ΚΕΦΑΛΑΙΟ 12

ΚΥΜΑΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ

12.1 Υλοκύματα. Φασική, ομαδική και σωματιδιακή ταχύτητα

Ένα σωματίδιο με μάζα ηρεμίας m_0, που κινείται με ταχύτητα υ, έχει σύμφωνα με τη θεωρία της σχετικότητας, μάζα m, ορμή p και ενέργεια E, που συνδέονται μέσω των σχέσεων

$$m = m_0\gamma = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{\upsilon^2}{c^2}}} \qquad p = m\upsilon \qquad E = mc^2 \qquad E^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2.$$

Σύμφωνα με την υπόθεση του de Broglie, με το σωματίδιο σχετίζεται κύμα συχνότητας ν και μήκους κύματος λ, για τα οποία ισχύουν οι σχέσεις

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

όπου h είναι η σταθερά του Planck και $\hbar \equiv h/2\pi$.
Η σωματιδιακή ταχύτητα είναι υ.

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

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

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

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

$$\upsilon_g = \frac{d\omega}{dk} = c^2\frac{k}{\omega} = \frac{c^2}{\upsilon_\phi}, \qquad \text{και τελικά} \qquad \upsilon_g\upsilon_\phi = c^2.$$

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

Η ομαδική ταχύτητα είναι επομένως ίση με τη σωματιδιακή ταχύτητα. Οι τρεις ταχύτητες συνδέονται μέσω των σχέσεων:

$$\upsilon_g = \upsilon \qquad \upsilon_g\upsilon_\phi = c^2 \qquad \upsilon_\phi\upsilon = c^2.$$

Η ομαδική ταχύτητα του κυματοπακέτου είναι η σωματιδιακή ταχύτητα, ενώ η φασική ταχύτητα είναι $\upsilon_\phi = c^2/\upsilon$ 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).

12.2 Η κυματική εξίσωση του Schrödinger

Δεχόμαστε τη δυική μορφή σωματιδίου-κύματος που δίνεται από τις σχέσεις de Broglie, $p=\hbar k$ και $E=\hbar\omega$. Θα ψάξουμε για μια κυματική εξίσωση σε αντιστοιχία με την κλασική Κυματική. Στην κλασική Κυματική, ένα επίπεδο κύμα που κινείται προς τα θετικά x με φασική ταχύτητα $c=\omega/k$, περιγράφεται από την εξίσωση

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(kx-\omega t)} \tag{12.1}$$

όπου η ψ εκφράζει κάποια διαταραχή (όπως π.χ. η μετατόπιση από τη θέση ισορροπίας, ή η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου). Ας σημειωθεί ότι στην κυματομηχανική χρησιμοποιείται ο συμβολισμός $e^{i(kx-\omega t)}$ αντί του $e^{i(\omega t-kx)}$ της κλασικής μηχανικής. Δεν υπάρχει καμιά ουσιαστική διαφορά μεταξύ των δύο.

Αντικαθιστώντας τη μορφή αυτή στην κλασική κυματική εξίσωση

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = c^2\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{12.2}$$

βλέπουμε ότι για να είναι λύση η ψ, θα πρέπει να ισχύει η σχέση

$$-\psi_0\omega^2 = -c^2k^2\psi_0 \qquad \text{ή} \qquad \frac{\omega^2}{k^2} = c^2. \tag{12.3}$$

Για φωτόνια και γενικά για σωματίδια με μηδενική μάζα ηρεμίας που κινούνται επομένως με την ταχύτητα του φωτός, ισχύουν οι σχέσεις $\omega=E/\hbar$ και $k=p/\hbar$ και έτσι η (12.3) ανάγεται στην $\frac{E^2}{p^2} = c^2$, δηλαδή $E=cp$. Αυτές οι σχέσεις, και επομένως και η κυματική εξίσωση (12.2) ισχύουν για τα φωτόνια.

Αντιθέτως, για ένα σωματίδιο με μάζα ηρεμίας m που κινείται ελεύθερο ($V(x)=0$) με μη σχετικιστική ταχύτητα, ισχύει η σχέση $E = \frac{1}{2}m\upsilon^2 = \frac{p^2}{2m}$. Αυτή διαφέρει από την $E=cp$ και επομένως η κλασική κυματική εξίσωση δεν μπορεί να είναι η ζητούμενη για τα υλοκύματα. Θα ψάξουμε να βρούμε μια νέα κυματική εξίσωση που να είναι συμβιβαστή με τις σχέσεις de Broglie και να ικανοποιεί τη σχέση $E = \frac{p^2}{2m}$ ή, ισοδύναμα, την $\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$. Η διαδικασία που θα ακολουθηθεί είναι ουσιαστικά αντίθετη από αυτήν που ακολουθήθηκε στην εξαγωγή της κλασικής κυματικής εξίσωσης. Εδώ είναι γνωστή η μορφή των λύσεων, από την υπόθεση του de Broglie, και ζητείται η κυματική εξίσωση από την οποία οι λύσεις πηγάζουν. Η εξίσωση αυτή βρέθηκε από τον Schrödinger.

Η εξίσωση που ζητείται πρέπει να ικανοποιεί τις ακόλουθες προϋποθέσεις:

(α) Να έχει λύσεις της μορφής $\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$, όπου $\omega=E/\hbar$ και $k=p/\hbar$.

(β) Να ικανοποιεί την εξίσωση της ενέργειας $E = \frac{p^2}{2m}$ για ελεύθερο σωματίδιο, ή $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ για σωματίδιο με δυναμική ενέργεια $V(x)$.

(γ) Να είναι γραμμική, ούτως ώστε να ισχύει η αρχή της επαλληλίας όπως στην κλασική περίπτωση (δηλ. το άθροισμα λύσεων να είναι επίσης λύση).

(δ) Να έχει σταθερούς συντελεστές, ώστε για ελεύθερο σωματίδιο όλα τα σημεία του χώρου και χρόνου να είναι ισοδύναμα (ομοιογένεια χώρου και χρόνου).

Οι απαιτήσεις που αναφέρθηκαν διατυπώθηκαν για την περίπτωση της μίας διάστασης, της x, αλλά η γενίκευση σε τρεις διαστάσεις είναι απλή. Επίσης, το ότι οι λύσεις της εξίσωσης είναι τα επίπεδα κύματα της Εξ.(12.1) δεν περιορίζει τη γενικότητα της εξίσωσης, γιατί λύσεις άλλων μορφών μπορούν να δημιουργηθούν με την επαλληλία όρων της μορφής (12.1).

Η διαδικασία που ακολούθησε ο Schrödinger και αυτή που θα ακολουθηθεί εδώ δεν αποτελεί βεβαίως απόδειξη της εξίσωσης. Το μόνο για το οποίο μπορεί να είναι κανείς σίγουρος είναι ότι η εξίσωση που θα βρεθεί θα ικανοποιεί τις συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν στην εξαγωγή της. Μόνο η επιτυχής εφαρμογή της στην εύρεση πειραματικά επαληθεύσιμων λύσεων σε φυσικά προβλήματα μπορεί να είναι το κριτήριο για την ορθότητα της εξίσωσης. Αξίζει να αναφερθεί εδώ ότι η Κβαντομηχανική, η οποία βασίζεται στην εξίσωση αυτή, είναι η πιο επιτυχής θεωρία που διαθέτουμε για την περιγραφή των ιδιοτήτων της ύλης και ότι καμιά από τις πολυάριθμες προβλέψεις της δεν έχει διαψευσθεί.

Παρατηρούμε αρχικά ότι για τη λύση $\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$, ισχύουν οι σχέσεις

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi \qquad \frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik\Psi \qquad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2\Psi, \tag{12.4}$$

από τις οποίες, με χρήση των σχέσεων $\omega=E/\hbar$ και $k=p/\hbar$, προκύπτει ότι

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \qquad \text{και} \qquad -\hbar\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = p^2\Psi. \tag{12.5}$$

Επίσης, από τη σχέση για την ολική ενέργεια $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ προκύπτει η

$\frac{p^2}{2m}\Psi + V(x)\Psi = E\Psi$ η οποία με αντικατάσταση από τις (12.5) δίνει την

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}. \tag{12.6}$$

Αυτή είναι η **εξίσωση του Schrödinger** σε μια διάσταση, την x. Είναι η ζητούμενη εξίσωση γιατί ικανοποιεί όλες τις συνθήκες που θέσαμε.

Για ελεύθερο σωματίδιο, $V(x) = 0$, και

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (12.7)$$

η οποία είναι η **ελεύθερη εξίσωση του Schrödinger** σε μία διάσταση.

12.3 Η φυσική σημασία της κυματοσυνάρτησης Ψ

Υπάρχει μια ουσιαστική διαφορά ανάμεσα στην κλασσική κυματική εξίσωση (12.2) και την εξίσωση του Schrödinger (12.6). Η πρώτη δέχεται ως λύσεις και πραγματικές συναρτήσεις, π.χ. cos(ωt-kx), αφού είναι μια διαφορική εξίσωση με πραγματικούς συντελεστές. Αυτό δεν ισχύει για τη δεύτερη, που έχει ένα φανταστικό συντελεστή. Θα πρέπει λοιπόν να προσδιοριστεί τί παριστάνουν οι λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger, οι οποίες είναι μιγαδικές συναρτήσεις.

Από τα πειραματικά αποτελέσματα γνωρίζουμε ότι ένα σωματίδιο μπορεί να έχει κυματικές ιδιότητες στη συμπεριφορά του, αλλά δεν παύει να διατηρεί τη σωματιδιακή του υπόσταση. Ανιχνεύεται ή αντιδρά με άλλα σωματίδια ως αδιαίρετη μονάδα και όχι ως ένα διεσπαρμένο στο χώρο κλασσικό κύμα. Η κυματοσυνάρτηση Ψ, ή κάποιο μέγεθος παράγωγο από αυτήν, δεν μπορεί να παριστάνει μια κατανομή της ύλης στο χώρο, όπως θα μπορούσε να υποθέσει κάποιος έχοντας κατά νουν την αντίστοιχη κλασσική κατανομή της ενέργειας ενός κύματος στο χώρο. Μια κλασσική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης είναι επομένως αδύνατη.

Μια δυνατή ερμηνεία είναι η **στατιστική ερμηνεία**, η οποία διατυπώθηκε αρχικά από τον M. Born το 1926. Σύμφωνα με αυτήν:

Η κυματοσυνάρτηση Ψ αντιπροσωπεύει ένα **κύμα πιθανότητας**.

Το τετράγωνο του μέτρου της κυματοσυνάρτησης, $|\Psi|^2$, δίνει την **πυκνότητα πιθανότητας** να βρίσκεται το σωματίδιο σε κάποιο σημείο του χώρου.

Η αποδοχή της στατιστικής ερμηνείας δικαιολογείται από την πειραματική επιβεβαίωση των θεωρητικών προβλέψεων που βασίζονται σε αυτήν. Η επιλογή του $|\Psi|^2$ ως πυκνότητας πιθανότητας εξασφαλίζει επίσης και τη διατήρηση της ολικής πιθανότητας, η οποία πρέπει να είναι ανεξάρτητη του χρόνου.

Θα εξετάσουμε το θέμα της στατιστικής ερμηνείας με περισσότερη λεπτομέρεια. Λόγω της γραμμικότητας της εξίσωσης του Schrödinger, αν μια συνάρτηση f(x,t) είναι λύση της εξίσωσης (σε μία διάσταση στην προκειμένη περίπτωση), τότε και η A f(x,t) είναι λύση της εξίσωσης για κάθε σταθερά A. Η τιμή της σταθεράς αυτής μπορεί να επιλεγεί έτσι ώστε η νέα κυματοσυνάρτηση Ψ(x,t) = A f(x,t) να είναι **κανονικοποιημένη** και να ισχύει:

$$d\Pi = \left(\begin{matrix}\text{Πιθανότητα να βρίσκεται το σωματίδιο στο}\\ \text{διάστημα } dx \text{ μεταξύ } x \text{ και } x+dx\end{matrix}\right) = |\Psi|^2\, dx. \qquad (12.8)$$

Έτσι, σε μία διάσταση, είναι:

$$|\Psi|^2 = \frac{d\Pi}{dx} = \textbf{πυκνότητα πιθανότητας ανά μονάδα μήκους για τη θέση του σωματιδίου.}$$

Σε τρεις διαστάσεις, αν η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση είναι Ψ(x,y,z,t), τότε

$$d\Pi = \left\{ \begin{array}{l} \text{Πιθανότητα να βρίσκεται το σωματίδιο στον} \\ \text{όγκο } dV \text{ γύρω από το σημείο } (x,y,z) \end{array} \right\} = |\Psi|^2 \, dV.$$

Έτσι, σε τρεις διαστάσεις, είναι:

$$|\Psi|^2 = \frac{d\Pi}{dV} = $$ **πυκνότητα πιθανότητας ανά μονάδα όγκου για τη θέση του σωματιδίου.**

Η κανονικοποίηση (δηλαδή ο προσδιορισμός της σταθεράς A που αναφέρθηκε πιο πάνω) βασίζεται στην απαίτηση η ολική πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο κάπου στο χώρο να είναι ίση με τη μονάδα. Σε μία διάσταση, η κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης $\Psi(x,t)$ υπαγορεύει:

$$\int \Psi^* \, \Psi \, dx = 1 \qquad \text{ή} \qquad \int |\Psi|^2 \, dx = 1 \tag{12.9}$$

όπου η ολοκλήρωση εκτείνεται από $x = -\infty$ μέχρι $x = +\infty$, ή όπου η $\Psi(x,t)$ είναι διάφορη του μηδενός.

Η κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης $\Psi(x,y,z,t)$ σε τρεις διαστάσεις εκφράζεται από τη σχέση

$$\int \Psi^* \, \Psi \, dV = 1 \qquad \text{ή} \qquad \int |\Psi|^2 \, dV = 1 \tag{12.10}$$

όπου dV είναι το στοιχείο όγκου και η ολοκλήρωση εκτείνεται σε ολόκληρο το χώρο, ή όπου η $\Psi(x,y,z,t)$ είναι διάφορη του μηδενός.

Η απαίτηση για κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης, σημαίνει ότι αυτή πρέπει να είναι **τετραγωνικά ολοκληρώσιμη**, δηλαδή τα ολοκληρώματα $\int |\Psi|^2 \, dx$ σε μία διάσταση, η $\int |\Psi|^2 \, dV$ σε τρεις διαστάσεις, πρέπει να είναι πεπερασμένα.

Για κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις, οι πυκνότητα πιθανότητας είναι:

$$P = \Psi^*\Psi = |\Psi|^2 \tag{12.11}$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι:

Σε μία διάσταση, η πυκνότητα πιθανότητας $P(x)$, ως πιθανότητα ανά μονάδα μήκους, έχει διαστάσεις $(\text{μήκος})^{-1}$ και μονάδες m^{-1}, η δε κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,t)$ έχει διαστάσεις $(\text{μήκος})^{-1/2}$ και μονάδες $m^{-1/2}$.

Σε τρεις διαστάσεις, η πυκνότητα πιθανότητας $P(x,y,z)$, ως πιθανότητα ανά μονάδα όγκου, έχει διαστάσεις $(\text{μήκος})^{-3}$ και μονάδες m^{-3}, η δε κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $\Psi(x,y,z,t)$ έχει διαστάσεις $(\text{μήκος})^{-3/2}$ και μονάδες $m^{-3/2}$.

12.4 Λύση της εξίσωσης του Schrödinger για χρονικά σταθερές καταστάσεις

Για ένα σωματίδιο που έχει δυναμική ενέργεια $V(x)$, η εξίσωση του Schrödinger έχει τη μορφή (12.6),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \qquad (12.12)$$

Οι καταστάσεις που εκφράζουν στάσιμα κύματα, θα πρέπει, κατά τα γνωστά από την κλασική Κυματική, να περιγράφονται από λύσεις της μορφής

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\cdot\exp\left(-i\,\frac{E}{\hbar}\,t\right) \qquad (12.13)$$

όπου με μικρό ψ θα συμβολίζουμε τη χωρική εξάρτηση της $\Psi(x,t)$

Από την (12.13), με παραγώγιση, βρίσκουμε ότι

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\,\frac{E}{\hbar}\,\psi\cdot\exp\left(-i\,\frac{E}{\hbar}\,t\right) \qquad \text{και} \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \exp\left(-i\,\frac{E}{\hbar}\,t\right)\frac{d^2\psi}{dx^2} \qquad (12.14)$$

και η εξίσωση του Schrödinger (12.6) δίνει, μετά από απλοποίηση του παράγοντα $\exp\left(-i\,\frac{E}{\hbar}\,t\right)$, την

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi. \qquad (12.15)$$

Η εξίσωση αυτή, δηλαδή η

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \qquad (12.16)$$

είναι η γενική μορφή της εξίσωσης του Schrödinger στη μόνιμη κατάσταση. Με τη λύση της Εξ.(12.16) θα ασχοληθούμε στα περισσότερα προβλήματα που θα εξετάσουμε.

Θα πρέπει πάντοτε να έχουμε υπόψη ότι

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\cdot\exp\left(-i\,\frac{E}{\hbar}\,t\right) \qquad (12.17)$$

και επομένως η

$$\Psi^*\,\Psi = \psi^*\,\psi \qquad \text{ή η} \qquad |\Psi|^2 = |\psi|^2 \qquad (12.18)$$

εκφράζει την πυκνότητα πιθανότητας για ανίχνευση του σωματιδίου σε κάποια θέση στο χώρο (δηλαδή πιθανότητα ανά μονάδα μήκους, σε μία διάσταση). Επομένως, η κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης εκφράζεται (για τη μονοδιάστατη περίπτωση) από το ολοκλήρωμα

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,dx = 1 \qquad (12.19)$$

όπου η ολοκλήρωση εκτείνεται από $x = -\infty$ μέχρι $x = +\infty$ ή, ισοδύναμα, σε κάθε τιμή του x όπου η $\psi(x)$ είναι διάφορη του μηδενός.

12.5 Γενικές ιδιότητες της κυματοσυνάρτησης και οριακές συνθήκες που αυτή ικανοποιεί

Η συζήτηση που θα ακολουθήσει για τις γενικές ιδιότητες και τις οριακές συνθήκες που ικανοποιεί η κυματοσυνάρτηση θα περιοριστεί σε μια διάσταση στο χώρο, αλλά μπορεί εύκολα να γενικευθεί σε τρεις διαστάσεις. Ας σημειωθεί επίσης ότι οι ιδιότητες και οι οριακές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται από την $\psi(x)$ είναι ίδιες με αυτές της $\Psi(x,t)$, για την οποία οι συνθήκες αυτές ισχύουν για κάθε τιμή του t

Η ερμηνεία που δόθηκε στο $|\Psi|^2$ ως πυκνότητα πιθανότητας, υπαγορεύει να είναι η Ψ τετραγωνικά ολοκληρώσιμη ώστε η ολική πιθανότητα να βρεθεί κάπου το σωματίδιο να είναι ίση με τη μονάδα, δηλαδή, για μια διάσταση, τη x, να είναι

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1. \tag{12.20}$$

Για το λόγο αυτό, αποκλίνουσες λύσεις, π.χ. της μορφής e^x για $x \longrightarrow \infty$, ή e^{-x} για $x \longrightarrow -\infty$, δεν είναι αποδεκτές.

Αρχικά θα διερευνηθούν οι ιδιότητες της κυματοσυνάρτησης για την περίπτωση που η δυναμική ενέργεια V(x) είναι μια συνεχής συνάρτηση της x. Από τη θεωρία των διαφορικών εξισώσεων είναι γνωστό ότι μια διαφορική εξίσωση όπως η

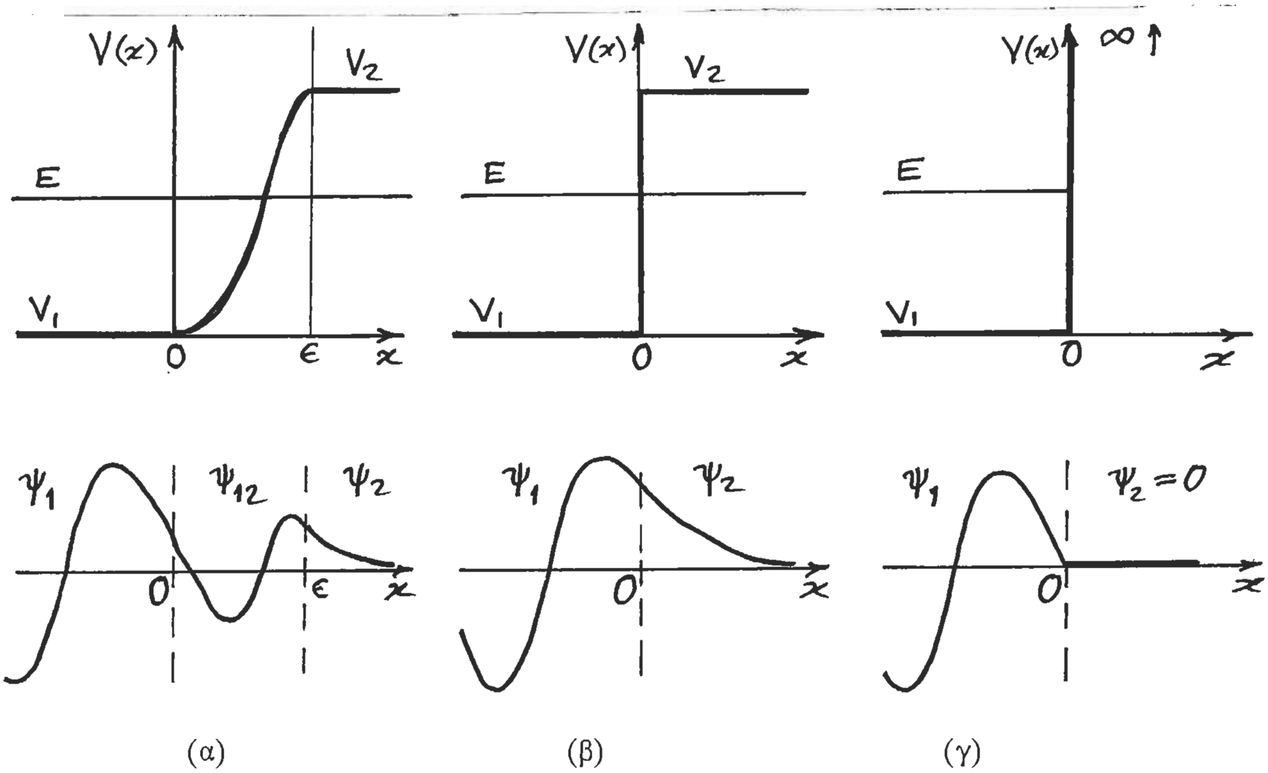
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \tag{12.21}$$

της οποίας οι συντελεστές (η συνάρτηση $E - V(x)$ εδώ) είναι συνεχείς, έχει, για δεδομένες οριακές συνθήκες, μία μοναδική λύση , την $\psi(x)$ έστω, η οποία είναι συνεχής. Συνεχής είναι επίσης και η παράγωγος $d\psi/dx$.

Η ιδιότητα της $\psi(x)$ να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και να είναι συνεχής τόσο αυτή όσο και η παράγωγός της, συνεπάγεται ότι η $\psi(x)$ είναι επίσης πεπερασμένη παντού. Αυτές είναι οι ιδιότητες της $\psi(x)$ και της $\Psi(x,t)$ και καλύπτουν όλες τις φυσικά πραγματοποιήσιμες καταστάσεις.

Για πληρότητα όμως, θα πρέπει να διερευνηθούν και οι φυσικά μη πραγματοποιήσιμες περιπτώσεις στις οποίες, για μαθηματική ευκολία, η συνάρτηση V(x) δεν είναι συνεχής, αλλά έχει μία ή περισσότερες πεπερασμένες ή άπειρες ασυνέχειες. Θα εξετασθεί αρχικά η περίπτωση μιας πεπερασμένης ασυνέχειας, οριακή περίπτωση της οποίας θα θεωρηθεί η περίπτωση της άπειρης ασυνέχειας.

Εστω η συνάρτηση V(x) του Σχ.12.1α η οποία μεταβάλλεται με συνεχή τρόπο στο διάστημα $0<x<\varepsilon$ από τη σταθερή τιμή V_1 για $x<0$ στη σταθερή τιμή V_2 για $x>\varepsilon$. Σύμφωνα με τις ιδιότητες της $\psi(x)$ για συνεχή V(x), η $\psi(x)$ και επομένως και το γινόμενο $[E-V(x)]\psi(x)$ είναι πεπερασμένα παντού, συμπεριλαμβανομένου και του διαστήματος $0<x<\varepsilon$. Επομένως, από την Εξ.(12.21), η δεύτερη παράγωγος $d^2\psi/dx^2$ της κυματοσυνάρτησης είναι πεπερασμένη. Παραμένει δε πεπερασμένη και καθώς το διάστημα ε τείνει στο μηδέν (Σχ.12.1β) οπότε και δημιουργείται μια πεπερασμένη ασυνέχεια στην V(x). Η πρώτη παράγωγος $d\psi/dx$ της $\psi(x)$, ως ολοκλήρωμα μιας πεπερασμένης συνάρτησης (της $d^2\psi/dx^2$), είναι συνεχής. Η $\psi(x)$, ως ολοκλήρωμα της $d\psi/dx$, είναι επίσης συνεχής. Προκύπτει επομένως ότι οι οριακές συνθήκες για τις $\psi(x)$ και $\Psi(x,t)$ σε μια πεπερασμένη ασυνέχεια στην V(x) είναι η συνέχεια τόσο αυτών όσο και των παραγώγων τους ως προς x.



Σχ.12.1 Η συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της σε σημείο ασυνέχειας στη δυναμική ενέργεια.

Τέλος θα πρέπει να διερευνηθεί η περίπτωση της άπειρης ασυνέχειας στη V(x). Αρχίζοντας από μια πεπερασμένη ασυνέχεια όπως αυτή του Σχ.12.1β με $V_1 < E < V_2$, οι γενικές λύσεις της (12.21) για τις δύο περιοχές είναι:

$$\text{Για } x \le 0 \qquad \psi_1(x) = A \sin\alpha x + B \cos\alpha x \qquad \text{όπου } \alpha = \left(\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{12.22}$$

$$\text{Για } x \ge 0 \qquad \psi_2(x) = C \exp(-\beta x) + D \exp(\beta x) \qquad \text{όπου } \beta = \left(\frac{2m(V_2-E)}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{12.23}$$

Τα α και β έχουν ορισθεί έτσι ώστε να είναι πραγματικά. Καθώς $V_2 \longrightarrow \infty$, επίσης $\beta \longrightarrow \infty$ και για να μείνει πεπερασμένη η $\psi_2(x)$ θα πρέπει να είναι D=0. Ταυτόχρονα όμως $\exp(-\beta x) \longrightarrow 0$ και επομένως $\psi_2(x) \longrightarrow 0$ σε όλα τα σημεία όπου απειρίζεται η δυναμική ενέργεια (Σχ.12.1γ). Από την Εξ.(12.23) προκύπτει ότι στο σημείο x=0 όπου υπάρχει η άπειρη ασυνέχεια στο V(x), θα είναι $\psi_2(0) = 0$ και επομένως και $\psi_1(0) = 0$.

Η συνέχεια της παραγώγου dψ/dx στο σημείο x=0 θα έδινε (για D=0) τη συνθήκη $\alpha A = -\beta C$, η οποία όμως δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί γιατί η C δεν ορίζεται.

Τίποτα δεν μπορεί επομένως να ειπωθεί για την παράγωγο $d\psi/dx$ στο σημείο όπου η $V(x)$ έχει μια άπειρη ασυνέχεια. Αυτή καθορίζεται από τις άλλες συνθήκες του προβλήματος.

Το τελικό συμπέρασμα επομένως είναι ότι η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται στις περιοχές άπειρης δυναμικής ενέργειας. Αυτό είναι αναμενόμενο γιατί ένα σωματίδιο δεν μπορεί να έχει άπειρη δυναμική ενέργεια.

Συνοψίζοντας, οι ιδιότητες και οι οριακές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί η $\psi(x)$ και επομένως και η $\Psi(x,t)$ είναι οι ακόλουθες:

(α) Η $\psi(x)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

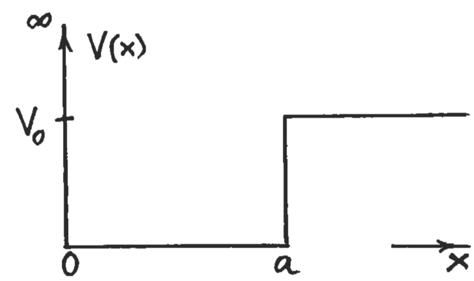
(β) Η $\psi(x)$ είναι παντού πεπερασμένη.

(γ) Η $\psi(x)$ είναι παντού συνεχής. Σε περιοχές όπου η δυναμική ενέργεια $V(x)$ απειρίζεται, η $\psi(x)$ μηδενίζεται.

(δ) Η παράγωγος $d\psi/dx$ είναι παντού συνεχής. Στις περιοχές όπου η δυναμική ενέργεια $V(x)$ απειρίζεται, η παράγωγος δεν ορίζεται.

Οι ιδιότητες αυτές είναι αρκετές για τον πλήρη προσδιορισμό των λύσεων για δεδομένη συνάρτηση $V(x)$. Οι ιδιότητες (γ) και (δ) παίζουν το ρόλο οριακών συνθηκών στα σημεία όπου υπάρχουν ασυνέχειες στη $V(x)$, όπως θα δούμε στη λύση συγκεκριμένων προβλημάτων.

Παράδειγμα 12.1



Η δυναμική ενέργεια σωματιδίου μάζας m είναι:

$$V(x) = \infty \quad \text{για} \quad x < 0$$
$$= 0 \quad \text{για} \quad 0 \le x \le \alpha$$
$$= V_0 \quad \text{για} \quad x > \alpha$$

όπου V_0 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 $E = V_0/2$;

(α) Για $x<0$, επειδή $V(x) = \infty$, θα είναι: $\psi_1(x) = 0$.

Για $0 \le x \le \alpha$, $\psi_2(x) = A \sin kx + B \cos kx$ 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 $x > \alpha$, $\psi_3(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$ όπου $\kappa = \left[2m(V_0 - E)/\hbar^2\right]^{1/2}$

και επειδή η $\psi_3(x)$ πρέπει να είναι πεπερασμένη και για $x \longrightarrow \infty$, έπεται ότι $D=0$.

Από τη συνέχεια της ψ και της $d\psi/dx$ στο $x = \alpha$, προκύπτουν οι σχέσεις

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

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

από την οποία βρίσκονται οι επιτρεπόμενες ενέργειες E_n, τα αντίστοιχα k και κ, και οι κυματοσυναρτήσεις. Η λύση της υπερβατικής αυτής εξίσωσης γίνεται με γραφικές ή αριθμητικές μεθόδους.

(β) Για να βρούμε το λόγο των πιθανοτήτων, υποθέτουμε ότι έχουμε βρει τις τιμές των A και C που κανονικοποιούν τις κυματοσυναρτήσεις $\psi_2(x)$ και $\psi_3(x)$. Η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην περιοχή $0 \le x \le \alpha$ είναι

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

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

$$P_3 = \int_\alpha^\infty |\psi_3|^2 \, dx = C^2 \int_\alpha^\infty e^{-2\kappa x} \, dx = \frac{C^2}{2\kappa} e^{-2\kappa\alpha} = \frac{A^2}{2\kappa} \sin^2 k\alpha.$$

Ο λόγος των πιθανοτήτων είναι:

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

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

$$\frac{P_2}{P_3} = \kappa\alpha \left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) + \frac{\kappa^2}{k^2} = \frac{\alpha V_0}{\hbar E} \sqrt{2m(V_0 - E)} + \frac{V_0}{E} - 1.$$

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

(γ) Για $E = V_0/2$ έχουμε $\kappa/k = 1$ και επομένως $\tan k\alpha = -1$.

Οι θετικές λύσεις αυτής της εξίσωσης είναι: $\quad k\alpha = \dfrac{3\pi}{4}, \dfrac{7\pi}{4}, \dfrac{11\pi}{4}, \ldots \quad$ ή

$$\alpha_n = \left(n - \frac{1}{4} \right) \frac{\pi}{k} \qquad \text{και τελικά,} \qquad \alpha_n = \left(n - \frac{1}{4} \right) \frac{\pi\hbar}{\sqrt{mV_0}}$$

είναι οι τιμές του πλάτους α για τις οποίες μια από τις επιτρεπτές ενέργειες είναι η $E = V_0/2$.

12.6 Ο αρμονικός ταλαντωτής

Στον μονοδιάστατο αρμονικό ταλαντωτή, η δύναμη εκφράζεται ως $F = -kx$ και η δυναμική ενέργεια είναι $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, όπου η σταθερά k είναι η κατευθύνουσα δύναμη και x η απομάκρυνση από τη θέση ευσταθούς ισορροπίας. Επομένως, η εξίσωση του Schrödinger θα είναι (στη μόνιμη κατάσταση),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi \tag{12.24}$$

ή

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{mkx^2}{\hbar^2}\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0. \tag{12.25}$$

Κατ' αναλογία με την κλασσική Κυματική θέτουμε $\omega^2 \equiv \frac{k}{m}$, οπότε

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi = 0. \tag{12.26}$$

Χρησιμοποιόντας τη νέα μεταβλητή

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x. \tag{12.27}$$

και την παράμετρο

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{12.28}$$

η εξίσωση του Schrödinger για τον αρμονικό ταλαντωτή έχει τη μορφή

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda-\xi^2)\psi = 0. \tag{12.29}$$

Οι οριακές συνθήκες είναι (μεταξύ άλλων)

$$\psi \longrightarrow 0 \quad \text{για} \quad \xi \longrightarrow \pm\infty. \tag{12.30}$$

Βασιζόμενοι στην ανάλυση της συμπεριφοράς των λύσεων της (12.29) για μεγάλες τιμές του ξ, δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής

$$\psi(\xi) = H(\xi)\exp(-\xi^2/2) = H(\xi)\exp(-m\omega x^2/2\hbar) \tag{12.31}$$

όπου η $H(\xi)$ είναι μια συνάρτηση του ξ, που απομένει να προσδιοριστεί. Με αντικατάσταση στην Εξ.(12.29), προκύπτει ότι η $H(\xi)$ ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda-1)H = 0. \tag{12.32}$$

Είναι γνωστό ότι η διαφορική αυτή εξίσωση έχει ως λύσεις πολυώνυμα του ξ, γνωστά ως **πολυώνυμα του Hermite**, τα οποία έχουν πεπερασμένο αριθμό όρων το άθροισμα των οποίων συγκλίνει, και επομένως είναι αποδεκτά ως λύσεις, μόνο αν το λ είναι περιττός ακέραιος, έστω $\lambda = 2n+1$. Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει μία λύση H_n για κάθε ακέραιο n και σε αυτήν αντιστοιχεί, σύμφωνα με την (12.28), ενέργεια ίση με

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \qquad (n = 0,1,2,3,...). \qquad (12.33)$$

Οι λύσεις H_n τώρα, ικανοποιούν την εξίσωση

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \qquad (12.34)$$

από την οποία προκύπτουν οι εξής ιδιότητες των συναρτήσεων H_n:

$$H_n' = 2nH_{n-1} \qquad H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1} \qquad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}. \qquad (12.35)$$

Οι πρώτες τέσσερις συναρτήσεις Hermite είναι:

$$H_0(\xi) = 1 \qquad H_1(\xi) = 2\xi \qquad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \qquad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi. \qquad (12.36)$$

Οι κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή δίνονται από τον γενικό τύπο:

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{H_n(\xi)}{(2^n\ n!)^{1/2}}\ e^{-\xi^2/2}. \qquad (12.37)$$

Οι κυματοσυναρτήσεις και οι αντίστοιχες ενέργειες του αρμονικού ταλαντωτή είναι, σύμφωνα με τις (12.36) και (12.37), $\left(\text{με } \xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\ x \right)$:

$$n=0 \quad \psi_0(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} \qquad E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \tag{12.38}$$

$$n=1 \quad \psi_1(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{2}\,\xi\, e^{-\xi^2/2} \qquad E_1 = \tfrac{3}{2}\hbar\omega \tag{12.39}$$

$$n=2 \quad \psi_2(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}}\,(2\xi^2-1)\, e^{-\xi^2/2} \qquad E_2 = \tfrac{5}{2}\hbar\omega \tag{12.40}$$

$$n=3 \quad \psi_3(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}}\,(2\xi^3-3\xi)\, e^{-\xi^2/2} \qquad E_3 = \tfrac{7}{2}\hbar\omega \tag{12.41}$$

και γενικά, η n-στη κυματοσυνάρτηση και η ενέργειά της είναι

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{H_n(\xi)}{(2^n\, n!)^{1/2}}\, e^{-\xi^2/2} \qquad E_n = \frac{2n+1}{2}\hbar\omega. \tag{12.42}$$

Το βασικό συμπέρασμα λοιπόν είναι ότι έχουμε διάκριτες ενεργειακές στάθμες που απέχουν μεταξύ τους κατά $\hbar\omega$. Η βασική (η πιο χαμηλή) στάθμη δεν έχει ενέργεια ίση με μηδέν αλλά $\frac{1}{2}\hbar\omega$, σε πλήρη συμφωνία με την αρχή της απροσδιοριστίας. Μηδενική ενέργεια θα σήμαινε απόλυτη γνώση της ορμής του συστήματος ($p=0$) και απόλυτη απροσδιοριστία της θέσης του.

Ας σημειωθεί τέλος ότι το πλάτος ταλάντωσης για τον κλασικό ταλαντωτή στη n-στη ενεργειακή στάθμη E_n είναι α_n, και βρίσκεται από τη σχέση για τη μέγιστη δυναμική ενέργεια, $\frac{1}{2}k\alpha_n^2 = E_n = E_n = \frac{2n+1}{2}\hbar\omega$.

Επομένως είναι: $\alpha_n = \sqrt{(2n+1)\frac{\hbar\omega}{k}} = \sqrt{(2n+1)\frac{\hbar}{m\omega}}$.

Παράδειγμα 12.2

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

$$P_{\kappa\lambda}(x) = \frac{1}{\pi\,(\alpha^2 - x^2)^{1/2}}.$$

Να βρεθεί η πυκνότητα πιθανότητας για τον κβαντομηχανικό απλό αρμονικό ταλαντωτή στην πρώτη διεγερμένη ενεργειακή κατάσταση, η κυματοσυνάρτηση της οποίας είναι:

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

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

Στη θέση x, ο ταλαντωτής κινείται με ταχύτητα υ. Σε κάθε περίοδο, περνά από το σημείο αυτό δύο φορές, μια για την κάθε κετεύθυνση της κίνησής του. Αν ο ταλαντωτής χρειάζεται χρονικό διάστημα dt για να διανύσει ένα διάστημα ίσο με dx, τότε η 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 της ταλάντωσης. Συγκεκριμένα, επειδή $dt = dx/|\upsilon|$, θα είναι

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

όπου $\upsilon(x)$ είναι η ταχύτητα του ταλαντωτή στη θέση x.

Η μετατόπιση δίνεται από τη σχέση $\qquad x(t) = \alpha \sin\omega t$

όπου α είναι το πλάτος της ταλάντωσης. Η ταχύτητα του ταλαντωτή είναι

$$\upsilon(t) = \alpha\omega \cos\omega t \qquad \text{και} \qquad |\upsilon(x)| = \alpha\omega\sqrt{1-\sin^2\omega t} = \omega\,(\alpha^2 - x^2)^{1/2}.$$

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

Αυτή είναι η λύση του προβλήματος 1.6 του βιβλίου του Pain.

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

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

Η σταθερά A βρίσκεται από την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x)|^2\, dx = 1$$

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{x}{x_o}\right)^2 \exp(-\,x^2/x_o^2)\, dx = A^2\,\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,x_0 = 1,$$

από την οποία βρίσκουμε: $\quad A = \sqrt{\dfrac{2}{x_0\sqrt{\pi}}}$. Επομένως,

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{x_0\sqrt{\pi}}}\;\frac{x}{x_o}\,\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{x^2}{x_o^2}\right) \qquad \text{και}$$

$$P_{\kappa\beta}(x) = \frac{2}{x_0\sqrt{\pi}}\left(\frac{x}{x_o}\right)^2 \exp(-\,x^2/x_o^2).$$

Από την κυματοσυνάρτηση της πρώτης διεγερμένης ενεργειακής κατάστασης

(12.39), που έχει ενέργεια $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$,

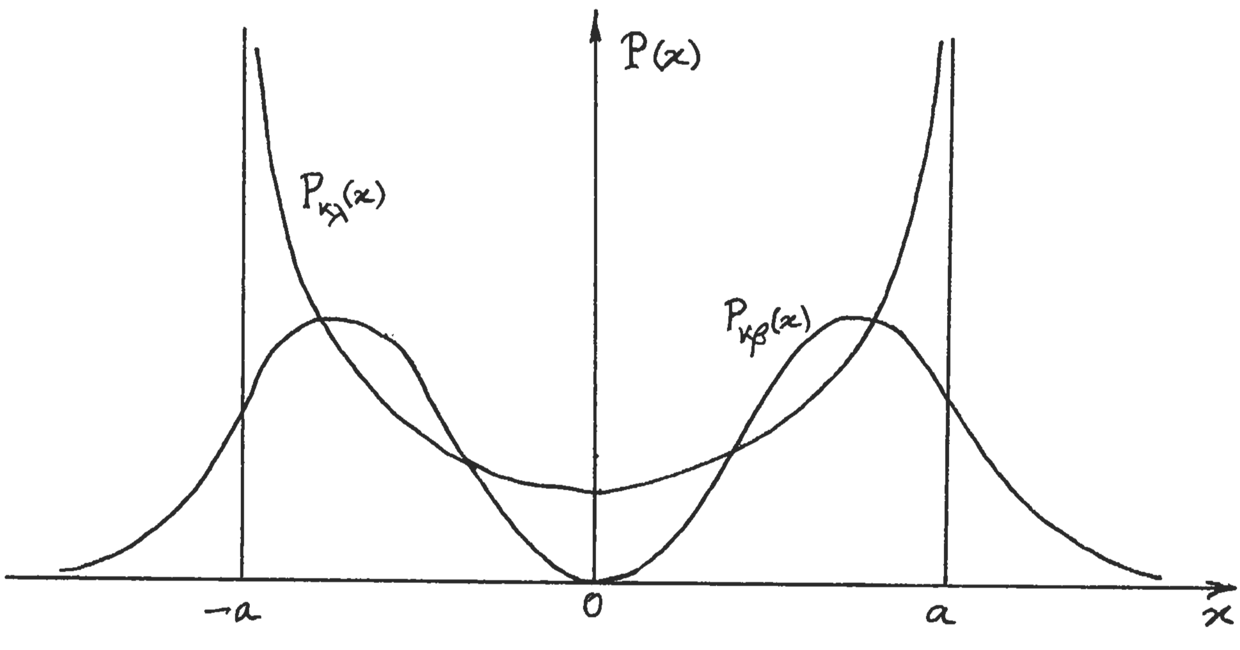
$$\psi_1(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{2}\,\xi\, e^{-\xi^2/2} \qquad \text{με} \quad \xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x,$$

βλέπουμε ότι $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

Το κλασικό πλάτος που αντιστοιχεί στην ενέργεια $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ είναι

$$\alpha_1 = \sqrt{\frac{3\hbar\omega}{k}} = \sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}} = \sqrt{3}\, x_0.$$

Οι δύο πυκνότητες πιθανότητας φαίνονται στο Σχ.12.3, για την ίδια ενέργεια E_1, για την οποία $\alpha = \alpha_1 = \sqrt{3}\, x_0$.



Σχ.12.3 Οι πυκνότητες πιθανότητας για τη θέση του αρμονικού ταλαντωτή, σύμφωνα με την κλασική κυματική, $P_{κλ}(x)$, και την κυματομηχανική, $P_{κβ}(x)$, για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση.

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

Η κλασική πυκνότητα πιθανότητας ορίζεται μόνο μεταξύ $x = -\alpha$ και $x = \alpha$. Έχει ελάχιστο, ίσο με $1/\pi\alpha$, στο σημείο $x = 0$. Απειρίζεται στα σημεία $x = \pm\,\alpha$.

Η κβαντική πυκνότητα πιθανότητας είναι παντού διάφορη του μηδενός, εκτός από τα σημεία $x = 0$ και $x = \pm\,\infty$. Έχει μέγιστα στα σημεία $x = \pm\, x_0 = \pm\, \alpha/\sqrt{3}$.

Η κβαντομηχανική προβλέπει ότι ο ταλαντωτής μπορεί να βρεθεί και στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή, $|x| > \alpha$.

Παράδειγμα 12.3

Κβαντομηχανικός αρμονικός ταλαντωτής μάζας m κινείται πάνω στον άξονα των x και έχει δυναμική ενέργεια $V(x) = \frac{1}{2} sx^2$, όπου s είναι μια θετική σταθερά. Αν υποτεθεί ότι μια από τις καταστάσεις του ταλαντωτή έχει κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = A\,x\,e^{-\alpha x^2}$, να βρεθούν για την κατάσταση αυτή:

(α) Τα α και A και η ενέργεια E του ταλαντωτή, συναρτήσει των m και $\omega = \sqrt{s/m}$.

(β) Το σημείο της μέγιστης πυκνότητας πιθανότητας της θέσης του ταλαντωτή.

Δίνεται: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} x^2\, e^{-cx^2}\, dx = \left(\frac{\pi}{4c^3}\right)^{1/2}$ (για c>0).

(α) Από την κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = A\,x\,e^{-\alpha x^2}$, έχουμε

$$\frac{d\psi}{dx} = A\,(1 - 2\alpha x^2)\,e^{-\alpha x^2} \quad \text{και} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = A\,(4\alpha^2 x^3 - 6\alpha x)\,e^{-\alpha x^2}.$$

Επίσης, $V(x) = \frac{1}{2} sx^2$. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση του Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + [V(x) - E]\psi = 0, \quad \text{προκύπτει ότι}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}A\,(4\alpha^2 x^3 - 6\alpha x)\,e^{-\alpha x^2} + \left(\frac{1}{2}sx^2 - E\right)A\,x\,e^{-\alpha x^2} = 0 \quad \text{και τελικά}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}4\alpha^2 + \frac{1}{2}s\right)x^3 + \left(6\alpha\frac{\hbar^2}{2m} - E\right)x = 0.$$

Για να ικανοποιείται η τελευταία εξίσωση για κάθε τιμή του x, θα πρέπει οι συντελεστές των x^3 και x να είναι ίσοι με μηδέν. Επομένως:

$$\alpha^2 = \frac{sm}{4\hbar^2} \quad \text{ή} \quad \alpha = \frac{\sqrt{sm}}{2\hbar} \quad \text{και} \quad E = 3\alpha\frac{\hbar^2}{m}.$$

Συναρτήσει της συχνότητας $\omega = \sqrt{s/m}$, είναι: $\alpha = \dfrac{m\omega}{2\hbar}$ και $E = \dfrac{3}{2}\hbar\omega$.

Από την κανονικοποίηση της $\psi(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\,dx = 1, \quad \text{προκύπτει ότι} \quad A^2\int_{-\infty}^{\infty}x^2\,e^{-2\alpha x^2}dx = 1, \quad \text{ή}$$

$$A^2 = \left(\frac{4}{\pi}8\alpha^3\right)^{1/2} = \left(\frac{4}{\pi}\frac{m^3\omega^3}{\hbar^3}\right)^{1/2} \quad \text{και} \quad A = \left(\frac{4}{\pi}\frac{m^3\omega^3}{\hbar^3}\right)^{1/4}.$$

(β) Η πυκνότητα πιθανότητας είναι

$$P(x) = |\psi(x)|^2, \qquad \text{ή} \qquad P(x) = A^2 x^2 e^{-2\alpha x^2},$$

η οποία έχει μέγιστο όταν $\dfrac{dP(x)}{dx} = A^2 (2x - 4\alpha x^3)\, e^{-2\alpha x^2} = 0.$

Αυτό ισχύει για $x = 0$, $x = \pm\infty$ ή $x = \pm x_m$, όπου

$$x_m = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} = \sqrt{\hbar/m\omega}\,.$$

Επειδή $P(x) > 0$ και $P(x) = 0$ για $x = 0$ και $x = \pm\infty$, τα μέγιστα της $P(x)$ βρίσκονται στα σημεία $\pm x_m = \pm\sqrt{\hbar/m\omega}$.

Το κλασικό πλάτος για την ενέργεια $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ είναι

$$\alpha = \sqrt{\frac{3\hbar\omega}{k}} = \sqrt{\frac{3\,\hbar}{m\omega}} = \sqrt{3}\, x_m.$$

Τα μέγιστα της $P(x)$ βρίσκονται επομένως στα σημεία $\pm x_m = \pm \dfrac{\alpha}{\sqrt{3}}$.

12.7 Μονοδιάστατο κυματοπακέτο

Τελειώνοντας, θα ήταν χρήσιμο να εξετάσουμε μια δυνατή μορφή που μπορεί να έχει το κυματοπακέτο που παριστάνει ένα κινούμενο σωματίδιο, καθώς και τις κυριότερες ιδιότητές του.

Η εξίσωση του Schrödinger για ελεύθερο σωματίδιο [δηλ. με $V(x) = 0$] σε μία διάσταση είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

και έχει λύσεις της μορφής: $\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$,

για τις οποίες ισχύει η σχέση διασποράς: $\omega(k) = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$.

Αυτές οι λύσεις παριστάνουν επίπεδα κύματα με σταθερό πλάτος για όλες τις τιμές του x. Επειδή $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi_0^2$, η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε κάποιο σημείο είναι σταθερή για κάθε τιμή του x. Για το λόγο αυτό η λύση δεν μπορεί να αντιπροσωπεύει ένα εντοπισμένο στο χώρο σωματίδιο.

Άλλες κυματομορφές μπορούν να δημιουργηθούν με επαλληλία περισσοτέρων της μιας λύσεων με διαφορετικούς κυματαριθμούς. Για παράδειγμα, η λύση

$$\Psi(x,t) = \Psi_1 e^{i(k_1x-\omega_1t)} + \Psi_2 e^{i(k_2x-\omega_2t)} + \dots + \Psi_N e^{i(k_Nx-\omega_Nt)} \qquad (12.43)$$

αποτελείται από N κύματα με κυματαριθμούς $k_1, k_2, \dots k_N$ και αντίστοιχες $\omega(k)$.

Το πλάτος της κυματομορφής αυτής είναι συνάρτηση της θέσης και του χρόνου.

Για πεπερασμένο αριθμό όρων, η λύση έχει περιοδικότητα τόσο στο χώρο όσο και στο χρόνο. Η επαλληλία άπειρων όρων, με συνεχή κατανομή κυματαριθμών, οδηγεί σε ένα κυματοπακέτο το οποίο με κατάλληλη επιλογή της κατανομής μπορεί να έχει οποιαδήποτε επιθυμητή μορφή. Καθώς το N τείνει στο άπειρο, το άθροισμα για διαφορετικούς κυματαριθμούς, της Εξ.(12.43), γίνεται ολοκλήρωμα στη συνεχή κατανομή κυματαριθμών και η γενική λύση σε μια διάσταση παίρνει τη μορφή

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k)\; e^{i(kx-\omega t)}\, dk \qquad (12.44)$$

όπου η συνάρτηση $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, g(k)$ είναι η φασματική κατανομή των κυματαριθμών, έτσι ώστε το ποσοστό των κυμάτων με κυματαριθμούς μεταξύ k και $k+dk$ να είναι ανάλογο του $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, g(k)\, dk$. Ο παράγων $1/\sqrt{2\pi}$ συμπεριλαμβάνεται αυθαίρετα, έτσι ώστε η $g(k)$ να είναι ο μετασχηματισμός Fourier της $\Psi(x,0)$, δηλαδή να είναι:

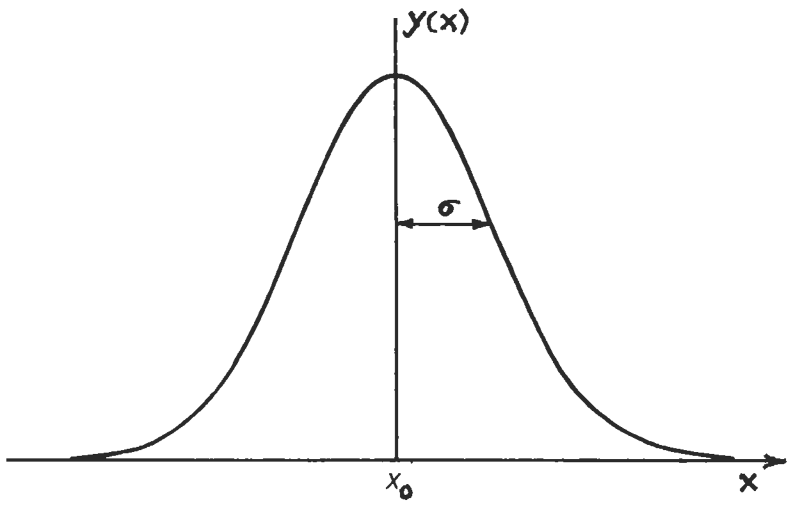
$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0)\; e^{-ikx}\, dx \qquad \longleftrightarrow \qquad \Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k)\; e^{ikx}\, dk.$$

Στη γενική περίπτωση, η $g(k)$ είναι μιγαδική συνάρτηση.

Μια επιλογή της κατανομής των κυματαριθμών k είναι η γκαουσιανή κατανομή:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, g(k) = \frac{\sqrt{\alpha}}{(2\pi)^{3/4}} \exp\left(-\frac{\alpha^2}{4}\,(k-k_0)^2\right). \qquad (12.45)$$

Η γκαουσιανή καμπύλη $y(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$ είναι συμμετρική ως προς το σημείο $x = x_0$ στο οποίο και έχει μέγιστη τιμή ίση με $y(x_0) = 1/\sigma\sqrt{2\pi}$.



Η καμπύλη είναι κανονικοποιημένη, ώστε $\int_{-\infty}^{\infty} y(x)\, dx = 1$. Η σ είναι η τυπική απόκλιση του x από τη μέση τιμή x_0, δηλαδή $\sigma = <(x - x_0)^2>^{1/2}$. Η παράμετρος σ μπορεί να θεωρηθεί ως το εύρος της καμπύλης. Στα σημεία $x = x_0 \pm \sigma$ η τιμή του y είναι ίση με το κλάσμα $e^{-1/2} = 0,607$ του μεγίστου. Ανάμεσα στα σημεία $x = x_0 - \sigma$ και $x = x_0 + \sigma$ βρίσκεται το 68 % της ολικής επιφάνειας κάτω από την καμπύλη. Ως πλήρες εύρος της γκαουσιανής μπορεί να θεωρηθεί το μέγεθος 2σ.

Η g(k) έχει μέγιστο στην τιμή $k = k_0$, γύρω από την οποία είναι κατανεμημένοι οι κυματαριθμοί, με μέτρο του εύρους της κατανομής την παράμετρο $1/\alpha$.

Η κυματοσυνάρτηση που αντιστοιχεί σε αυτή την κατανομή κυματαριθμών είναι:

$$\Psi(x,t) = \frac{\sqrt{\alpha}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{\alpha^2}{4}(k - k_0)^2\right\} e^{i(kx-\omega t)}\, dk. \tag{12.46}$$

Το ολοκλήρωμα μπορεί να υπολογιστεί και τελικά

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{2\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\phi}}{\left(\alpha^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} e^{ik_0 x} \exp\left\{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{\alpha^2 + \frac{2i\hbar t}{m}}\right\}, \tag{12.47}$$

με $\quad \phi = -\theta - \frac{\hbar k_0^2}{2m} t \quad$ και $\quad \tan 2\theta = \frac{2\hbar t}{m\alpha^2}$.

Αρχικά (t=0), η κυματοσυνάρτηση είναι

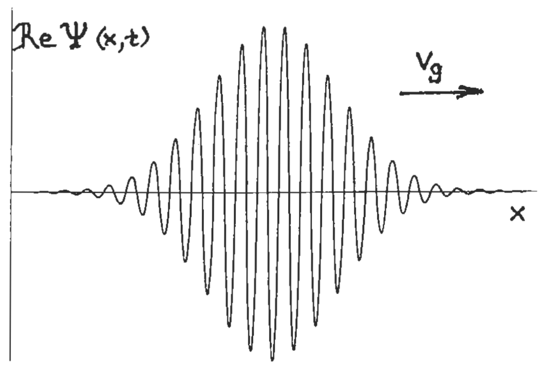
$$\Psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{1/4} e^{ik_0 x} e^{-x^2/\alpha^2} \tag{12.48}$$

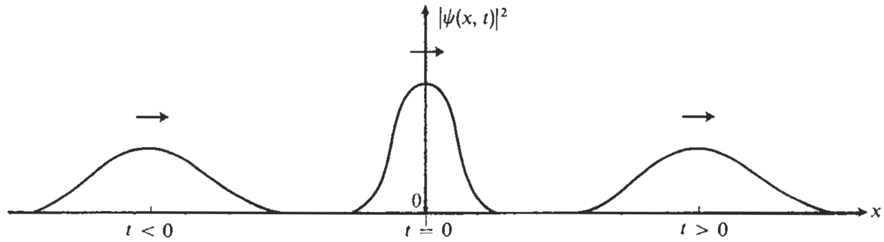
και η αντίστοιχη αρχική πυκνότητα πιθανότητας είναι

$$|\Psi(x,0)|^2 = \left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{1/2} e^{-2x^2/\alpha^2}. \tag{12.49}$$

Η πυκνότητα πιθανότητας ως συνάρτηση του χρόνου είναι:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left\{\frac{\frac{2}{\pi\alpha^2}}{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2\alpha^4}}\right\}^{1/2} \exp\left\{-\frac{2\alpha^2\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{\alpha^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}\right\}. \tag{12.50}$$





Η καμπύλη αυτή είναι μια γκαουσιανή με μέγιστο στο σημείο $x_m(t) = \dfrac{\hbar k_0}{m}\, t$

και πλήρες εύρος στο χώρο, ίσο με $\Delta x(t) = \dfrac{\alpha}{2}\sqrt{1 + \dfrac{4\hbar^2}{m^2\alpha^4}\, t^2}$.

Τα κυριότερα συμπεράσματα της ανάλυσης αυτής είναι:

1. Η περιβάλλουσα του κυματοπακέτου έχει, για την κατανομή κυματαριθμών που επιλέχθηκε, το σχήμα μιας γκαουσιανής πάνω από τον άξονα των x και της συμμετρικής της κάτω από τον άξονα των x.

2. Η πυκνότητα πιθανότητας έχει σχήμα γκαουσιανής.

3. Τόσο το μέγιστο της περιβάλλουσας της κυματοσυνάρτησης (πραγματικό και φανταστικό μέρος) όσο και της πυκνότητας πιθανότητας, μετατοπίζονται κατά μήκος του άξονα των x με ταχύτητα ίση με $\dfrac{dx_m(t)}{dt} = \dfrac{\hbar k_0}{m}$, που είναι η ομαδική ταχύτητα v_g όπως υπολογίζεται από την εξίσωση $v_g = \left.\dfrac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_o}$, για τη σχέση διασποράς $\omega(k) = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$. Διασπορά παρατηρείται γιατί είναι $\omega = \omega(k)$.

4. Καθώς το κυματοπακέτο κινείται, το εύρος της καμπύλης της πυκνότητας πιθανότητας αυξάνει σύμφωνα με τη σχέση:

$$\Delta x(t) = \frac{\alpha}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2}{m^2\alpha^4}\, t^2} \qquad \text{ή} \qquad \Delta x(t) = \Delta x(0)\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2}{m^2\alpha^4}\, t^2}\ .$$

5. Η αβεβαιότητα στη θέση του σωματιδίου μπορεί να θεωρηθεί ίση με $\Delta x(t)$. Το εύρος της κατανομης των κυματαριθμών που συνθέτουν το υλοκύμα είναι $\Delta k = 1/\alpha$. Αυτό αντιστοιχεί σε μια ορμή ίση με $\Delta p = \hbar\Delta k = \hbar/\alpha$, η οποία και μπορεί να θεωρηθεί ως η αβεβαιότητα στην ορμή του σωματιδίου. Παρατηρείται ότι:

$$\Delta x(t)\ \Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2}{m^2\alpha^4}t^2}.$$ Σε συμφωνία με την αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg, είναι: $\Delta x(t)\ \Delta p \ge \frac{\hbar}{2}$. Το γινόμενο $\Delta x(t)\ \Delta p$ έχει ελάχιστη τιμή ίση με $\frac{\hbar}{2}$ όταν $t = 0$. Με την πάροδο του χρόνου, λόγω της αύξησης της αβεβαιότητας στη θέση, η τιμή του γινομένου αυξάνει. Το ίδιο συμβαίνει και για αρνητικές τιμές του χρόνου. Η ορμή του σωματιδίου είναι σταθερά της κίνησης και η Δp δεν μεταβάλλεται με το χρόνο.

Βιβλιογραφία

Σ. Τραχανάς. Κβαντομηχανική. (Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, 1981).Τόμος Ι, κεφ. 1 (Χ).

C. Cohen-Tannoudji, B. Diu και F. Laloe. Quantum Mechanics. (J. Wiley & sons, N. York, 1977). Vol. 1, Ch. 1, Compl. G1.

Για το κυματοπακέτο γκαουσιανής μορφής.

Προβλήματα

Προβλήματα από Pain: 12.1, 12.2, 12.3, 12.8, 12.9, 12.12, 12.18.

12.1 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 θετική σταθερά.

(α) Να προσδιοριστεί η τιμή της σταθεράς C.

(β) Σε ποιο σημείο είναι μέγιστη η πυκνότητα πιθανότητας για τη θέση του σωματιδίου;

Απ.: (α) $C = \sqrt{12\alpha}$ (β) $x = \ln 2/\alpha$.

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

Απ.: $V(x) = -V_0 + \frac{1}{2}\left(\frac{4\hbar^2}{mL^4}\right)x^2$. Αρμονικός ταλαντωτής.

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

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

Προσδιορίστε το A.

$\left(\text{Δίνεται: } \int_0^\infty e^{-qx^2}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi/q} \quad \text{για} \quad q>0\right)$. Απ.: $A = (2\sqrt{2}\alpha/\sqrt{\pi})^{1/2}$.

12.4 Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου είναι $\psi(x) = A\exp(-|x|/x_0)$ όπου x_0= θετική σταθερά. Να προσδιοριστεί το Α.

Απ.: $A = 1/\sqrt{x_0}$.

12.5 Ένα σωματίδιο βρίσκεται μέσα σε κυβικό κουτί που εκτείνεται στην περιοχή $0 \le x \le L$, $0 \le y \le L$, $0 \le z \le L$. Μέσα στον κύβο η δυναμική ενέργεια του σωματιδίου είναι $V = 0$ ενώ έξω από τον κύβο είναι $V = \infty$.

(α) Επαληθεύσατε ότι οι κυματοσυναρτήσεις του σωματιδίου είναι της μορφής:

$$\psi(x,y,z) = A\sin(k_1x + \theta_1)\sin(k_2y + \theta_2)\sin(k_3z + \theta_3).$$

(β) Χρησιμοποιήστε τις οριακές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί η $\psi(x,y,z)$ για να προσδιορίσετε τα $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ και k_1, k_2, k_3.

(γ) Δείξετε ότι οι επιτρεπόμενες ενέργειες του σωματιδίου είναι

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{h^2}{8mL^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \qquad \text{όπου} \quad n_1,n_2,n_3 = 1, 2, 3, \ldots$$

(δ) Προσδιορίστε τη σταθερά Α.

(ε) Με τον όρο "πολλαπλότητα εκφυλισμού" εννοούμε τον αριθμό διαφορετικών καταστάσεων (κυματοσυναρτήσεων) που αντιστοιχούν στην ίδια τιμή ενέργειας.

Ποια είναι η πολλαπλότητα εκφυλισμού της ενεργειακής στάθμης $E = 6\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$;

$\left(\begin{array}{l}\text{Η εξίσωση του Schrödinger} \\ \text{σε τρεις διαστάσεις είναι}\end{array} \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\,\psi = 0\right)$.

Απ.: (β) $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 0$, και $k_1 = \frac{n_1\pi}{L}$, $k_2 = \frac{n_2\pi}{L}$, $k_3 = \frac{n_3\pi}{L}$,
όπου $(n_1,n_2,n_3 = 1,2,3,\ldots)$, (δ) $A = (2/L)^{3/2}$, (ε) 3.