

Μοριακά προβλήματα.

Εξίσωση Schrödinger

ιδιοτιμών : $\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$

E : ιδιοτιμή της ενέργειας

$\psi(x)$: ιδιοσυνάρτηση.

$\psi(x), \psi'(x)$ συνεχείς $\left\{ \begin{array}{l} \text{ακόμη και σε σημεία στα οποία} \\ \text{το δυναμικό παρουσιάζει πεπερασμένα} \\ \text{ασυνέχεια.} \end{array} \right.$

Εξέλιξη σωματίου :

E έχει συνεχείς τιμές (συνεχές φάσμα)

$\psi(x)$ δεν είναι εξεραμυγία οφθαλμισμού

(και υπάρχει αμφισβήτηση $\hat{H}f_p(x) = \hat{H}f_{-p}(x)$).

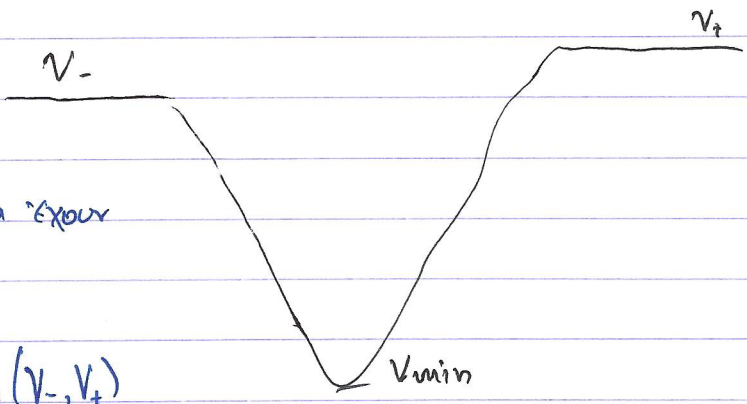
Ανεπίβουλο μηγίδι :

Διατεταμένο φάσμα.

Ιδιοσυναρτήσεις τετραγωνικά οφθαλμισμού.

$\left. \begin{array}{l} \text{Δίεργες} \\ \text{καταστάσεις.} \end{array} \right\}$

Έστω $V(x)$:



Οι Δίεργες καταστάσεις θα έχουν ενέργεια E με :

$V_{min} < E < \min(V_-, V_+)$

$(V_- = \lim_{x \rightarrow -\infty} V(x), \quad V_+ = \lim_{x \rightarrow \infty} V(x))$

Τέλος εάν υποθέσουμε ότι για $x < x_-$ τα δυναμικά είναι αρκούντως σταθερά ίσο με V_- για $E > V_-$ η εξίσωση Schrödinger γίνεται:

$$\psi'' = - \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_-)}_{k^2} \psi$$

με λύση $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$.

Μια τέτοια κυματική συνάρτηση δεν μπορεί να είναι σταθερά μηδενισμένη ανεξάρτητα από τον μέγεθος της για $x > x_-$.

Ομοίως εάν $V(x) = V_+$ για $x > x_+$.

Άρα $E < \min(V_+, V_-)$.

Επίσης εάν $\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow \langle \psi, \hat{H}\psi \rangle = E$

εάν η ψ είναι σταθερά μηδενισμένη, οπότε και λαμβάνεται θετικό αποτέλεσμα.

Αντίστροφα $E = \int \psi^* \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi dx + \int \psi^* V(x) \psi dx$

$$= \int \frac{1}{2m} (\hat{p}\psi)^* (\hat{p}\psi) dx + \int \psi^* V(x) \psi dx >$$

$$\int \psi^* V(x) \psi dx > V_{\min}$$

> 0 εφόσον εάν $\psi = 0$ οπότε δεν είναι σταθερά μηδενισμένη (αλλά $\psi \neq 0$).

(i). Το διακρινό ενεργειακό πρόβλημα δέν έχει ακεραιότητα.

$$\text{-Εστω } \psi_1, \psi_2 : \begin{cases} \hat{H}\psi_1 = E\psi_1 \\ \hat{H}\psi_2 = E\psi_2 \end{cases}$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_1'' &= \frac{2m}{\hbar^2} (V-E)\psi_1 \\ \psi_2'' &= \frac{2m}{\hbar^2} (V-E)\psi_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \psi_2\psi_1'' - \psi_1\psi_2'' = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} (\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2') = 0 \Rightarrow \psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2' = c$$

$$\text{για } x \rightarrow \pm\infty \quad \psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2' \rightarrow 0 \Rightarrow c=0$$

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} \Rightarrow (\ln\psi_1)' = (\ln\psi_2)' \Rightarrow \ln\psi_1 = \ln\psi_2 + d'$$

$$\Rightarrow \psi_1 = d\psi_2$$

Άρα οι δύο λύσεις δέν είναι γραμμικά ανεξάρτητες.

(ii). Οι ιδιοσυναρτήσεις διακρινό πρόβματος μπορεί να βρεθούν πραγματικές.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^{*''} + V(x)\psi^* = E\psi^*$$

δηλαδή ψ, ψ^* ιδιοσυναρτήσεις με την ίδια ιδιοτιμή $\stackrel{(i)}{\Rightarrow}$

$$\left. \begin{aligned} \psi &= c\psi^* \\ \psi^* &= c^*\psi \end{aligned} \right\} \Rightarrow \psi\psi^* = |c|^2\psi\psi^* \\ \Rightarrow |c|^2 = 1 \Rightarrow c = e^{i\theta}$$

Επομένως:

$$\psi = e^{i\theta}\psi^* \Rightarrow e^{-i\theta/2}\psi = e^{i\theta/2}\psi^* \Rightarrow e^{-i\theta/2}\psi = R \text{ πραγματική συνάρτηση}$$

$$\Rightarrow \psi = e^{i\theta/2}R$$

↳ ορατότητα φάση

(iii). Εάν $V(x) = V(-x)$ οι ιδιοσυμπεριφορές του διακεκριτού φάσματος θα είναι είτε άρρες είτε περιττές.

(iv). Ρίζες των ιδιοσυμπεριφορών διακεκριτού φάσματος.
(Θεώρημα παραγωγής).

-Εστω $E_0 < E_1 < E_2 < \dots < E_n < \dots$

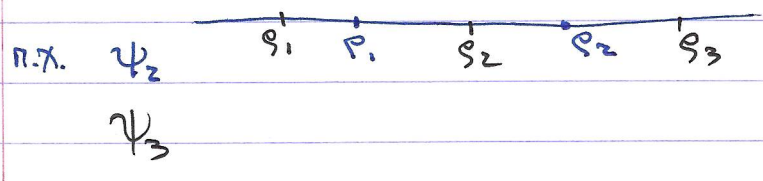
$\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$

το διακεριστό φάσμα (E_0 η πρώτη σειρά).

Στο ανοικτό διάστημα ορισμοί του πεπεδημένου (εφαρμογή διφάνη τα άκρα)

n ψ_n έχει n ρίζες $\rho_i, \psi(\rho_i) = 0$.

Οι ρίζες των ψ_n ευρισκονται ανάμεσα των ριζών των ψ_{n-1} , μία για μία μεταξύ δύο ριζών των ψ_{n-1} .



Είκοτα αποδεικνύεται ότι εάν $E_2 > E_1$,
η ψ_2 έχει επίη μεταξύ δύο διαδοχικών επίων της ψ_1 .

- Έστω $\psi_1(p_1) = \psi_2(p_2) = 0$ και

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_1'' + V \psi_1 &= E_1 \psi_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_2'' + V \psi_2 &= E_2 \psi_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\int_{p_1}^{p_2} (\psi_2 \psi_1'' - \psi_1 \psi_2'') dx = +\frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - E_1) \int_{p_1}^{p_2} \psi_1 \psi_2 dx \Rightarrow$$

$$\psi_2(p_2) \psi_1'(p_2) - \psi_1(p_2) \psi_2'(p_2) - \psi_2(p_1) \psi_1'(p_1) + \psi_1(p_1) \psi_2'(p_1) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - E_1) \int_{p_1}^{p_2} \psi_1 \psi_2 dx$$

- Έστω ότι $\psi_1'(p_1) > 0$ και $\psi_1'(p_2) < 0 \Rightarrow \psi_1(x) > 0$ για $p_1 < x < p_2$

Για το διάστημα (p_1, p_2) η ψ_2 διατηρεί πρόσημο έστω > 0
τότε το αριστερό μέλος είναι αρνητικό και το δεξιό
θετικό \rightarrow άτοπο.

Ομοίως η ψ_2 έχει επίη στο διάστημα (p_1, p_2) .

Απόλα εφέπεται οι άλλες περιπτώσεις.

- Οι επίες είναι αηίς : $\psi'(p_i) \neq 0$ για τις ίδιες
τους επίωνες Schrödinger. **

* *

Είν

$$\psi(x) = \psi(0) + x\psi'(0) + \frac{1}{2}x^2\psi''(0) + \dots + \frac{1}{n!}x^n\psi^{(n)}(0) + \dots$$

$$\psi'(x) = \psi'(0) + x\psi''(0) + \frac{1}{2}x^2\psi'''(0) + \dots + \frac{1}{n!}x^n\psi^{(n+1)}(0) + \dots$$

$$\psi''(x) = \psi''(0) + x\psi'''(0) + \frac{1}{2}x^2\psi^{(4)}(0) + \dots + \frac{1}{n!}x^n\psi^{(n+2)}(0) + \dots$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \psi''(0) + x\psi'''(0) + \dots + \frac{1}{n!}x^n\psi^{(n+2)}(0) + \dots \right\} =$$

$$(V(x)-E) \left\{ \psi(0) + x\psi'(0) + \dots + \frac{1}{n!}x^n\psi^{(n)}(0) + \dots \right\}$$

$$= (V(0)-E)\psi(0) + [V'(0)\psi(0) + V(0)\psi'(0)]x +$$

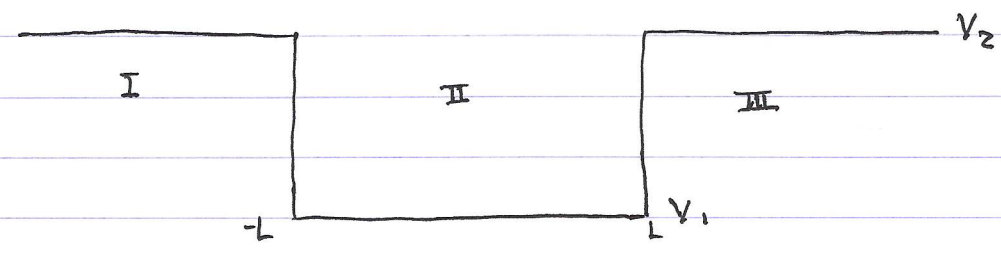
$$\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{2m} (V(0)\psi''(0) + 2V'(0)\psi'(0) + \psi(0)V''(0))x^2 + \dots$$

$$\Rightarrow \psi''(0)=0, \psi'''(0)=0, \psi^{(4)}(0)=0, \dots, \psi^{(n)}(0)=0, \dots$$

$$\Rightarrow \psi(x)=0.$$

↳ έχουμε μόνον μηδέν επί/αξ.

1. Σε συμμετρικό κυψαλί πεπερασμένου βάθους, να ελεγχθούν οι δέσμες καταστάσεων.



Ιδιοτιμές διακετού φάσματος: $V_1 < E < V_2$.

Ανταμικό συμμετρικό \Rightarrow Ιδιοσυναρτήσεις άρτες ή περιτές.

α). Άρτες ιδιοσυναρτήσεις.

* I: $x < -L$: $\psi_I = A e^{qx}$, $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_2 - E)}$,

II: $-L < x < L$: $\psi_{II} = B \cos kx$, $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1)}$,

III: $x > L$: $\psi_{III} = A e^{-qx}$.

Στο σημείο $x = -L$.

Συνέχεια των κυψ. συναρτήσεων:

$$B \cos kL = A e^{-qL}$$

Συνέχεια της πρώτης παραγώγου:

$$-kB \sin(-kL) = qA e^{-qL} \Rightarrow kB \sin kL = qA e^{-qL}$$

$$\tan kL = \frac{q}{k}$$

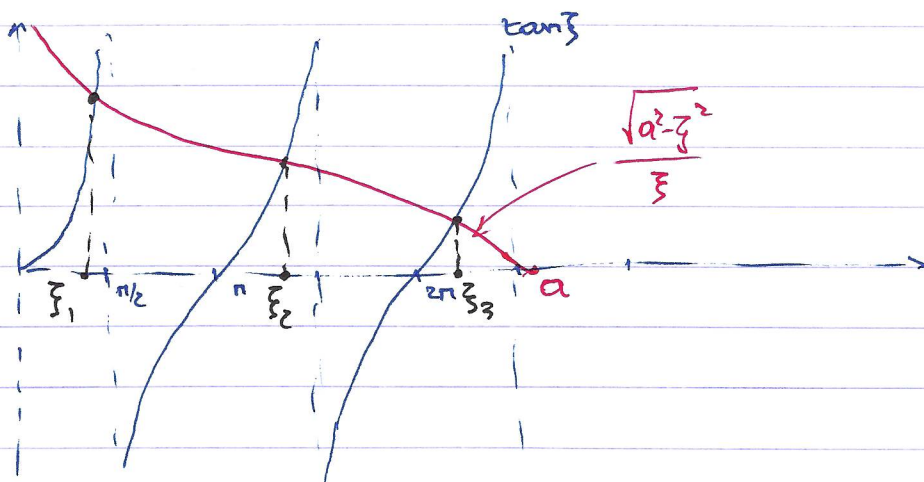
$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_2 - E)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_2 - V_1 - (E - V_1))} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_2 - V_1) - k^2}$$

Ερωτήματα:

$$\tan \xi = \frac{\sqrt{a^2 - \xi^2}}{\xi}$$

$$\xi = kL$$

$$a^2 = \frac{2mL^2}{\hbar^2} (V_2 - V_1)$$



Εάν $n\pi < a < (n+1)\pi \Rightarrow (n+1)$ ιδιοenergies και ενέργειες με άλλα ιδιοαριθμούς.

Το ίδιο θα:

$$k\pi < \xi_{k+1} < \frac{2k+1}{2}\pi, \quad k = 0, \dots, n$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 \pi^2 k^2}{2mL^2} + V_1 < E_{k+1} < \frac{\hbar^2 \pi^2 (2k+1)^2}{2m(2L)^2} + V_1$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 \pi^2 (2k)^2}{2m(2L)^2} + V_1 < E_{k+1} < \frac{\hbar^2 \pi^2 (2k+1)^2}{2m(2L)^2} + V_1$$

||

||

$E_{2k} \rightarrow$ αντίστοιχων αριθμών $\leftarrow E_{(2k+1)}$
 εύρους $2L$

β). Περίτες ιδιοσυχνότητες.

$$\text{I: } x < -L : \Psi_{\text{I}} = -Ae^{+qx}$$

$$\text{II: } -L < x < L : \Psi_{\text{II}} = B \sin kx,$$

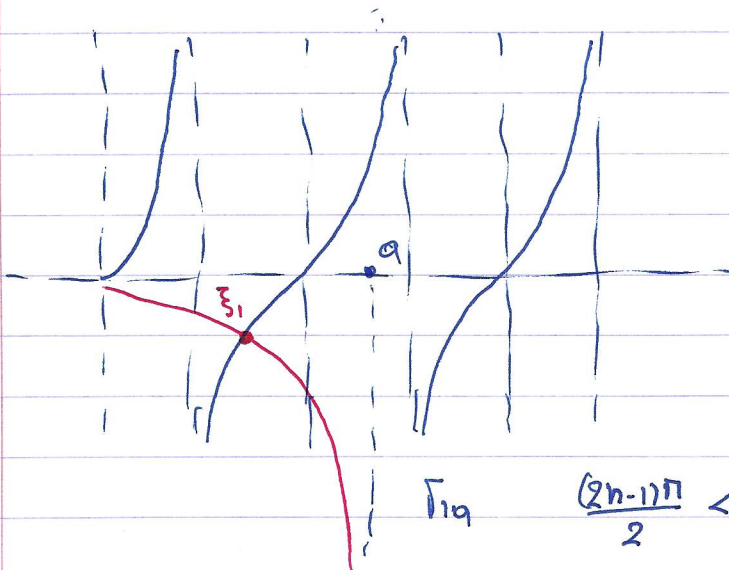
$$\text{III: } x > L : \Psi_{\text{III}} = Ae^{-qx}.$$

Στο όριο $x = -L$.

$$\left. \begin{aligned} B \sin kL &= +Ae^{-qL} \\ kB \cos kL &= -qAe^{-qL} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \tan kL = -\frac{k}{q}$$

ορίζεται αντιστοίχα περίπτωσης $kL = \xi$:

$$\tan \xi = -\frac{\xi}{\sqrt{a^2 - \xi^2}}$$



$$\text{Για } \frac{(2n-1)\pi}{2} < a < \frac{(2n+1)\pi}{2}, \quad n=1,2,\dots$$

υπάρχουν n περίτες ιδιοσυχνότητες με ενέργειες:

$$\frac{2k-1}{2}\pi < \xi_k < 2k\pi \Rightarrow \frac{\frac{1}{2}\pi(2k-1)^2}{2m(2L)^2} + V_1 < E_k < \frac{k^2\pi(2k)^2}{2m(2L)^2} + V_1$$

$(k=1, \dots, n)$

"
 $E_{2k-1} \rightarrow$ αντίστροφου πηγαδιού εύρους $2L$.
 "

$$a = \sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2} (V_2 - V_1)}$$

L καθορίζει τον αριθμό των δεσμών καταστάσεων.

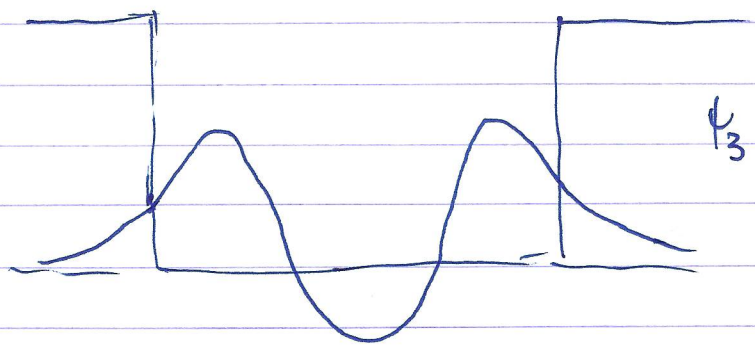
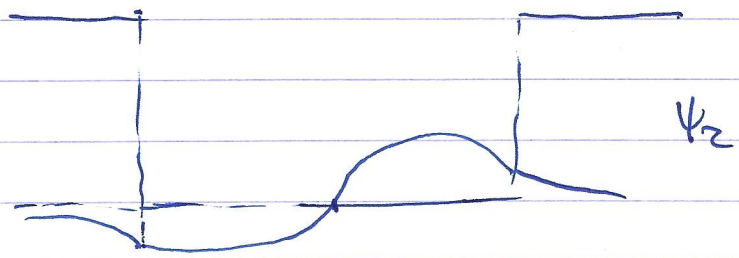
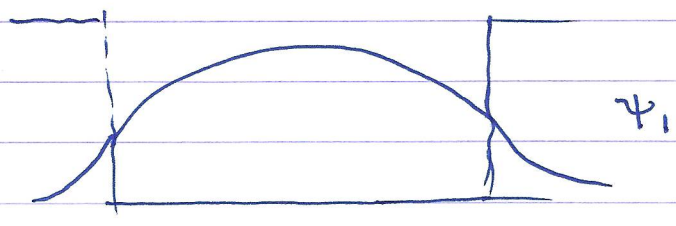
∃ πάντα ρυθμιστών για κατάσταση.

$a < \frac{\pi}{2}$, E_1, ψ_1 άρα 1 κατάσταση

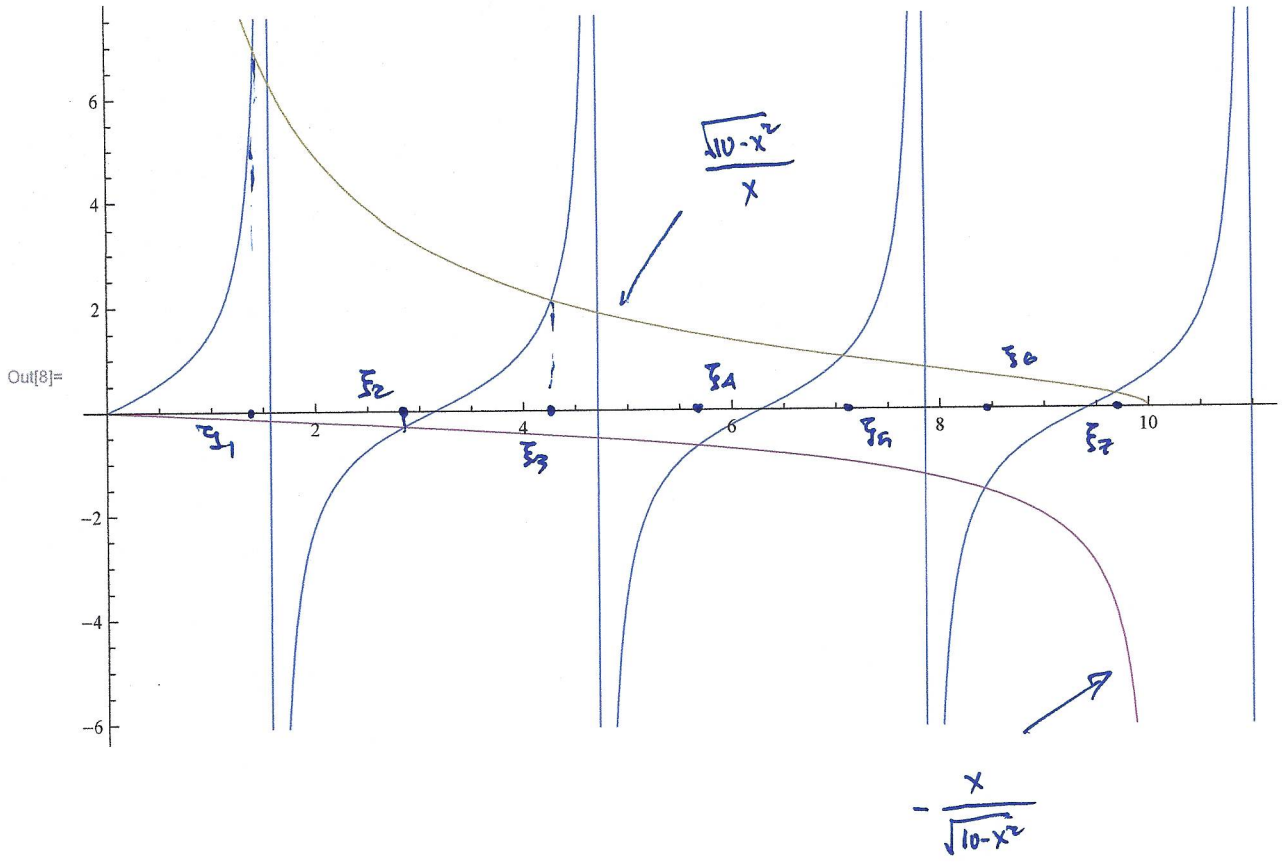
$\frac{\pi}{2} < a < \pi$, E_1, ψ_1 άρα 2 καταστάσεις
 \hat{E}_2, ψ_2 πλεον

$\pi < a < \frac{3\pi}{2}$, E_1, ψ_1 άρα (0, $e^{i\pi/2}$) 3 κατα-
 \hat{E}_2, ψ_2 πλεον (1, $e^{i\pi}$) στάσεις
 \hat{E}_3, ψ_3 άρα (2, $e^{i3\pi/2}$)

∴

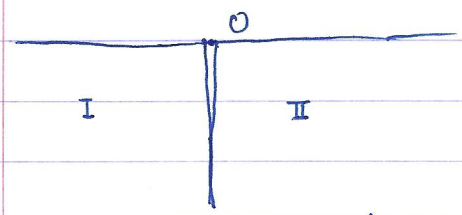


7'



2. Να επεξεργαστείς τις δόσεις καταστάσεις των δυναμικών

$$V(x) = -\lambda \delta(x), \quad \lambda > 0.$$



$$V_{min} = 0 \Rightarrow E < 0.$$

$$x < 0: \quad \psi_I = A e^{kx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

$$x > 0: \quad \psi_{II} = B e^{-kx}.$$

Συνέχεια της κυματικής συνάρτησης στο σημείο $x=0$:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A = B.$$

Όσον αφορά τις δύο παραμέτρους:

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

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(e) - \psi'(-e)] - \lambda \psi(0) = E \int_{-e}^e \psi(x) dx$$

Για $e \rightarrow 0$ έχουμε: $(\int_{-e}^e \psi(x) dx \rightarrow 0)$

$$\psi'(0_+) - \psi'(0_-) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(0)$$

Η πρώτη παράμετρος παρουσιάζει ασυνέχεια αλλαγής της τιμής της κυματικής συνάρτησης στο σημείο $x=0$ (όραση της συνάρτησης δ).

Αρα για $x=0$:

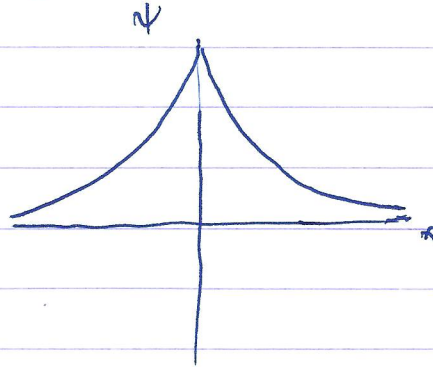
$$\psi_{II}'(0) - \psi_I'(0) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(0) \Rightarrow$$

$$-kB - kA = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} A \Rightarrow (A=B)$$

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

$$\Rightarrow \frac{2m\lambda}{\hbar^2} |E| = \frac{m^2 \lambda^2}{\hbar^2} \Rightarrow$$

$$E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$$



$$\psi(x) = A e^{-k|x|}$$

Συνθήκες κανονικοποίησης:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 2|A|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = |A|^2 \frac{1}{k} = 1$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{k} e^{i\theta}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k}} e^{-k|x|}$$

*

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

Εάν V σταθερό:

α). $V-E > 0$ $\Rightarrow \psi'' = k^2 \psi$, $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V-E)}$

$$\Rightarrow \psi(x) = A e^{kx} + B e^{-kx}$$

$$\text{η } \psi(x) = A' \cosh kx + B' \sinh kx.$$

Εάν η περιοχή της ανώτερης ζώνης εκτείνεται στο $+\infty$
 $\rightarrow A=0$

Εάν η περιοχή της ζώνης εκτείνεται στο $-\infty$
 $\rightarrow B=0$

ώστε να έχουμε εξαρτημένα οριακά όρια συνάρτησης.

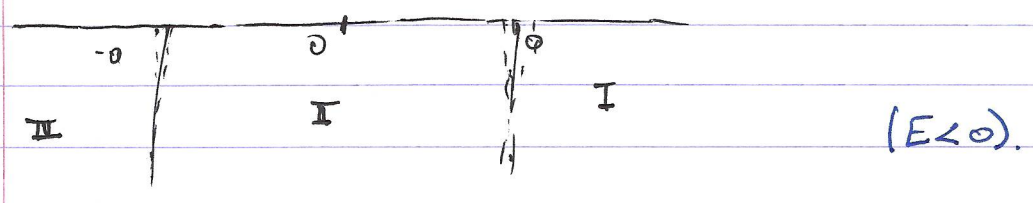
Εάν το x μετασχηματίζεται σε πεπετασμένο διάστημα θα υπάρχουν υπ' όψιν και οι δύο ανεξάρτητες ζώνες.

β). $V-E < 0$ $\Rightarrow \psi'' = -k^2 \psi$, $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E-V)}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ &= A' \cos kx + B' \sin kx \\ &= \Gamma \cos(kx + \delta) \\ &= \Delta \sin(kx + \delta) \end{aligned}$$

3. Να εφευδοθή οι ίδιες καταστάσεις που δίνονται

$$V(x) = -\alpha (\delta(x-a) + \delta(x+a)), \quad \alpha > 0.$$



(i). Ψυχρές καταστάσεις.

$$\Psi_I(x) = A e^{-kx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}},$$

$$\Psi_{II}(x) = B \cosh kx,$$

$$\Psi_{III}(x) = A e^{kx}.$$

Στο σημείο $x = a$:

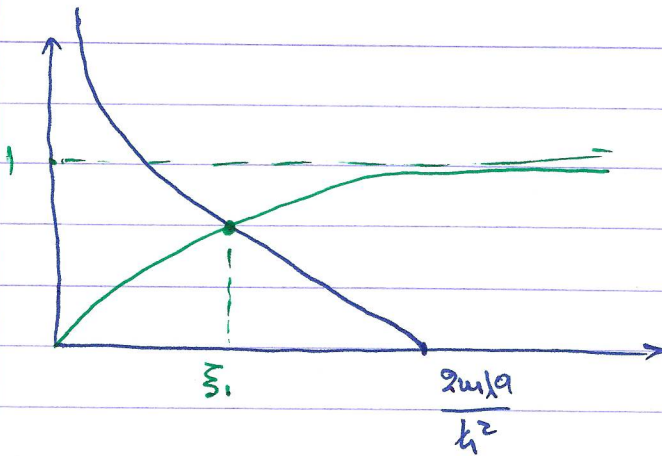
$$\left. \begin{aligned} \Psi_I(a) &= \Psi_{II}(a) \\ \Psi_I'(a) - \Psi_{II}'(a) &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \Psi_I(a) \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

και

$$\left. \begin{aligned} A e^{-ka} &= B \cosh ka \\ -k A e^{-ka} - k B \sinh ka &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} A e^{-ka} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} kB \sinh ka = \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - k\right) A e^{-ka} \\ B \cosh ka = A e^{-ka} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \tanh ka = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k} - 1$$

$$\Rightarrow \boxed{\tanh \xi = \frac{2m\alpha a}{\hbar^2} \frac{1}{\xi} - 1.} \quad (\xi = ka)$$



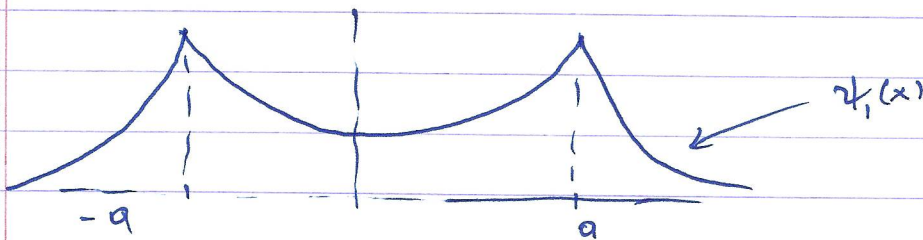
Η γραφική επίλυση δίνει πάντοτε για ενεργειακό στάθμη E_1 με:

$$\tan k\xi_1 = \frac{2m\lambda a}{k^2} \frac{1}{\xi_1} - 1 < 1 \Rightarrow$$

$$\frac{m\lambda a}{k^2} < \xi_1 \Rightarrow \frac{m^2 \lambda^2}{k^2} < \frac{2m}{k^2} |E|$$

$$\Rightarrow |E| > \frac{m\lambda^2}{2k^2} \Rightarrow E_1 < -\frac{m\lambda^2}{2k^2}$$

Βασική στάθμη με κυματική συνάρτηση:



και ενέργεια μεγαλύτερη αυτής που έχει ελεύθερο κίνητρο.

(ii). Περίπτωση καθορισμού.

$$\psi_I(x) = A e^{-kx},$$

$$\psi_{II}(x) = B \sinh kx,$$

$$\psi_{III}(x) = -A e^{kx}.$$

Σε σύγκριση $x=a$:

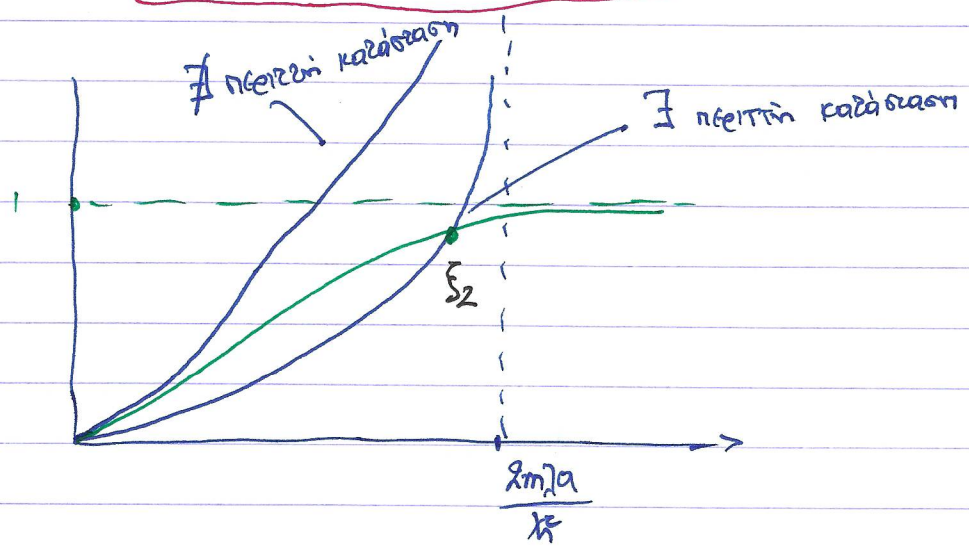
$$A e^{-ka} = B \sinh ka$$

$$-k A e^{-ka} - k B \cosh ka = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} A e^{-ka} \Rightarrow$$

$$\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2} - k \right) A e^{-ka} = k B \cosh ka \Rightarrow$$

$$\tanh ka = \frac{k}{\frac{2m\lambda}{\hbar^2} - k} \Rightarrow (ka = \xi)$$

$$\boxed{\tanh \xi = \frac{\xi}{\frac{2m\lambda a}{\hbar^2} - \xi}}$$



Για να υπάρχει πεπετην ιδιοκατάσταση (πρωτον διασπαρμένη)
 πρέπει:

$$\left. \frac{d}{d\xi} \tanh \xi \right|_{\xi=0} > \left. \frac{d}{d\xi} \frac{\xi}{\frac{2m\lambda a}{\hbar^2} - \xi} \right|_{\xi=0} \Rightarrow$$

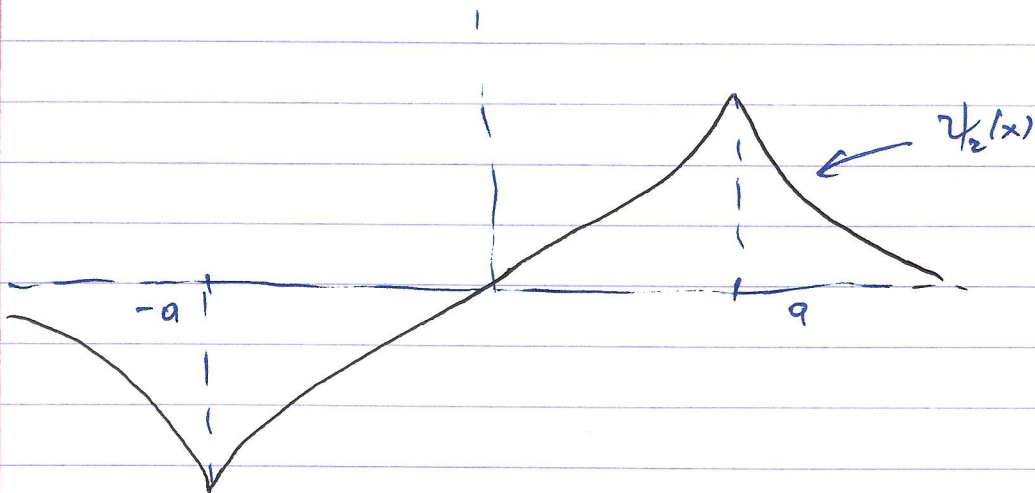
$$1 > \frac{\hbar^2}{2m\lambda a} \Rightarrow \boxed{\frac{2m\lambda a}{\hbar^2} > 1.}$$

Προφανώς:

$$\tanh \xi_2 = \frac{\xi_2}{\frac{2m\lambda a}{\hbar^2} - \xi_2} < 1$$

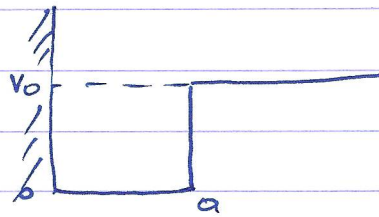
$$\Rightarrow \xi_2 < \frac{2m\lambda a}{\hbar^2} \Rightarrow E_2 > -\frac{m\lambda^2 a^2}{2\hbar^2}$$

Η ιδιοκατάσταση ως μορφή:

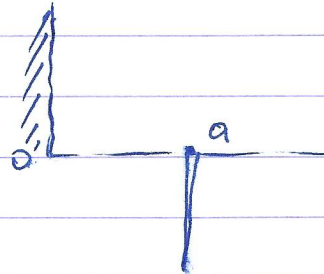


1. Να ερευνήσουν οι δέσμες καταστάσεις στα ακόλουθα διαγράμματα:

$$(i) \quad V(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ +V_0, & x > a \end{cases}$$



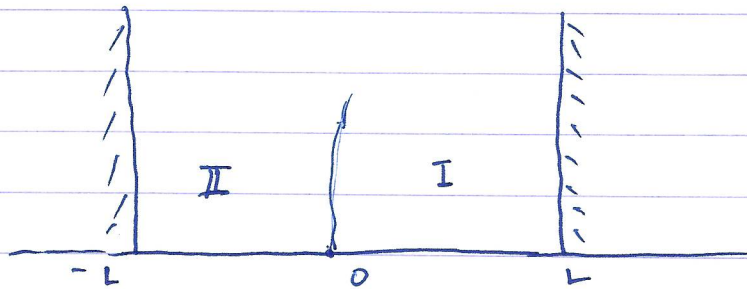
$$(ii) \quad V(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0 \\ -\lambda \delta(x-a), & x > 0, \lambda > 0. \end{cases}$$



Να δείξει ότι αυτές συντίθενται με τις κεντρικές ιδιοκαταστάσεις των προβλημάτων (1) και (3) αντίστοιχα.

5. Να βρεθούν οι ιδιοκαταστάσεις και ενέργειες για το δυναμικό

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L \\ \lambda \delta(x), & |x| < L. \end{cases}$$



Προφανώς υπάρχουν μόνο δεξιές καταστάσεις με $\psi(x) = 0$ εάν $|x| \geq L$.

(i). Περίττες ιδιοκαταστάσεις.

$$\psi_I(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (E > 0)$$

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

$$\psi_{II}(x) = -A \cos kx + B \sin kx$$

$$\begin{aligned} \text{Στο σημείο } x=L: & \quad A \cos kL + B \sin kL = 0 \Rightarrow A = -B \tan kL \\ \text{Στο σημείο } x=0: & \quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0 \Rightarrow A = 0 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \text{Στο σημείο } x=L: \\ \text{Στο σημείο } x=0: \end{aligned}} \right\} \Rightarrow$$

$$\sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi$$

$$n = 1, 2, \dots$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 2mE}{\hbar^2} = n^2 \pi^2 \Rightarrow E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$\Rightarrow E_{2n} = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2L)^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

δηλαδή έχουμε απειράστως το ποσοστό των περιττών ιδιοκαταστάσεων των απειράστως μεγάλου (άρθρο n).

α). Εφ' όσον για $n=1$: $\psi_2 = B \sin \frac{\pi}{L} x$ μηδενίζεται (εκτός των άκρων) μόνο στο σημείο $x=0$ (ένας δεξιός) δεν υπάρχουν άλλες ποσότητες ιδιοκαταστάσεις (με $E \leq 0$).

β). Οι όψεις θα ευρισκονται ανά μια μεριά των ποσότητες:

$$E_1 < E_2 < E_3 < E_4 < \dots$$

$$\begin{matrix} | & & | \\ \psi_1 & & \psi_3 \end{matrix}$$

↳ βασική σειράση.

γ). Η συνθήκη δ δεν επιβάλλει τις ποσότητες ιδιοκαταστάσεις:

$$\psi'_I(0) - \psi'_II(0) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(0) \Rightarrow \text{συνέχεια και}$$

0

τους πρώτους παραμέτρους.

(ii) Άλλες ιδιοκαταστάσεις.

$$\psi_I(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (E > 0)$$

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

$$\psi_{II}(x) = A \cos kx - B \sin kx$$

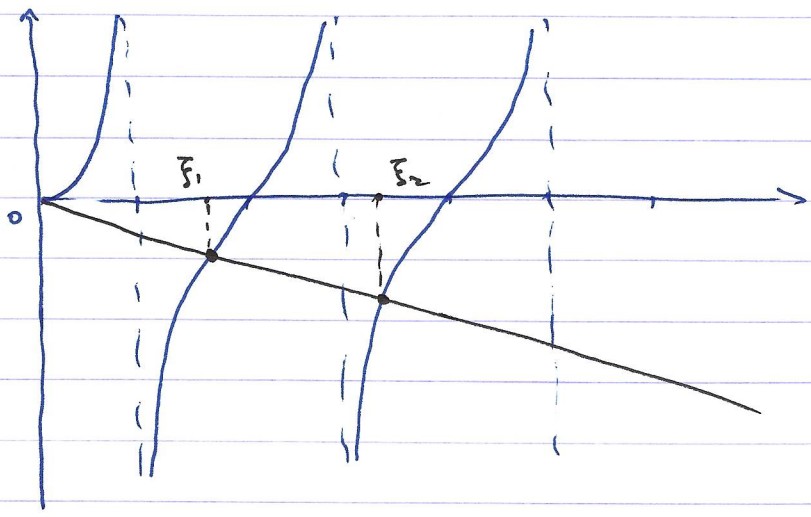
Στο σημείο $x=L$: $A = -B \tan kL$

Στο σημείο $x=0$: $kB - (-kB) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} A$ (συνέχεια τις πρώτους παραμέτρους)

$$\Rightarrow 2kB = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} B \tan kL \Rightarrow$$

$$\tan \xi = -\left(\frac{\hbar^2}{m\lambda L}\right) \xi$$

1. $\lambda > 0$.

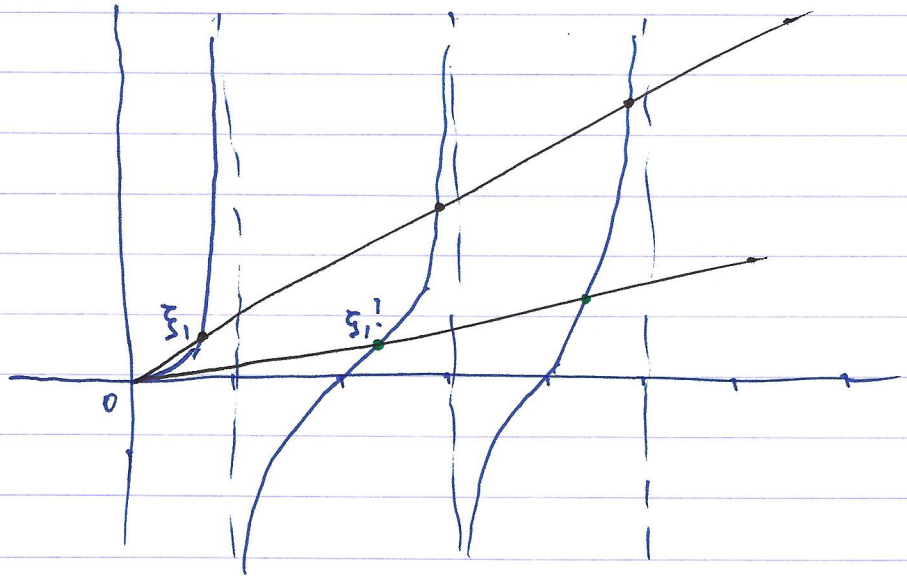


$$\frac{\pi}{2} < \xi_1 < \pi \Rightarrow \frac{\pi}{2L} < k_1 < \frac{\pi}{L} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2L)^2} < E_1 < \frac{\hbar^2 \pi^2 (2)^2}{2m(L)^2} \Rightarrow E_1 \text{ είναι η βασική στάσιμη } E_2$$

(Η E_1 είναι μεγαλύτερη από την βασική στάσιμη του απείρου βαθύ οπταδίου ($\lambda > 0$) αλλά μικρότερη από την E_2).
 (Ομοίως $E_{2n-1} < E_{2n}$).

2. $\lambda < 0$.



$$\tan \xi = \frac{\hbar^2}{m\lambda L} \xi$$

Εάν $\left. \frac{d}{d\xi} \tan \xi \right|_{\xi=0} = 1 < \frac{k^2}{m|\lambda|L}$

υπόγειο στάσιον με $\xi_1 < \frac{\pi}{2} < \pi \Rightarrow E_1 < E_2$.

Αντίστοιχα έχουμε την πρώτη στάσιον οπότε παίρνουμε
 ότι το ενεργειακό εύρος με θετικές ενέργειες.

→ $\frac{m|\lambda|L}{k^2} < 1, E_m > 0$.



Εάν $\frac{m|\lambda|L}{k^2} > 1$

η πρώτη ζώνη είναι για $\xi > \pi \Rightarrow E > E_2$. Δεδομένου
 πρώτης στάσιον έχει ενέργεια ≤ 0 .

α). $E < 0$.

$\Psi_I(x) = A \cosh kx + B \sinh kx$

$k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$

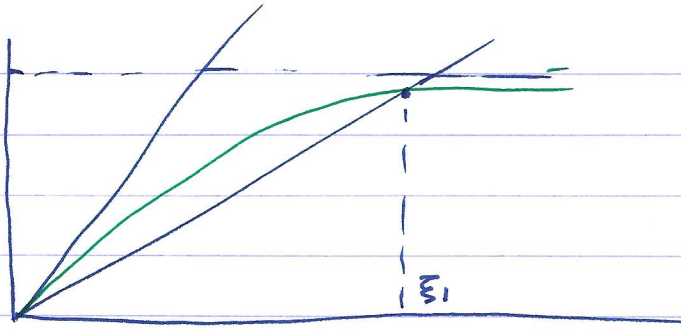
$\Psi_{II}(x) = +A \cosh kx - B \sinh kx$

Στο σημείο $x=L$: $A = -B \tanh kL$

Στο σημείο $x=0$: $kB - k(-kB) = -\frac{2m|\lambda|}{\hbar^2} A$

$\Rightarrow k = \frac{m|\lambda|}{\hbar^2} \tanh kL$

$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{m|\lambda|L} \xi = \tanh \xi$



$\frac{\hbar^2}{2m|x|L} < 1$ υπάρχει μόνο με ενέργεια:

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2mL^2} \xi_1^2$$

Αντίθετα εάν $\frac{m|x|L}{\hbar^2} > 1$ η βασική κατάσταση έχει αρνητική ενέργεια.

β). $\frac{m|x|L}{\hbar^2} = 1$ η βασική κατάσταση έχει μηδενική ενέργεια.

Παράδειγμα: $E=0 \Rightarrow$

$$\psi_I(x) = Ax + B$$

$$\psi_{II}(x) = -Ax + B$$

Στο σημείο $x=L$: $AL + B = 0 \Rightarrow A = -\frac{1}{L}B$.

Στο σημείο $x=0$: $A - (-A) = -\frac{2m|x|}{\hbar^2} B$

$$\Rightarrow 2A = -\frac{2m|x|}{\hbar^2} (-L) A \Rightarrow$$

$$\frac{m|x|L}{\hbar^2} = 1.$$