2

Εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger - Μονοδιάστατα προβλήματα

2.1 Συνεχές Ενεργειακό Φάσμα

2.1.1 Ελεύθερο Σωμάτιο

Έχουμε σε αυτή την περίπτωση $F = 0$, δηλαδή $V(x,t) =$ σταθερό και τη σταθερή αυτή τιμή τη βάζουμε ίση με μηδέν. Η εξίσωση του Schrödinger είναι:

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

στη μία διάσταση, έστω τη x.
Λύση της εξίσωσης $\Psi(x,t) = \Psi(x)\Phi(t)$. Χωρίζουμε τις μεταβλητές στην εξίσωση

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \Rightarrow i\hbar\frac{\partial \Phi}{\partial t} = E\Phi$$

$$\Rightarrow \Phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E\Psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E\Psi$$

Θέτουμε

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2\Psi \Rightarrow \Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = [Ae^{ikx} + Be^{-ikx}]e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Θέτουμε $E = \hbar\omega$.

$$\boxed{\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}}$$

όπου A, B μιγαδικοί αριθμοί που προσδιορίζονται από τις αρχικές συνθήκες του προβλήματος.

Ο πρώτος όρος δίνει ένα κύμα που οδεύει κατά τη διεύθυνση $(+x)$, ο δεύτερος στην $(-x)$.

Εάν ξέρουμε (κατασκευάζουμε) ότι το σωματίδιο κινείται κατά τη θετική φορά του άξονα, τότε $B = 0$. Εάν κινείται μόνο κατά την αρνητική φορά, τότε $A = 0$.

Στην περίπτωσή μας δεν έχουμε περιορισμούς στις δυνατές τιμές της ενέργειας και το ω μπορεί να πάρει κάθε πιθανή τιμή στο συνεχές. Η

$$\boxed{\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar}{2m}k^2}$$

αποτελεί τη **σχέση διασποράς** για το ελεύθερο σωματίδιο.

• Εάν υποθέσουμε, π.χ. $B = 0$, τότε:

$$P(x,t) = \Psi_+^*(x,t)\Psi_+(x,t) = |A|^2$$

που είναι ανεξάρτητη του x και του t, άρα το σώμα μπορεί να είναι παντού· δηλαδή $\Delta x = \infty$, συμβατό με τη σχέση αβεβαιότητας αφού $\Delta P = 0$ και $(\Delta x)(\Delta P) \geq \hbar/2$.

• Για να είναι η $P(x,t)$ συνάρτηση της θέσης x, πρέπει να έχουμε $\Delta x =$ πεπερασμένο, $\Delta P =$ πεπερασμένο, και παίρνουμε επαλληλία κυμάτων:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int A(k)e^{i(kx-\omega t)}\,dk + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int B(k)e^{-i(kx+\omega t)}\,dk$$

με $\omega = \omega(k) = \dfrac{\hbar}{2m}k^2$.

$$\hat{p}e^{ikx} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx} = (-i\hbar)(ik)e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}$$
$$p = \hbar k$$
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

Κυματοσυνάρτηση Ελεύθερου σωματιδίου στις 3 διαστάσεις

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$
$$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})\Phi(t)$$
$$\Phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad E > 0.$$
$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2\Psi + \partial_y^2\Psi + \partial_z^2\Psi) = E\Psi$$
$$\partial_x^2\Psi + \partial_y^2\Psi + \partial_z^2\Psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = -k^2\Psi \tag{2.1}$$
$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Η Εξίσωση χωριζομένων μεταβλητών είναι

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z)$$

και διαιρούμε την εξίσωση (2.1) με την Ψ:

$$\Rightarrow \frac{1}{\Psi_1}\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} + \frac{1}{\Psi_2}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial y^2} + \frac{1}{\Psi_3}\frac{\partial^2\Psi_3}{\partial z^2} = -k^2$$

$$\Rightarrow \left\{\begin{array}{ccc} \dfrac{1}{\Psi_1}\dfrac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} & = & \lambda \\ \dfrac{1}{\Psi_2}\dfrac{\partial^2\Psi_2}{\partial y^2} & = & \mu \\ \dfrac{1}{\Psi_3}\dfrac{\partial^2\Psi_3}{\partial z^2} & = & \nu \end{array}\right\} \qquad \text{με } \lambda + \mu + \nu = -k^2$$

και οι επιτρεπτές λύσεις είναι επίπεδα κύματα, διότι όλα τα σημεία του χώρου είναι ισοδύναμα.

$$\Rightarrow \lambda = -k_x^2, \quad \mu = -k_y^2, \quad \nu = -k_z^2$$

$$\boxed{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2}$$

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r}) = e^{\pm ik_x x} e^{\pm ik_y y} e^{\pm ik_z z} = e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\mathbf{k} = \hat{\mathbf{e}}_1 k_x + \hat{\mathbf{e}}_2 k_y + \hat{\mathbf{e}}_3 k_z, \qquad \mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

$$\mathbf{k}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

και τα k_x, k_y, k_z έχουν μόνο αυτόν τον περιορισμό.

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + Be^{-k(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \omega t)}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

Εκφυλισμός: για την ίδια τιμή της Ενέργειας E έχουμε πολλές και διαφορετικές τιμές των k_x, k_y, k_z.

Ρεύμα πιθανότητας

Μέχρι τώρα μιλούσαμε για ένα μόνο σωματίδιο και την πυκνότητα πιθανότητας $P(x,t) = \Psi^*\Psi$ να βρούμε το σωματίδιο γύρω από τη θέση x τη χρονική στιγμή t, και από την κανονικοποίηση έχουμε

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,\mathrm{d}x = 1$$

Εάν έχουμε ένα μεγάλο αριθμό σωματιδίων με την ίδια μάζα και ταχύτητα (όπως σε ένα πείραμα σκέδασης) που κινούνται σε μία κατεύθυνση, έχουμε μία **δέσμη**. Αυτή η δέσμη σωματιδίων χαρακτηρίζεται από την **ένταση** της δέσμης.

Ως Ένταση της δέσμης ορίζουμε τον αριθμό των σωματιδίων που περνάνε ανά μονάδα επιφανείας και ανά μονάδα χρόνου από μια επιφάνεια κάθετη στη διεύθυνση κίνησής τους.

$$\boxed{J = \frac{n}{\Delta s \cdot \Delta t},}$$

εάν πάρουμε $v = \Delta x/\Delta t$, δηλαδή τα σωματίδια διανύουν απόσταση Δx μέσα σε χρόνο Δt. Τότε:

$$J = \frac{n}{\Delta s \cdot \Delta t} \cdot \frac{\Delta x}{\Delta x} = \frac{n}{\Delta V} v$$

$$\boxed{\Rightarrow J = \rho v}$$

όπου ρ η πυκνότητα σωματιδίων ανά μονάδα όγκου (για x, t) και v η ταχύτητα που κινούνται τα σωματίδια (στη θέση x, t).
δηλαδή όσα σωματίδια μπαίνουν από τη μία επιφάνεια Δs του όγκου ΔV τόσα βγαίνουν από την άλλη μεριά.
Διανυσματικά,

$$\boldsymbol{J} = \rho\mathbf{v}$$

Εξίσωση διατήρησης μάζας (φορτίου)

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \rho\,\mathrm{d}^3x = -\oint_S \boldsymbol{J}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a}$$

Κβαντομηχανικά η πιθανότητα να βρούμε ένα σωματίδιο στη θέση (x,t) είναι $\Psi^*\Psi$, κανονικοποιώντας στη μονάδα.

Μπορούμε να κανονικοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση Ψ έτσι ώστε να μας δίνει τον ολικό αριθμό των σωματιδίων της δέσμης, και να λύνει συγχρόνως την εξίσωση του Schrödinger για το ένα σωματίδιο. Υποθέτοντας ότι τα σωματίδια της δέσμης δεν αλληλεπιδρούν ισχυρά μεταξύ τους, έχουμε την **πυκνότητα πιθανότητας** που δίνει τον αριθμό των σωματιδίων ανά μονάδα όγκου γύρω από τη θέση $\mathbf{r}$, τη χρονική στιγμή t.

$$\Rightarrow P = \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)$$

και

$$\int_{\text{χώρο}} \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}^3x = N,$$

όπου N ο ολικός αριθμός σωματιδίων στη δέσμη, και από τον προηγούμενο ορισμό του ρ και της εξίσωσης συνέχειας θα βρούμε το **ρεύμα πιθανότητας**, δηλαδή την ένταση της δέσμης. Αποδεικνύεται ότι:

$$\boldsymbol{J} = -i\frac{\hbar}{2m}\left\{\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\right\}$$

Απόδειξη: Έχουμε,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \qquad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$
$$P = \Psi^*\Psi, \qquad V = V(\mathbf{r})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \frac{\partial\Psi^\star}{\partial t}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} \\
&= \Psi^*\left[\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi\right] + \Psi\left[-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi^*\right] \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\nabla^2\Psi + \frac{\hbar^2}{2m}\Psi\nabla^2\Psi^*\right\} \\
&= -\frac{\hbar}{i2m}\left\{\Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^*\right\} \\
&= -\frac{\hbar}{i2m}\boldsymbol{\nabla}[\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*] \\
&= -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{J} = -i\frac{\hbar}{2m}\left\{\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\right\}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}, \qquad P = \Psi^*\Psi$$

2.1.2 Ορθογώνιο Σκαλοπάτι Δυναμικού

Εξετάζουμε το μονοδιάστατο πρόβλημα με δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{για } x < 0 \\ V_0 & \text{για } x > 0 \end{cases}$$

Λύνουμε τη χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

A. Ενέργεια σωματιδίου $E < V_0$

Κλασσικά το σωματίδιο κινείται μόνο στην περιοχή $-\infty < x < 0$ και για $x = 0$ ανακλάται και γυρίζει πίσω. Έχουμε για την ενέργεια:

$$E = E_{\text{κιν}} + V, \text{ με } E_{\text{κιν}} > 0.$$

Κβαντομηχανικά λύνουμε την εξίσωση του Schrödinger για $-\infty < x < +\infty$ χωρίζοντας την περιοχή σε δύο υποπεριοχές:

(i) **Περιοχή I:** $-\infty < x < 0 \Rightarrow \Psi_1$

(ii) **Περιοχή II:** $0 < x < +\infty \Rightarrow \Psi_2$

Εδώ το $E > 0$ (γιατί;)

$$\langle E\rangle = \langle H\rangle = \langle T+V\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle, \quad V=0$$
$$\Rightarrow \langle E\rangle = \langle T\rangle$$

Θα δείξουμε ότι $\langle T\rangle \geq 0$ πάντα.

$$\begin{aligned}\langle T\rangle &= \int \Psi^* \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi \,\mathrm{d}x = \frac{1}{2m}\int (\hat{p}\Psi)^*(\hat{p}\Psi)\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2m}\int \Phi^*\Phi\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2m}\langle \Phi, \Phi\rangle \geq 0\end{aligned}$$

όπου $\Phi = \hat{p}\Psi$.

Ενώνουμε τις δύο περιοχές σε μία λύση απαιτώντας από τις Ψ_1, Ψ_2 να ικανοποιούν ορισμένες οριακές συνθήκες:

- Η κυματοσυνάρτηση είναι συνεχής και μονότιμη.
- Η πρώτη παράγωγος της Ψ πρέπει να είναι συνεχής και μονότιμη.
- Η κυματοσυνάρτηση πρέπει να παραμένει πεπερασμένη ή να τείνει στο μηδέν όταν $x \to \pm\infty$.

Λύση στην περιοχή Ι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi_1 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1$$

Ορίζουμε $k_1^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} > 0$

$$\Rightarrow \Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

Ο πρώτος όρος αντιπροσωπεύει το προσπίπτον σώμα που κινείται προς τα δεξιά. Ο δεύτερος όρος το ανακλώμενο που κινείται προς τα αριστερά.

Λύση στην περιοχή ΙΙ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2} + V_0\Psi_2 = E\Psi_2$$
$$\Rightarrow \frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\Psi_2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\Psi_2$$

Ορίζουμε

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0$$
$$\Rightarrow \Psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

Από την τρίτη συνοριακή συνθήκη παίρνουμε $D = 0$, αλλιώς θα είχαμε άπειρη πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο για $x = \infty$ στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή.

Από την πρώτη συνοριακή συνθήκη, για $x = 0$:

$$\Psi_1(x=0) = \Psi_2(x=0)$$
$$\Rightarrow A + B = C$$

Από τη δεύτερη ΣΣ:

$$\left.\frac{\mathrm{d}\Psi_1}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0}$$
$$\Rightarrow ik_1A - ik_1B = -k_2C$$

Λύνουμε το σύστημα:

$$\left\{\begin{array}{rcl} A+B &=& C \\ A-B &=& \dfrac{ik_2}{k_1}C \end{array}\right\} \Rightarrow 2A = C\left[1 + \frac{ik_2}{k_1}\right]$$

$$\Rightarrow C = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}A, \qquad B = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}A$$

Χωρίς περιορισμούς στην E (μόνο $E < V_0$) άρα το φάσμα των ενεργειακών ιδιοτιμών είναι συνεχές.

$$\Rightarrow \begin{cases} \Psi_1(x) &= Ae^{ik_1x} + \dfrac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}Ae^{-ik_1x} \\ \\ \Psi_2(x) &= \dfrac{2k_1}{k_1 + ik_2}Ae^{-k_2x} \end{cases}$$

- Δεν υπάρχει λύση για $C = 0$ εάν το V_0 είναι πεπερασμένο!
- Η κυματοσυνάρτηση για $x > 0$ φθίνει εκθετικά.
- Εάν $V_0 \to \infty$

  $$\Rightarrow k_2 \to \infty \text{ και } \Psi \to 0 \text{ για } x > 0 \Rightarrow \Psi_2(x > 0) \to 0,$$

  οπότε για $V_0 = \infty$ έχουμε λύση με $C = 0$. Τότε $\Psi_1(x) = A\sin k_1x$ και $\Psi_1(x = 0) = 0$, εφαρμόζουμε μόνο τη συνθήκη για τη συνέχεια της κυματοσυνάρτησης.
- Βάθος διείσδυσης του σωματιδίου προς τα δεξιά:

  $$\Delta x = \frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

$$\Psi_\pi = Ae^{ik_1x}$$

$$\Psi_\alpha = A\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}e^{-ik_1x}$$

$$\Psi_\delta = A\frac{2k_1}{k_1 + ik_2}e^{-k_2x}$$

Υπολογίζουμε τα ρεύματα πιθανότητας για την *προσπίπτουσα δέσμη* $J_{\pi\rho}$, την *ανακλώμενη* συνιστώσα της δέσμης $J_{\alpha\nu}$ και τη *διερχόμενη* δεξιά συνιστώσα της δέσμης, J_δ.

$$\begin{aligned} J_{\pi\rho} &= -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi_\pi^*\partial_x\Psi_\pi - \Psi_\pi\partial_x\Psi_\pi^*) \\ &= \frac{-i\hbar}{2m}\left\{A^*A(ik_1) - A^*A(-ik_1)\right\} = 2\frac{\hbar k_1}{2m}A^*A = \frac{\hbar k_1}{m}A^*A \end{aligned}$$

αλλά $p_1 = \hbar k_1, \quad v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar}{m}k_1$

$$\Rightarrow J_{\pi\rho} = A^*Av_1$$

$$\begin{aligned} J_{\alpha\nu} &= -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi_a^*\partial_x\Psi_a - \Psi_a\partial_x\Psi_a^*) \\ &= \frac{-i\hbar}{2m}\left\{A^*A\frac{(k_1 - ik_2)(k_1 + ik_2)}{(k_1 + ik_2)(k_1 - ik_2)}(-2ik_1)\right\} = -\frac{\hbar k_1}{m}A^*A \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_\delta &= -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi_\delta^*\partial_x\Psi_\delta - \Psi_\delta\partial_x\Psi_\delta^*) \\ &= \frac{-i\hbar}{1m}\left\{\frac{2k_1}{k_1 + ik_2}\frac{2k_1}{k_1 - ik_2}\left[e^{-k_2x}(-k_2)e^{-k_2x} - e^{-k_2x}(-k_2)e^{-k_2x}\right]\right\} \\ &= \frac{-i\hbar}{2m}\frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2}[\text{μηδέν}] = \text{μηδέν} \end{aligned}$$

Δηλαδή κλασσικά θα μπορούσαμε να πούμε ότι τα σωματίδια περνάνε για $x > 0$, επιβραδύνονται, σταματούν και επιταχύνονται προς τα αριστερά!!!

Ορίζουμε το **συντελεστή Ανάκλασης** R και το **συντελεστή Διέλευσης** T:

$$R = \frac{|J_{\alpha\nu}|}{J_{\pi\rho}}, \quad T = \frac{J_{\delta}}{J_{\pi\rho}}, \qquad T + R = 1$$

Τα R και T είναι η πιθανότητα ανάκλασης και η πιθανότητα διέλευσης, αντίστοιχα.
Εδώ έχουμε:

$$J_{\pi\rho} = \frac{\hbar k_1}{2m}|A|^2, \quad J_{\alpha\nu} = -\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2, \quad J_{\delta} = 0$$
$$\Rightarrow T = 0, \quad R = 1$$

Άρα όλα τα σωματίδια ανακλώνται τελικά· ακόμη και αυτά που περνούν, μέχρι κάποιο βάθος, το σκαλοπάτι δυναμικού προς τα δεξιά.

B. Ενέργεια σωματιδίου $E > V_0$

Λύση στην περιοχή I:

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$
$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

Λύση στην περιοχή II:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\Psi_2$$
$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$$

$$\Rightarrow \Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + \underbrace{D}_{0}e^{-ik_2x}$$

$D = 0$: Δεν υπάρχουν για $x > 0$ σωματίδια που να οδεύουν αριστερά, προσπίπτουσα δέσμη από αριστερά.
Ικανοποιούμε τις συνθήκες για την $\Psi(x)$:

$$\begin{cases} A + B &= C \\ ik_1A - ik_1B &= ik_2C \end{cases}$$

$$\Rightarrow C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A, \qquad B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A$$

Για δεδομένο V_0, όταν $E \to \infty$ έχουμε $k_2 \to k_1 \Rightarrow R \to 0, T \to 1$

$$\begin{cases} \Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + A\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}e^{-ik_1x}, & x < 0 \\ \\ \Psi_2(x) = A\dfrac{2k_1}{k_1 + k_2}e^{ik_2x}, & x > 0 \end{cases}$$

Άρα έχουμε οδεύον κύμα ανακλώμενο προς τα αριστερά για $x < 0$ και οδεύον κύμα που διέρχεται προς τα δεξιά για $x > 0$.
Δεν υπάρχει λύση για $B = 0$, δηλαδή χωρίς ανάκλαση.
Επίσης έχουμε

$$R = \frac{|J_{\alpha\nu}|}{J_{\pi\rho}} = \frac{|B|^2v_1}{|A|^2v_1} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$
$$T = \frac{J_{\delta}}{J_{\pi\rho}} = \frac{|C|^2v_2}{|A|^2v_1} = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}\frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$
$$R + T = 1$$

Εάν εναλλάξουμε το k_1 με το k_2, δηλαδή εάν το σωμάτιο ερχόταν από δεξιά προς τα αριστερά, θα βρούμε τα ίδια ακριβώς R και T.
Άρα η ανάκλαση οφείλεται μόνο στην ανομοιογένεια του δυναμικού γύρω από το $x = 0$.

2.1.3 Ορθογώνιο Φράγμα δυναμικού - Φαινόμενο Σήραγγας

Εξετάζουμε το μονοδιάστατο πρόβλημα με δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{για } x < 0 \\ V_0, & \text{για } 0 < x < a \\ 0, & \text{για } x > a \end{cases}$$

υποθέτοντας και πάλι ότι αρχικά για $x \to -\infty$ ένα σωματίδιο συγκεκριμένης ενέργειας κινείται για $x < 0$ από αριστερά προς τα δεξιά.

A. Ενέργεια σωματιδίου $E < V_0$

(i) $\boxed{x < 0}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi$$

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \Rightarrow \Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}$$

(ii) $\boxed{0 < x < a}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + V_0\Psi = E\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\Psi$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0 \Rightarrow \Psi_2(x) = A_2 e^{k_2x} + B_2 e^{-k_2x}$$

(iii) $\boxed{x > a}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E > 0 \Rightarrow \Psi_3(x) = A_3 e^{ik_1x} + B_3 e^{-ik_1x}$$

Συνοριακές συνθήκες του προβλήματος: $B_3 = 0$. Από δεξιά ($x > a$) υπάρχει μόνο το κύμα (σωματίδιο) που πέρασε δηλαδή το A_3, δεν υπάρχει προσπίπτον από δεξιά.

Οριακές συνθήκες για $x = 0$ και $x = a$:
Στην περιοχή $0 < x < a$ δεν έχουμε διάδοση κύματος, αλλά $\Psi(x) \neq 0$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \Psi_1(x=0) & = & \Psi_2(x=0) \\ \dfrac{\mathrm{d}\Psi_1}{\mathrm{d}x}(x=0) & = & \dfrac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}(x=0) \\ \Psi_2(x=a) & = & \Psi_3(x=a) \\ \dfrac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}(x=a) & = & \dfrac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}(x=a) \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathcal{J} = -\frac{i\hbar}{2m}\left\{\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right\}$$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \tag{2.2}$$

$$ik_1A_1 - ik_1B_1 = k_2A_2 - k_2B_2 \tag{2.3}$$

$$e^{k_2a}A_2 + B_2e^{-k_2a} = A_3e^{ik_1a} \tag{2.4}$$

$$k_2A_2e^{k_2a} - k_2B_2e^{-k_2a} = ik_1A_3e^{ik_1a} \tag{2.5}$$

Λύνω για να βρω τους συντελεστές A, B. Υπάρχει μια αυθαίρετη σταθερά, που ορίζεται από την κανονικοποίηση, η A_1, όλα θα εκφραστούν μέσω της A_1.

Ενδιαφέρομαι κυρίως για την A_3, διότι έτσι θα βρω το **συντελεστή διέλευσης** του σωματιδίου μέσω του φράγματος $E < V_0$

$$T = \frac{J_\delta}{J_{\pi\rho}} = \frac{|A_3|^2\hbar k_1/m}{|A_1|^2\hbar k_1/m} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

όπου A_1 το πλάτος προσπίπτοντος κύματος, B_1 το πλάτος ανακλώμενου κύματος και A_3 το πλατος διαδιδόμενου δεξιά κύματος.

Διαιρώ την εξίσωση (2.3) με ik_1 και προσθέτω στην (2.2):

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ A_1 - B_1 &= \frac{k_2}{ik_1}A_2 - \frac{k_2}{ik_1}B_2 \end{aligned}$$

$$2A_1 = A_2\left(1+\frac{k_2}{ik_1}\right) + B_2\left(1-\frac{k_2}{ik_1}\right)$$

$$\Rightarrow A_1 = A_2\frac{ik_1+k_2}{2ik_1} + B_2\frac{ik_1-k_2}{2ik_1} \tag{2.6}$$

Διαιρώ την (2.5) με k_2 και από τις (2.4), (2.5) έχω:

$$\begin{aligned} A_2e^{k_2a} + B_2e^{-k_2a} &= A_3e^{ik_1a} \\ A_2e^{k_2a} - B_2e^{-k_2a} &= A_3e^{ik_1a}\frac{ik_1}{k_2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2A_2e^{k_2a} &= A_3e^{ik_1a}\left(1+\frac{ik_1}{k_2}\right) \\ 2B_2e^{-k_2a} &= A_3e^{ik_1a}\left(1-\frac{ik_1}{k_2}\right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_2 = A_3e^{(ik_1-k_2)a}\dfrac{k_2+ik_1}{2k_2} & (2.7) \\ B_2 = A_3e^{(ik_1+k_2)a}\dfrac{k_2-ik_1}{2k_2} & (2.8) \end{cases}$$

Βάζοντας τις (2.7) και (2.8) στην (2.6) έχουμε:

$$A_1 = A_3\frac{(k_2+ik_1)^2}{4ik_1k_2}e^{(ik_1-k_2)a} - A_3\frac{(k_2-ik_1)^2}{4ik_1k_2}e^{(ik_1+k_2)a}$$

$$\Rightarrow A_1 = A_3\frac{e^{ik_1a}}{4ik_1k_2}\left[(k_2+ik_1)^2e^{-k_2a} - (k_2-ik_1)^2e^{k_2a}\right]$$

Άρα εάν υπάρχει λύση για μη μηδενική κυματοσυνάρτηση, $A_1 \neq 0$ τότε και $A_3 \neq 0$ αναγκαστικά.
Άρα έχουμε πάντα διέλευση από το φράγμα δυναμικού αν και κλασσικά απαγορεύεται όταν $E < V_0$.

> Το καθαρά κβαντικό αυτό φαινόμενο λέγεται **φαινόμενο σήραγγας**. Θα το δούμε στα αγγλόφωνα βιβλία σαν "tunneling". Η εκπομπή ακτινοβολίας α-σωματιδίου από ραδιενεργούς πυρήνες π.χ. οφείλεται στο φαινόμενο σήραγγας μέσω του πυρηνικού δυναμικού.

Προσοχή: Εάν $k_2a \gg 1$ τότε, αμελώντας το e^{-k_2a} στην προηγούμενη σχέση έχουμε:

(1)

$$A_3 \simeq A_1 e^{-ik_1 a} \frac{4ik_1k_2}{(k_2 - ik_1)^2} e^{-k_2 a}$$

$$\Rightarrow T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \approx \frac{16k_1^2k_2^2}{(k_2^2 + k_1^2)^2} \mathrm{e}^{-2k_2 a} \tag{2.9}$$

(2)

$$\Psi_2(0) = A_2 + B_2 = A_3 e^{ik_1 a}[\Gamma e^{-k_2 a} + \Gamma^* e^{k_2 a}]$$
$$\Psi_2(a) = A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a}[\Gamma + \Gamma^*]$$

$$\Rightarrow \frac{\Psi_2(0)}{\Psi_2(a)} \simeq \Gamma^* e^{k_2 a} \Rightarrow \frac{\Psi_2(a)}{\Psi_2(0)} \simeq \frac{e^{-k_2 a}}{\Gamma^*} \Rightarrow \frac{|\Psi_2(a)|^2}{|\Psi_2(0)|^2} \simeq T$$

όπου

$$\Gamma = \frac{k_2 + ik_1}{2k_2} \qquad \text{και} \qquad \Gamma + \Gamma^* = 1$$

Υπολογισμός του συντελεστή διέλευσης

$$A_1^* A_1 = \frac{A_3^* A_3}{16k_1^2k_2^2} \left\{ \left[(k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a} \right] \cdot \right.$$
$$\left. \cdot \left[(k_2 - ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 + ik_1)^2 e^{k_2 a} \right] \right\} \tag{2.10}$$

Το γινόμενο των δύο όρων ισούται με:

$$\begin{aligned}
&= (k_2 + ik_1)^2 (k_2 - ik_1)^2 e^{-2k_2 a} - (k_2 + ik_1)^4 - (k_2 - ik_1)^4 + \\
&\quad + (k_2 + ik_1)^2 (k_2 - ik_1)^2 e^{2k_2 a} \\
&= (k_2^2 + k_1^2)^2 (e^{2k_2 a} + e^{-2k_2 a}) - \left[(k_2 + ik_1)^4 + (k_2 - ik_1)^4 \right] \\
&= (k_2^2 + k_1^2)^2 (e^{2k_2 a} + e^{-2k_2 a}) - 4(k_2^2 - k_1^2)^2 + 2(k_2^2 + k_1^2)^2 \\
&= (k_2^2 + k_1^2)^2 [e^{2k_2 a} + e^{-2k_2 a} + 2] - 4(k_2^2 - k_1^2)^2 \\
&= (k_2^2 + k_1^2)^2 (e^{k_2 a} + e^{k_2 a})^2 - 4(k_2^2 - k_1^2)^2 \\
&= 4(k_2^2 + k_1^2)^2 \cosh^2(k_2 a) - 4(k_2^2 - k_1^2)^2
\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήθηκε η ταυτότητα

$$(k_2 + ik_1)^4 + (k_2 - ik_1)^4 = 4(k_2^2 - k_1^2)^2 - 2(k_2^2 + k_1^2)^2$$

οπότε η σχέση (2.10) γίνεται:

$$A_1^* A_1 = \frac{A_3^* A_3}{4k_1^2k_2^2} \left\{ (k_2^2 + k_1^2)^2 \cosh^2(k_2 a) - (k_2^2 - k_1^2)^2 \right\}$$

$$\Rightarrow \boxed{T = \frac{A_3^* A_3}{A_1^* A_1} = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_2^2 + k_1^2)^2 \cosh^2(k_2 a) - (k_2^2 - k_1^2)^2}}$$

$$T + R = 1 \Rightarrow R = 1 - T$$

Χρησιμοποιώντας: $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$,

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

$$\Rightarrow T = \left[1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4\dfrac{E}{V_0}\left(1 - \dfrac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1}$$

Εάν το $k_2 a$ είναι μεγάλο, τότε:

$$\sinh(k_2 a) = \frac{1}{2}\left(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a}\right) \to \frac{e^{k_2 a}}{2}$$

$$\Rightarrow T = \left[1 + \frac{e^{2k_2 a}}{16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1} \simeq 16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-2k_2 a},$$

που είναι ίδιο με τη σχέση (2.9)

$$T = \frac{1}{1+\Sigma} \simeq \Sigma^{-1}, \qquad \text{για } \Sigma \gg 1,\ 1+\Sigma \simeq \Sigma$$

άρα όσο μικρότερη η μάζα του σωματιδίου ή όσο μικρότερο το a, ή όσο κοντύτερα το E στο V_0, τόσο μικρότερο το γινόμενο $k_2 a$ και άρα μεγαλύτερο το T, επομένως τόσο πιθανότερη η διέλευση του σωματιδίου από το φράγμα του δυναμικού.

Β. Ενέργεια σωματιδίου $E > V_0$

(i) : $\boxed{x < 0} \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\Psi_1'' = E\Psi_1$

$$\Rightarrow k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \Rightarrow \Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

(ii) : $\boxed{0 < x < a} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_2'' + V_0\Psi_2 = E\Psi_2$

$$\Rightarrow \tilde{k}_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$$

$$\Rightarrow \Psi_2(x) = A_2 e^{i\tilde{k}_2 x} + B_2 e^{-i\tilde{k}_2 x}$$

(iii) : $\boxed{x > a} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_3'' = E\Psi_3$

$$\Rightarrow \Psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}$$

Τώρα δεν έχουμε εκθετική ελάττωση του πλάτους του κύματος. Υπολογίζουμε όμοια τα A_k, B_k.

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_1 &= i\tilde{k}_2 A_2 - i\tilde{k}_2 B_2 \\ A_2 e^{i\tilde{k}_2 a} + B_2 e^{-i\tilde{k}_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \\ i\tilde{k}_2 A_2 e^{i\tilde{k}_2 a} - i\tilde{k}_2 B_2 e^{-i\tilde{k}_2 a} &= ik_1 A_3 e^{ik_1 a} \end{aligned}$$

Οι προηγούμενες σχέσεις είναι παρόμοιες με τις σχέσεις για την περίπτωση ($E < V_0$), αλλά με τη διαφορά ότι όπου $k_2 \to i\tilde{k}_2$ για την τελική σχέση που δίνει το A_3 συναρτήσει του A_1 π.χ.
Ο συντελεστής διέλευσης τώρα είναι:

$$T = \left[1 + \frac{\sin^2(\tilde{k}_2 a)}{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)}\right]^{-1}$$

Παρατηρήσεις

(i) Ακόμη και για $E/V_0 > 1$ υπάρχει πιθανότητα να ανακλαστεί το σωματίδιο.
(ii) Όταν $E/V_0 \gg 1$, τότε $T \to 1$, $R \to 0$.

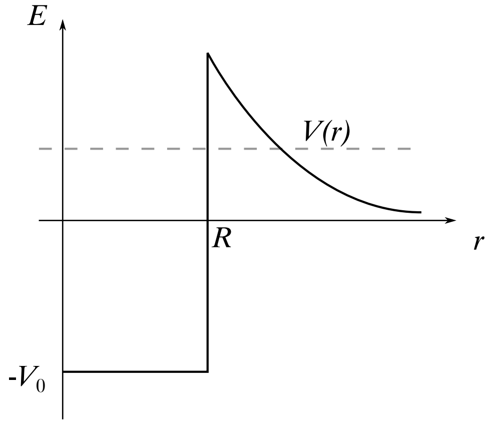
(iii) Για $E/V_0 > 1$, ο συντελεστής διέλευσης εξαρτάται ημιτονοειδώς από το $\tilde{k}_2 a$, άρα για

$$\tilde{k}_2 a = n\pi \Rightarrow T = 1 \text{ με } n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\Rightarrow a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} = n\pi \Rightarrow a^2 \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = n^2\pi^2$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2 + V_0$$

(iv) Το δυναμικό που παρουσιάζεται στον πυρήνα και εμποδίζει τα σωματίδια άλφα να βγουν είναι χονδρικά της μορφής του σχήματος 2.1.



Σχήμα 2.1

Η πιθανότητα διέλευσης έχει τη μορφή $T(E) = f(E)\mathrm{e}^{-2k_2 a}$.
Η συνάρτηση $f(E)$ μεταβάλλεται αργά με την ενέργεια E, ενώ το εκθετικό $e^{-2k_2 a}$ μεταβάλλεται πολύ γρήγορα με το E και το a, και επειδή το πλάτος a του φράγματος ελαττώνεται καθώς αυξάνεται η ενέργεια, ο συντελεστής διέλευσης μεταβάλλεται σημαντικά με μικρές μεταβολές της ενεργειας.
Άρα μεταβολή της ενεργειας κατά μερικά MeV προκαλεί μεταβολή στους χρόνους ημιζωης των ραδιενεργών πυρήνων από 10^{-7} s μέχρι 10^{10} χρόνια.
WKB approximation (Wentzel, Kramers, Brillouin)

(v) Πάμε πάλι στη μορφή του συντελεστή διέλευσης $T(E) \simeq e^{2k_2 a}$ με

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

Έχουμε ότι

$$T(E) \simeq \frac{|\Psi(a)|^2}{|\Psi(0)|^2} \simeq e^{-2k_2 a}$$

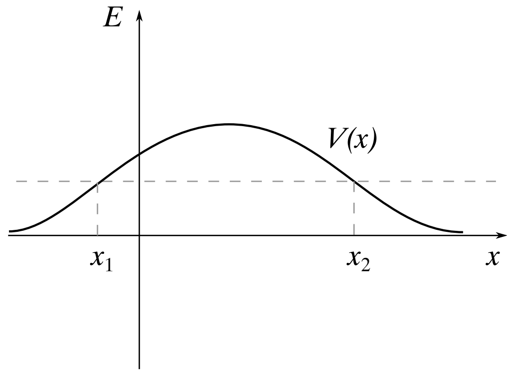
όπου k_2 είναι ο συντελεστής απόσβεσης.

Εάν τώρα το φράγμα δυναμικού δεν έχει την τετραγωνική μορφή όπως προηγουμένως αλλά είναι π.χ. αυτό του σχήματος 2.2.
τότε ο συντελεστής απόσβεσης για ένα τετραγωνικό φράγμα που προσεγγίζει αυτό το δυναμικό αλλάζει με το $x \to k_2(x)$, όπου

$$k_2(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}$$

Μπορούμε στο συντελεστή διέλευσης $T(E)$ να αντικαταστήσουμε τον k_2 με τη μέση τιμή του και έτσι να έχουμε μια πρώτη προσέγγιση για την πιθανότητα διέλευσης ενός σωματιδίου από αυτό το δυναμικό.

$$\Rightarrow \langle k_2 \rangle \equiv \frac{1}{a}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}\,\mathrm{d}x$$



Σχήμα 2.2

$$\Rightarrow \boxed{T(E) = e^{-2\langle k_2\rangle a} = \exp\left\{-2\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}\,\mathrm{d}x\right\}}$$

που αποτελεί τον **τύπο του Gamow** στην Πυρηνική Φυσική.

$$a = x_2 - x_1$$

Ορίζουμε

$$A = \frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2(V(x)-E)}\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow T(E) \simeq e^{-\sqrt{m}A}$$

Άρα έχουμε διαφορετικό πλάτος διέλευσης για σωματίδια διαφορετικής μάζας:

$$\frac{T_1(E)}{T_2(E)} \simeq \frac{e^{-\sqrt{m_1}}}{e^{-\sqrt{m_2}}} \simeq e^{-(\sqrt{m_1}-\sqrt{m_2})}$$

2.2 Διακριτό Φάσμα

2.2.1 Δυναμικό Τετραγωνικού Πηγαδιού Απείρου Βάθους

Α. Μονοδιάστατη περίπτωση

Θα εξετάσουμε πρώτα τη μονοδιάστατη περίπτωση, όπου:

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

Το σωματίδιο είναι περιορισμένο στο διάστημα $0 \leq x \leq a$. Σύμφωνα με το παράδειγμα στην παράγραφο 2, όταν το $V_0 \to \infty$ η κυματοσυνάρτηση $\Psi(x)$ του σωματιδίου μηδενίζεται, δηλαδή για $x > a$ και $x < 0$ στη δική μας περίπτωση.

Εξίσωση του Schrödinger για $0 < x < a$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi \Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi$$

Ορίζουμε $k_x^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow$ Λύση της διαφορικής εξίσωσης

$$\Psi(x) = Ae^{ik_x x} + Be^{-ik_x x}$$

$$\Psi(x=0) = 0 \Rightarrow A + B = 0 \Rightarrow B = -A$$

$$\Psi(x) = 2Ai\sin(k_x x) = C\sin(k_x x)$$

$$\Psi(x=a) = 0 \Rightarrow \sin(k_x a) = 0 \Rightarrow k_x a = n\pi$$

$$\Rightarrow \boxed{k_x = n\frac{\pi}{a},\ n = 1, 2, 3\dots}$$

Για την ενέργεια έχουμε:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k_x^2$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots}$$

Η E_1 είναι η ελάχιστη δυνατή ενέργεια, ή αλλιώς ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης. Η ενέργεια είναι κβαντισμένη, παίρνει δηλαδή συγκεκριμένες διακριτές τιμές.

Κανονικοποιούμε την Κυματοσυνάρτηση:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi\,\mathrm{d}x = 1$$

$$\Rightarrow C^2\int_0^a \sin^2(kx)\,\mathrm{d}x = \frac{C^2}{k}\int_0^{ka=n\pi} \sin^2\omega\,d\omega = \frac{C^2}{n\pi/a}\frac{n\pi}{2} = C^2\frac{a}{2} = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{C = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

$$\Rightarrow \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

με ενέργεια

$$E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Παρατηρήσεις

(i) **Θεώρημα των κόμβων:**
Ο αριθμός των κόμβων (μηδενισμών) αυξάνεται κατά μονάδα καθώς προχωρούμε από τη θεμελιώδη στάθμη (κατάσταση, με μηδέν κόμβους) στις ανώτερες

Εννοούμε εδώ μηδενισμός στο πεδίο ορισμού, δηλαδή $0 < x < a$, και όχι στα άκρα.

(ii) Το φάσμα δεν παρουσιάζει εκφυλισμό, δηλαδή υπάρχει μια μόνο κατάσταση για κάθε ενεργειακή στάθμη.

(iii) Οι ιδιοσυναρτήσεις είναι εναλλάξ άρτιες και περιττές ως προς το μέσο του πηγαδιού:

$$\begin{aligned} E_1 &\to \text{ άρτια} \\ E_2 &\to \text{ περιττή} \\ E_3 &\to \text{ άρτια} \end{aligned}$$

(iv) Κλασσικό όριο $\hbar \to 0$, $m \to \infty$ τότε η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης τείνει στο μηδέν, το φάσμα τείνει στο συνεχές.

(v) Στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών $n \to \infty$ έχουμε

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \to 0,$$

άρα πλησιάζουμε και πάλι το συνεχές φάσμα.

(vi) Σχέση Αβεβαιότητας - Ενέργεια θεμελιώδους στάθμης

$$\Delta x \cdot \Delta p \simeq \hbar$$

Η αβεβαιότητα στη θέση είναι της τάξης του εύρους του πηγαδιού $\Rightarrow \Delta x \simeq a$.
Ακόμη,

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \quad \text{και} \quad \langle p \rangle = 0$$

διότι $\langle [x, H] \rangle = \dfrac{i\hbar}{m} \langle p \rangle$ και $\langle [x, H] \rangle = 0$ για τις δέσμιες καταστάσεις για οποιαδήποτε ιδιοκατάσταση της ενέργειας

$$\Rightarrow (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle \simeq \left(\frac{\hbar}{\Delta x} \right)^2 \simeq \frac{\hbar^2}{a^2}$$

Η μέση τιμή της ενέργειας θα είναι:

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \simeq E_1$$

(vii) **Απόσταση μεταξύ ενεργειακών σταθμών** για μικρά n περίπου ίση με την

$$E_1 \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \simeq \Delta E$$

Άτομο: $m = m_e = 0.5\,\text{MeV}$, $a = R_{\text{τροχιάς}} \simeq 0.5 \times 10^{-8}\,\text{cm}$

$$\Rightarrow \Delta E \simeq \text{eV}$$

Πυρήνας: $m = m_p \simeq 2000\, m_e$, $a = R_{\text{πυρήνα}} \simeq 10^{-13}\,\text{cm}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\Delta E_{\text{πυρ}}}{\Delta E_{\text{ατ}}} \simeq \frac{m_e R^2_{\text{τροχιάς}}}{m_p R^2_{\text{πυρ.}}} \simeq 10^6 \text{ εώς } 10^7}$$

B. Τριδιάστατο κουτί με άπειρα τοιχώματα

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & \text{όταν} \quad \begin{matrix} 0<x<a \\ 0<y<b \\ 0<z<c \end{matrix} \\ \infty, & \text{όταν} \quad \begin{matrix} x<0, & x>a \\ y<0, & y>b \\ z<0, & z>c \end{matrix} \end{cases}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = E\Psi$$

(ελεύθερο σωμάτιο μέσα στο κουτί)

$\Rightarrow$ Λύση από την παρ. 2.1.1 με τη μέθοδο των χωριζομένων μεταβλητών

$$\Psi(x,y,z) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z)$$

Τα Ψ_k είναι επίπεδα κύματα και από τις οριακές συνθήκες λόγω της μονοδιάστατης περίπτωσης (A) έχουμε:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n&=1,2,3,\ldots \\ \Psi_2(x) &= \sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{m\pi y}{b}\right), & m&=1,2,3,\ldots \\ \Psi_3(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{l\pi z}{c}\right), & l&=1,2,3,\ldots \end{aligned}$$

Για την ενέργεια έχουμε:

$$\begin{aligned} E &= E_x + E_y + E_z = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\frac{\hbar^2}{2m} \\ \Rightarrow E &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2 n^2}{a^2} + \frac{\pi^2 m^2}{b^2} + \frac{\pi^2 l^2}{c^2}\right), \end{aligned}$$

δηλαδή η ενέργεια χαρακτηρίζεται από τρεις κβαντικούς αριθμούς.

$$E = E_{nlm}$$

Δίνοντας τα n, l, m ξέρουμε την ενέργεια.

Εκφυλισμός διότι μπορεί να έχουμε την ίδια ενέργεια για πολλές διαφορετικές τριάδες (n, l, m), όταν έχουμε ίδιο μήκος των πλευρών.

> **Παράδειγμα.** Έστω $a = b = c$
>
> $$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n^2 + l^2 + m^2) = \xi(n^2 + l^2 + m^2)$$
>
> $$\begin{aligned} &n=1, l=1, m=1 \Rightarrow E_{111} = 3\xi & &\text{μία στάθμη} \\ &n=2, l=1, m=1 \Rightarrow E = E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\xi & &\text{τρεις στάθμες} \\ &\quad\vdots \end{aligned}$$

2.2.2 Τετραγωνικό πηγάδι Δυναμικού πεπερασμένου βάθους

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{για} \quad -a<x<a \\ V_0, & \text{για} \quad x<-a, x>a \end{cases}$$

Θα λύσουμε το πρόβλημα μόνο για $E < V_0$. Έχουμε τρεις περιοχές:

(i) **Περιοχή I,** $x < -a$**:** $\dfrac{-\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{\mathrm{d}x^2} + V_0\Psi_1 = E\Psi_1$

(ii) **Περιοχή II,** $-a < x < a$**:** $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi_2$

(iii) **Περιοχή III,** $x > a$**:** $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi_3}{\mathrm{d}x^2} + V_0\Psi_3 = E\Psi_3$

Λύση των τριών εξισώσεων Schrödinger:

(I), $x < -a$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\Psi_1$$

$$\boxed{k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \Rightarrow \Psi_1(x) = Ae^{k_1 x} + Be^{-k_1 x}$$

(II), $-a < x < a$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_2$$

$$\boxed{k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E} \Rightarrow \Psi_2(x) = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x}$$

(III), $x > a$

$$\Psi_3(x) = Fe^{k_1 x} + Ge^{-k_1 x}$$

Οριακές συνθήκες: Για $x \to \pm\infty$, η $\Psi(x)$ είναι πεπερασμένη γενικά, και ειδικά τώρα για $x \to \pm\infty$ η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται $\Psi_1(x \to -\infty) \to 0$ και $\Psi_3(x \to \infty) \to 0$

$$\Rightarrow B = 0,\ F = 0$$

$$\Rightarrow \Psi_1(x) = Ae^{k_1 x}, \qquad \Psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$

Ακόμη,

$$\Psi_2(x) = \tilde{C}\sin k_2 x + \tilde{D}\cos k_2 x$$

Τα $\tilde{C}, \tilde{D}$ είναι γενικά μιγαδικοί αριθμοί.

Το δυναμικό $V(x)$ του προβλήματος είναι αναλλοίωτο σε έναν κατοπτρικό μετασχηματισμό. Άρα οι ιδιοσυναρτήσεις της Ενέργειας αναλύονται σε άρτιες και περιττές, και η parity διατηρείται.

A. Άρτιες Κυματοσυναρτήσεις, $\Psi(x) = \Psi(-x)$

$$\Rightarrow A = G, \qquad \tilde{C} = 0$$

$$\Rightarrow \Psi_1(x) = Ae^{k_1 x}, \quad \Psi_2(x) = \tilde{D}\cos(k_2 x), \quad \Psi_3(x) = Ae^{-k_1 x}$$

Οριακές συνθήκες:

$$\left\{\begin{array}{rcl} \Psi_1(-a) & = & \Psi_2(-a) \\ \left.\frac{\mathrm{d}\Psi_1}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-a} & = & \left.\frac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-a} \end{array}\right\} \quad \text{και} \quad \left\{\begin{array}{rcl} \Psi_2(a) & = & \Psi_3(a) \\ \frac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}(a) & = & \frac{\mathrm{d}\Psi_3}{\mathrm{d}x}(a) \end{array}\right\}$$

που είναι ισοδύναμες από τη συμμετρία.

$$\left.\begin{array}{rcl} \tilde{D}\cos(k_2 a) & = & Ae^{-k_1 a} \\ -\tilde{D}k_2\sin(k_2 a) & = & -Ak_1 e^{-k_1 a} \end{array}\right\}$$

τις οποίες διαιρώντας παίρνουμε:

$$\boxed{\tan(k_2 a) = \frac{k_1}{k_2}}$$

B. Περιττές Κυματοσυναρτήσεις, $\Psi(x) = -\Psi(-x)$

$$\Psi_1(x) = Ae^{k_1 x}, \quad \Psi_2(x) = \tilde{C}\sin(k_2 x), \quad \Psi_3(x) = -Ae^{-k_1 x}$$

Οριακές συνθήκες:

$$\left.\begin{aligned} \tilde{C}\sin(k_2 a) &= -Ae^{-k_1 a} \\ \tilde{C}k_2\cos(k_2 a) &= Ak_1 e^{-k_1 a} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\boxed{\tan(k_2 a) = -\frac{k_2}{k_1}}$$

Λύση για τις άρτιες κυματοσυναρτήσεις:

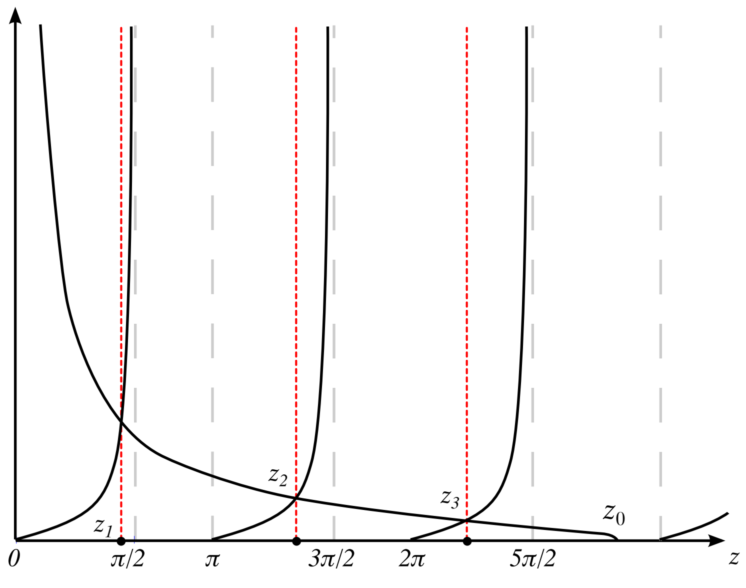
$$\tan(k_2 a) = \frac{k_1}{k_2} = \frac{k_1 a}{k_2 a} = \sqrt{\frac{k_1^2 a^2}{k_2^2 a^2}}$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E), \qquad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$$

$$z = k_2 a, \qquad z^2 = k_2^2 a^2 = \frac{2m}{\hbar^2}Ea^2$$

$$z_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 a^2$$

$$\Rightarrow \tan(z) = \sqrt{\frac{z_0^2 - z^2}{z^2}} = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$$



Σχήμα 2.3: *Γραφική παράσταση για* $z_0 = 8$ *π.χ.*

$$z_k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E_k a^2} \Rightarrow E_k = \frac{\hbar^2 z_k^2}{2ma^2}$$

Λύση για τις περιττές κυματοσυναρτήσεις:

$$\tan(k_2 a) = -\frac{k_2}{k_1} = -\frac{k_2 a}{k_1 a} = -\sqrt{\frac{k_2^2 a^2}{k_1^2 a^2}}$$

Θέτω $k_2 a = z$, οπότε

$$\tan z = -\frac{z}{\sqrt{z_0^2 - z^2}}$$

Κάνουμε γραφική παράσταση των συναρτήσεων $\tan z$ και $z/\sqrt{z_0^2 - z^2}$ με δεδομένο το z_0. Τα σημεία τομής δίνουν τις λύσεις $z_k \Rightarrow E_k$.
Συνολικά λοιπόν για $z_0 = 8$ έχουμε 3 άρτιες και 3 περιττές λύσεις. Για $z_0 \leq \pi/2$ έχουμε μόνο μια λύση (άρτια).

2.2.3 Πηγάδι δυναμικού συνάρτησης δέλτα

$$V(x) = -a\delta(x), \ a > 0$$

A. $\boxed{E < 0}$ $\Rightarrow$ Στάσιμες καταστάσεις

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} - a\delta(x)\Psi = E\Psi$$

για $x \neq 0$ έχουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(-E)\Psi = k^2\Psi$$

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0, \qquad \boxed{k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|}$$

$$\Rightarrow \Psi(x) = \begin{cases} Be^{kx}, & x < 0 \\ Fe^{-kx}, & x > 0 \end{cases}$$

Συνοριακές συνθήκες:

(i) Ψ συνεχής $\Rightarrow B = F \Rightarrow \Psi(x) = Be^{-k|x|}$

(ii) $\Psi'(x)$ συνεχής εκτός από τα σημεία όπου το $V(x)$ απειρίζεται, δηλαδή το $x = 0$.
$\Psi'(x)$ ασυνεχής στο $x = 0 \Rightarrow \Psi''(x = 0)$ απειρίζεται, έτσι ώστε να εξουδετερώνει τη $\delta(x)$ απειρία $\Rightarrow$ Ορίζουμε τα B, E.

Ολοκληρώνουμε την εξίσωση του Schrödinger από το $-\epsilon$ έως το $+\epsilon$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x - a\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\Psi(x) = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\Psi(x)\,\mathrm{d}x$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}(x = +\epsilon) - \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}(x = -\epsilon)\right) - a\Psi(0) = 0,$$

στο όριο $\epsilon \to 0$.

$$\left.\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}\right|_{\epsilon} = -Bk, \quad \left.\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}\right|_{-\epsilon} = Bk, \quad \Psi(0) = B \ (\epsilon \to 0)$$

$$\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}(-2k) = a \Rightarrow \frac{\hbar^2}{m}k = a \Rightarrow k = \frac{ma}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow k^2 = \frac{(ma)^2}{\hbar^4} = \frac{2m}{\hbar^2}|E| \Rightarrow \boxed{|E| = \frac{ma^2}{2\hbar^2}}$$

Κανονικοποίηση: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\Psi(x) = 1$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty}B^2e^{-2k|x|}\,\mathrm{d}x = 1 \Rightarrow 2B^2\int_0^{+\infty}e^{-2kx}\,\mathrm{d}x = 1$$

$$\Rightarrow B^2 = k \Rightarrow B = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Psi(x) = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar}e^{\frac{-ma}{\hbar^2}|x|}}$$

(Εδώ έχουμε μόνο μια ιδιοτιμή της ενέργειας με $E < 0$).

B. $\boxed{E > 0}$ Συνεχές φάσμα

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' - a\delta(x)\Psi = E\Psi$$

$$x \neq 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' = E\Psi \Rightarrow \Psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi$$

$$\Psi'' = -k^2\Psi \Rightarrow \Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},\ x < 0$$

$$\boxed{k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \Psi_2(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx},\ x > 0$$

$G = 0$: Δεν υπάρχει κύμα προσπίπτον από τα δεξιά, εάν έχουμε δέσμη που έρχεται από τα αριστερά.

Συνοριακές συνθήκες: $\Psi_1(0^-) = \Psi_2(0^+) \Rightarrow A + B = F$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\Psi_1}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0^-} = ik(A - B) \qquad \left.\frac{\mathrm{d}\Psi_2}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0^+} = ikF$$

Ολοκλήρωμα της Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[ikF - ik(A - B)] = a(A + B)$$

$$\Rightarrow ik(A + B) - ik(A - B) = -\frac{2ma}{\hbar^2}(A + B)$$

$$\Rightarrow 2ikB = -\frac{2ma}{\hbar^2}(A + B) \Rightarrow B = i\frac{ma}{k\hbar^2}(A + B)$$

Ορίζουμε $\beta = \dfrac{ma}{k\hbar^2}$

$$\Rightarrow \boxed{B = i\frac{\beta}{1 - i\beta}A}$$

Συντελεστής ανάκλασης $\Rightarrow$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2},$$

$$T = 1 - R = \frac{1}{1 + \beta^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

2.3 Μονοδιάστατος Αρμονικός Ταλαντωτής

Κάθε φυσικό σύστημα για μικρές μετατοπισεις από τη θέση ευσταθούς ισορροπίας υπακούει σε μια εξίσωση που δίνει σαν λύση την απλή αρμονική ταλάντωση.
Η δυναμική ενέργεια είναι:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

Κλασσικά έχουμε την εξίσωση κίνησης

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -kx \Rightarrow x'' = -\omega^2 x$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \quad \text{και} \quad x(t) = A\cos\omega t + B\sin\omega t$$

$$\Rightarrow x(t) = x_0\sin(\omega t + \phi)$$

$$E = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$$

2.3.1 Αναλυτική λύση, πολυώνυμα Hermite

Εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi=E\Psi$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{dx^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\Psi=0$$

Ορίζουμε την αδιάστατη μεταβλητή

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x=\sqrt{\alpha}x,\qquad \alpha=\frac{m\omega}{\hbar}\simeq\frac{1}{(\text{μήκος})^2}$$

$$\hbar\omega=\frac{\text{Joule}\cdot\text{sec}}{\text{sec}}\simeq\text{Joule}$$

$$\frac{\hbar}{m\omega}=\frac{\text{Joule}\cdot\text{sec}}{\text{Kgr}\,(\text{sec})^{-1}}\simeq\frac{\text{Nt}\cdot\text{m}\,\text{sec}^2}{\text{Kgr}}$$

$$\frac{\hbar}{m\omega}\simeq\text{Kgr}\frac{\text{m}}{\text{sec}^2}\frac{\text{m}\cdot\text{sec}^2}{\text{Kgr}}\simeq(\text{m})^2$$

$$\xi^2=\frac{m\omega}{\hbar}x^2\qquad\text{αδιάστατο}$$

$$\Rightarrow\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}\sqrt{\alpha}$$

$$\Rightarrow\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{dx^2}=\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}\alpha}$$

$$\Rightarrow\alpha\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E-\alpha\xi^2\right)\Psi=0$$

$$\Rightarrow\quad\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}+\left(\frac{2E}{\omega\hbar}-\xi^2\right)\Psi=0$$

όπου $\Psi(\xi)$ συνεχής, μονότιμη, πεπερασμένη για $-\infty<\xi<+\infty$.

Επίλυση με τη μέθοδο των δυναμοσειρών

Η $\Psi(\xi)$ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και $\Psi(\xi)\to 0$ για $\xi\to\pm\infty$.
Προσδιορίζουμε πρώτα την $\Psi(\xi)$ για τα μεγάλα ξ, δηλαδή πρώτα την ασυμπτωτική της συμπεριφορά. Σε αυτή την περίπτωση το $\dfrac{2E}{\omega\hbar}$ είναι αμελητέο σε σχέση με το ξ^2. Επομένως η εξίσωση προς επίλυση είναι:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}-\xi^2\Psi=0$$

Προσεγγιστικά πάλι αυτή η εξίσωση ικανοποιείται από την $\Psi(\xi)=e^{-\xi^2/2}$.

Απόδειξη:

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}=-\xi e^{-\xi^2/2}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}=\xi^2e^{-\xi^2/2}-e^{-\xi^2/2}$$

άρα ο δεύτερος όρος παραλείπεται,

$$\Rightarrow\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2}=\xi^2e^{-\xi^2/2}=\xi^2\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2} - \xi^2\Psi = 0 \qquad \text{ο.ε.δ}$$

Η λύση της διαφορικής εξίσωσης για όλο το διάστημα ορισμού του ξ ισχυριζόμαστε ότι θα είναι της μορφής:

$$\Psi(\xi) = e^{-\xi^2/2}y(\xi)$$

με $y(\xi)$ πολυώνυμο και όχι άπειρη σειρά, διότι θέλουμε $\Psi(\xi) \to 0$ για $\xi \to \pm\infty$.
Αντικαθιστούμε την $\Psi(\xi)$ στη διαφορική εξίσωση και επιλύουμε τη νέα διαφορική εξίσωση που προκύπτει:

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi} = -\xi e^{-\xi^2/2}y(\xi) + e^{-\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2} = \xi^2 e^{-\xi^2/2}y(\xi) - e^{-\xi^2/2}y(\xi) - \xi e^{-\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi} - \xi e^{-\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}y(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + e^{-\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^2y}{d\xi^2}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{d\xi^2} = e^{-\xi^2/2}\left[\frac{\mathrm{d}^2y}{d\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi} + (\xi^2-1)y(\xi)\right]$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση του Schrödinger έχουμε:

$$\frac{\mathrm{d}^2y}{d\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right)y = 0$$

Θέτουμε: $\dfrac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2\beta$

$$\Rightarrow \boxed{E = \left(\beta + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$

και

$$\frac{\mathrm{d}^2y}{d\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi} + 2\beta y = 0$$

που λέγεται **Διαφορική Εξίσωση του Hermite** με λύση τα πολυώνυμα Hermite.

Η Χαμιλτονιανή είναι αναλλοίωτη στην Parity $\Rightarrow$ χωρίζουμε τις λύσεις σε άρτιες και περιττές.

Λύση:

$$y(\xi) = \sum_{k=0}^{+\infty}\alpha_k\xi^k$$

Αντικαθιστούμε και βρίσκουμε μια αναδρομική σχέση για το α_k.

$$y''(\xi) = \sum_k \alpha_k k(k-1)\xi^{k-2}$$

$$y'(\xi) = \sum_k \alpha_k k\xi^{k-1}$$

$$\xRightarrow[\substack{k=\nu+2\\ k-1=\nu+1}]{\nu=k-2} \overbrace{\underbrace{\sum_{k=0}^{+\infty} a_k k(k-1)\xi^{k-2}}_{\text{αρχίζει από τον όρο } k=2}}^{\sum_{\nu=0}^{\infty}\alpha_{\nu+2}(\nu+2)(\nu+1)\xi^{\nu}} - 2\sum_{k=0}^{+\infty}\alpha_k k\xi^k + 2\beta\sum_{k=0}^{+\infty}\alpha_k\xi^k = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty}\big[\alpha_{k+2}(k+2)(k+1) + \alpha_k(2\beta - 2k)\big]\xi^k = 0,\ \forall\xi \ \Rightarrow\ \text{μηδενίζονται οι συντελεστές του } \xi$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha_{k+2} = \frac{2(k-\beta)\alpha_k}{(k+2)(k+1)}}$$

(α) δίνοντας το συνδυασμό

$$\alpha_0 \neq 0,\ \alpha_1 = 0 \Rightarrow \text{ άρτιες λύσεις}$$

$$\Rightarrow y(\xi) = \alpha_0 \left[1 - \frac{2\beta}{2!}\xi^2 + \frac{2^2}{4!}\beta(\beta-2)\xi^4 + \dots\right]$$

$$\alpha_0,\ \alpha_2 = -\frac{2\beta}{2}\alpha_0,\ \ \alpha_4 = \frac{2(2-\beta)}{3\cdot 4}\alpha_2 = -\frac{4\beta(2-\beta)\alpha_0}{2\cdot 3\cdot 4}$$

$$\text{άρτια λύση},\ \alpha_0 \neq 0.$$

(β) δίνοντας το συνδυασμό

$$\alpha_0 = 0,\ \alpha_1 \neq 0 \Rightarrow \text{ περιττές λύσεις}$$

Το πολυώνυμο αρχίζει με $\xi \to \xi^3 \to \xi^5 \to \dots$ άρα περιττή λύση, $\alpha_1 \neq 0$.

$$y(\xi) = \alpha_1 \left[\xi - \frac{2(\beta-1)}{3!}\xi^3 + \frac{2^2}{5!}(\beta-1)(\beta-3)\xi^5 + \dots\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{\text{H parity διατηρείται}}$$

Για μια αυθαίρετη τιμή του β οι δύο συντελεστές έχουν άπειρους όρους. Η $\Psi(\xi)$ δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

Εάν $\beta =$ ακέραιος $= n$ με $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, οι σειρές τερματίζονται και βρίσκουμε σαν $y(\xi)$ πολυώνυμα.

Επομένως έχουμε:

(i) $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ Διακριτές στάθμες ενέργειας

(ii) $y_0(\xi) = \alpha_0, \quad n = 0,$ $\alpha_0 =$ σταθερά κανονικοποίησης

$y_1(\xi) = \alpha_1\xi, \quad n = 1,$ $\alpha_1 =$ σταθερά κανονικοποίησης

$y_2(\xi) = \alpha_0(1 - 2\xi^2), \quad n = 2,$ $\alpha_0 =$ σταθερά κανονικοποίησης

$y_3(\xi) = \alpha_1\left(\xi - \frac{2}{3}\xi^3\right), \quad n = 3,$ $\alpha_1 =$ σταθερά κανονικοποίησης

$$\Psi_n(\xi) = e^{-\xi^2/2}y_n(\xi) = \tilde{c}_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$$

$H_n(\xi)$ είναι τα πολυώνυμα του Hermite με κατάλληλη κανονικοποίηση.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(\xi)\Psi_n(\xi)\,\mathrm{d}\xi$$

Πολυώνυμα του Hermite:

$$\begin{aligned}
&H_0(\xi) = 1, && \alpha_0 = 1\\
&H_1(\xi) = 2\xi, && \alpha_1 = 2\\
&H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, && \alpha_0 = -2\\
&H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, && \alpha_1 = -12\\
&\quad\vdots
\end{aligned}$$

Τα πολυώνυμα του Hermite έχουν την ιδιότητα

$$H_n(\xi) = (-1)^n H_n(-\xi)$$

και ορίζονται από τη σχέση:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n\left(e^{-\xi^2}\right)}{d\xi^n}$$

Τα πολυώνυμα του Hermite από την προηγούμενη σχέση δεν είναι κανονικοποιημένα.
Σχέση ορθογωνιότητας:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2}\, d\xi = 0, \qquad \text{για } m \neq n$$

Κανονικοποιώντας έχουμε:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(\xi) \Psi_m(\xi)\, \mathrm{d}\xi = \delta_{nm}$$

όπου

$$\Psi_n(\xi) = \tilde{c}_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

και

$$\tilde{c}_n = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}}$$

Ιδιοενέργειες του Αρμονικού ταλαντωτή

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

Ιδιοσυναρτήσεις του Αρμονικού Ταλαντωτή

$$\Psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha} x)$$

$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$n = 0 \Rightarrow \Psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2/2}$$

$$n = 1 \Rightarrow \Psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{2\alpha} x e^{-\alpha x^2/2}$$

$$n = 2 \Rightarrow \Psi_2(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^3}} (4\alpha x^2 - 2) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\vdots$$

Παρατηρήσεις

(i) Οι $\Psi_n(x)$ απλώνονται και στην κλασσικά απαγορευμένη περιοχή, δηλαδή εκεί όπου $E_n < V(x)$, αλλά φθίνουν εκθετικά.

(ii) Αριθμός κόμβων αυξάνει κατά μονάδα καθώς προχωρούμε από τη θεμελιώδη $n = 0$ στην $n = 1$ και μετά στη $n = 2, \ldots$.

(iii) $\Delta x \simeq$ άπλωμα $\Psi_0(x) \simeq \dfrac{1}{\sqrt{2\alpha}}$

$$\Rightarrow (\Delta x)^2 \simeq \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega}$$

(iv) Ενέργεια θεμελιώδους στάθμης

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

Ελάχιστη ενέργεια λόγω της Αρχής της Αβεβαιότητας

$$(\Delta x) \cdot (\Delta p) \simeq \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad \Rightarrow [x,H] = \frac{2i\hbar}{2m}p$$

και

$$[p,H] = -i\hbar m\omega^2 x, \qquad \langle\Psi_n|[x,H]|\Psi_n\rangle = 0 \Rightarrow \langle p\rangle = 0$$

$$\langle\Psi_n|[p,H]|\Psi_n\rangle = 0 \Rightarrow \langle x\rangle = 0$$

$\langle x\rangle = 0,\ \langle p\rangle = 0$ για τον ταλαντωτή σε μια ιδιοκατάσταση της Ενέργειας

$$\Rightarrow \langle p^2\rangle = (\Delta p)^2 \simeq \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$$

$$\langle x^2\rangle = (\Delta x)^2$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle \simeq \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2$$

$$\Rightarrow \text{ ελάχιστο της } \langle E\rangle, \quad \frac{\mathrm{d}\langle E\rangle}{d(\Delta x)} = 0$$

$$\Rightarrow (\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle \simeq \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{προσεγγιστικά.}$$

2.3.2 Τελεστές Δημιουργίας και Καταστροφής

Η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Ορίζουμε όπως πριν μία νέα μεταβλητή

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

ως προς τη νέα μεταβλητή ξ έχουμε

$$\hat{H} = \hbar\omega\left[\frac{1}{2}\xi^2 - \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\right]$$

με ιδιοσυναρτήσεις να είναι συναρτήσεις του ξ.
Ορίζουμε τους τελεστές $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$ συζυγή του $\hat{a}$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{ip_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\xi + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{ip_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\xi - \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

οι τελεστές αυτοί δεν είναι ερμιτιανοί αν και χωριστά οι δύο όροι x, p_x είναι ερμιτιανοί στο χώρο των κανονικοποιήσιμων συναρτήσεων.
Για τους δύο τελεστές $a, a^\dagger$ έχουμε τις σχέσεις μετάθεσης (για συντομία δε βάζουμε το «$\hat{}$»)

$$\begin{aligned}
a^\dagger a &= \frac{1}{2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left\{\xi^2 - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\xi + \xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} - \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\right) + \frac{1}{2}\left[\xi, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right]
\end{aligned}$$

Ισχύει:

$$\left[\xi, \frac{d}{d\xi}\right] = -1$$

$$\Rightarrow \boxed{a^\dagger a = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2}\right) - \frac{1}{2}}$$

Ορίζοντας τον τελεστή $\hat{N} = a^\dagger a$ έχουμε

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

$$\begin{aligned}[a, a^\dagger] &= \frac{1}{2}\left[\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}, \xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right] \\ &= \frac{1}{2}[\xi, \xi] + \frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}, \xi\right] - \frac{1}{2}[\xi, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}] - \frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right] \\ &= \frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right) = 1\end{aligned}$$

$$\Rightarrow [a, a^\dagger] = 1$$

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = a^\dagger$$

$$\Rightarrow aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \Rightarrow aa^\dagger - 1 = a^\dagger a \Rightarrow \hat{N} = aa^\dagger - 1$$

Αν λοιπόν έχουμε μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή N, τότε

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{N}\Psi_\lambda &= \lambda\Psi_\lambda \\ \hat{H}\Psi_\lambda &= \hbar\omega\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\Psi_\lambda \end{cases}$$

Βρίσκουμε λοιπόν τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{N}$.
Για τις ιδιοσυναρτήσεις Ψ του $\hat{N}$ ισχύει:

$$\int \Psi^*(x)\hat{N}\Psi(x)\,\mathrm{d}x = \int \Psi^* a^\dagger a\Psi\,\mathrm{d}x = \int (a\Psi)^*(a\Psi)\,\mathrm{d}x \geq 0$$

άρα έχει θετικές ιδιοτιμές (ή μηδέν).
Αν Ψ_λ ιδιοσυνάρτηση του $\hat{N}$ με ιδιοτιμή λ,

$$\hat{N}\Psi_\lambda = \lambda\Psi_\lambda \Rightarrow N(a\Psi_\lambda) = (\lambda - 1)a\Psi_\lambda$$

Απόδειξη:

Σχέση μετάθεσης $[\hat{N}, a] = -a$

$$\hat{N}a - a\hat{N} = -a \Rightarrow \hat{N}a = a\hat{N} - a \quad \text{και} \quad \hat{N}\Psi_\lambda = \lambda\Psi_\lambda$$

$$\Rightarrow \hat{N}(a\Psi_\lambda) = a\hat{N}\Psi_\lambda - a\Psi_\lambda = (\lambda - 1)a\Psi_\lambda$$

και

$$\hat{N}(a^2\Psi_\lambda) = \hat{N}a(a\Psi_\lambda) = (aN - a)a\Psi_\lambda = aN(a\Psi_\lambda) - a^2\Psi_\lambda = (\lambda - 2)a^2\Psi_\lambda$$

$$\hat{N}(a^3\Psi_\lambda) = \hat{N}a(a^2\Psi_\lambda) = (a\hat{N} - a)a^2\Psi_\lambda = a\hat{N}(a^2\Psi_\lambda) - a^3\Psi_\lambda = a(\lambda - 2)a^2\Psi_\lambda - a^3\Psi_\lambda = (\lambda - 3)a^3\Psi_\lambda$$

$$\Rightarrow \hat{N}(a^\rho\Psi_\lambda) = (\lambda - \rho)a^\rho\Psi_\lambda$$

με $\lambda - \rho \geq 0$. Για αρκετά μεγάλο ρ όμως ($\rho > \lambda$) εμφανίζεται μια ιδιοσυνάρτηση με αρνητική ιδιοτιμή, αδύνατον. Η λύση στο πρόβλημα αυτό είναι ότι υπάρχει αριθμός $k : a^k\Psi_\lambda = 0$. Όμοια $\forall l > k$, $a^l\Psi_\lambda = a^{l-k}a^k\Psi_\lambda = 0$

$$\Rightarrow \hat{N} a^{k-1}\Psi_\lambda = (\lambda - (k-1)) a^{k-1}\Psi_\lambda$$

βάζουμε $\hat{N} = a^\dagger a$ οπότε θα έχουμε

$$\Rightarrow a^\dagger a^k \Psi_\lambda = (\lambda - (k-1))\, a^{k-1}\Psi_\lambda$$

Επειδή $a^k\Psi_\lambda = 0 \Rightarrow \lambda = k-1 =$ ακέραιος

$$\Rightarrow \lambda = n, \quad \text{ακέραιος αριθμός}$$

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$

με $n = 0, 1, 2, \ldots, \infty$.

$$k = n + 1 = \lambda + 1$$
$$\lambda = 0 \Rightarrow k = 1 \Rightarrow \Psi_0, a\Psi_0 = 0$$
$$\lambda = 1 \Rightarrow k = 2 \Rightarrow \Psi_1, a^2\Psi_1 = 0$$

Ορισμός της θεμελιώδους στάθμης Ψ_0:

$$\hat{N}\Psi_0 = 0 \Rightarrow a^\dagger(a\Psi_0) = 0$$
$$a\Psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\Psi_0 = 0$$
$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}\Psi_0}{\mathrm{d}\xi} = -\xi\Psi_0 \Rightarrow \Psi_0(\xi) = \tilde{c}e^{-\xi^2/2}$$

και

$$\Psi_0(x) = c\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}}$$

Κανονικοποιώντας έχουμε:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^*(x)\Psi_0(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_0^*(\xi)\Psi_0(\xi)\mathrm{d}\xi = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2}\mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi} \Rightarrow \tilde{c} = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}$$

$$\boxed{\Rightarrow c = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}}$$

Θεώρημα 2.1. *Οι διακριτές τιμές της Ενέργειας E_n ενός μονοδιάστατου προβλήματος είναι μη εκφυλισμένες.*

Απόδειξη. Έστω δύο λύσεις Ψ_1, Ψ_2 για την ίδια ιδιοτιμή:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_1}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\big(V(x) - E\big)\Psi_1 \Rightarrow \frac{1}{\Psi_1}\Psi_1'' = \frac{2m}{\hbar}\left(V(x) - E\right)$$
$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi_2}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\big(V(x) - E\big)\Psi_2 \Rightarrow \frac{1}{\Psi_2}\Psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)$$
$$\Rightarrow \frac{1}{\Psi_1}\Psi_1'' = \frac{1}{\Psi_2}\Psi_2'' \Rightarrow \Psi_2\Psi_1'' = \Psi_1\Psi_2''$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2'\right) = 0$$
$$\Rightarrow \Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2' = \text{ σταθερό } = \text{ μηδέν}$$

διότι $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_1'\Psi_2' \to 0$ για $x \to \pm\infty$

$$\Rightarrow \frac{\Psi_1'}{\Psi_1} = \frac{\Psi_2'}{\Psi_2} \Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\ln\Psi_1) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\ln\Psi_2\right)$$
$$\Rightarrow \Psi_1 = c\Psi_2$$

□

Στον ταλαντωτή όπου $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$, μη εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{H} \Rightarrow$ μη εκφυλισμένες ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{N}$.

Αναδρομικός υπολογισμός των $\Psi_n(\xi)$: Έχουμε $Na^\dagger - a^\dagger N = a^\dagger$

$$\Rightarrow N(a^\dagger\Psi_0) = a^\dagger N\Psi_0 + a^\dagger\Psi_0 = 0 + a^\dagger\Psi_0 = a^\dagger\Psi_0$$

άρα η συνάρτηση $a^\dagger\Psi_0$ είναι ιδιοσυνάρτηση του N με ιδιοτιμή $\lambda_1 = 1 \Rightarrow \Psi_1 \simeq a^\dagger\Psi_0$

$$N(a^\dagger\Psi_1) = a^\dagger N\Psi_1 + a^\dagger\Psi_1 = 2(a^\dagger\Psi_1)$$

άρα η συνάρτηση $a^\dagger\Psi_1 = (a^\dagger)^2\Psi_0$ είναι ιδιοσυνάρτηση του $\hat{N}$ με ιδιοτιμή $\lambda_2 = 2$

$$\Rightarrow \Psi_2 \simeq (a^\dagger)^2\Psi_0$$

Η σταθερή αναλογίας βρίσκεται από την κανονικοποίηση.

Συνεχίζοντας με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε

$$\Psi_n \simeq (a^\dagger)^n\Psi_0$$

και με κανονικοποίηση

$$\boxed{\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n\Psi_0}$$

Υπολογίζουμε τώρα το συντελεστή κανονικοποίησης:

Θα δείξουμε ότι:

$$\begin{cases} a^\dagger\Psi_n &= \sqrt{n+1}\Psi_{n+1} \\ a\Psi_n &= \sqrt{n}\Psi_{n-1} \end{cases}$$

Γενικά όπως είδαμε ισχύει:

$$\begin{cases} a^\dagger\Psi_n &= \beta_n\Psi_{n+1} \\ a\Psi_n &= \gamma_n\Psi_{n-1} \end{cases}$$

$$N\Psi_n = n\Psi_n$$

$$\Rightarrow a^\dagger a\Psi_n = n\Psi_n$$

$$(aa^\dagger - 1)\Psi_n = n\Psi_n$$

$$\Rightarrow aa^\dagger\Psi_n = (n+1)\Psi_n$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(aa^\dagger\Psi_n)\mathrm{d}x = (n+1)\underbrace{\int\Psi_n^*\Psi_n\mathrm{d}x}_{=1} = (n+1)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(aa^\dagger\Psi_n)\mathrm{d}x = \int(a^\dagger\Psi_n)^*(a^\dagger\Psi_n)\mathrm{d}x = \beta_n^*\beta_n\underbrace{\int\Psi_{n+1}^*\Psi_{n+1}\mathrm{d}x}_{=1} = \beta_n^*\beta_n$$

$$\Rightarrow \beta_n^*\beta_n = n+1 \Rightarrow \beta_n = \sqrt{n+1}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(a^\dagger a\Psi_n)\mathrm{d}x = n\int\Psi_n^*\Psi_n\mathrm{d}x = n$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*(a^\dagger a\Psi_n)\mathrm{d}x = \int(a\Psi_n)^*(a\Psi_n)\mathrm{d}x = \gamma_n^*\gamma_n\int\Psi_{n-1}^*\Psi_{n-1}\mathrm{d}x = \gamma_n^*\gamma_n$$

$$\Rightarrow \gamma_n^*\gamma_n = n \Rightarrow \gamma_n = \sqrt{n}$$

$$\Psi_n = c_n(a^\dagger)^n\Psi_0$$

Ξέρουμε ότι $\Psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger \Psi_n$

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= a^\dagger \Psi_0 \\
\Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger \Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 \Psi_0 \\
\Psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^3 \Psi_0 \\
&\vdots \\
\Psi_n &= \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger \Psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} (a^\dagger)^2 \Psi_{n-2} = \ldots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \Psi_0
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

$$\Psi_1 = a^\dagger \Psi_0 = \frac{c}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \right) \mathrm{e}^{-\xi^2/2} = \frac{c}{\sqrt{2}} (2\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

$$\Psi_1 = \frac{c}{\sqrt{2}} H_1(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

Γενικά,

$$\boxed{\Psi_n = c \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad c = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}}$$

όπου $H_n(\xi)$ είναι πολυώνυμα του Hermite τάξης n.
$\hat{a}^\dagger$ ο **τελεστής δημιουργίας** και $\hat{a}$ ο **τελεστής καταστροφής** (οι δύο αυτοί τελεστές ονομάζονται **τελεστές κλίμακας**) και $\hat{N} = \hat{a}^+ a$ ο **τελεστής αριθμού κβάντων**.

$$\begin{aligned}
(\Psi_m, \hat{N} \Psi_n) &= n \delta_{mn} \\
(\Psi_m, a^\dagger \Psi_n) &= \sqrt{n+1} (\Psi_m, \Psi_{n+1}) = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \\
(\Psi_m, a \Psi_n) &= \sqrt{n} (\Psi_m, \Psi_{n-1}) = \sqrt{n} \delta_{m,n-1}
\end{aligned}$$

$$a^\dagger \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \right) \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \tag{2.11}$$

$$a \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \right) \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1} \tag{2.12}$$

Προσθέτοντας τις (2.11) και (2.12) κατά μέλη:

$$\frac{2}{\sqrt{2}} \xi \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} + \sqrt{n} \Psi_{n-1}$$

Αφαιρώντας κατά μέλη:

$$\frac{2}{\sqrt{2}} \frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\mathrm{d}\xi} = \sqrt{n} \Psi_{n-1} - \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}$$

Άσκηση: Υπολογισμός του $\langle V \rangle_n = \langle n | V | n \rangle$

$$\langle V \rangle_n = \langle \Psi_n, \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi_n \rangle$$

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \Psi_n = \xi \Psi_n = \frac{\sqrt{2}}{2} \left(\sqrt{n+1} \Psi_{n+1} + \sqrt{n} \Psi_{n-1} \right)$$

$$\frac{m\omega}{\hbar} x^2 \Psi_n = \xi (\xi \Psi_n) = \frac{\sqrt{2}}{2} \left(\sqrt{n+1} \xi \Psi_{n+1} + \sqrt{n} \xi \Psi_{n-1} \right)$$

$$\frac{m\omega}{\hbar}x^2\Psi_n = \frac{\sqrt{2}}{2}\frac{\sqrt{2}}{2}\left[\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\Psi_{n+2} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\Psi_n + \sqrt{n}\sqrt{n}\Psi_n + \sqrt{n}\sqrt{n-1}\Psi_{n-2}\right]$$

$$\frac{m\omega}{\hbar}x^2\Psi_n = \frac{1}{2}\left[\sqrt{(n+1)(n+2)}\Psi_{n+2} + (n+1)\Psi_n + n\Psi_n + \sqrt{n(n-1)}\Psi_{n-2}\right]$$

$$\begin{aligned}\langle V\rangle_n &= \frac{1}{2}m\omega^2\langle\Psi_n, x^2\Psi_n\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega\langle\Psi_n, \frac{m\omega}{\hbar}x^2\Psi_n\rangle \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}\left[\langle\Psi_n|(n+1)\Psi_n\rangle + \langle\Psi_n|n\Psi_n\rangle\right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}(n+1+n) = \frac{\hbar\omega}{4}(2n+1) \\ &\Rightarrow \langle V\rangle_n = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\end{aligned}$$

$$\langle T\rangle_n = \frac{1}{2m}\langle p^2\rangle_n = \frac{1}{2m}\langle\Psi_n, P^2\Psi_n\rangle = \ldots$$

$$\begin{aligned}p\Psi_n &= -i\hbar\frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\mathrm{d}x} = -i\hbar\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\mathrm{d}\xi} \\ &= -i\hbar\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{\sqrt{2}}{2}\left[\sqrt{n}\Psi_{n-1} - \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}\right]\end{aligned}$$

$$p^2\Psi_n = -\hbar^2\frac{m\omega}{\hbar}\frac{\sqrt{2}}{2}\left[\sqrt{n}\frac{\mathrm{d}\Psi_{n-1}}{\mathrm{d}\xi} - \sqrt{n+1}\frac{\mathrm{d}\Psi_{n+1}}{\mathrm{d}\xi}\right] = \ldots$$

$$\frac{1}{2m}p^2\Psi_n = -\frac{\hbar\omega}{4}\sqrt{2}\left[\sqrt{n}\frac{\mathrm{d}\Psi_{n-1}}{\mathrm{d}\xi} - \sqrt{n+1}\frac{\mathrm{d}\Psi_{n+1}}{\mathrm{d}\xi}\right] = \ldots$$

$$\langle n|H|n\rangle = E_n = \langle T\rangle_n + \langle V\rangle_n$$