



Κβαντική Θεωρία της Ύλης

Διδάσκων: Λευτέρης Λοιδωρίκης
Π11, 7146, elidorik@cc.uoi.gr
cmsl.materials.uoi.gr/elidorik

Κβαντομηχανική σε μία διάσταση

Στατιστική ερμηνεία κυματοσυνάρτησης

- **Max Born (1925):**

- η κυματοσυνάρτηση εμπεριέχει όλες τις πληροφορίες σχετικά με το σωματίδιο (εν γένει συνάρτηση του χώρου και του χρόνου)
- η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στο απειροστό διάστημα dx γύρω από το x



$$P(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx$$

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$$

- δεν μπορούμε να μετρήσουμε το Ψ , μόνο το μέτρο του στο τετράγωνο, που εκφράζει πυκνότητα πιθανότητας
- η Ψ πρέπει να είναι ομαλή και μονότιμη. Το ίδιο και η παράγωγός της

Κανονικοποίηση

- Το άθροισμα όλων των πιθανοτήτων είναι μονάδα
 - το σωματίδιο κάπου πρέπει να βρίσκεται

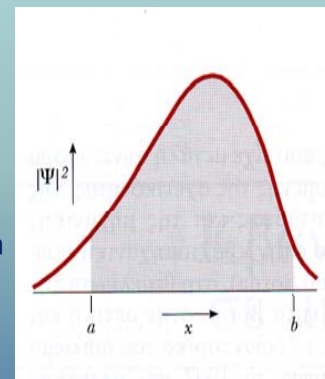
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

συνθήκη κανονικοποίησης

- Πιθανότητα να βρίσκεται στο διάστημα $a < x < b$

$$P_{ab} = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx$$

η Ψ εννοείται κανονικοποιημένη



- εαν δεν είναι κανονικοποιημένη

$$P_{ab} = \frac{\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx}$$

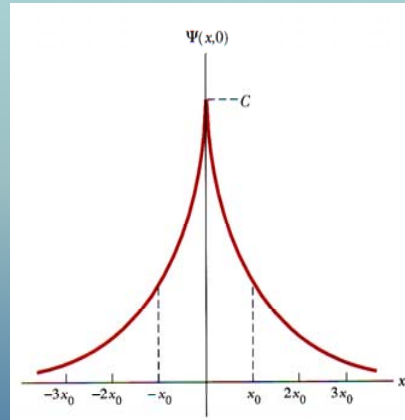


Παράδειγμα 5.1

- Έστω η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου

$$\Psi(x,0) = Ce^{-|x|/x_0}$$

- απεικονίστε την γραφικά
- κανονικοποιήστε την (βρείτε το C)



$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = 1 \Rightarrow C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2|x|/x_0} dx = 1$$

$$\Rightarrow C^2 = \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2|x|/x_0} dx} = \frac{1}{x_0}$$

$$\Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{x_0}}$$



Παράδειγμα 5.1

- Υπολογισμός ολοκληρώματος

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2|x|/x_0} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{-2x/x_0} dx$$

$$\text{- αντικατάσταση } y = \frac{2x}{x_0}$$

$$\Rightarrow x = y \frac{x_0}{2}, \quad dx = dy \frac{x_0}{2}$$

$$2 \int_0^{+\infty} e^{-2x/x_0} dx = 2 \frac{x_0}{2} \int_0^{+\infty} e^{-y} dy = x_0 (-e^{-y}) \Big|_0^{+\infty} = -x_0 (e^{-\infty} - e^{-0}) = x_0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2|x|/x_0} dx = x_0$$



Παράδειγμα 5.2

- Στο προηγούμενο παράδειγμα, ποιά η πιθανότητα το σωματίδιο να βρίσκεται σε

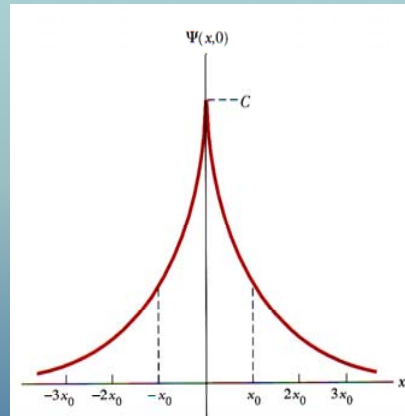
$$-x_0 \leq x \leq x_0$$

$$P = \int_{-x_0}^{x_0} |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-x_0}^{x_0} \left| \frac{1}{\sqrt{x_0}} e^{-|x|/x_0} \right|^2 dx$$

$$\Rightarrow P = \frac{2}{x_0} \int_0^{x_0} e^{-2x/x_0} dx$$

$$\Rightarrow P = \frac{2}{x_0} \frac{x_0}{2} \int_0^2 e^{-y} dy = -(e^{-2} - e^{-0})$$

$$\Rightarrow P = 1 - e^{-2} = 0.8647 = 86.47\%$$



Κβαντική vs Κλασική

- Κλασική μηχανική

- χρονική εξέλιξη: νόμος Νεύτωνα

- θέση $x(t)$

- ταχύτητα $v(t) = \dot{x}(t)$

- επιτάχυνση $a(t) = \ddot{x}(t)$

- Κβαντική μηχανική

- Κυματοσυνάρτηση: εξίσωση Schrödinger (χρονοανεξάρτητη)

$$\Psi(x,0)$$

- Χρονική εξέλιξη: εξίσωση Schrödinger

$$\Psi(x,t)$$



Ελεύθερο σωματίδιο

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- **Ελεύθερο σωματίδιο** → δεν ασκείται καμία δύναμη

- σταθερή ορμή

$$p = \hbar k$$

- σταθερή ενέργεια

$$E = \hbar \omega$$

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

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

- **Η λύση ένα απλό επίπεδο κύμα με**

- χωρική συχνότητα k

- χρονική συχνότητα ω

$$\Psi_k(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

$$\Psi_k(x, t) = A \cos(kx - \omega t) + iA \sin(kx - \omega t)$$



Ελεύθερο σωματίδιο στην πράξη

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ένα επίπεδο κύμα είναι αφύσικη λύση

- εκτείνεται παντού, ενώ ένα σωματίδιο έχει κάποιον εντοπισμό

- Χρησιμοποιούμε μια επαλληλία επίπεδων κυμάτων

$$\Psi(x, 0) = \sum_k a_k e^{ikx}$$

- σε ελεύθερο σωματίδιο όλα τα k επιτρέπονται, το άθροισμα γίνεται ολοκλήρωμα

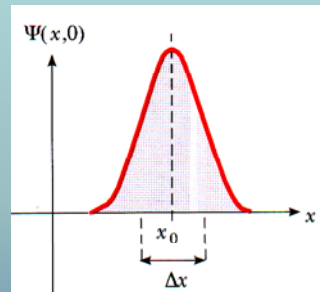
$$\Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{ikx} dk$$

- τα πλάτη $a(k)$ βρίσκονται από την θεωρία ολοκληρωμάτων Fourier

$$a(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx$$

- **Χρονική εξέλιξη**

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{i\{kx - \omega(k)t\}} dk$$



Ελεύθερο σωματίδιο

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- **Πυκνότητα πιθανότητας**

- το σωματίδιο έχει ισόποση πιθανότητα να βρεθεί οπουδήποτε

$$P = |\Psi_k(x, t)|^2 = |Ae^{i(kx - \omega t)}|^2 = |A|^2$$

- **Απροσδιοριστία στην θέση**

$$\Delta x = \infty$$

- **Ορμή σωματιδίου**

$$p = \hbar k$$

- **Απροσδιοριστία στην ορμή**

$$\Delta p = 0$$



Θεωρία ολοκληρωμάτων Fourier

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- **Αρχική εξίσωση:** $\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{ikx} dk$

- Πολλαπλασιάζουμε με $e^{-ik'x}$ και ολοκληρώνουμε σε όλο τον χώρο

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-ik'x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{i(k-k')x} dx dk$$

- Στο δεξί μέρος εκτελούμε πρώτα την ολοκλήρωση κατά x , και μετά κατά k .

$$\int_{-\infty}^{+\infty} a(k) \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k-k')x} dx \right\} dk = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) \delta(k - k') dk = a(k')$$

- Η συνάρτηση $\delta(y)$ του Dirac: είναι μη-μηδενική μόνο για $y \rightarrow 0$

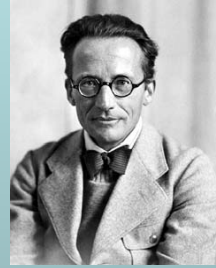
- **Τελικό αποτέλεσμα:** $a(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx$



Εξίσωση Schrödinger

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Erwin Schrödinger (1926)



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

- Η συνάρτηση $U(x)$ είναι η δυναμική ενέργεια
 - Η δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο είναι $F = -\frac{dU}{dx}$

- Η εξίσωση Schrödinger είναι μια έκφραση του νόμου διατήρησης ενέργειας
 - για επίπεδο κύμα $\Psi_k(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \{e^{i(kx-\omega t)}\} = (ik)^2 \{e^{i(kx-\omega t)}\} \quad \frac{\partial}{\partial t} \{e^{i(kx-\omega t)}\} = (-i\omega) \{e^{i(kx-\omega t)}\}$$

- η εξίσωση Schrödinger γίνεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (ik)^2 \{e^{i(kx-\omega t)}\} + U \{e^{i(kx-\omega t)}\} = i\hbar (-i\omega) \{e^{i(kx-\omega t)}\}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U = \hbar\omega \Rightarrow \frac{p^2}{2m} + U = E$$



Τελεστές ορμής και ενέργειας

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ορίζουμε τον τελεστή της ορμής $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
 - η δράση του πάνω σε ένα επίπεδο κύμα
$$\hat{p} \cdot e^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar (ik) e^{i(kx-\omega t)} = \hbar k e^{i(kx-\omega t)} = p e^{i(kx-\omega t)}$$

- Ορίζουμε τον τελεστή της ολικής ενέργειας $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
 - η δράση του πάνω σε ένα επίπεδο κύμα
$$\hat{E} \cdot e^{i(kx-\omega t)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i(kx-\omega t)} = i\hbar (-i\omega) e^{i(kx-\omega t)} = \hbar\omega e^{i(kx-\omega t)} = E e^{i(kx-\omega t)}$$

- Ορίζουμε τον τελεστή της κινητικής ενέργειας $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
 - η δράση του πάνω σε ένα επίπεδο κύμα
$$\hat{K} \cdot e^{i(kx-\omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(kx-\omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2) e^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{i(kx-\omega t)} = K e^{i(kx-\omega t)}$$

- Ορίζουμε τον τελεστή της Χαμιλτονιανής $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$

- Εξίσωση Schrödinger $\hat{H}\Psi(x,t) = \hat{E}\Psi(x,t)$



Λύση χρονικής εξέλιξης

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Έστω ότι η $\Psi(x,0)$ είναι γνωστή. Πως βρίσκουμε την $\Psi(x,t)$;
 - γνωρίζοντας την παράγωγο (κλίση) ως προς την χρόνο (ανάπτυγμα Fourier)

$$\Psi(x,t+\delta t) \cong \Psi(x,t) + \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \delta t$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) \right]$$

- μετά από κάθε βήμα, ξανα-υπολογίζουμε την παράγωγο ως προς χρόνο

υπολογιστική μεθοδολογία

→ υπολογισμός κλίσης στον χρόνο t
 → προσδιορισμός νέας κυματοσυνάρτησης στον $t+\delta t$



Υπολογισμός ιδιοσυναρτήσεων

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Χωρισμός μεταβλητών: $\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 [\psi(x)\phi(t)]}{\partial x^2} + U(x)[\psi(x)\phi(t)] = i\hbar \frac{\partial [\psi(x)\phi(t)]}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \phi(t) + U(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar \psi(x) \frac{\partial \phi(t)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x) = i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x) = E \quad i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = E$$

- Χρονο-ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

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

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t)$$



Υπολογισμός ιδιοσυναρτήσεων

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Χρονική εξέλιξη $i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t) \Rightarrow \frac{d\phi}{\phi} = \frac{E}{i\hbar} dt$

$$\Rightarrow \int \frac{d\phi}{\phi} = \int -i \frac{E}{\hbar} dt \quad \Rightarrow \ln \phi = -i \frac{E}{\hbar} t \quad \Rightarrow \phi(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t} = e^{-i\omega t}$$

- Χρονοανεξάρτητη κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$
 - ομαλή, πεπερασμένη, μονοσήμαντη, με συναχή παράγωγο
- για μηδέν δυναμικό (μηδέν δυνάμεις, ελεύθερα σωματίδια)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$$

$$\Rightarrow \psi'' + k^2\psi = 0 \quad \Rightarrow \psi(x) = e^{ikx} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

- επίπεδα κύματα $\Psi_k(x,t) = \psi_k(x)\phi(t) = e^{ikx} e^{-i\omega t}$



Ιδιοσυναρτήσεις: στάσιμες καταστάσεις

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ιδιοσυνάρτηση: η λύση $\psi(x)$ της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger
- Η πυκνότητα πιθανότητας για μια ιδιοσυνάρτηση
 - όταν δηλαδή είναι σε μορφή χωρισμού μεταβλητών

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2 |e^{-i\omega t}|^2 = |\psi(x)|^2$$

στις ιδιοσυναρτήσεις δεν μεταβάλλεται η κατανομή πιθανοτήτων
- στάσιμα κύματα (π.χ. ατομικά τροχιακά)

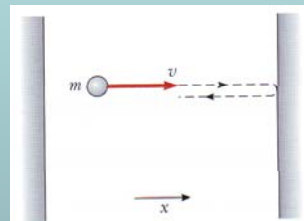


Σωματίδιο σε κουτί

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ελεύθερο σωματίδιο περιορισμένο στον χώρο

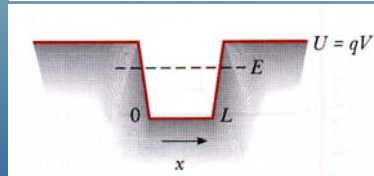
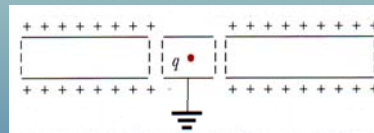
- η κλασική εικόνα:
 - ελεύθερη κίνηση μέσα στο κουτί
 - ελαστική ανάκλαση στα τοιχώματα
 - κανένας περιορισμός για την ενέργεια του σωματιδίου (μπορεί να γίνει και μηδέν)



- Η κβαντική εικόνα
 - αρχή της απροσδιοριστίας
 - κβάντωση ενέργειας

- Απλουστευμένο πρόβλημα: απειρόβαθο πηγάδι

- ή απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού
- $V \rightarrow \infty$
- $U(x) = 0$ για $0 < x < L$
- $U(x) = \infty$ για $x < 0$ και $x > L$
 - το σωματίδιο ΔΕΝ μπορεί να υπάρξει έξω από το κουτί



Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ψάχνουμε για σταθερές λύσεις (ιδιοσυναρτήσεις, στάσιμες λύσεις)
 - λύνουμε την χρονο-ανεξάρτητη εξίσωση

- Εξίσωση Schrödinger

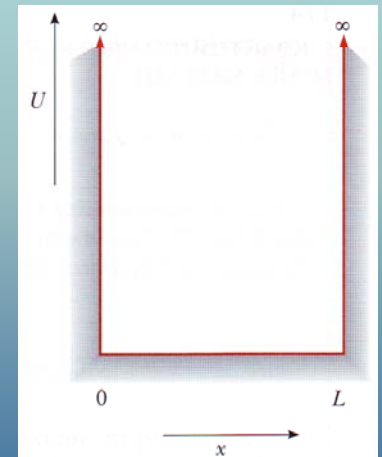
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- Μέσα στο πηγάδι $U(x)=0$

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

- Έξω από το πηγάδι $U(x)=\infty \Rightarrow \psi(x) = 0$
 - συνοριακές συνθήκες:

$$\psi(0) = 0 \quad \psi(L) = 0$$



Κβάντωση: Βρείτε τις επιτρεπτές ενέργειες E και κυματοσυναρτήσεις



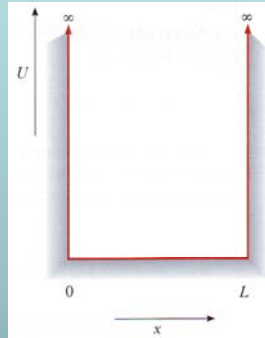
Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Χρονο-ανεξάρτητη εξίσωση (μέσα στο κουτί)

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

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$



- Πιθανές λύσεις της χρονο-ανεξάρτητης εξίσωσης

$$\left. \begin{aligned} \psi(x) &\propto \cos(kx) \\ \psi(x) &\propto \sin(kx) \\ \psi(x) &\propto e^{ikx} \\ \psi(x) &\propto e^{-ikx} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{Κάθε μια ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger} \\ &\text{Ποιά όμως διαλέγουμε ως λύση;} \\ &\text{Με τί κριτήριο επιλέγουμε;} \\ &\text{Επιλέγουμε έναν γραμμικό συνδυασμό πιθανών λύσεων} \\ &\text{Επιβάλλουμε τις συνοριακές συνθήκες} \end{aligned}$$

$$\psi(0) = 0 \quad \psi(L) = 0$$

- Η κβάντωση προκύπτει λόγω των συνοριακών συνθηκών



Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Γενική λύση

- με στάσιμα κύματα

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

- ή με επίπεδα κύματα

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

- και τα δύο είναι ισοδύναμα, καθώς

$$2 \cos(kx) = e^{ikx} + e^{-ikx}$$

$$2i \sin(kx) = e^{ikx} - e^{-ikx}$$

- Λύση: Βρείτε τις σταθερές A, B που ικανοποιούν τις συνοριακές συνθήκες

- με τα στάσιμα κύματα είναι πιο εύκολο

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

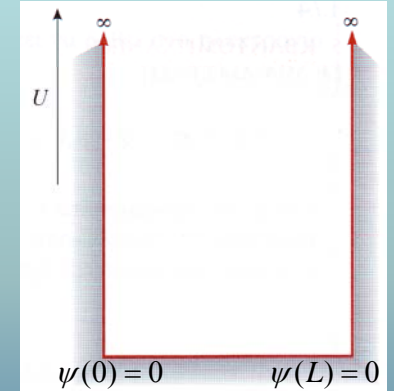
$$\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$$

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow kL = n\pi$$

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

n: οποιοσδήποτε θετικός ακέραιος

- Η κβάντωση προκύπτει λόγω των συνοριακών συνθηκών



Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

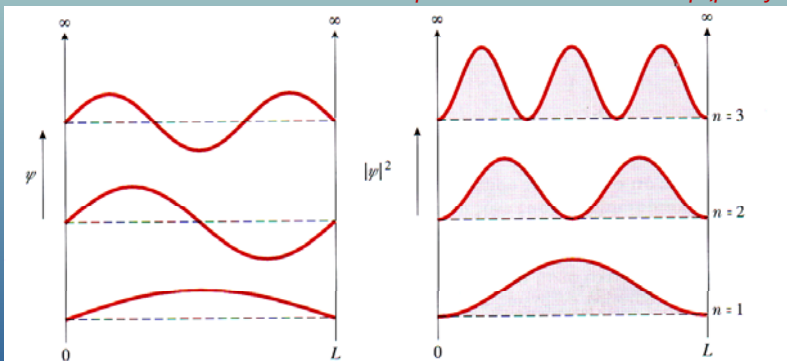
Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Συνθήκη κβάντωσης

$$kL = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{L} \quad \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \lambda = \frac{2L}{n}$$

- Με απλά λόγια: $L = n \frac{\lambda}{2}$ στάσιμα κύματα όπου ακέραιος αριθμός μισών μηκών κύματος χωρούν στο κουτί

οι πιθανότητες του που θα βρεθεί το σωματίδιο δεν είναι ισοκαταναμημένες



Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi(x) = A \sin(kx) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

- Κανονικοποίηση

$$\int_0^L |A|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2(y) dy = 1$$

$$\Rightarrow |A|^2 \frac{L}{n\pi} \frac{n\pi}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

- Ενέργειες

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

- κβαντισμένες (διακριτές) ενέργειες
- ελάχιστη ενέργεια για n=1 (δεν υπάρχει κατάσταση με ενέργεια μηδέν)



Ενεργειακές ιδιοτιμές

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης
 - επίσης ονομάζεται ενέργεια μηδενικού σημείου

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

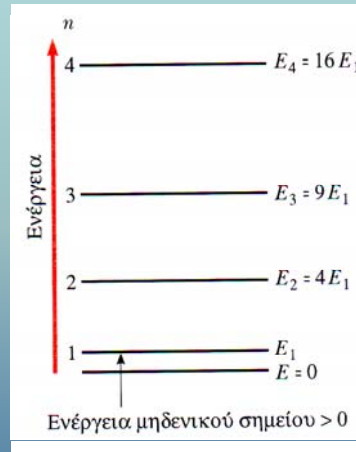
- Ενεργειακές ιδιοτιμές:

$$E_n = n^2 E_1$$

- Κβαντική φύση της ύλης:

- ένα περιορισμένο σωματίδιο δεν μπορεί να έχει μηδενική ενέργεια
- θα μπορούσαμε να προσεγγίσουμε την θεμελιώδη ενέργεια απλά χρησιμοποιώντας την αρχή της απροσδιοριστίας; $\Delta x \Delta p \geq \hbar$

$$\Delta x = L \Rightarrow \Delta p \geq \frac{\hbar}{L} \quad E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow E \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$



Παράδειγμα 5.6

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Σε ένα απλοποιημένο μοντέλο ατόμου υποθέτουμε το άτομο ως φρέαρ δυναμικού. Εάν η ακτίνα του ατόμου είναι 0.2 nm

- πόση ενέργεια απαιτείται για διέγερση από την θεμελιώδη στην πρώτη διεγερμένη στάθμη;
- Σε τι μήκος κύματος φωτονίου αντιστοιχεί αυτή η ενέργεια;

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

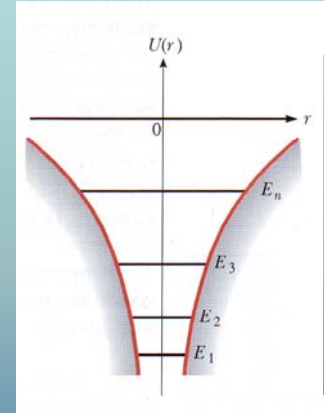
$$E_1 = \frac{(3.14159)^2 (1.05457 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{2(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(0.2 \times 10^{-9} \text{ m})^2} = 1.5059 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_1 = \frac{1.5059 \times 10^{-18} \text{ J}}{1.602 \times 10^{-19} \text{ C}} = 9.40 \text{ eV}$$

$$E_2 = 4E_1 = 37.6 \text{ eV}$$

$$\Delta E = 28.2 \text{ eV}$$

$$\lambda = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{28.2 \text{ eV}} = 44 \text{ nm}$$



Παράδειγμα 5.5

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ένα μικρό αντικείμενο μάζας 1 mg είναι περιορισμένο ανάμεσα σε δύο τοιχώματα με $L=1 \text{ cm}$.

- ποιά η ελάχιστη ενέργεια του σωματιδίου;

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \Rightarrow E_1 = \frac{(3.14159)^2 (1.05457 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{2(10^{-6} \text{ kg})(10^{-2} \text{ m})^2} = 5.49 \times 10^{-58} \text{ J}$$

- ποιά η ελάχιστη ταχύτητά του;

$$\frac{1}{2} m v^2 = E_1 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2(5.49 \times 10^{-58} \text{ J})}{(10^{-6} \text{ kg})}} = 3.31 \times 10^{-26} \text{ m/s}$$

- σε πόσο χρόνο θα διανύσει την απόσταση L ;

$$t = \frac{L}{v} = \frac{0.01 \text{ m}}{3.31 \times 10^{-26} \text{ m/s}} = 3 \times 10^{23} \text{ s}$$

$$t = \frac{3 \times 10^{23} \text{ s}}{365 \times 24 \times 60 \times 60} \approx 10^{16} \text{ years}$$



Παράδειγμα 5.5

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ένα μικρό αντικείμενο μάζας 1 mg είναι περιορισμένο ανάμεσα σε δύο τοιχώματα με $L=1 \text{ cm}$.

- Εάν η ταχύτητά του είναι 3 cm/s, σε ποιόν κβαντικό αριθμό αντιστοιχεί;

$$E_n = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} (10^{-6} \text{ kg})(0.03 \text{ m/s})^2 = 4.5 \times 10^{-10} \text{ J}$$

$$E_n = n^2 E_1 \Rightarrow n = \sqrt{\frac{4.50 \times 10^{-10} \text{ J}}{5.49 \times 10^{-58} \text{ J}}} = 9.05 \times 10^{23}$$

- ποιά η σχετική μεταβολή ενέργειας σε τόσο μεγάλους κβαντικούς αριθμούς;

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2 E_1 - n^2 E_1}{n^2 E_1} = \frac{2n+1}{n^2} \cong \frac{2}{n} \cong 10^{-24}$$



Παράδειγμα 5.7

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

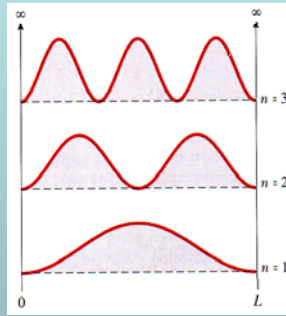
- Έστω σωματίδιο σε φρέαρ δυναμικού L , στην θεμελιώδη κατάσταση.
- ποιά η πιθανότητα το σωματίδιο να εντοπιστεί στο κεντρικό ήμισυ του φρέατος $L/4 < x < 3L/4$

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

$$P = \int_{L/4}^{3L/4} |\psi_1(x)|^2 dx = \frac{2}{L} \int_{L/4}^{3L/4} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{2}{L} \frac{L}{\pi} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \sin^2(y) dy$$

$$= \frac{2}{L} \frac{L}{\pi} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \frac{1 - \cos(2y)}{2} dy = \frac{2}{\pi} \left(\frac{1}{2} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} 1 dy - \frac{1}{4} \sin(2y) \Big|_{\pi/4}^{3\pi/4} \right)$$

$$= \frac{2}{\pi} \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} - \frac{\pi}{4} \right) - \frac{2}{\pi} \frac{1}{4} (-1 - 1) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} = 0.818 = 81.8\%$$



Παράδειγμα 5.7

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

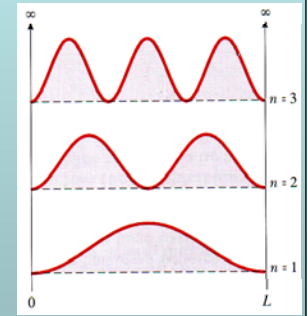
- Έστω σωματίδιο σε φρέαρ δυναμικού L , στην θεμελιώδη κατάσταση.
- πως αλλάζει αυτή η πιθανότητα σαν συνάρτηση του n ;

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$P = \int_{L/4}^{3L/4} |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{L} \int_{L/4}^{3L/4} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{2}{L} \frac{L}{n\pi} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \sin^2(y) dy$$

$$= \frac{2}{L} \frac{L}{n\pi} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \frac{1 - \cos(2y)}{2} dy = \frac{2}{n\pi} \left(\frac{1}{2} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} 1 dy - \frac{1}{4} \sin(2y) \Big|_{\pi/4}^{3\pi/4} \right)$$

$$= \frac{2}{n\pi} \frac{1}{2} \left(\frac{3n\pi}{4} - \frac{n\pi}{4} \right) - \frac{2}{n\pi} \frac{1}{4} O(1) \rightarrow \frac{1}{2} = 50\%$$



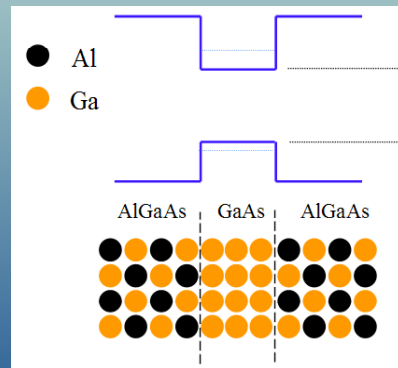
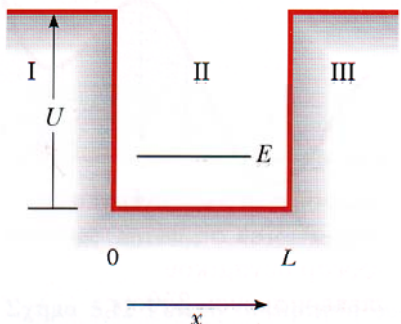
Πεπερασμένο φρέαρ δυναμικού

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Στην πράξη, δεν έχουμε ποτέ απειρόβαθα πηγάδια δυναμικού
 - πιο συνηθισμένα: πηγάδια που δημιουργούνται μεταξύ διαφορετικών ημιαγωγών
 - πολύ χρήσιμα σε laser, LED, αισθητήρες
- Δυναμική ενέργεια:

$$U(x) = 0 \quad \text{όταν} \quad 0 < x < L$$

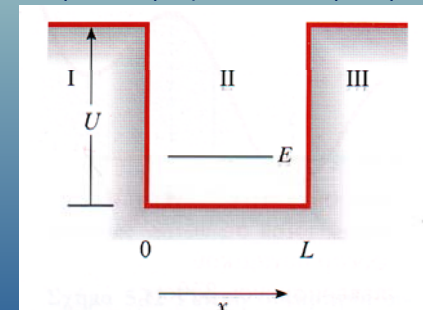
$$U(x) = U \quad \text{όταν} \quad x < 0, \quad x > L$$



Πεπερασμένο φρέαρ δυναμικού

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Λύση εξίσωσης Schrödinger στις περιοχές I, II, III
 - ξεχωριστή γενική λύση σε κάθε περιοχή I, II, III
- εφαρμογή συνοριακών συνθηκών:
 - συνέχεια της κυματοσυνάρτησης στο $x=0, x=L$
 - συνέχεια της πρώτης παραγώγου της κυματοσυνάρτησης στο $x=0, x=L$
- Αποτέλεσμα: ενεργειακές ιδιοτιμές και κυματοσυναρτήσεις
 - για $E > U$: ελεύθερα σωματίδια, μπορούν να βρεθούν παντού
 - για $E < U$: δέσμη σωματίδια, μπορούν να είναι μόνο μέσα στο πηγάδι





Δέσμιες καταστάσεις ($E < U$)

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

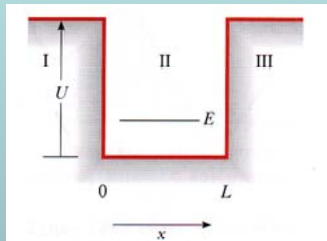
Περιοχή II ($0 \leq x \leq L$)

- εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = E\psi_{II} \Rightarrow \psi_{II}'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{II} = 0$$

- γενική λύση

$$\psi_{II} = C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar$$



συνοριακές συνθήκες

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0)$$

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L)$$

$$\psi_{II}'(L) = \psi_{III}'(L)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

Περιοχή I και III ($x \leq 0$ και $x \geq L$)

- εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + U\psi_I = E\psi_I \Rightarrow \psi_I'' + \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\psi_I = 0$$

- γενική λύση

$$\psi_I = Ae^{\alpha x} + B e^{-\alpha x}$$

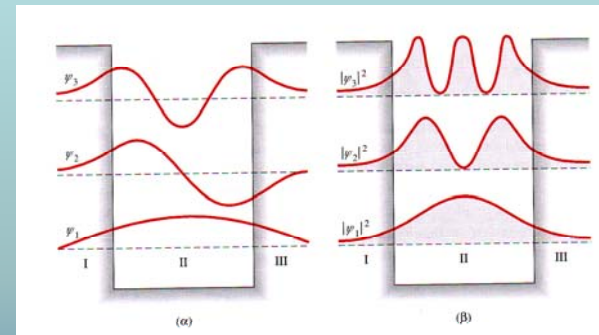
$$\psi_{III} = C e^{\alpha x} + F e^{-\alpha x}$$

$$\alpha = \sqrt{2m(U-E)} / \hbar$$



Δέσμιες καταστάσεις ($E < U$)

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση



Προσέγγιση ενεργειακών ιδιοτιμών:

- το πρόβλημα είναι παρόμοιο με απειρόβαθο πηγάδι μεγαλύτερου πλάτους
- το σωματίδιο εισχωρεί κατά μέσο όρο απόσταση δ : $\delta = 1/\alpha$ η απόσταση όπου $\psi = e^{-1}$

$$L \rightarrow L + 2\delta \quad \delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}}$$

Αυτοσυνεπή εξίσωση για την ενέργεια

Πεπερασμένος αριθμός δέσμιων καταστάσεων

- τόσες, όσο ικανοποιείται η $E_n < U$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(L + 2\delta)^2}$$



Παράδειγμα 5.8

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

Προσεγγίστε την ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης ενός ηλεκτρονίου παγιδευμένου σε φρέαρ δυναμικού, εύρους 0.2 nm και βάθους 100 eV.

- Προσεγγιστική λύση: θεωρούμε φρέαρ απείρου βάθους, με εύρος $L + 2\delta$.

$$\delta = \hbar / \sqrt{2m(U-E)}$$

- Δεν γνωρίζουμε το E. Εφαρμόζουμε αυτοσυνεπή επαναληπτική διεργασία

- πρώτη μαντεψιά $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 9.4 \text{ eV}$

$$\delta \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}} = \frac{1.05457 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{\sqrt{2(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(100 \text{ eV} - 9.4 \text{ eV})(1.602 \times 10^{-19} \text{ J})}} = 0.0205 \text{ nm}$$

- δεύτερη μαντεψιά $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(L + 2\delta)^2} = 6.47 \text{ eV}$

$$\delta \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}} = \frac{1.05457 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{\sqrt{2(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(100 \text{ eV} - 6.47 \text{ eV})(1.602 \times 10^{-19} \text{ J})}} = 0.0202 \text{ nm}$$

- τρίτη μαντεψιά $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(L + 2\delta)^2} = 6.51 \text{ eV}$

$$\text{πραγματική τιμή } E = 6.52 \text{ eV}$$



Γενική περίπτωση δυναμικής ενέργειας

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

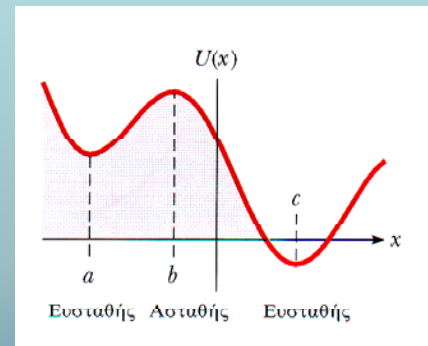
Γενική περίπτωση δυναμικής ενέργειας

- ελάχιστα: σημεία ευσταθούς ισορροπίας

$$\frac{dU}{dx} = 0 \quad \frac{d^2U}{dx^2} > 0$$

- μέγιστα: σημεία ασταθούς ισορροπίας

$$\frac{dU}{dx} = 0 \quad \frac{d^2U}{dx^2} < 0$$



Στο σημείο a

$$\text{για } x=a: F = -U'(x) = 0$$

$$\text{για } x < a: F = -U'(x) > 0$$

$$\text{για } x > a: F = -U'(x) < 0$$

Στο σημείο b

$$\text{για } x=b: F = -U'(x) = 0$$

$$\text{για } x < b: F = -U'(x) < 0$$

$$\text{για } x > b: F = -U'(x) > 0$$



Γενική περίπτωση δυναμικής ενέργειας

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Γενική περίπτωση δυναμικής ενέργειας
 - ελάχιστα: σημεία ευσταθούς ισοροπίας

$$\frac{dU}{dx} = 0 \quad \frac{d^2U}{dx^2} > 0$$

- Γενική μορφή γύρω από το σημείο a

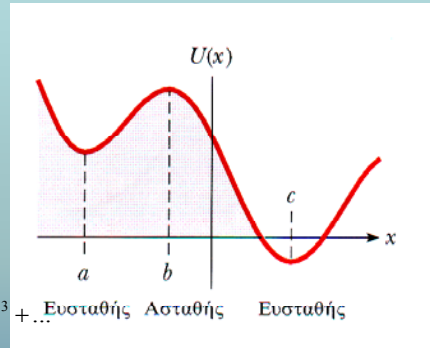
$$U(x) = U(a) + \frac{U'(a)}{1!}(x-a) + \frac{U''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{U'''(a)}{3!}(x-a)^3 + \dots$$

- για $x \approx a$:

$$U(x) \approx U(a) + \frac{1}{2}U''(a)(x-a)^2$$

- μεταφορά του x άξονα στο a
- μεταφορά του y άξονα στο $U(a)$

$$U(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \quad K = \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=a}$$



αρμονικός ταλαντωτής
δυναμική ενέργεια

$$U(x) = \frac{1}{2}Kx^2$$

δύναμη επαναφοράς

$$F = -\frac{dU(x)}{dx} = -Kx$$

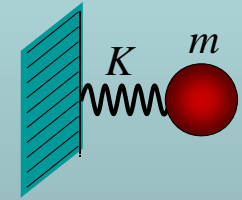


Κλασικός αρμονικός ταλαντωτής

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Κλασικός ταλαντωτής:

- σταθερά ελατηρίου K
- μάζα m
- συχνότητα ταλάντωσης $\omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$



- Εαν η ολική ενέργεια είναι E

- το E μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή
- Η μέγιστη κινητική ενέργεια

$$E_K = \frac{1}{2}m v_{\max}^2 = E$$

- Η μέγιστη δυναμική ενέργεια

$$E_U = \frac{1}{2}K x_{\max}^2 = E$$

- Το πλάτος ταλάντωσης $x_{\max} = \sqrt{\frac{2E}{K}} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}$



Κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Δυναμική ενέργεια

$$U(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

- Εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

- συνοριακές συνθήκες $\psi(\pm\infty) = 0$

- Η θεμελιώδης κατάσταση πρέπει να είναι συμμετρική γύρω από το $x=0$

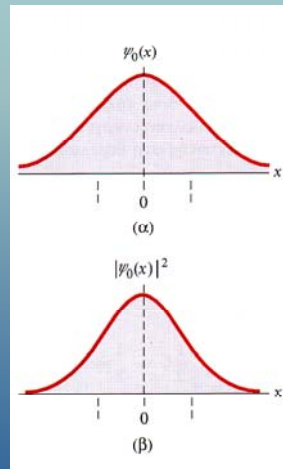
- για δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση είναι

$$\psi(x) = C_0 e^{-ax^2}$$

- αντικαθιστούμε στην εξίσωση Schrödinger

$$\psi'(x) = -C_0 2ax e^{-ax^2}$$

$$\psi''(x) = -C_0 2ae^{-ax^2} + C_0 4a^2 x^2 e^{-ax^2}$$



Θεμελιώδης κατάσταση

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 x^2 - 2a) C_0 e^{-ax^2} = (E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2) C_0 e^{-ax^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 x^2 - 2a) = E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$\Rightarrow 4a^2 x^2 - 2a = \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} a &= \frac{m\omega}{2\hbar} \\ E &= a \frac{\hbar^2}{m} \end{aligned} \right\} \Rightarrow E = \frac{m\omega \hbar^2}{2\hbar m} \Rightarrow E = \frac{1}{2} \hbar \omega$$



Πρώτη διεγερμένη κατάσταση

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Η πρώτη διεγερμένη θα πρέπει να έχει έναν δεσμό
 - να είναι αντισυμμετρική στο μηδέν
- Δοκιμαστική συνάρτηση

$$\psi(x) = C_1 x e^{-ax^2}$$

- Αντικατάσταση στην εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 x^2 - 6a) = E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$\Rightarrow 4a^2 x^2 - 6a = \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} a &= \frac{m\omega}{2\hbar} \\ E &= 3a \frac{\hbar^2}{m} \end{aligned} \right\} \Rightarrow E = \frac{3m\omega}{2\hbar} \frac{\hbar^2}{m} \Rightarrow E = \frac{3}{2} \hbar\omega$$



Παράδειγμα 5.9

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης της θεμελιώδους κατάστασης του ταλαντωτή

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-ax^2} \quad a = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax^2} dx = 1$$

$$\text{δίνεται: } \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax^2} dx = C_0^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} = 1 \Rightarrow C_0 = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4}$$

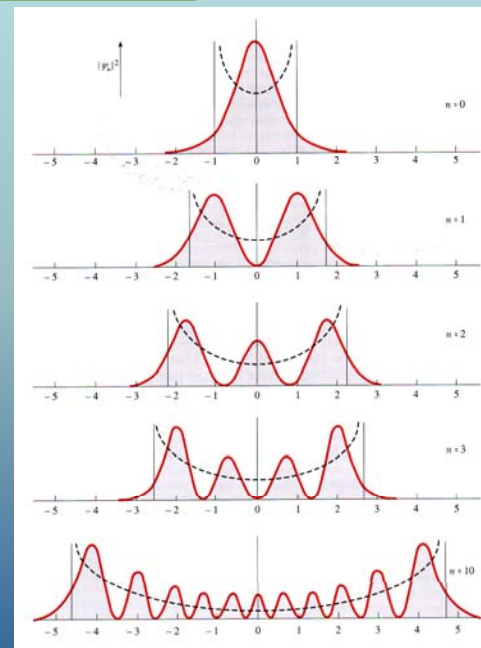
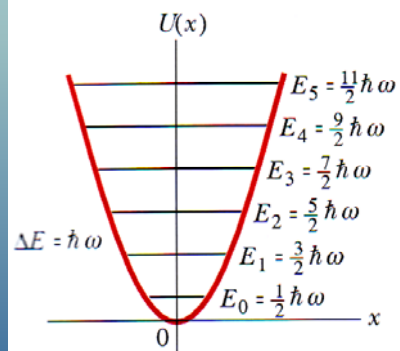
$$C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$



Καταστάσεις αρμονικού ταλαντωτή

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Παράδειγμα 5.10

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Τα όρια ταλάντωσης για έναν κλασικό ταλαντωτή με ενέργεια αυτή της θεμελιώδους κατάστασης του κβαντικού ταλαντωτή

$$E = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad \frac{1}{2} KA^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

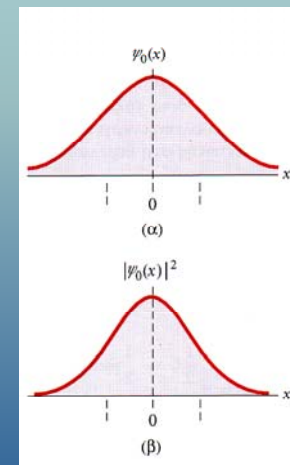
$$A = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{K}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m\omega^2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

- ποιά η πυκνότητα πιθανότητα να βρεθεί ένας κβαντικός ταλαντωτής στο $x=A$;

$$P = |\psi(A)|^2 = C_0^2 e^{-2aA^2}$$

$$a = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad A^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

$$P = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-1}$$





Παράδειγμα 5.11

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ποια η πιθανότητα ο κβαντικός ταλαντωτής να βρεθεί στην μη κλασική περιοχή;

$$P = \int_{-\infty}^{-A} |\psi(x)|^2 dx + \int_A^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$$

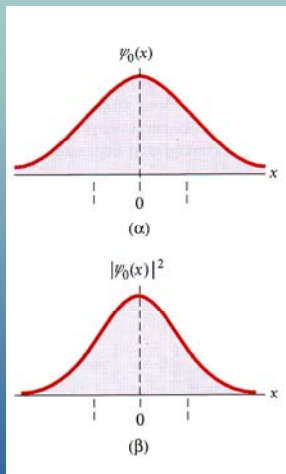
$$P = 2 \int_A^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$$

$$a = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad A^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

$$P = 2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{\sqrt{\hbar/m\omega}}^{+\infty} e^{-max^2/\hbar} dx$$

$$\text{θέτουμε: } y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$P = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{+\infty} e^{-y^2} dy \approx 0.157 \quad (\sim 16\%)$$



Παράδειγμα 5.12

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Η κβάντωση ενέργειας ταλαντωτή στο κλασικό όριο. Έστω μια μάζα m=0.01 kg σε ελατήριο σταθεράς K=0.1 N/m. Μπορούμε να παρατηρήσουμε την κβαντική συμπεριφορά;

- Ποια η διαφορά μεταξύ των ενεργειακών σταθμών;

$$\Delta E = \hbar\omega$$

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} = \sqrt{\frac{0.1 \text{ N/m}}{0.01 \text{ kg}}} = 3.16 \text{ rad/s}$$

$$\Delta E = \hbar\omega = (6.582 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s})(3.16 \text{ rad/s}) = 2.08 \times 10^{-15} \text{ eV}$$

- εαν ταλαντώνεται με πλάτος A=1cm, σε τι κβαντικό αριθμό αντιστοιχεί;

$$\frac{1}{2} KA^2 = \frac{1}{2} (0.1 \text{ N/m})(0.01 \text{ m})^2 = 5 \times 10^{-6} \text{ J}$$

$$n \approx \frac{(5 \times 10^{-6} \text{ J})}{(1.602 \times 10^{-19} \text{ J/eV})(2.08 \times 10^{-15} \text{ eV})} \cong 1.5 \times 10^{28}$$



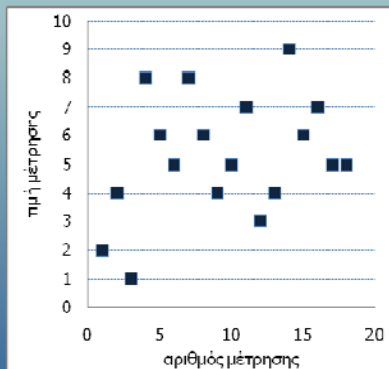
Μέση τιμή μετρήσεων

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Έστω ότι εκτελούμε πολλές μετρήσεις θέσης σε ένα κβαντικό σύστημα
 - οι τιμές που λαμβάνουμε έχουν σχέση με την κατανομή πιθανοτήτων $|\psi(x)|^2$
 - τι συμπεράσματα μπορούμε να βγάλουμε;
 - μπορούμε αν κάνουμε στατιστική ανάλυση των μετρήσεων;

- Έστω οι παρακάτω μετρήσεις θέσης:

A/A	τιμή	A/A	τιμή	A/A	τιμή
1	2	7	8	13	4
2	4	8	6	14	9
3	1	9	4	15	6
4	8	10	5	16	7
5	6	11	7	17	5
6	5	12	3	18	5



- μέση τιμή

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 5.28$$



Μέση τιμή μετρήσεων

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Πως μπορούμε να υπολογίσουμε τον μέσο όρο αλλιώς;

- στο παραπάνω παράδειγμα:

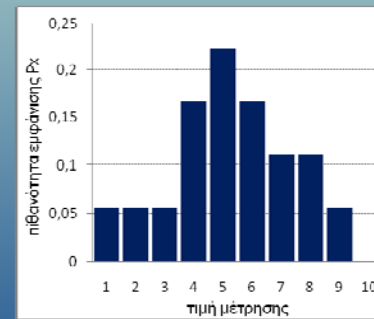
A/A	τιμή	A/A	τιμή	A/A	τιμή
1	2	7	8	13	4
2	4	8	6	14	9
3	1	9	4	15	6
4	8	10	5	16	7
5	6	11	7	17	5
6	5	12	3	18	5

- το γράφουμε ισοδύναμα ως:

$$\bar{x} = \sum x P_x \quad \sum P_x = 1$$

τιμή θέσης x συχνότητα εμφάνισης N_x πιθανότητα εμφάνισης P_x

1	1	1/18
2	1	1/18
3	1	1/18
4	3	3/18
5	4	4/18
6	3	3/18
7	2	2/18
8	2	2/18
9	1	1/18
10	0	0/18



στο συνεχές

$$\bar{x} = \int x P(x) dx$$

$$\int P(x) dx = 1$$



Αναμενόμενες τιμές

- Στην κβαντική, η μέση τιμή της μέτρησης μιας ποσότητας ονομάζεται «αναμενόμενη» τιμή και συμβολίζεται με $\langle \rangle$

- αναμενόμενη τιμή της θέσης

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x,t)|^2 dx$$

- εν γένει η αναμενόμενη τιμή είναι συνάρτηση του χρόνου
- για ιδιοκαταστάσεις (στάσιμες) η αναμενόμενη τιμή είναι σταθερή

- αναμενόμενη τιμή μιας οποιαδήποτε συνάρτησης του x

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) |\Psi(x,t)|^2 dx$$

- για παράδειγμα

$$\langle U \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi(x,t)|^2 dx$$



Παράδειγμα 5.14

- Υπολογίστε την μέση θέση $\langle x \rangle$ και την αβεβαιότητα Δx για σωματίδιο σε απειρόβαθο πηγάδι που βρίσκεται στην θεμελιώδη κατάσταση

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi|^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

$$\Rightarrow \langle x \rangle = \frac{2}{L} \frac{L^2}{\pi^2} \int_0^{\pi} y \sin^2 y dy = \frac{2L}{\pi^2} \frac{\pi^2}{4} \Rightarrow \langle x \rangle = \frac{L}{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi|^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^L x^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \frac{L^3}{\pi^3} \int_0^{\pi} y^2 \sin^2 y dy = \frac{2L^2}{\pi^3} \frac{1}{2} \left(\frac{\pi^3}{3} - \frac{\pi}{2} \right) \Rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2\pi^2}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = L \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} - \frac{1}{4}} = 0.181L$$



Υπολογισμός αβεβαιότητας θέσης

- Η αβεβαιότητα θέσης σχετίζεται με την τυπική απόκλιση

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N}}$$

$$\sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N}} = \sqrt{\frac{\sum (x_i^2 + \bar{x}^2 - 2x_i \bar{x})}{N}} = \sqrt{\frac{\sum x_i^2}{N} + \frac{\sum \bar{x}^2}{N} - \frac{2 \sum x_i \bar{x}}{N}}$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\sum x_i^2}{N} &= \overline{x^2} \\ \frac{\sum \bar{x}^2}{N} &= \frac{\bar{x}^2 \sum 1}{N} = \bar{x}^2 \\ -\frac{2 \sum x_i \bar{x}}{N} &= -2\bar{x} \frac{\sum x_i}{N} = -2\bar{x}^2 \end{aligned} \right\}$$

$$\sigma = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$$

κβαντική αβεβαιότητα θέσης

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$



Φυσικά μεγέθη και τελεστές

- Φυσικό μέγεθος είναι οποιαδήποτε μετρήσιμη ιδιότητα του σωματιδίου
 - π.χ. θέση, ορμή, ενέργεια, κτλ
 - σε κάθε φυσικό μέγεθος αντιστοιχίζεται ένας τελεστής

- Η αναμενόμενη τιμή για ένα φυσικό μέγεθος

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{Q} \Psi dx$$

- Αβεβαιότητα στην μέτρηση ενός φυσικού μεγέθους

$$\Delta Q = \sqrt{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2}$$



Σαφή μεγέθη

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- **Σαφή μεγέθη:** $\Delta Q = 0$
 - π.χ. ενέργεια στάσιμων καταστάσεων, ορμή επίπεδων κυμάτων
- Για ένα σαφές μέγεθος, η κυματοσυνάρτηση είναι ιδιοσυνάρτηση του αντίστοιχου τελεστή
 - π.χ. η Χαμιλτονιανή για στάσιμα κύματα φρέατος

$$\hat{H} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{d^2}{dx^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m L^2} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = E_n \psi_n(x)$$

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{H} \psi_n dx = E_n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx = E_n$$

$$\langle E^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{H} \hat{H} \psi_n dx = E_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx = E_n^2$$

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \sqrt{E_n^2 - E_n^2} = 0$$



Πρόβλημα 5.1

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο έχει κυματοσυνάρτηση (το x σε μέτρα)

$$\psi(x) = A \sin(5 \times 10^{10} x)$$

- α) το μήκος κύματος de Broglie

$$k = 5 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} = 5 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{5 \times 10^{10}} \text{ m} = 0.126 \text{ nm}$$

- β) η ορμή του ηλεκτρονίου

$$p = \hbar k = (1.05457 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(5 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}) = 5.28 \times 10^{-24} \text{ kg}\cdot\text{m/s}$$

- η ενέργεια του ηλεκτρονίου σε eV

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(5.28 \times 10^{-24} \text{ kg}\cdot\text{m/s})^2}{2(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})} = 1.526 \times 10^{-17} \text{ J}$$

$$E = \frac{1.526 \times 10^{-17} \text{ J}}{1.602 \times 10^{-19} \text{ J/eV}} = 95.25 \text{ eV}$$



Ασαφή μεγέθη

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- **Ασαφή μεγέθη:** $\Delta Q > 0$
 - π.χ. θέση, ορμή στάσιμων κυμάτων

$$\hat{p} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = -i\hbar \frac{d}{dx} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = -i\hbar \frac{n\pi}{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \neq p_n \psi_n(x)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{p} \psi_n dx = \frac{-i2n\pi\hbar}{L} \int_{-\infty}^{+\infty} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 0$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{p}^2 \psi_n dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{L^2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{L^2}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{n\pi\hbar}{L}$$

στο παραπάνω, το \hat{p} είναι ασαφές, ενώ το \hat{p}^2 είναι σαφές



Πρόβλημα 5.3

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Σε μια περιοχή του χώρου, ένα σωματίδιο με μηδενική ενέργεια έχει κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = A x e^{-x^2/L^2}$$

- βρείτε την δυναμική ενέργεια σαν συνάρτηση της θέσης

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x) \psi(x) = 0 \Rightarrow U(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$$

$$\psi'(x) = A \left(e^{-x^2/L^2} - \frac{2x^2}{L^2} e^{-x^2/L^2} \right)$$

$$\psi''(x) = A \left(-\frac{2x}{L^2} e^{-x^2/L^2} - \frac{4x}{L^2} e^{-x^2/L^2} + \frac{4x^3}{L^4} e^{-x^2/L^2} \right) = \psi(x) \left(-\frac{6}{L^2} + \frac{4x^2}{L^4} \right)$$

$$\Rightarrow U(x) = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \left(\frac{4x^2}{L^2} - 6 \right)$$

ελάχιστο ενέργειας

$$U(0) = -\frac{3\hbar^2}{mL^2}$$



Πρόβλημα 5.6

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Έστω ότι το πυρηνικό δυναμικό προσεγγίζεται από ορθογώνιο απειρόβαθο φρέαρ δυναμικού, πλάτους $L=10^{-5}$ nm.
- Ποιο μήκος κύματος εκπέμπεται όταν πρωτόνιο μεταπίπτει από την πρώτη διεγερμένη στην θεμελιώδη κατάσταση;

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 (1.05457 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{2(1.6726 \times 10^{-27} \text{ kg})(10^{-14} \text{ m})^2} = 3.28 \times 10^{-13} \text{ J} = 2.05 \times 10^6 \text{ eV}$$

$$\Delta E = 3E_1 = 6.15 \times 10^6 \text{ eV}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{6.15 \times 10^6 \text{ eV}} = 0.000202 \text{ nm}$$



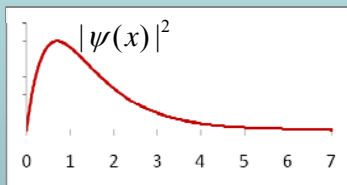
Πρόβλημα 5.22

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ηλεκτρόνιο περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ Ce^{-x}(1-e^{-x}) & x > 0 \end{cases}$$

- σχεδιάστε την
- κανονικοποιήστε την



$$\int_0^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow C^2 \int_0^{+\infty} (e^{-2x} + e^{-4x} - 2e^{-3x}) dx = 1$$

$$\Rightarrow C^2 \left[-\frac{1}{2}e^{-2x} \Big|_0^\infty - \frac{1}{4}e^{-4x} \Big|_0^\infty + 2\frac{1}{3}e^{-3x} \Big|_0^\infty \right] = 1$$

$$\Rightarrow C^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} - \frac{2}{3} \right) = 1 \Rightarrow C = \sqrt{12}$$



Πρόβλημα 5.8

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ένα ηλεκτρόνιο βρίσκεται ορθογώνιο απειρόβαθο φρέαρ δυναμικού, πλάτους $L=0.1$ nm, στην κατάσταση $n=4$
- Ποιά μήκη κύματος θα εκπέμφθούν κατά την αποδιέγερσή του σε χαμηλότερες στάθμες;

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 (1.05457 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{2(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(10^{-10} \text{ m})^2} = 6.024 \times 10^{-18} \text{ J} = 37.6 \text{ eV}$$

$$\Delta E = E_1(4^2 - 3^2), E_1(4^2 - 2^2), E_1(4^2 - 1^2), E_1(3^2 - 2^2), E_1(3^2 - 1^2), E_1(2^2 - 1^2)$$

$$\Delta E = 7E_1, 12E_1, 15E_1, 5E_1, 8E_1, 3E_1$$

$$\lambda = \frac{hc}{15E_1}, \frac{hc}{12E_1}, \frac{hc}{8E_1}, \frac{hc}{7E_1}, \frac{hc}{5E_1}, \frac{hc}{3E_1}$$

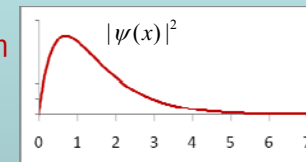


Πρόβλημα 5.22

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Ηλεκτρόνιο περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ Ce^{-x}(1-e^{-x}) & x > 0 \end{cases}$$



- Ποιά η πιο πιθανή θέση του ηλεκτρονίου;

$$\frac{d}{dx} (e^{-2x} + e^{-4x} - 2e^{-3x}) = 0 \Rightarrow -2e^{-2x} - 4e^{-4x} + 6e^{-3x} = 0$$

$$\Rightarrow 1 + 2e^{-2x} - 3e^{-x} = 0 \Rightarrow e^{-x} = \frac{3 \pm \sqrt{9 - 4 \cdot 2}}{4} \Rightarrow e^{-x} = 1/2$$

$$\Rightarrow x_m = \ln(2) = 0.693$$

- Ποιά η μέση θέση του ηλεκτρονίου

$$\langle x \rangle = C^2 \int_0^{+\infty} x(e^{-2x} + e^{-4x} - 2e^{-3x}) dx$$

$$\Rightarrow \langle x \rangle = 12 \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{16} - \frac{2}{9} \right) = 1.0834$$

χρησιμοποιούμε

$$\int_0^{+\infty} x e^{-ax} dx = \frac{1}{a^2}$$

οταν η κυματοσυνάρτηση δεν είναι συμμετρική:

$$\langle x \rangle \neq x_{\max}$$



Πρόβλημα 5.28

- Βρείτε το Δx για έναν κβαντικό ταλαντωτή στην θεμελιώδη του κατάσταση

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-ax^2} \quad a = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

δίνονται:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-ax^2} dx = 0 \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi_0|^2 dx = C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-2ax^2} dx = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi_0|^2 dx = C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2ax^2} dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$



Πρόβλημα 5.30

- Χρησιμοποιώντας τα δύο παραπάνω προβλήματα, πως εκφράζεται η αρχή της απροσδιοριστίας για τον αρμονικό ταλαντωτή στη θεμελιώδη του κατάσταση;

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} = \frac{\hbar}{2}$$

- Αυτό είναι το μισό απο ότι είχαμε θεωρήσει μέχρι τώρα. Από μια αυστηρότερη θεώρηση της αρχής της απροσδιοριστίας προκύπτει ότι η ελάχιστη δυνατή τιμή του γινομένου $\Delta x \Delta p$ είναι ακριβώς το $\hbar/2$ και αυτή η ελάχιστη τιμή εμφανίζεται πράγματι στον αρμονικό ταλαντωτή



Πρόβλημα 5.29

- Βρείτε το Δp για έναν κβαντικό ταλαντωτή στην θεμελιώδη του κατάσταση

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-ax^2} \quad a = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

δίνονται:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-ax^2} dx = 0 \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* \hat{p} \psi_0 dx = C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) e^{-ax^2} dx = 2i\hbar a C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-2ax^2} dx = 0$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* \hat{p}^2 \psi_0 dx = C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) e^{-ax^2} dx = \hbar^2 C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (2a - 4a^2 x^2) e^{-2ax^2} dx = \\ &= \hbar^2 C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (2a - 4a^2 x^2) e^{-2ax^2} dx = \hbar^2 C_0^2 \left(2a \sqrt{\frac{\pi}{2a}} - 4a^2 \frac{1}{4a} \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \right) = \frac{\hbar m\omega}{2} \end{aligned}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}$$