University of Ioannina
Department of Materials Science & Engineering
Computational Materials Science

Κβαντική Θεωρία της Ύλης

Διδάσκων: Λευτέρης Λοιδωρίκης
Π1, 7146, elidorik@cc.uoi.gr
cmsl.materials.uoi.gr/lidorikis/courses

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 απο το x

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

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

  - 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

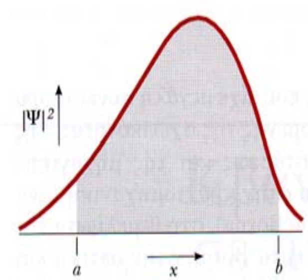
$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1}$$

συνθήκη κανονικοποίησης

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

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

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

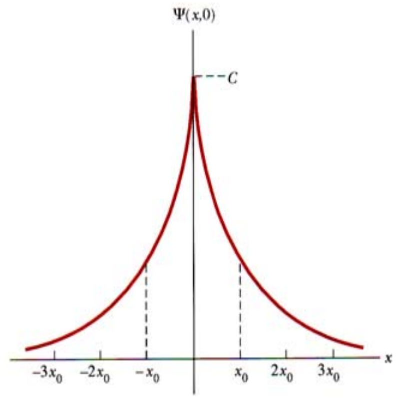
$$\Psi(x,0) = C\mathrm{e}^{-|x|/x_0}$$

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

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

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

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



Παράδειγμα 5.1

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Υπολογισμός ολοκληρώματος

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2|x|/x_0} dx = 2\int_{0}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2x/x_0} dx$$

  - αντικατάσταση $\quad y = \dfrac{2x}{x_0}$

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

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

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

Παράδειγμα 5.2

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

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

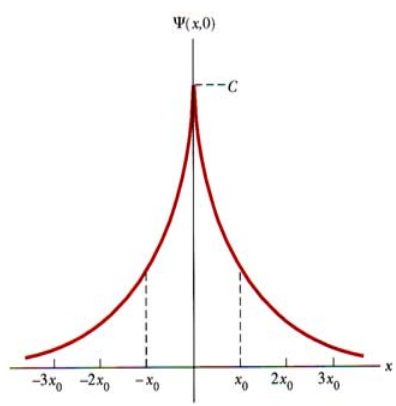
$$-x_0 \le x \le x_0$$

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

$$\Rightarrow P = \frac{2}{x_0}\int_{0}^{x_0} \mathrm{e}^{-2x/x_0} dx$$

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

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



Κβαντική vs Κλασική

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Κλασική μηχανική
  - χρονική εξέλιξη: νόμος Νεύτωνα
    - θέση $x(t)$
    - ταχύτητα $\upsilon(t) = \dot{x}(t)$
    - επιτάχυνση $a(t) = \ddot{x}(t)$

- Κβαντική μηχανική
  - Κυματοσυνάρτηση: εξίσωση Schrödinger (χρονοανεξάρτητη)

$$\Psi(x,0)$$

  - Χρονική εξέλιξη: εξίσωση Schrödinger

$$\Psi(x,t)$$

Ελεύθερο σωματίδιο

- 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*

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

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

Ελεύθερο σωματίδιο

- 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

$$\Delta p = 0$$

Ελεύθερο σωματίδιο στην πράξη

- Ένα επίπεδο κύμα είναι αφύσικη λύση
  - εκτείνεται παντού, ενώ ένα σωματίδιο έχει κάποιον εντοπισμό
- Χρησιμοποιούμε μια επαλληλία επίπεδων κυμάτων

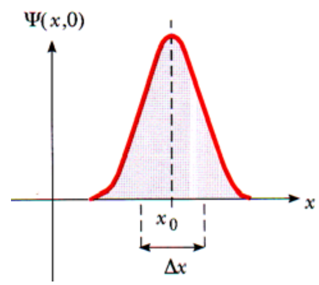
$$\Psi(x,0) = \sum_k a_k \mathrm{e}^{ikx}$$

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

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

  - τα πλάτη *a(k)* βρίσκονται απο την θεωρία ολοκληρωμάτων Fourier

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



- Χρονική εξέλιξη

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

θεωρία ολοκληρωμάτων Fourier

- Αρχική εξίσωση: $\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k)\mathrm{e}^{ikx}dk$
- Πολλαπλασιάζουμε με $\mathrm{e}^{-ik'x}$ και ολοκληρώνουμε σε όλο τον χώρο

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

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

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

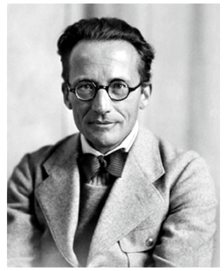
  - Η συνάρτηση δ(y) του Dirac: είναι μη-μηδενική μόνο για y→0

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

Εξίσωση Schrödinger

- Erwin Schrödinger (1926)

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



- Η συνάρτηση $U(x)$ είναι η δυναμική ενέργεια
  - Η δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο είναι $F=-\dfrac{dU}{dx}$
- Η εξίσωση Schrodinger είναι μια έκφραση του νόμου διατήρησης ενέργειας
  - για επίπεδο κύμα $\Psi_k(x,t)=\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$ σε σταθερό δυναμικό $U(x)=U_0$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left\{\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\right\}=(ik)^2\left\{\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\right\} \qquad \frac{\partial}{\partial t}\left\{\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\right\}=(-i\omega)\left\{\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\right\}$$

  - η εξίσωση Schrödinger γίνεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2\{\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\}+U_0\{\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\}=i\hbar(-i\omega)\{\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\}$$

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m}+U_0=\hbar\omega\Rightarrow\boxed{\frac{p^2}{2m}+U_0=E}$$

Τελεστές ορμής και ενέργειας

- Ορίζουμε τον τελεστή της ορμής $\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$
  - η δράση του πάνω σε ένα επίπεδο κύμα

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=-i\hbar(ik)\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=\hbar k\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=p\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$$

- Ορίζουμε τον τελεστή της ολικής ενέργειας $\hat{\mathbf{E}}=i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$
  - η δράση του πάνω σε ένα επίπεδο κύμα

$$\hat{\mathbf{E}}\cdot\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=i\hbar(-i\omega)\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=\hbar\omega\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=E\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$$

- Ορίζουμε τον τελεστή της κινητικής ενέργειας $\hat{\mathbf{K}}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$
  - η δράση του πάνω σε ένα επίπεδο κύμα

$$\hat{\mathbf{K}}\cdot\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=-\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}=K\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$$

- Ορίζουμε τον τελεστή της Χαμιλτονιαλής $\hat{\mathbf{H}}=\hat{\mathbf{K}}+\hat{\mathbf{U}}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)$
- Εξίσωση Schrödinger $\boxed{\hat{\mathbf{H}}\Psi(x,t)=\hat{\mathbf{E}}\Psi(x,t)}$

Λύση χρονικής εξέλιξης

- Έστω οτι η $\Psi(x,0)$ είναι γνωστή. Πως βρίσκουμε την $\Psi(x,t)$;
  - γνωρίζοντας την παράγωγο (κλίση) ως πρός 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 απο κάθε βήμα, ξανα-υπολογίζουμε την παράγωγο ως πρός χρόνο

υπολογιστική μεθοδολογία

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

Υπολογισμός ιδιοσυναρτήσεων

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

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

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

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

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

- Χρονο-ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)} \qquad \boxed{i\hbar\frac{d\phi(t)}{dt}=E\phi(t)}$$

Υπολογισμός ιδιοσυναρτήσεων

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

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

- Χρονοανεξάρτητη κυματοσυνάρτηση ψ(x)
  - ομαλή, πεπερασμένη, μονοσήμαντη, με συναχή παράγωγο

- για μηδέν δυναμικό (μηδέν δυνάμεις, ελεύθερα σωματίδια)

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

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

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

Ιδιοσυναρτήσεις: στάσιμες καταστάσεις

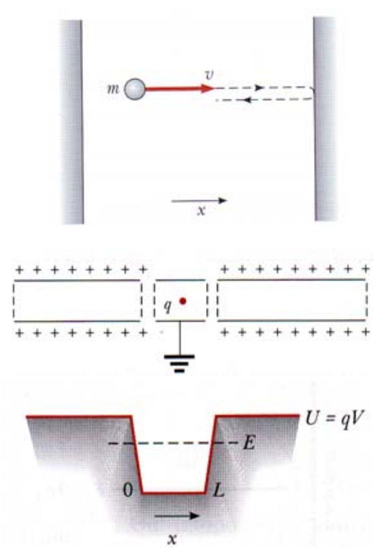
- Ιδιοσυνάρτηση: η λύση ψ(x) της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger
- Η πυκνότητα πιθανότητας για μια ιδιοσυνάρτηση
  - όταν δηλαδή είναι σε μορφή χωρισμού μεταβλητών

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

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

Σωματίδιο σε κουτί

- 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*
    - το σωματίδιο ΔΕΝ μπορεί να υπάρξει έξω απο το κουτί



Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

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

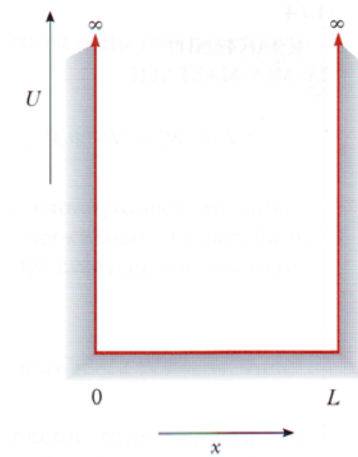
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- Μέσα στο πηγάδι $U(x)=0$

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

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

$$\boxed{\psi(0) = 0 \qquad \psi(L) = 0}$$



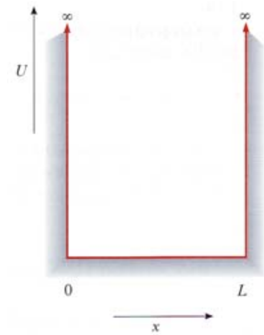
Κβάντωση: βρείτε τις επιτρεπτές ενέργειες *E* και κυματοσυναρτήσεις

Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

- Χρονο-ανεξάρτητη εξίσωση (μέσα στο κουτί)

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

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



- Πιθανές λύσεις της χρονο-ανεξάρτητης εξίσωσης

$$\left.\begin{array}{l}\psi(x) \propto \cos(kx) \\ \psi(x) \propto \sin(kx) \\ \psi(x) \propto \mathrm{e}^{ikx} \\ \psi(x) \propto \mathrm{e}^{-ikx}\end{array}\right\}$$

Κάθε μια ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger

Ποιά όμως διαλέγουμε ως λύση;
Με τί κριτίριο επιλέγουμε;

Επιλέγουμε έναν γραμμικό συνδιασμό πιθανών λύσεων
Επιβάλουμε τις συνοριακές συνθήκες

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

- Η κβάντωση προκύπτει λόγω των συνοριακών συνθηκών

Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

- Γενική λύση
  - με στάσιμα κύματα

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

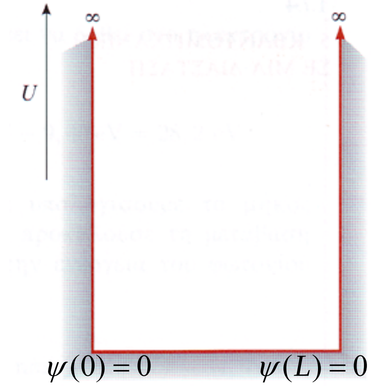
  - ή με επίπεδα κύματα

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}$$

  - και τα δύο είναι ισοδύναμα, καθώς

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

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



- Λύση: βρείτε τις σταθερές A, B που ικανοποιούν τις συνοριακές συνθήκες
  - με τα στάσιμα κύματα είναι πιο εύκολο

$$\left.\begin{array}{l}\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \\ \psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0 \\ \psi(L) = 0 \Rightarrow kL = n\pi\end{array}\right\} \qquad \boxed{\psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

n: οποιοσδήποτε θετικός ακέραιος

- Η κβάντωση προκύπτει λόγω των συνοριακών συνθηκών

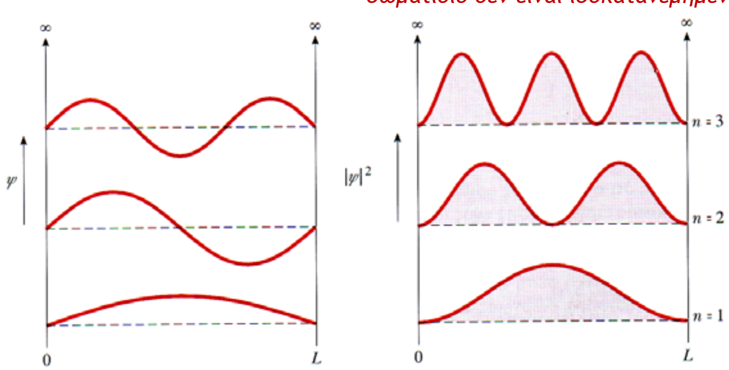
Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

- Συνθήκη κβάντωσης

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

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

οι πιθανότητες του που θα βρεθεί το σωματίδιο δεν είναι ισοκατανεμημένες



Απειρόβαθο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού

- Ιδιοσυναρτήσεις

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

- Κανονικοποίηση

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

$$\Rightarrow |A|^2 \frac{L}{n\pi}\frac{n\pi}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \qquad \boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

- Ενέργειες

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

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

Ενεργειακές ιδιοτιμές

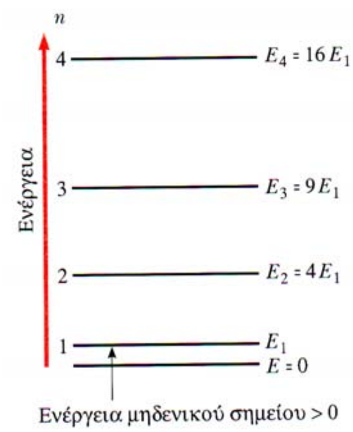
- Ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης
  - επίσης ονομάζεται ενέργεια μηδενικού σημείου

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

- Ενεργειακές ιδιοτιμές:

$$\boxed{E_n = n^2 E_1}$$

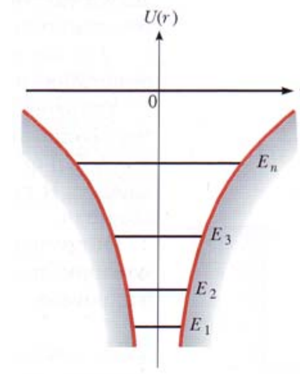
- Κβαντική φύση της ύλης:
  - ένα περιορισμένο σωματίδιο δεν μπορεί να έχει μηδενική ενέργεια
  - *θα μπορούσαμε να προσεγγίσουμε την θεμελιώδη ενέργεια απλά χρησιμοποιώντας την αρχή της απροσδιοριστίας;* $\Delta x \Delta p \geq \hbar$



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

Παράδειγμα 5.6

- Σε ένα απλοποιημένο μοντέλο ατόμου υποθέτουμε το άτομο ως φρέαρ δυναμικού. Εάν η ακτίνα του ατόμου είναι 0.1 nm
  - πόση ενέργεια απαιτείται για διέγερση απο την θεμελιώδη στην πρώτη διεγερμένη στάθμη;
  - Σε τι μήκος κύματος φωτονίου αντιστοιχεί αυτή η ενέργεια;



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

$$E_1 = \frac{(3.14159)^2(1.05457\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s})^2}{2(9.11\times10^{-31}\ \mathrm{kg})(0.2\times10^{-9}\ \mathrm{m})^2} = 1.5059\times10^{-18}\ \mathrm{J}$$

$$E_1 = \frac{1.5059\times10^{-18}\ \mathrm{J}}{1.602\times10^{-19}\ \mathrm{C}} = 9.40\ \mathrm{eV}$$

$$E_2 = 4E_1 = 37.6\ \mathrm{eV} \qquad \lambda = \frac{1240\ \mathrm{eV\cdot nm}}{28.2\ \mathrm{eV}} = 44\ \mathrm{nm}$$

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

Παράδειγμα 5.5

- Ένα μικρό αντικείμενο μάζας 1 mg είναι περιορισμένο ανάμεσα σε δύο τοιχώματα με *L*=1 cm.
  - ποιά η ελάχιστη ενέργεια του σωματιδίου;

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad \Rightarrow E_1 = \frac{(3.14159)^2(1.05457\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s})^2}{2(10^{-6}\ \mathrm{kg})(10^{-2}\ \mathrm{m})^2} = 5.49\times10^{-58}\ \mathrm{J}$$

  - ποιά η ελάχιστη ταχύτητά του;

$$\frac{1}{2}m\upsilon^2 = E_1 \Rightarrow \upsilon = \sqrt{\frac{2(5.49\times10^{-58}\ \mathrm{J})}{(10^{-6}\ \mathrm{kg})}} = 3.31\times10^{-26}\ \mathrm{m/s}$$

  - σε πόσο χρόνο θα διανύσει την απόσταση *L*;

$$t = \frac{L}{\upsilon} = \frac{0.01\ \mathrm{m}}{3.31\times10^{-26}\ \mathrm{m/s}} = 3\times10^{23}\ \mathrm{s}$$

$$t = \frac{3\times10^{23}\ \mathrm{s}}{365\times24\times60\times60} \approx 10^{16}\ \mathrm{years}$$

Παράδειγμα 5.5

- Ένα μικρό αντικείμενο μάζας 1 mg είναι περιορισμένο ανάμεσα σε δύο τοιχώματα με *L*=1 cm.
  - Εάν η ταχύτητά του είναι 3 cm/s, σε ποιόν κβαντικό αριθμό αντιστοιχεί;

$$E_n = \frac{1}{2}m\upsilon^2 = \frac{1}{2}(10^{-6}\ \mathrm{kg})(0.03\ \mathrm{m/s})^2 = 4.5\times10^{-10}\ \mathrm{J}$$

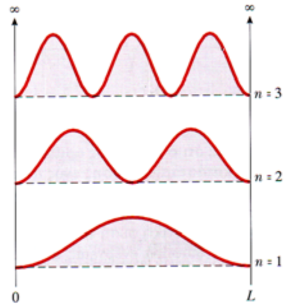
$$E_n = n^2E_1 \Rightarrow n = \sqrt{\frac{4.50\times10^{-10}\ \mathrm{J}}{5.49\times10^{-58}\ \mathrm{J}}} = 9.05\times10^{23}$$

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

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

Παράδειγμα 5.7

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



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

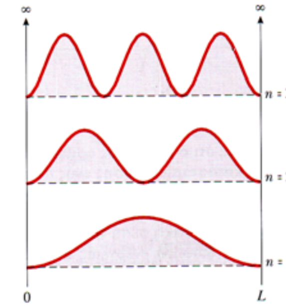
$$P=\int_{L/4}^{3L/4}|\psi_1(x)|^2\,dx=\frac{2}{L}\int_{L/4}^{3L/4}\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)dx \quad =\frac{2}{L}\frac{L}{\pi}\int_{\pi/4}^{3\pi/4}\sin^2(y)dy$$

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

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

Παράδειγμα 5.7

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



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

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

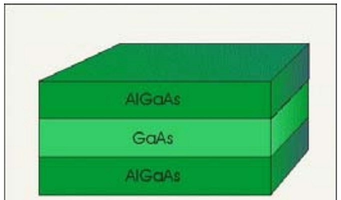
$$=\frac{2}{L}\frac{L}{n\pi}\int_{n\pi/4}^{3n\pi/4}\frac{1-\cos(2y)}{2}dy \quad =\frac{2}{n\pi}\left(\left.\frac{y}{2}\right|_{n\pi/4}^{3n\pi/4}-\left.\frac{1}{4}\sin(2y)\right|_{n\pi/4}^{3n\pi/4}\right)$$

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

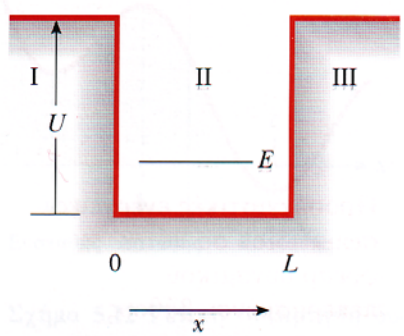
Πεπερασμένο φρέαρ δυναμικού

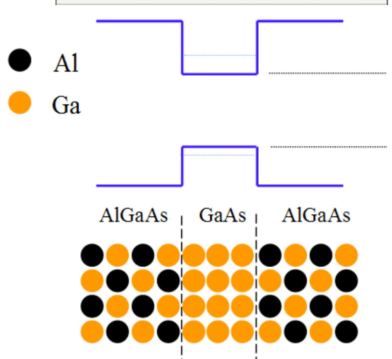
- Στην πράξη, δεν έχουμε ποτέ απειρόβαθα πηγάδια δυναμικού
  - πιο συνηθισμένα: πηγάδια που δημιουργούνται μεταξύ διαφορετικών ημιαγωγών
  - πολύ χρήσιμα σε laser, LED, αισθητήρες
- Δυναμική ενέργεια:

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



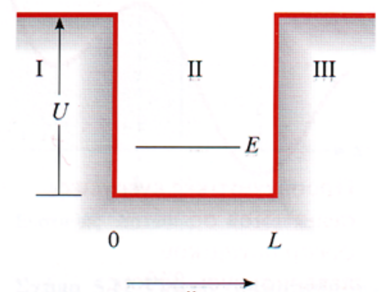
κβαντικό πηγάδι GaAs/AlGaAs





Πεπερασμένο φρέαρ δυναμικού

- 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 $E<U$: δέσμια σωματίδια, μπορούν να είναι μόνο μέσα στο πηγάδι



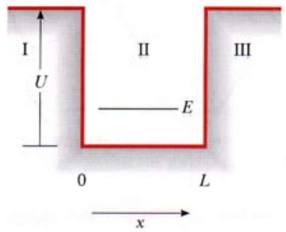
Δέσμιες καταστάσεις ($E<U$)

- Περιοχή II ($0 \le x \le L$)
  - εξίσωση Schrödinger

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

  - γενική λύση

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



- Περιοχή I και III ($x \le 0$ και $x \ge L$)
  - εξίσωση Schrödinger

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

  - γενική λύση

$$\psi_I = Ae^{\alpha x} + \cancel{Be^{-\alpha x}}$$

$$\psi_{III} = \cancel{Ee^{\alpha x}} + Fe^{-\alpha x} \qquad \alpha = \sqrt{2m(U-E)}/\hbar$$

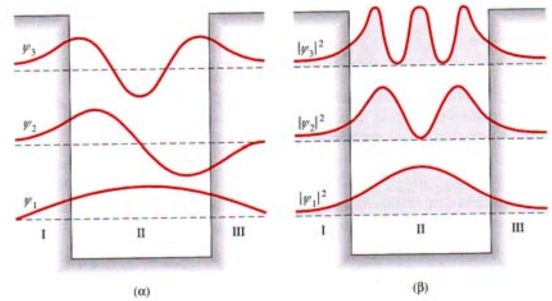
συνοριακές συνθήκες

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

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

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

Δέσμιες καταστάσεις ($E<U$)



- 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 $\psi=e^{-1}$

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

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

- Αυτοσυνεπή εξίσωση για την ενέργεια
- Πεπερασμένος αριθμός δέσμιων καταστάσεων
  - τόσες, όσο ικανοποιείται η $E_n < U$

Παράδειγμα 5.8

- 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+2δ.

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

  - Δεν γνωρίζουμε το E. Εφαρμόζουμε αυτοσυνεπή επαναληπτική διεργασία
    - πρώτη μαντεψιά $\quad E = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 9.4\,\mathrm{eV}$

$$\delta \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}} = \frac{1.05457\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}}{\sqrt{2(9.11\times10^{-31}\ \mathrm{kg})(100\ \mathrm{eV} - 9.4\ \mathrm{eV})(1.602\times10^{-19}\ \mathrm{J})}} = 0.0205\ \mathrm{nm}$$

    - δεύτερη μαντεψιά $\quad E = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2m(L+2\delta)^2} = 6.47\,\mathrm{eV}$

$$\delta \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}} = \frac{1.05457\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}}{\sqrt{2(9.11\times10^{-31}\ \mathrm{kg})(100\ \mathrm{eV} - 6.47\ \mathrm{eV})(1.602\times10^{-19}\ \mathrm{J})}} = 0.0202\ \mathrm{nm}$$

    - τρίτη μαντεψιά $\quad E = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2m(L+2\delta)^2} = 6.51\,\mathrm{eV}$

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

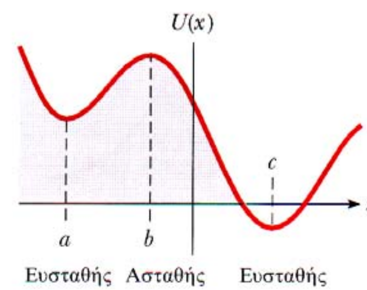
Γενική περίπτωση δυναμικής ενέργειας

- Γενική περίπτωση δυναμικής ενέργειας
  - ελάχιστα: σημεία ευσταθούς ισορροπίας

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

  - μέγιστα: σημεία ασταθούς ισορροπίας

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

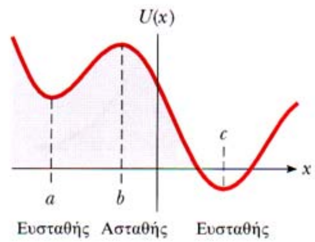


Στο σημείο a	Στο σημείο b
για $x=a$: $F = -U'(x) = 0$	για $x=b$: $F = -U'(x) = 0$
για $x<a$: $F = -U'(x) > 0$	για $x<b$: $F = -U'(x) < 0$
για $x>a$: $F = -U'(x) < 0$	για $x>b$: $F = -U'(x) > 0$

Γενική περίπτωση δυναμικής ενέργειας

- Γενική περίπτωση δυναμικής ενέργειας
  - ελάχιστα: σημεία ευσταθούς ισορροπίας

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



- Γενική μορφή γύρω απο το σημείο a

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

  - 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 $U(a)$

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

αρμονικός ταλαντωτής

δυναμική ενέργεια

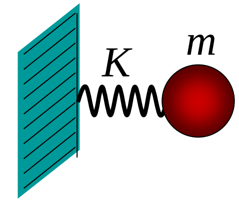
$$U(x)=\frac{1}{2}Kx^2$$

δύναμη επαναφοράς

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

Κλασικός αρμονικός ταλαντωτής

- 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

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

  - Η μέγιστη δυναμική ενέργεια

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

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

Κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής

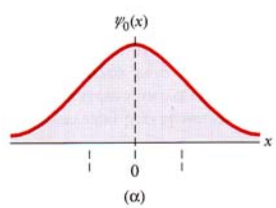
- Δυναμική ενέργεια

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

- Εξίσωση Schrödinger

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

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



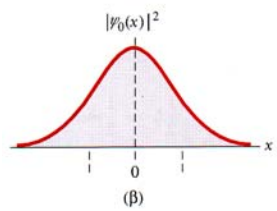
- Η θεμελιώδης κατάσταση πρέπει να είναι συμμετρική γύρω απο το x=0
  - μια δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση είναι

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

  - αντικαθιστούμε στην εξίσωση Schrödinger

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

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



Θεμελιώδης κατάσταση

- Εξίσωση Schrödinger

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

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

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

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

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

Πρώτη διεγερμένη κατάσταση

- 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

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

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

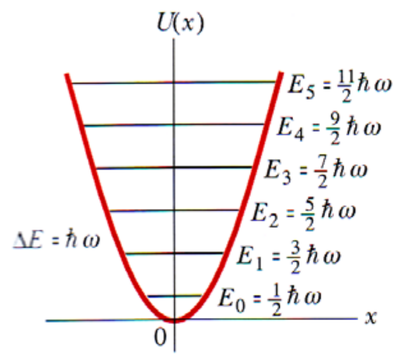
$$\Rightarrow 4a^2x^2 - 6a = \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}$$

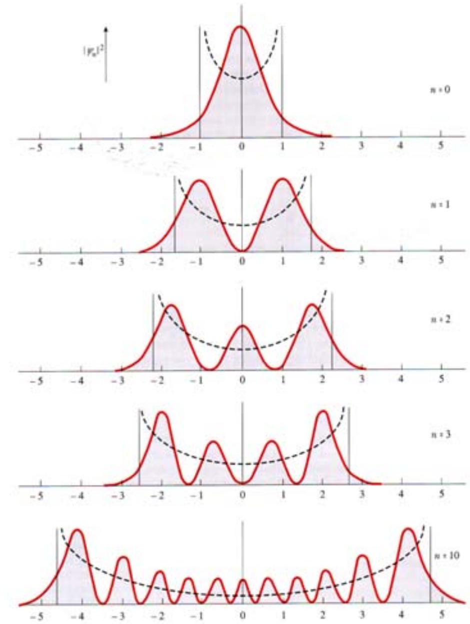
$$\Rightarrow \left.\begin{matrix} a = \dfrac{m\omega}{2\hbar} \\ E = 3a\dfrac{\hbar^2}{m} \end{matrix}\right\} \Rightarrow E = \frac{3m\omega}{2\hbar}\frac{\hbar^2}{m} \Rightarrow \boxed{E = \frac{3}{2}\hbar\omega}$$

Καταστάσεις αρμονικού ταλαντωτή

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

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





Παράδειγμα 5.9

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Κβαντομηχανική σε Μία Διάσταση

- Κανονικοποίηση της κυνατοσυνάρτησης της θεμελιώδους κατάστασης του ταλαντωτή

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

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

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

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

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

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

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

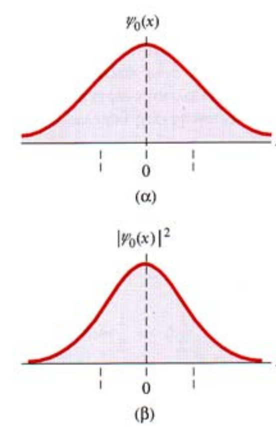
$$A = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{K}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m\omega^2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

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

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

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

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



Παράδειγμα 5.11

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

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

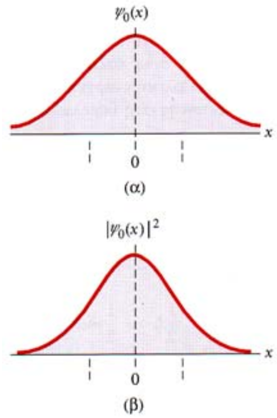
$$\boxed{P = 2\int_{A}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx}$$

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

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

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

$$\boxed{P = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{1}^{+\infty} \mathrm{e}^{-y^2} dy \approx 0.157 \quad (\sim 16\%)}$$



Παράδειγμα 5.12

- 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;

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

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

$$\Delta E = \hbar\omega = (6.582\times10^{-16}\ \mathrm{eV\cdot s})(3.16\,\mathrm{rad/s}) = 2.08\times10^{-15}\ \mathrm{eV}$$

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

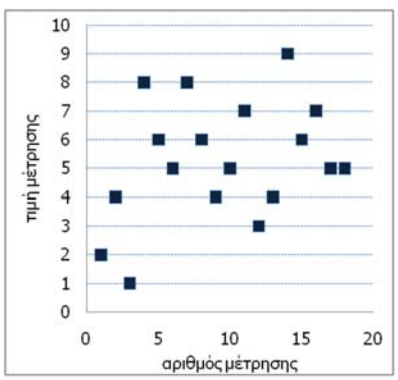
$$\frac{1}{2}KA^2 = \frac{1}{2}(0.1\,\mathrm{N/m})(0.01\,\mathrm{m})^2 = 5\times10^{-6}\ \mathrm{J}$$

$$n \approx \frac{(5\times10^{-6}\ \mathrm{J})}{(1.602\times10^{-19}\ \mathrm{J/eV})(2.08\times10^{-15}\ \mathrm{eV})} \cong 1.5\times10^{28}$$

Μέση τιμή μετρήσεων

- 'Εστω οτι εκτελούμε πολλές μετρήσεις θέσης σε ένα κβαντικό σύστημα
  - οι τιμές που λαμβάνουμε έχουν σχέση με την κατανομή πιθανοτήτων $|\psi(x)|^2$
  - τι συμεράσματα 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

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

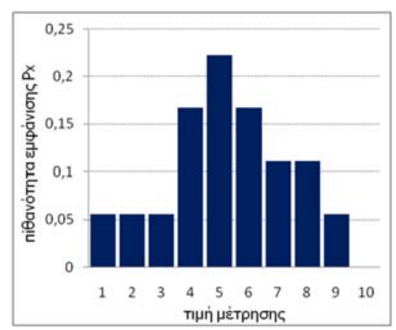
Μέση τιμή μετρήσεων

- Πως μπορούμε να υπολογίσουμε τον μέσο όρο αλλοιώς;
  - 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: $\boxed{\bar{x} = \sum xP_x}$ $\qquad \sum P_x = 1$

τιμή θέσης	συχνότητα εμφάνισης	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

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

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

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

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

Υπολογισμός αβεβαιότητας θέσης

- Η αβεβαιότητα θέσης σχετίζεται με την τυπική απόκλιση

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

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

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

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

κβαντική αβεβαιότητα θέσης

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

Παράδειγμα 5.14

- Υπολογίστε την μέση θέση <x> και την αβεβαιότητα Δx για σωματίδιο σε απειρόβαθο πηγάδι που βρίσκεται στην θεμελιώδη κατάσταση

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

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

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

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

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

Φυσικά μεγέθη και τελεστές

- Φυσικό μέγεθος είναι οποιαδήποτε μετρήσημη ιδιότητα του σωματιδίου
  - π.χ. θέση, ορμή, ενέργεια, κτλ
  - σε κάθε φυσικό μέγεθος αντιστοιχίζεται ένας τελεστής
- Η αναμενόμενη τιμή για ένα φυσικό μέγεθος

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

- Αβεβαιότητα στην μέτρηση ενός φυσικού μεγέθους

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

Σαφή μεγέθη

- 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

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

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

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

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

Ασαφή μεγέθη

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

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

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

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

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

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

Πρόβλημα 5.1

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

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

  - α) το μήκος κύματος de Broglie

$$k = 5\times10^{10}\ \mathrm{m^{-1}} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} = 5\times10^{10}\ \mathrm{m^{-1}} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{5\times10^{10}}\ \mathrm{m} = 0.126\ \mathrm{nm}$$

  - β) η ορμή του ηλεκτρονίου

$$p = \hbar k = (1.05457\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s})(5\times10^{10}\ \mathrm{m^{-1}}) = 5.28\times10^{-24}\ \mathrm{kg\cdot m/s}$$

  - η ενέργεια του ηλεκτρονίου σε eV

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(5.28\times10^{-24}\ \mathrm{kg\cdot m/s})^2}{2(9.11\times10^{-31}\ \mathrm{kg})} = 1.526\times10^{-17}\ \mathrm{J}$$

$$E = \frac{1.526\times10^{-17}\ \mathrm{J}}{1.602\times10^{-19}\ \mathrm{J/eV}} = 95.25\ \mathrm{eV}$$

Πρόβλημα 5.3

- Σε μια περιοχή του χώρου, ένα σωματίδιο με μηδενική ενέργεια έχει κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = Axe^{-x^2/L^2}$
  - Βρείτε την δυναμική ενέργεια σαν συνάρτηση της θέσης

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

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

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

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

ελάχιστο ενέργειας

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

Πρόβλημα 5.6

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

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

$$E_1 = \frac{\pi^2(1.05457\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s})^2}{2(1.6726\times10^{-27}\ \mathrm{kg})(10^{-14}\ \mathrm{m})^2} = 3.28\times10^{-13}\ \mathrm{J} = 2.05\times10^{6}\ \mathrm{eV}$$

$$\Delta E = 3E_1 = 6.15\times10^{6}\ \mathrm{eV}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240\ \mathrm{eV\cdot nm}}{6.15\times10^{6}\ \mathrm{eV}} = 0.000202\ \mathrm{nm}$$

Πρόβλημα 5.8

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

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

$$E_1 = \frac{\pi^2(1.05457\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s})^2}{2(9.11\times10^{-31}\ \mathrm{kg})(10^{-10}\ \mathrm{m})^2} = 6.024\times10^{-18}\ \mathrm{J} = 37.6\ \mathrm{eV}$$

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

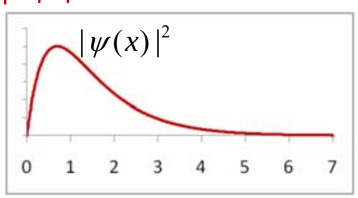
$$\Delta E = 7E_1, 12\,E_1, 15E_1, 5E_1, 8E_1, 3E_1$$

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

Πρόβλημα 5.22

- Ηλεκτρόνιο περιγράφεται απο την κυματοσυνάρτηση

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



  - σχεδιάστε την
  - κανονικοποιήστε την

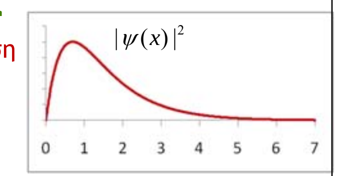
$$\int_0^{+\infty}|\psi(x)|^2\,dx = 1 \Rightarrow C^2\int_0^{+\infty}(\mathrm{e}^{-2x}+\mathrm{e}^{-4x}-2\mathrm{e}^{-3x})dx = 1$$

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

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

Πρόβλημα 5.22

- Ηλεκτρόνιο περιγράφεται απο την κυματοσυνάρτηση



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

  - Ποιά η πιο πιθανή θέση του ηλεκτρονίου;

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

$$\Rightarrow 1 + 2\mathrm{e}^{-2x_m} - 3\mathrm{e}^{-x_m} = 0 \quad \Rightarrow \mathrm{e}^{-x_m} = \frac{3\pm\sqrt{9-4\cdot2}}{4} \quad \Rightarrow \mathrm{e}^{-x_m} = 1/2$$

$$\Rightarrow \boxed{x_m = \ln(2) = 0.693}$$

  - Ποιά η μέση θέση του ηλεκτρονίου

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

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

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

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

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

δίνονται:

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

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

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

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

Πρόβλημα 5.29

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

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

δίνονται:

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

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

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* \hat{\mathbf{p}}^2 \psi_0^* dx = C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\right)e^{-ax^2}dx = \hbar^2 C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (2a - 4a^2x^2)e^{-2ax^2}dx =$$

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

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

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 οτι είχαμε θεωρήσει μέχρι τώρα. Από μια αυστηρότερη θεώρηση της αρχής της απροσδιοριστίας προκύπτει οτι η ελάχιστη δυνατή τιμή του γινομένου ΔxΔp είναι ακριβώς το $\hbar/2$ και αυτή η ελάχιστη τιμή εμφανίζεται πράγματι στον αρμονικό ταλαντωτή