^{-ik\varphi}\right)/2 \quad \text{και} \quad v_k(\varphi) = \sin(k\varphi) = \left(e^{ik\varphi} - e^{-ik\varphi}\right)/2i\,,$$

συναρτήσει των οποίων μπορούμε να εκφράσουμε κάθε κυματοσυνάρτηση του συστήματος, όπως θα κάνουμε παρακάτω.

Η τιμή της σταθεράς A στην κυματοσυνάρτηση $\psi(\varphi) = A \sin^2\varphi$ μπορεί να υπολογιστεί εύκολα με την κανονικοποίησή της, ως εξής:

$$1 = \int_0^{2\pi} \psi^2 d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} \sin^4 \varphi \, d\varphi \quad \text{που δίνει} \quad A = 2/\sqrt{3\pi}.$$

Αν αναλύσουμε την κυματοσυνάρτηση $\psi(\varphi)$ στις u_k και v_k, εύκολα προκύπτει ότι

$$\psi(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \sin^2 \varphi = \frac{1}{\sqrt{3\pi}}(1 - \cos 2\varphi) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}}\left[1 - \frac{e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}}{2}\right] = .$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3\pi}}\left[u_o - \frac{u_2^+ + u_2^-}{2}\right]$$

Οι συναρτήσεις $u_o(\varphi)$ και $u_2(\varphi)$ αντιστοιχούν στις ενέργειες $E = 0$ και $E_2 = 4\hbar^2/2mR^2$. Επομένως η χρονική εξάρτηση της κυματοσυνάρτησης $\psi(\varphi)$ θα είναι:

$$\psi(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}}\left(u_o(\varphi)e^{-iE_o t/\hbar} - \frac{u_2^+ + u_2^-}{2} e^{-iE_2 t/\hbar}\right)$$

$$\psi(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}}\left(1 - \cos 2\varphi \, e^{-2i\hbar t/mR^2}\right).$$

ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ

4.1 Το δευτέριο είναι ισότοπο του υδρογόνου με πυρήνα που αποτελείται από ένα πρωτόνιο και ένα νετρόνιο. Αν E_H και E_D είναι οι ενεργειακές στάθμες των ατόμων του υδρογόνου και του δευτερίου αντίστοιχα, να βρεθεί ο λόγος E_D/E_H και η διαφορά στις ενέργειες ιονισμού των δύο ατόμων. (Οι μάζες των H και D είναι περίπου ίσες με 1836 και 3672 φορές τη μάζα του ηλεκτρονίου αντίστοιχα).

4.2 Σωματίδιο κινείται σε σφαιρικό πηγάδι δυναμικού ακτίνας R. Μέσα στο πηγάδι (για $0 < r < R$) η δυναμική του ενέργεια είναι ίση με $-V_o$, ενώ έξω από αυτό (για $r > R$) η δυναμική του ενέργεια είναι με μηδέν. Να βρεθεί η συνθήκη που πρέπει να ικανοποιούν οι ενεργειακές καταστάσεις που δεν εξαρτώνται από τις γωνίες θ και φ. Υπάρχει πάντα μια δεσμευμένη κατάσταση ανεξάρτητα από το βάθος του πηγαδιού, όπως στην περίπτωση του μονοδιάστατου δυναμικού του εδ.2.2;
Σημ.: Ακολουθήστε την αλλαγή μεταβλητής του παραδείγματος 4.8.