

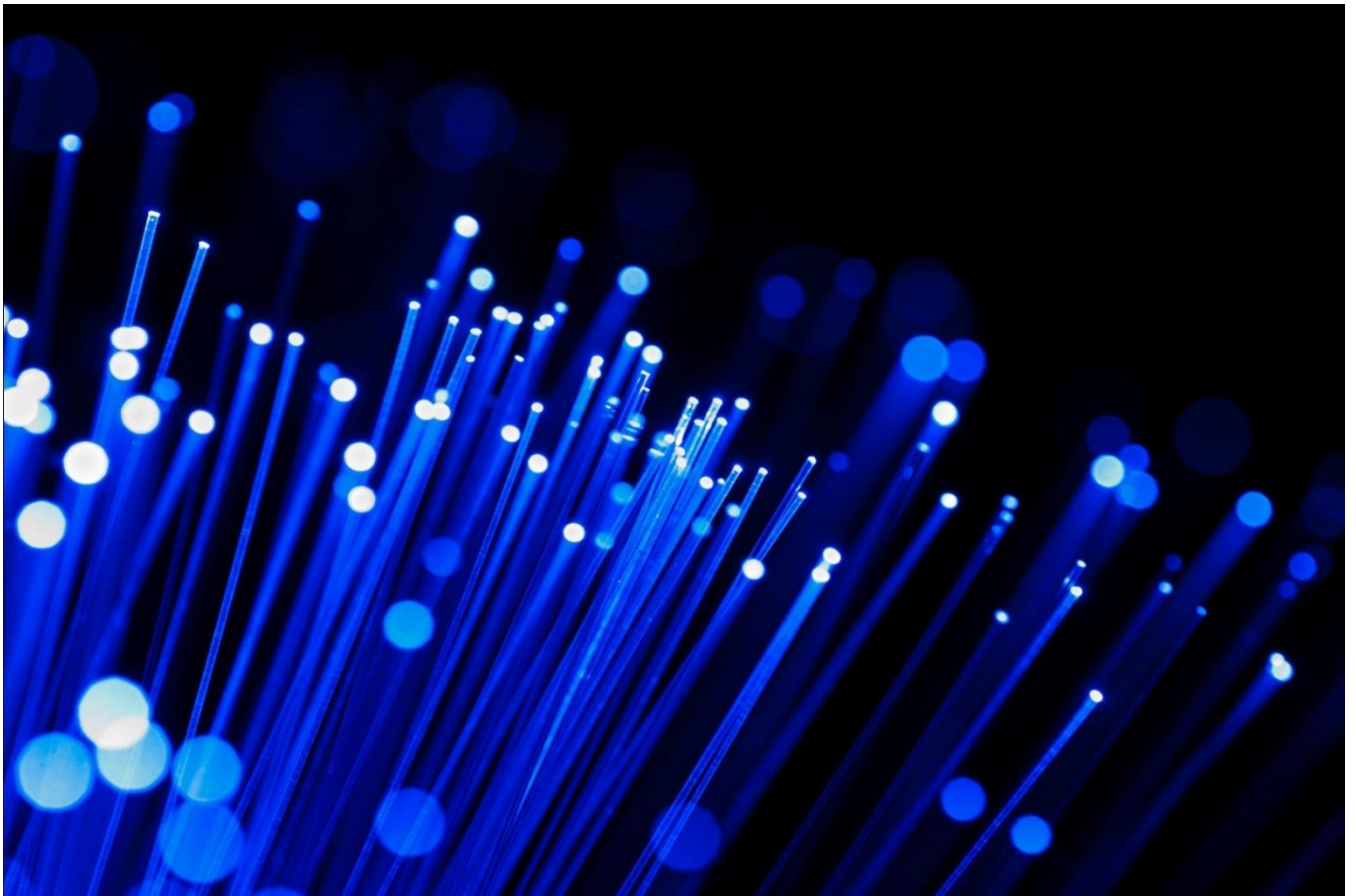


ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ – ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

*Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών
«Μαθηματική Μοντελοποίηση στις Φυσικές Επιστήμες
και στις Σύγχρονες Τεχνολογίες»*

Μεταπτυχιακή Διατριβή

Η ΛΥΣΗ ΣΟΛΙΤΟΝΙΟΥ ΓΙΑ ΤΗΝ ΜΗ-ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRÖDINGER



ΠΡΙΦΤΗ ANNA

AM: 313/2012017

Επιβλέπων: Καθηγητής ΚΑΡΑΧΑΛΙΟΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ

ΜΑΪΟΣ 2014

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ – ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

*Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών
«Μαθηματική Μοντελοποίηση στις Φυσικές Επιστήμες
και στις Σύγχρονες Τεχνολογίες»*

Μεταπτυχιακή Διατριβή

Η ΛΥΣΗ ΣΟΛΙΤΟΝΙΟΥ ΓΙΑ ΤΗΝ ΜΗ-ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRÖDINGER

ΠΡΙΦΤΗ ANNA

ΑΜ: 313/2012017

Επιβλέπων: Καθηγητής ΚΑΡΑΧΑΛΙΟΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ

ΜΑΪΟΣ 2014

Με αγάπη στον

Θωμά μου!

Περίληψη

Στην διπλωματική αυτή εργασία ασχοληθήκαμε με την μη γραμμική εξίσωση Schrödinger (εξίσωση NLS). Το ενδιαφέρον μας επικεντρώθηκε στην εξαγωγή της βασικής μη γραμμικής κυματικής εξίσωσης NLS, των οπτικών σολιτονίων, δηλαδή στη διάδοση παλμών σε οπτικές ίνες και η διάδοση δεσμών σε συμπαγή οπτικά μέσα ή σε επίπεδους διηλεκτρικούς κυματοδηγούς. Η μονοδιάστατη εξίσωση NLS, που αντιστοιχεί στο σολιτόνιο, παίρνει την μορφή $iu_z + \nu u_{xx} + s|u|^2 u = 0$. Στο τρίτο κομμάτι της εργασίας επιλύεται η εξίσωση NLS και μελετάτε η δυναμική της συμπεριφορά για κάθε μια περίπτωση της λύσης. Τέλος μελετάμε τον ρόλο της σταθερά ν από την εξίσωση NLS και παραθέτουμε κάποια παραδείγματα για μια πιο σαφή εικόνα. Τα γραφήματα πραγματοποιήθηκαν με χρήση του λογισμικού Mathematica, Matlab και Microsoft Math.

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική – Ιστορική Αναδρομή

1.1 Εισαγωγή.....	3
1.2 Θεμελίωση της σύγχρονης κβαντικής θεωρίας.....	3
1.3 Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg.....	8
1.4 Η κυματική εξίσωση του Schrödinger.....	10
1.5 Μονοδιάστατο πηγάδι δυναμικού με άπειρο ύψος.....	12
1.6 Σημασία του πλάτους $\psi_n(x)$ της κυματοσυνάρτησης.....	15
1.7 Αριθμός των ενεργειακών καταστάσεων στο διάστημα $(E, E + dE)$	16
1.8 Το βήμα δυναμικού.....	17
1.9 Ο αρμονικός ταλαντωτής.....	24

Κεφάλαιο 2

Εισαγωγή στη φυσική των οπτικών σολιτονίων

2.1 Εισαγωγή.....	27
2.2 Η μη γραμμική εξίσωση του Schrödinger (εξίσωση NLS).....	29
2.2.1 Οπτικές ίνες.....	30
2.2.2 Συμπαγή οπτικά μέσα και επίπεδοι διηλεκτρικοί κυματοδηγοί.....	27

Κεφάλαιο 3

Λύση της εξίσωσης σολιτονίου NLS

3.1 Κατασκευή της λύσης σολιτονίου.....	35
3.2 Ο ρόλος της σταθεράς ν στην λύση της διαφορικής εξίσωσης NLS.....	45
3.3 Αριθμητικές εξομοιώσεις για τη λύση σολιτονίου.....	47
Βιβλιογραφία.....	80

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική – Ιστορική Αναδρομή

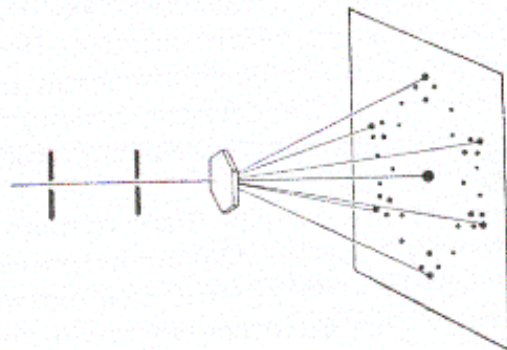
1.1 Εισαγωγή

Η κυματομηχανική του Schrödinger (1926) και ο ισοδύναμος φορμαλισμός με τη βοήθεια πινάκων από τον Heisenberg (1926) αποτελούν τη βάση αυτού που είναι γνωστό ως «σύγχρονη φυσική». Με τις θεωρίες αυτές, αναμφίβολα, αντικαταστάθηκε ή επεκτάθηκε με επιτυχία η κλασική μηχανική σε όλη την περιοχή της φυσικής σε ατομικό και μοριακό επίπεδο, όπου με τη σειρά τους περιγράφουν τις μακροσκοπικές ιδιότητες μεγαλύτερης κλίμακας. Τα φαινόμενα πολύ υψηλών ενεργειών στη φυσική των στοιχειωδών σωματιδίων εξακολουθούν πάντως να παρουσιάζουν πολλά προβλήματα.

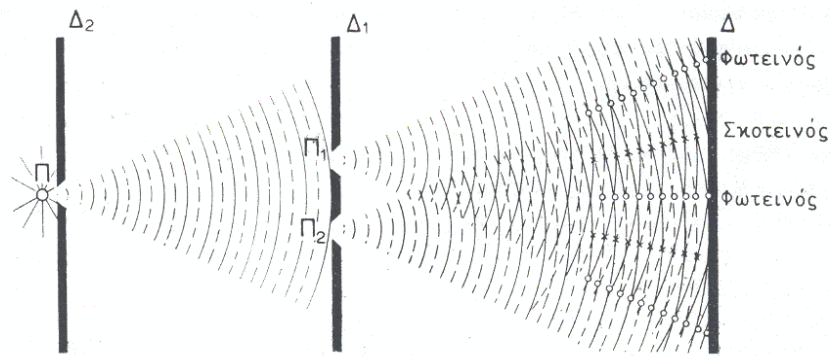
Σε αυτή την διπλωματική εργασία θα ασχοληθούμε μόνο με την κυματομηχανική του Schrödinger και τον τρόπο με τον οποίο αναδεικνύει τη δυϊκή κυματοσωματιδιακή φύση της ύλης. Η δυϊκή αυτή φύση θεμελιώθηκε πρώτα για την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, αλλά η παράλληλη προσπάθεια για τη θεμελίωση της κυματικής φύσης των υλικών σωματιδίων αποτελεί τη βασική ιστορία της φυσικής του 20^{ου} αιώνα.

1.2 Θεμελίωση της σύγχρονης κβαντικής θεωρίας

Κατά το 19^ο αιώνα πειράματα συμβολής και περίθλασης μαζί με την κλασική ηλεκτρομαγνητική θεωρία είχαν επιβεβαιώσει την κυματική φύση του φωτός πέρα από κάθε αμφιβολία (Σχήμα 1.1-1.2), αλλά το 1901, για να ερμηνεύσει τις πειραματικές καμπύλες της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος, ο Planck δέχθηκε αξιωματικά ότι η εκπομπή φωτονίων γινόταν μέσω κβάντα. Τα κβάντα ή αλλιώς τα κυματοπακέτα που εκπέμπει κάποιο σώμα σχετίζονται με μια ορισμένη συχνότητα του φωτός ν και έχουν όλα την ίδια ενέργεια $E = h \cdot \nu$, ανάλογη της συχνότητας αυτής. Η ποσότητα h ονομάστηκε σταθερά του Planck και έχει τιμή $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. Έπρεπε να παρέλθει ένα τέταρτο του αιώνα πριν προκύψει το ίδιο αποτέλεσμα από τη νέα κβαντομηχανική.

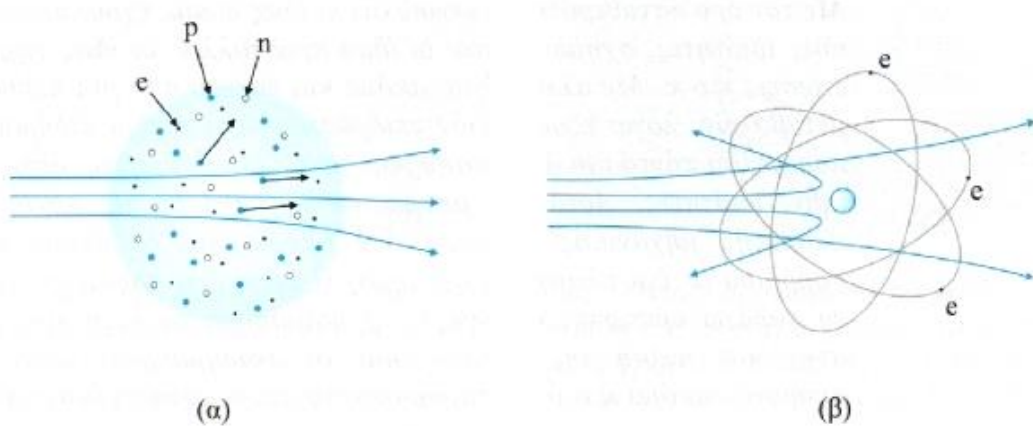


Σχήμα 1.1: Περίθλαση εξάγωνου αντικείμενου.



Σχήμα 1.2: Πείραμα των διπλών σχισμών του Young. Συμβολή μέτωπο κυμάτων και περίθλαση φωτός από δυο σχισμές.

Οι ακτίνες X ανακαλύφθηκαν από τον Roentgen το 1895, οι κυματικές τους ιδιότητες αναδείχθηκαν με τα πειράματα περίθλασης του von Laue το 1912 και σύντομα αποδείχθηκε η ηλεκτρομαγνητική φύση τους. Πολύ περισσότερος χρόνος χρειάστηκε για να συμβιβαστεί η κυματική φύση με τα αρνητικά φορτισμένα σωματίδια (ηλεκτρόνια) που βρήκε ο J.J. Thomson στα πειράματά του με καθοδικές ακτίνες το 1897. Ο J.J. Thomson υποστήριζε ότι τα άτομα είναι κομμάτια θετικά φορτισμένης ύλης εμπεριέχοντας ηλεκτρόνια όπως ακριβώς ένα κέικ με σταφίδες (Σχήμα 1.3α). Και μόνον το 1927 οι Davisson και Germer παρατήρησαν φαινόμενα συμβολής από ανάκλαση ή σκέδαση ηλεκτρονίων, ενώ ο G.P. Thomson (ο γιός του J.J.), το 1928, παρήγαγε εικόνες περίθλασης με ομόκεντρους δακτυλίους εκτοξεύοντας ηλεκτρόνια μέσα από ένα λεπτό φύλλο.

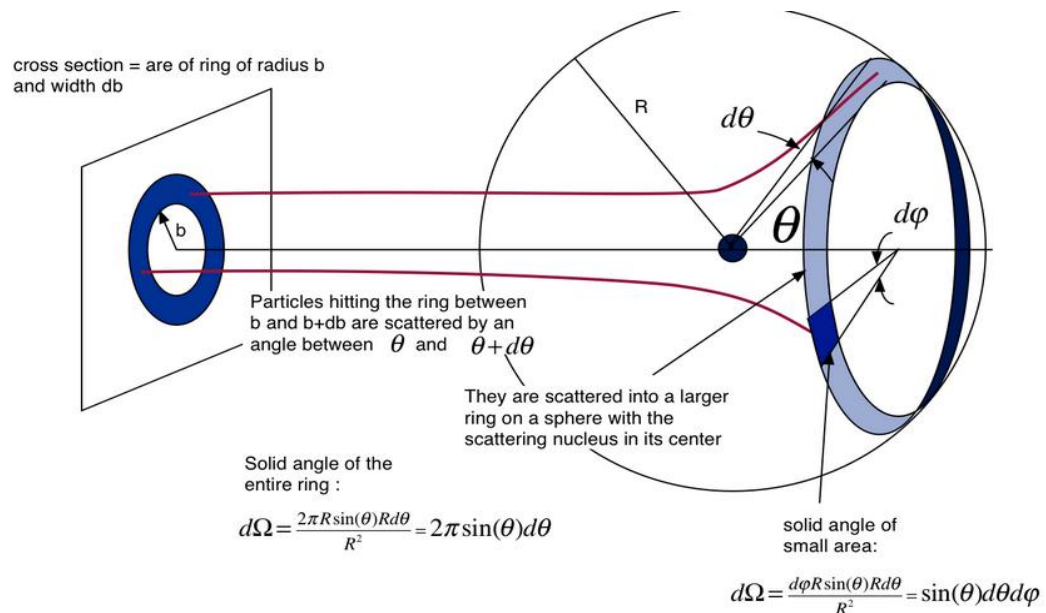


Σχήμα 1.3: Τα δυο πιθανά σενάρια για το πείραμα του Rutherford. (α) Για το ατομικό μοντέλο του J.J. Thomson, η σκέδαση των σωματιδίων άλφα περιορίζεται σε λίγες μοίρες. (β) Το ατομικό μοντέλο του Rutherford μετά τα πειραματικά δεδομένα όπου έδειξαν ότι όλη η μάζα του μορίου είναι μαζεμένη στο κέντρο του.

Εν τω μεταξύ, το 1906, ο Einstein χρησιμοποίησε την ιδέα του Planck, περί κβάντα φωτός, για να εξηγήσει το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, στο οποίο φως που έπεφτε πάνω σε μια επιφάνεια προκάλούσε εκπομπή ηλεκτρονίων. Ο Einstein θεώρησε ότι εάν το φως

εκπέμπεται σε ξεχωριστά κβάντα τότε θα απορροφάται και ως ξεχωριστά κβάντα ή φωτόνια, το καθένα με ενέργεια $E = h \cdot \nu$. Οι συγκρούσεις μεταξύ αυτών των κβάντων και των ηλεκτρονίων, του υλικού του στόχου της καθόδου, δίνουν στα ηλεκτρόνια αρκετή ενέργεια για να ξεφύγουν από αυτό.

Το 1912 τα πειράματα σκέδασης σωματιδίων άλφα από τον Rutherford (Σχήμα 1.4), οδήγησαν στην πρότασή του ότι το άτομο αποτελείται από ένα μικρό θετικά φορτισμένο πυρήνα, που περιβάλλεται από επαρκή αριθμό αρνητικών ηλεκτρονίων, έτσι ώστε το άτομο να είναι ηλεκτρικά ουδέτερο. Αυτό το υπόδειγμα ατόμου χρησιμοποιήθηκε από τους Bohr και Rutherford στην «παλιά κβαντική θεωρία» τους, ένα μίγμα κλασικής μηχανικής και κβαντικών αιτημάτων, στην προσπάθειά τους να ερμηνεύσουν, μεταξύ άλλων, την κανονικότητα των φασματοσκοπικών σειρών στα φάσματα των ακτινοβολούντων ατόμων. Σύμφωνα με τη θεωρία αυτή, τα ηλεκτρόνια κινούνται γύρω από τον πυρήνα, σε ορισμένες ενεργειακές στάθμες (Σχήμα 1.3 β) και, όταν ένα ηλεκτρόνιο μετακινηθεί από μια τροχιά με μεγαλύτερη ενέργεια σε μια άλλη με μικρότερη, με διαφορά ενέργειας $\Delta E = h \cdot \nu$, εκπέμπονται ακτινοβολία με ορισμένη συχνότητα ν . Έγινε δεκτό ότι οι τροχιές αυτές είναι σταθερές ή στάσιμες με κβαντισμένες επιτρεπόμενες δηλαδή τιμές ενέργειας και στροφορμής. Το γεγονός ότι η κλασική ηλεκτρομαγνητική θεωρία είχε δείξει ότι ένα επιταχυνόμενο φορτίο (ηλεκτρόνιο σε τροχιά) αποτελούσε μια πηγή ακτινοβολίας, παρόμενη μια αδιευκρίνιστη δυσκολία.



Σχήμα 1.4: Σκέδαση Rutherford

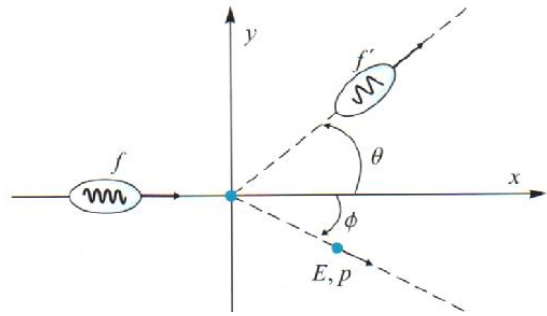
Η προηγούμενη ανάλυση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου κατοχυρώνει αναμφίβολα την κβάντωση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας ως ένα εγγενές χαρακτηριστικό της και όχι απλώς ως μια ιδιαιτερότητα του μηχανισμού αλληλεπίδρασης της ύλης, όπως υποστήριζε ο Planck. Εντούτοις δεν μπορούμε να πούμε με σιγουριά ότι τα κβάντα του φωτός είναι όντως σωματίδια με όλη τη σημασία του όρου. Διότι για να ισχύει αυτό, τα φωτόνια θα έπρεπε να είναι όχι μόνο φορείς ενέργειας αλλά και ορμής, όπως και τα κοινά σωματίδια. Η θεωρία της σχετικότητας του Einstein, που διατυπώθηκε το 1919, ξεκαθάρισε το τοπίο.

Η θεωρία αυτή περιλαμβάνει δυο αποτελέσματα: i) ότι ένα κβάντο ακτινοβολίας (φωτόνιο) έχει ενέργεια $E = h \cdot \nu$ και ii) ότι ένα σωματίδιο με ορμή $p = m \cdot u$ και μάζας

ηρεμίας m_0 έχει σχετιμιστική ενέργεια $E = \sqrt{c^2 \cdot p^2 + m_0^2 \cdot c^4}$. Όπου τα μεγέθη: p είναι η ορμή του φωτονίου, m η σχετιμιστική μάζα του για ταχύτητες συγκρίσιμες με την ταχύτητα του φωτός, m_0 η μάζα ηρεμίας για μικρές ταχύτητες, u η ταχύτητα του φωτονίου στο μέσο και c η ταχύτητα του φωτός στο κενό με τιμή $c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$. Η σχέση της σχετιμιστικής ενέργειας θεμελίωσε την ισοδυναμία ύλης και ενέργειας, όπου ένα ακίνητο σωματίδιο ($u = 0$) έχει ενέργεια $E = m_0 \cdot c^2$.

Δυο ήταν τα επόμενα βήματα που οδήγησαν στη σύγχρονη κβαντική θεωρία. Το πρώτο από αυτά έγινε από το Compton (1922-23) και το δεύτερο από τον de Broglie το 1924.

Ο Compton βομβάρδισε ένα λεπτό φύλλο μετάλλου με ακτίνες X γνωστής συχνότητας και παρατήρησε ότι η συχνότητα ν της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας είναι ανεξάρτητη από το υλικό του φύλλου. Αυτό σήμαινε ότι η σκέδαση ήταν αποτέλεσμα συγκρούσεων μεταξύ κβάντων ακτίνων X με ενέργεια $E = h \cdot \nu$ και των ηλεκτρονίων του υλικού του στόχου. Βρήκε επιπλέον ότι, εκτός από τη σκεδαζόμενη ακτινοβολία που έχει την προσπίπτουσα συχνότητα, υπάρχει πάντοτε και μια σκεδαζόμενη συνιστώσα χαμηλότερης συχνότητας, που εξαρτάται μόνον από τη μάζα των σωματιδίων που προκαλούν τη σκέδαση (ηλεκτρόνια) και τη γωνία σκέδασης. Ο Compton έδειξε ότι τα αποτελέσματα αυτά ήταν συμβιβαστά με την απαίτηση της διατήρησης της ορμής και της ενέργειας σε μια ελαστική σκέδαση μεταξύ δύο «σωματιδίων», του ηλεκτρονίου και μιας ακτίνας X με ενέργεια $h \cdot \nu$, μάζα ηρεμίας $m_0 = 0$ και ορμή (που προκύπτει από την εξίσωση του Einstein για τη σχετιμιστική ενέργεια) ίση με



Σχήμα 1.5: Η σκέδαση Compton ως σύγκρουση ενός φωτονίου με ένα ηλεκτρόνιο.

$$\left. \begin{aligned} p &= \frac{E}{c} = \frac{h \cdot \nu}{c} \\ c &= \nu \cdot \lambda \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow p = \frac{h}{\lambda} \quad (1.1)$$

Ο de Broglie πρότεινε το 1924 ότι, αφού η δυική κυματοσωματιδιακή φύση των ηλεκτρομαγνητικών πεδίων απαιτούσε μια σωματιδιακή ορμή $p = h/\lambda$, θα ήταν δυνατό σε κάθε σωματίδιο ορμής $p = m \cdot u$ να αντιστοιχήσει κανείς ένα μήκος κύματος λ ενός «κωλικού» πεδίου και να πάρει τη σχέση $p = h/\lambda$. Το επιχείρημα του ήταν ως εξής:

Αν η φασική ταχύτητα ενός τέτοιου υλικού κύματος υπακούει στη συνηθισμένη σχέση

$$u_p = \nu \cdot \lambda \quad (1.2)$$

όπου ν είναι η συχνότητα, η παραδοχή ότι κάθε σωματίδιο έχει ορμή $p = h/\lambda$ μαζί με την έκφραση του Einstein $E = h \cdot \nu$, δίνει τιμή στη φασική ταχύτητα $u_p = E/p$.

Για ένα σωματίδιο με μάζα ηρεμίας m_0 και ταχύτητα u , η θεωρία της σχετικότητας δίνει ότι το σωματίδιο αυτό έχει ενέργεια $E = m \cdot c^2$ και ορμή $p = m \cdot u$, όπου

$$m = m_0 \left(1 - \frac{u^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.3)$$

είναι η μάζα του σωματιδίου με ταχύτητα u . Για ένα τέτοιο σωματίδιο, η φασική ταχύτητα είναι

$$u_p = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{u} \quad (1.4)$$

δηλαδή,

$$uu_p = c^2 \quad (1.5)$$

Η ταχύτητα u είναι πάντα μικρότερο από την ταχύτητα του φωτός c τότε η φασική ταχύτητα θα είναι πάντα $u_p > c$! Για να γίνει κατανοητό αυτό το αναπάντεχο αποτέλεσμα είναι απαραίτητο να ξεκαθαριστούν οι έννοιες για τη φασικής και την ομαδική ταχύτητας. Η ενέργεια του κύματος (ή σωματιδίου) Broglie οδεύει με την ομαδική ταχύτητα

$$u_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad (1.6)$$

η οποία, για ενέργεια

$$E = h \cdot \nu = \frac{h}{2\pi} \omega \quad (1.7)$$

και ορμή

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k \quad (1.8)$$

δίνει

$$u_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial E}{\partial p} \quad (1.9)$$

Ένα τέτοιο σωματίδιο με σχετικιστική ενέργεια E , όπου

$$E^2 = p^2 c^2 + (m_0 c^2)^2 \quad (1.10)$$

Έχει ταχύτητα ομάδας

$$2E \frac{\partial E}{\partial p} = 2pc^2 \quad (1.11)$$

ή

$$u_g = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{pc^2}{E} = \frac{uc^2}{c^2} = u \quad (1.12)$$

δηλαδή, η ομαδική ταχύτητα ενός κύματος de Broglie αντιστοιχεί στη σωματιδιακή ταχύτητα u .

Ακόμα και η «παλιά κβαντική θεωρία» των Bohr-Sommerfeld κέρδισε κάτι από την υπόθεση του de Broglie. Το αξιωμα τους, ότι η στροφορμή στάσιμων τροχών περιορίζεται σε ακέραιους (κβαντικούς) αριθμούς μονάδων στροφορμής $h/2\pi$, οδήγησε, για την κυκλική τροχιά, στο συμπέρασμα ότι

$$2\pi r p = nh \quad (1.13)$$

ή

$$2\pi r = \frac{nh}{p} = n\lambda \quad (1.14)$$

δηλαδή η περιφέρεια μιας στάσιμης τροχιάς αποτελεί ένα σύστημα στάσιμων κυμάτων και περιέχει ένα ακέραιο πλήθος n μηκών κύματος de Broglie λ .

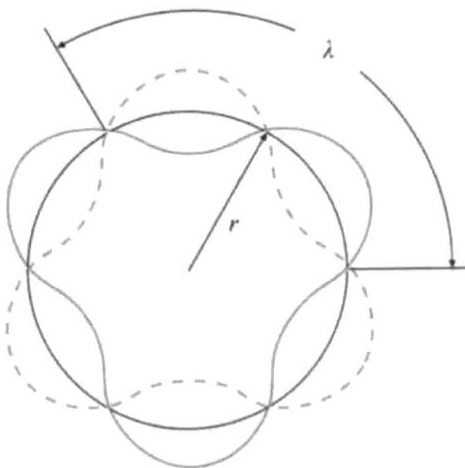
Μέσα σε τρία χρόνια όμως οι κβαντικοί αυτοί αριθμοί έπαυσαν να αποτελούν υποθέσεις. Ήταν το φυσικό αποτέλεσμα της νέας κβαντικής θεωρίας των Schrödinger και Heisenberg.

1.3 Η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg

Η εξίσωση του Schrödinger παίρνει τη μορφή μιας εξίσωσης στάσιμων κυμάτων, όμως η προσαρμογή ενός ακέραιου αριθμού στάσιμων κυμάτων de Broglie γύρω από μια τροχιά Bohr εμφανίζει μια θεμελιώδη δυσκολία. Η αζιμουθιακή συμμετρία μιας τέτοιας εικόνας (Σχήμα 1.6), που παριστάνει ένα ηλεκτρόνιο σε τροχιά, δεν επιτρέπει τον προσδιορισμό της ακριβούς θέσης του ηλεκτρονίου κάποια ιδιαίτερη χρονική στιγμή. Αυτό το δίλημμα λύθηκε από τον Heisenberg με βάση το θεώρημα εύρους ζώνης.

Σύμφωνα με αυτό, μια ομάδα κυμάτων με ομαδική ταχύτητα u_g και σε μια περιοχή συχνοτήτων $\Delta\nu$ επιπροστίθεται δίνοντας σημαντικό πλάτος μόνο για ένα χρονικό διάστημα Δt , όπου

$$\Delta\nu \cdot \Delta t \approx 1 \quad (1.15)$$



Ομοίως, μια ομάδα στην περιοχή κυματαριθμών Δk επιπροστίθεται στο χώρο σε μια απόσταση Δx , όπου

$$\Delta x \cdot \Delta k \approx 2\pi \quad (1.16)$$

Αλλά η ταχύτητα του υλικού κύματος de Broglie ουσιαστικά είναι μια ομαδική ταχύτητα και αντιστοιχεί σε ορμή

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k \quad (1.17)$$

όπου

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (1.18)$$

$$\Delta p = \hbar \Delta k \quad (1.19)$$

Σχήμα 1.6: Ο ακέραιος αριθμός στάσιμων κυμάτων de Broglie $\lambda = h/p$ γύρω από μια κυκλική τροχιά Bohr.

και το θεώρημα εύρους ζώνης γίνεται η αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \approx h \quad (1.20)$$

Επειδή

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \omega = \hbar\omega \quad (1.21)$$

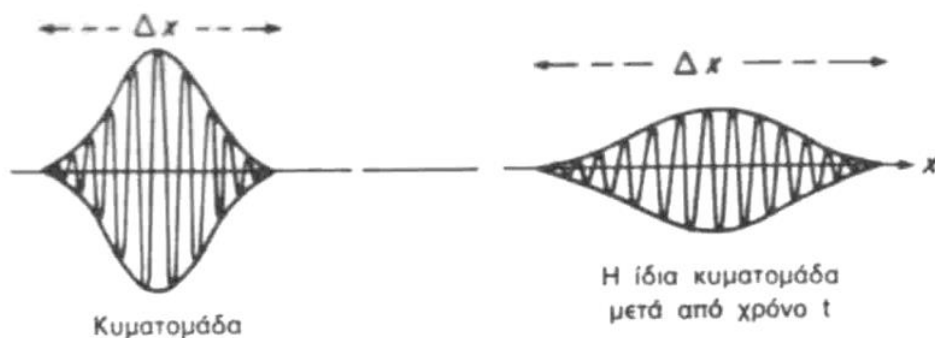
προκύπτει ότι

$$\frac{\Delta E}{\Delta\nu} = \Delta E \cdot \Delta t \approx h \quad (1.22)$$

και

$$\Delta E \approx \hbar\Delta\omega \quad (1.23)$$

είναι επίσης εκφράσεις της αρχής της αβεβαιότητας του Heisenberg. Έτσι προέκυψε η αρχή αβεβαιότητας δηλ.: Είναι αδύνατο να ξέρουμε συγχρόνως και την ακριβή θέση και την ακριβή ορμή ενός σωματίου.



Σχήμα 1.7: Μια κυματομάδα που παριστάνει ένα σωματίδιο παρουσιάζει διασπορά μετά από χρόνο t .

Η σχέση αυτή θέτει ένα θεμελιώδες όριο στη μέγιστη ακρίβεια με την οποία μπορούμε να γνωρίζουμε τη θέση x του σωματιδίου και τη συνιστώσα p_x της ορμής του. Αν το Σχήμα 1.7 δείχνει μια κυματομάδα που παριστάνει το σωματίδιο, η περιοχή Δx δείχνει την αβεβαιότητα στη θέση του σωματιδίου, την περιοχή του χώρου στην οποία μπορεί να βρεθεί, με πιθανότητα να βρисуεται σε κάποια ιδιαίτερη θέση που δίνεται από το τετράγωνο του πλάτους του κύματος στη θέση αυτή. Η σχέση

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx h \quad (1.24)$$

σημαίνει ότι η ταχύτητα του σωματιδίου ($p = mu$) είναι επίσης αβέβαιη, τόσο λιγότερο βέβαιη όσο περισσότερο ακριβής είναι η γνώση της θέσης, του σωματιδίου. Αν «παρτηρήσουμε» το σωματίδιο κάποια στιγμή αργότερα, η διασπορά που υφίσταται η ομάδα θα έχει αυξήσει την περιοχή Δx και ελαττώσει το πλάτος. Η αβεβαιότητα στη θέση έχει αυξηθεί και η πιθανότητα να βρεθεί σε οποιαδήποτε θέση έχει ελαττωθεί.

Αυτό όμως συμβαίνει εξαιτίας της αρχικής αβεβαιότητας της ταχύτητας, μέσω του Δp , που κάνει ακόμα πιο απίθανη μια ακριβή πρόβλεψη της θέσης του μετά από χρόνο t . Μπορούμε να βρούμε ένα παράδειγμα της σχέσης

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx h \quad (1.25)$$

αν θεωρήσουμε το χρόνο επί τον οποίο ένα ηλεκτρόνιο παραμένει σε μια ατομική τροχιά. Σε μια σταθερή τροχιά, ο χρόνος Δt είναι μεγάλος και η αβεβαιότητα στην ενέργεια ΔE μικρή, επομένως οι ενεργειακές στάθμες των σταθερών τροχιών είναι καλά καθορισμένες. Όταν ένα ηλεκτρόνιο αλλάζει ενεργειακή στάθμη και εκπέμπεται ακτινοβολία, ο χρόνος

παραμονής στην τροχιά μπορεί να είναι σύντομος και οι ενεργειακές στάθμες να μην είναι καλά καθορισμένες, οπότε ο όρος ΔE συνεισφέρει στο εύρος της φασματικής γραμμής.

1.4 Η κυματική εξίσωση του Schrödinger

Η κβαντομηχανική καταλήγει σε σχέσεις μεταξύ παρατηρούμενων ποσοτήτων, οι οποίες όμως περιορίζονται από την αρχή της αβεβαιότητας. Μέσα στη θεωρία αυτή, αιτία και αποτέλεσμα συσχετίζονται αλλά η ερμηνεία τους χρειάζεται προσοχή. Στην κβαντομηχανική, το είδος της βεβαιότητας για τα μελλοντικά χαρακτηριστικά που υπάρχει στην κλασική μηχανική είναι αδύνατο, διότι η αρχική κατάσταση ενός σωματίου δεν μπορεί να προσδιοριστεί με ακριβή ακρίβεια.

Η παλιά κβαντική θεωρία προσπάθησε να καθιερώσει κανόνες για την ύπαρξη διακριτών συχνοτήτων και ενεργειακών σταθμών. Γύρω από την κυκλική τροχιά κατά Bohr μπορούσε να χωρέσει ένας ακέραιος αριθμός μισών μηκών κύματος de Broglie. Και τα δύο αυτά γεγονότα είναι συμβιβαστά με τα συστήματα κλασικών στάσιμων κυμάτων, όταν οδεύοντα κύματα που οδεύουν μεταξύ ακλόνητων συνόρων ανακλώνται τελείως (Σχήμα 1.8).

Η εγιάρσια μετατόπιση

$y(x, t)$ μιας χορδής μήκους l με σταθερά και τα δύο άκρα υπακούει στην κυματική εξίσωση:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{1}{v_p^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0 \quad (1.26)$$

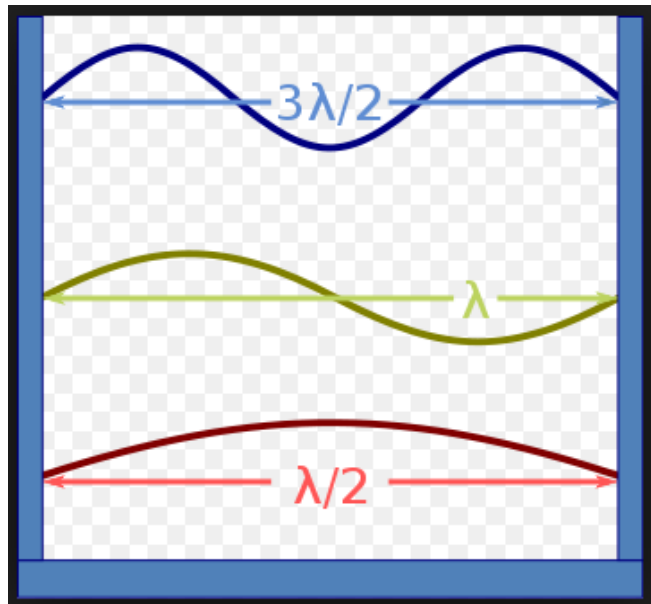
όπου v_p είναι η κυματική ταχύτητα.

Για τα στάσιμα κύματα μπορούμε να ξεχωρίσουμε την εξάρτηση από το x και t και πήραμε

$$y(x, t) = A \cdot \sin\left(\frac{\omega_n x}{v_p}\right) \cdot \sin(\omega_n t) \quad (1.27)$$

Όπου το n μπορεί να πάρει τις ακέραιες τιμές $n = 1, 2, 3, \dots$ κλπ. και να δώσει τις διακριτές ιδιοσυχνότητες

$$\omega_n = \frac{n\pi v_p}{l} \quad (1.28)$$



Σχήμα 1.8: Στάσιμα κύματα σε μια τεντωμένη χορδή στερεωμένη στα δυο άκρα.

Η λύση $y(x,t)$ που αντιστοιχεί σε ορισμένη ω_n ονομάζεται ιδιοσυνάρτηση ή κυματοσυνάρτηση.

Για την εξαγωγή της κυματικής εξίσωσης Schrödinger που περιγράφει τη συμπεριφορά ενός σωματιδίου, χρησιμοποιούμε πιο κάτω επιχειρήματα που με κανένα τρόπο δε συνιστούν απόδειξη, γιατί η κυματομηχανική βασίζεται πάνω σε ορισμένα αιτήματα, η ισχύς των οποίων μπορεί να επιβεβαιωθεί μόνον από την ακρίβεια των προβλεπόμενων αποτελεσμάτων.

Σύμφωνα με την αρχή του κυματοσωματιδιακού δυισμού, τα πάντα στη φύση έχουν διπλή υφή. Είναι σωματίδια και κύματα ταυτόχρονα. Ότι η παλιά θεωρία αποκλειστικά ως κύματα έχουν ταυτόχρονα και σωματιδιακή υπόσταση, ενώ ότι θεωρούσε αποκλειστικά ως σωματίδιο συμπεριφέρεται ταυτόχρονα και ως κύμα. Οι σχέσεις που συνδέουν αυτές τις δύο όψεις των πραγμάτων είναι η ενέργεια $E = \hbar\omega$, ορμή $p = \hbar k$ και η ταχύτητα $v_g = \partial\omega/\partial k$.

Η κυματομηχανική χρησιμοποιεί το συμβολισμό

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx)} = \Psi_0 e^{i(px - Et)/\hbar} \quad (1.29)$$

για να ορίσει το πλάτος ενός υλικού κύματος σε ένα σημείο x το χρόνο t .

Η κυματοσυνάρτηση δεν αντιπροσωπεύει ένα παρατηρήσιμο κλασικό κύμα αλλά ένα «κύμα πιθανότητας». Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης μας δίνει την πυκνότητα πιθανότητα – δηλαδή την πιθανότητα ανά μονάδα μήκους (ή όγκο) – να βρούμε το σωματίδιο σε μια περιοχή του χώρου. Το αντίθετο πρόσημο του εκθέτη, που ακολουθεί τη σύμβαση που χρησιμοποιείται σε όλα τα βιβλία της Κβαντικής Μηχανικής, εισάγει απλώς μια διαφορά φάσης π .

Στην κλασική μηχανική η ολική ενέργεια ενός σωματιδίου με μάζα m και ορμή p μέσα σε ένα διατηρητικό πεδίο με δυναμικό V δίνεται από την σχέση:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (1.30)$$

Παραγωγίζοντας την $\Psi(x,t)$ παίρνουμε

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(x,t) \quad (1.31)$$

και εισάγοντας την τιμή του p^2 από την σχέση (1.30) παίρνουμε

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + (E - V) \Psi(x,t) = 0 \quad (1.33)$$

Αυτή η χρονικά ανεξάρτητη κυματική εξίσωση θα δώσει καταστάσεις σταθερής συχνότητας, σταθερής δηλαδή ενέργειας.

Παρατηρούμε ότι η εξίσωση αυτή έχει την ίδια μορφή με την εξίσωση στάσιμων κυμάτων.

Για τις καταστάσεις που δεν έχουν σταθερή ενέργεια πρέπει να διατηρήσουμε τη χρονική εξάρτηση στην εξίσωση Schrödinger. Αυτό το επιτυγχάνουμε χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{iE}{\hbar} \Psi(x,t) \quad (1.34)$$

και εισάγοντας την τιμή αυτή του E στην κλασική κυματική εξίσωση. Παίρνουμε έτσι τη χρονικά εξαρτημένη κυματική εξίσωση του Schrödinger,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + V \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t). \quad (1.35)$$

1.5 Μονοδιάστατο πηγάδι δυναμικού με άπειρο ύψος

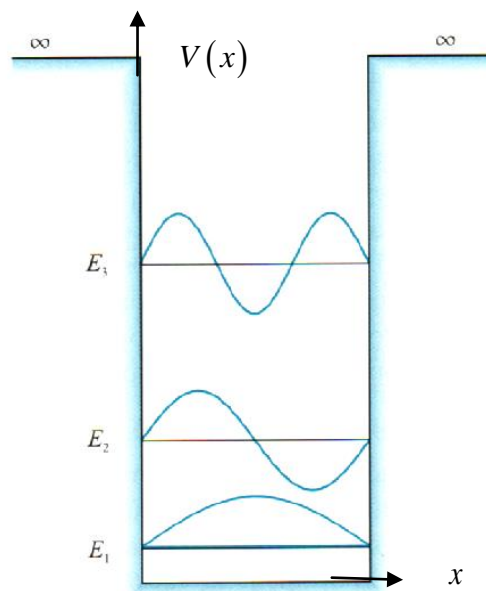
Σε αυτή την παράγραφο θα ασχοληθούμε με ένα σωματίδιο που έχει ως συνάρτηση δυναμικού την συνάρτηση του Σχήματος 1.9. Το πλεονέκτημα για δυναμικά αυτού του τύπου είναι ότι η εξίσωση του Schrödinger είναι μια γραμμική διαφορική εξίσωση με σταθερούς συντελεστές που μπορεί να επιλυθεί ακριβώς.

Θεωρούμε ένα σωματίδιο που είναι περιορισμένο να κινείται σε μια περιοχή μεταξύ του $x=0$ και $x=a$ στην οποία το δυναμικό είναι $V=0$. Στα $x=0$ και $x=a$ τα τοιχώματα του δυναμικού έχουν άπειρο ύψος, όπως στο σχήμα. Αυτό αποτελεί μια εξιδανικευμένη μορφή του δυναμικού που βλέπει ένα ηλεκτρόνιο στις χαμηλές ενεργειακές στάθμες κοντά στον πυρήνα ενός ατόμου.

Αφού $V(x)=0$ για $0 < x < a$, η εξίσωση του Schrödinger γίνεται

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (1.36)$$

που μπορεί να γραφεί με τη μορφή



Σχήμα 1.9: Οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του απειρόβαθου πηγαδιού.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \quad (1.37)$$

με

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (1.38)$$

Οι συνοριακές συνθήκες είναι ότι $\psi(x)=0$ στο $x=0$ και $x=a$ όπου το $V(x)$ γίνεται άπειρο, ενώ οι άλλοι όροι της εξίσωσης παραμένουν πεπερασμένοι. Το σωματίδιο πρέπει να βρισκείται μέσα στο πηγάδι και, σύμφωνα με την κλασική περιγραφή, οποιαδήποτε κι αν είναι η ενέργειά του E , θα ανακλαστεί ελαστικά από τα «τοιχώματα» του δυναμικού. Όταν κινείται προς τα δεξιά, η συμπεριφορά του σωματιδίου μπορεί να περιγραφεί από μια κυματοσυνάρτηση της μορφής e^{+ikx} , όπου ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger και, όταν κινείται προς τα αριστερά, από μια κυματοσυνάρτηση της μορφής e^{-ikx} .

Αλλά, όπως και με τα κύματα στη χορδή, μια τέλεια ανάκλαση που αναστρέφει την απομάκρυνση οδηγεί στη λύση $\psi_n(x)$ της εξίσωσης Schrödinger που παριστάνει ένα σύστημα στάσιμων κυμάτων με γωνιακή συχνότητα ω_n . Η λύση αυτή εκφράζεται με τη μορφή

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= Ce^{ik_n x} - Ce^{-ik_n x} \\ &= A \sin k_n x \end{aligned} \quad (1.39)$$

Όπου

$$A = \frac{C}{2i} \quad (1.40)$$

Η συνοριακή συνθήκη $\psi_n(x) = 0$ στο $x = a$ δίνει $k_n a = n\pi$ για $n = 1, 2, 3, \dots$ κλπ.

δηλαδή $k_n = \frac{n\pi}{a}$.

Επομένως

$$k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \quad (1.41)$$

που δίνει ιδιοτιμές ενέργειας

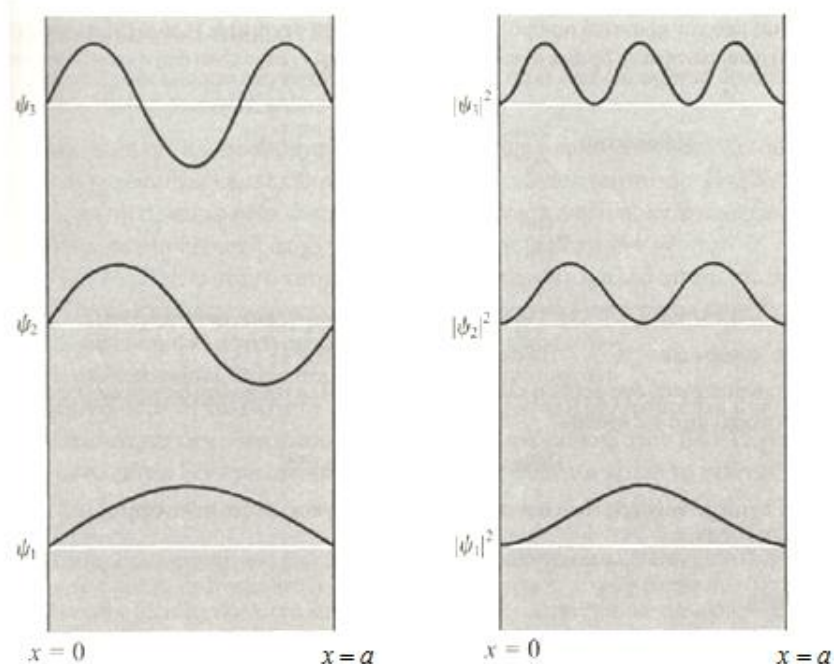
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2 2m} \quad (1.42)$$

Βλέπουμε λοιπόν ότι, με την εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών στις κυματοσυναρτήσεις που είναι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger, προκύπτουν με τρόπο φυσικό διάκριτες ενεργειακές τιμές που εξαρτώνται από τον κβαντικό αριθμό n . Οι τιμές της ορμής του σωματιδίου είναι επίσης κβαντισμένες, αφού

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k = \frac{n\pi\hbar}{a} \quad (1.43)$$

Είναι προφανές, σε ένα άπειρο πηγάδι δυναμικού, ένα ηλεκτρόνιο ή σωματίδιο δεν μπορεί να έχει μια αυθαίρετη τιμή ενέργειας, αλλά θα πρέπει να πάρει μόνον τις κβαντισμένες τιμές E_n . Ο περιορισμός αυτός θα ισχύει οποτεδήποτε λύνουμε την εξίσωση Schrödinger για ένα δυναμικό $V(x)$ το οποίο επιβάλλει συνοριακές συνθήκες που αναγκάζουν το σωματίδιο να κινείται σε μια περιορισμένη περιοχή.

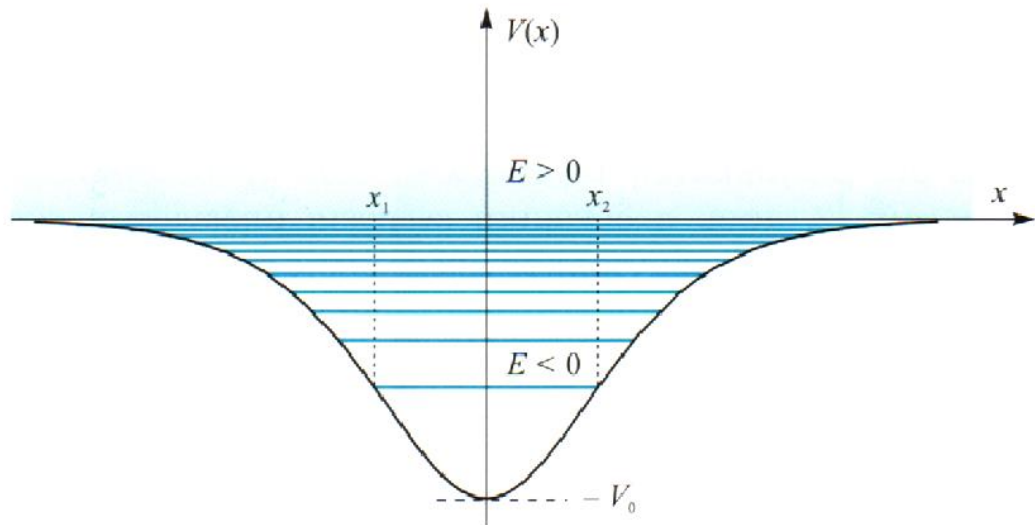
Οι κυματοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$ για $n = 1, 2, 3, \dots$ έχουν σχεδιαστεί στο Σχήμα 1.10 που δείχνει ότι αυτές είναι απαράλλακτες με τις συναρτήσεις πλάτους για τα στάσιμα κύματα πάνω σε μια παλλόμενη χορδή με σταθερά άκρα.



Σχήμα 1.10: Κυματοσυναρτήσεις και πυκνότητες πιθανότητας σωματίου περιορισμένου σε κιβώτιο με συμπαγή τοιχώματα.

Παρατηρήστε ότι το διάστημα μεταξύ επιτρεπομένων ενεργειακών καταστάσεων ελαττώνεται καθώς αυξάνει είτε η μάζα του σωματιδίου, είτε οι διαστάσεις του κουτιού δυναμικού. Για σωματίδια με μεγάλη μάζα και συστήματα μεγάλων διαστάσεων οι επιτρεπόμενες ενεργειακές καταστάσεις σχηματίζουν, για όλους τους πρακτικούς σκοπούς, ένα συνεχές και δεν είναι πλέον κβαντισμένες. Έτσι, περνώντας από ατομικές σε πολύ μεγαλύτερες διαστάσεις, τα αποτελέσματα της κβαντικής μηχανικής προσεγγίζουν αυτά της κλασικής φυσικής. (Σχήμα 1.11)

Βλέπουμε ότι η ελάχιστη τιμή της ενέργειας του σωματιδίου μέσα στο πηγάδι δυναμικού δεν είναι μηδέν αλλά



Σχήμα 1.11: Το ενεργειακό φάσμα σε ένα μονοδιάστατο πηγάδι δυναμικού.

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (1.44)$$

Αυτή η ελάχιστη ενέργεια σχετίζεται με την αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx h \quad (1.45)$$

Η αβεβαιότητα στη θέση του σωματιδίου είναι προφανώς $\Delta x = a$ και η ορμή p του σωματιδίου μπορεί να έχει θετική ή αρνητική διεύθυνση που δίνει αβεβαιότητα

$$\Delta p = 2p \quad (1.47)$$

Έτσι

$$\Delta x \cdot \Delta p = a \cdot 2p \approx h \quad (1.47)$$

Ή

$$p \approx \frac{h}{2a} \quad (1.48)$$

Τώρα, για $V(x) = 0$

$$E = \frac{p^2}{2m} \approx \frac{h^2}{8ma^2} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (1.49)$$

Η ενέργεια αυτή ονομάζεται ενέργειας του απολύτου μηδενός.

1.6 Σημασία του πλάτους $\psi_n(x)$ της κυματοσυνάρτησης

Στο Σχήμα 1.10 σχεδιάσαμε το πλάτος $\psi_n(x)$ της κυματοσυνάρτησης για τις τιμές $n=1,2,3$ μαζί με τις τιμές

$$|\psi_n(x)|^2$$

Στα κύματα που συναντήσαμε μέχρι τώρα, το πλάτος, ή μάλλον το τετράγωνο του πλάτους, ήταν ένα μέτρο της έντασης του κύματος. Σε θέσεις μεγάλου πλάτους το κύμα είχε μεγαλύτερη ένταση – περισσότερη ενέργεια ήταν εντοπισμένη εκεί. Εδώ εκφράσαμε την κίνηση ενός σωματιδίου περιορισμένου σε μια μικρή περιοχή του χώρου με τη βοήθεια του υλικού κύματος που αντιστοιχεί σε αυτό. Το πλάτος της κυματοσυνάρτησης $\psi(x)$ μεταβάλλεται από σημείο σε μέσα στη μικρή περιοχή στην οποία μπορεί να βρεθεί το σωματίδιο. Η $\psi(x)$ είναι μηδέν έξω από το άπειρο πηγάδι. Η ένταση του υλικού κύματος γράφεται

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x) \cdot \psi(x) \quad (1.50)$$

όπου η μιγαδική συζυγής $\psi^*(x)$ σημαίνει ότι $\psi(x)$ μπορεί μερικές φορές να είναι μιγαδική. Αφού το υλικό πεδίο περιγράφει την κίνηση του σωματιδίου, μπορούμε να πούμε ότι οι περιοχές του χώρου όπου τα σωματίδια είναι πιο πιθανό να βρεθούν είναι εκείνες στις οποίες η ένταση $|\psi(x)|^2$ είναι μεγάλη ή, πιο αυστηρά, «η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ στο διάστημα dx γύρω από το x είναι $|\psi(x)|^2 dx$ ».

Η πιθανότητα ανά μονάδα μήκους να βρούμε το σωματίδιο στο x είναι

$$P(x) = |\psi(x)|^2 \quad (1.51)$$

Σε τρεις διαστάσεις μια κυματοσυνάρτηση θα είχε τη μορφή $\psi(x, y, z)$ και η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο στο στοιχείο όγκου γύρω από το σημείο (x, y, z) είναι

$$P(x, y, z) = |\psi(x, y, z)|^2 \quad (1.52)$$

Η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο μέσα σε ένα πεπερασμένο όγκο V είναι προφανώς

$$P_V = \int_V |\psi(x, y, z)|^2 dx \cdot dy \cdot dz \quad (1.53)$$

Το σωματίδιο όμως πρέπει πάντοτε να βρίσκεται κάπου στο χώρο και έτσι, αν επεκτείνουμε το ολοκλήρωμα σε όλο το χώρο, η πιθανότητα γίνεται βεβαιότητα, ισούται δηλαδή με τη μονάδα, ή

$$\int_{allspace} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1 \quad (1.54)$$

Αυτή η διαδικασία ολοκλήρωσης πάνω σε όλο το χώρο ονομάζεται κανονικοποίηση και επιβάλλει πάντοτε περιορισμούς στη μορφή της $\psi(x, y, z)$, που πρέπει να τείνει στο μηδέν καθώς το x , το y ή το z τείνουν στο άπειρο.

Η κανονικοποίηση καθορίζει την τιμή της σταθεράς A στην κυματοσυνάρτησή μας

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (1.55)$$

για την περίπτωση του άπειρου πηγαδιού δυναμικού.

Εκεί

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx &= \int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx \\ &= A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = A^2 \frac{a}{2} = 1\end{aligned}\quad (1.56)$$

Επομένως

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (1.57)$$

και η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση είναι

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (1.58)$$

1.7 Αριθμός των ενεργειακών καταστάσεων στο διάστημα $(E, E + dE)$

Τα παραπάνω αποτελέσματα ισχύουν όσο οι διαστάσεις του κυβικού κουτιού είναι μικρές, δηλαδή οι ενεργειακές στάθμες παραμένουν διακριτές. Όταν όμως ο όγκος αυξάνει, όπως στην περίπτωση των ελεύθερων ηλεκτρονίων σε ένα μέταλλο, οι διαδοχικές ενεργειακές στάθμες πλησιάζουν τόσο πολύ που σχηματίζεται ένα σχεδόν συνεχές φάσμα. (Σχήμα 1.11)

Αν θέλουμε να βρούμε πόσες ενεργειακές στάθμες μπορούν να περιέχονται στο μικρό ενεργειακό διάστημα dE όταν το κουτί δυναμικού είναι πολύ μεγάλο, αρκεί μόνο να εφαρμόσουμε τον αριθμό των δυνατών κανονικών τρόπων ταλάντωσης ανά μονάδα όγκου μιας κοιλότητας στο διάστημα συχνοτήτων $(\nu, \nu + d\nu)$ όπου δίνεται από την

$$dn = \frac{4\pi\nu^2 d\nu}{c^3} \quad (1.59)$$

Το αποτέλεσμα δεν εξαρτάται από κανένα ιδιαίτερο σύστημα, εφαρμόζετε στο νόμο ακτινοβολίας του Planck και στη θεωρία του Debye για τις ειδικές θερμοότητες. Εδώ το χρησιμοποιούμε με τις σχέσεις

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{και} \quad p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} \quad (1.60)$$

οπότε

$$dE = \frac{p}{m} dp = h d\nu \quad (1.61)$$

και

$$dp = \frac{h d\nu}{c} \quad (1.62)$$

Για να πάρουμε τον αριθμό καταστάσεων ανά μονάδα όγκου στο ενεργειακό διάστημα dE ,

$$dn(E) = \frac{4\pi(2m^3)^{1/2} E^{1/2}}{h^3} dE \quad (1.63)$$

Το αποτέλεσμα αυτό μπορούμε να το εφαρμόσουμε για να προσδιορίσουμε τον τρόπο με τον οποίο τα ελεύθερα ηλεκτρόνια ενός μετάλλου κατανέμονται σε μια ενεργειακή ζώνη με τιμές από το μηδέν ως E . Σύμφωνα με την αρχή του Pauli κάθε ενεργειακή στάθμη μπορεί να φιλοξενήσει δύο ηλεκτρόνια με αντίθετα σπιν και επομένως ο ολικός αριθμός των ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου στην ενεργειακή περιοχή από μηδέν ως E είναι

$$\begin{aligned}
 n &= \int dn(E) = \frac{2 \cdot 4\pi (2m_e^3)^{1/2}}{h^3} \int_0^E E^{1/2} dE \\
 &= \frac{16\pi (2m_e^3)^{1/2}}{3h^3} E^{3/2}
 \end{aligned}
 \tag{1.64}$$

όπου m_e είναι η μάζα του ηλεκτρονίου.

Αν το μέταλλο βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση του, τα διαθέσιμα ηλεκτρόνια θα καταλάβουν τις χαμηλότερες δυνατές ενεργειακές στάθμες και, αν ο ολικός αριθμός ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου n_0 είναι μικρότερος από τον ολικό αριθμό των ενεργειακών σταθμών στη ζώνη, τότε τα ηλεκτρόνια θα καταλάβουν όλες τις ενεργειακές καταστάσεις μέχρι μια μέγιστη ενέργεια E_F που λέγεται ενέργεια Fermi και δίνεται από την

$$n_0 = \frac{16\pi (2m_e^3)^{1/2} E_F^{3/2}}{3h^3}
 \tag{1.65}$$

Τυπικές τιμές της E_F είναι της τάξης των 5 ηλεκτρονιοβόλτ.

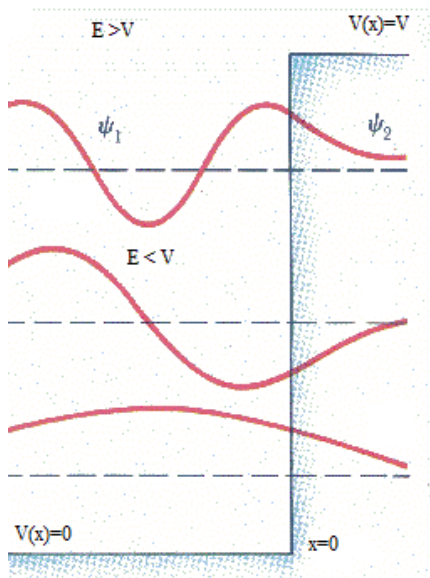
1.8 Το βήμα δυναμικού

Το σύστημα στάσιμων κυμάτων για το πηγάδι δυναμικού άπειρου ύψους, όπου η κυματοσυνάρτηση

$$\psi_n(x)$$

είναι πεπερασμένη στην περιοχή $V(x)=0$ αλλά μηδενική σε όλα τα άλλα σημεία, είναι μοναδικό ως προς την αντιστοιχία που παρουσιάζει μεταξύ των κλασικών και κβαντομηχανικών αποτελεσμάτων. Τα κβαντικά αποτελέσματα γίνονται προφανή όταν θεωρήσουμε τη γενική περίπτωση του βήματος δυναμικού πεπερασμένου ύψους V στο Σχήματος 1.12, που είναι μια εξιδανικευμένη μορφή της πολύ απότομης βαθμίδας δυναμικού μιας συντηρητικής δύναμης

$$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}
 \tag{1.66}$$



Σχήμα 1.12: Η κυματοσυνάρτηση ψ_1 και ψ_2 για ένα σωματίδιο με μάζα m και ενέργεια $E < V$, σε βήμα δυναμικού $V(x) = V$.

Ένα τέτοιο βήμα δυναμικού βλέπει ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο κοντά στην επιφάνεια ενός μετάλλου.

Είναι απαραίτητο να θεωρήσουμε ξεχωριστά τις δύο περιπτώσεις όπου η ολική ενέργεια E του σωματιδίου είναι (α) μικρότερη από τη δυναμική ενέργεια V και (β) μεγαλύτερη από V , όπου

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (1.67)$$

(α) $E < V$

Όταν η E είναι μικρότερη της V , η περιοχή $x > 0$ του Σχ. 1.12 είναι απαγορευμένη για το σωματίδιο από την κλασική φυσική, γιατί τότε η κινητική ενέργεια

$$\frac{p^2}{2m}$$

θα είχε αρνητική τιμή.

Για να βρούμε την πλήρη λύση της $\psi(x)$ για το βήμα δυναμικού πρέπει να λύσουμε την εξίσωση Schrödinger για τις ξεχωριστές περιοχές του Σχ.1.12, $x < 0$ (περιοχή 1) και $x > 0$ (περιοχή 2)

Στην περιοχή 1, $V(x) = 0$ και έχουμε

$$\frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1(x) = 0 \quad (1.68)$$

με λύση

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (1.69)$$

όπου

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (1.70)$$

Ο όρος Ae^{ikx} (με τη σύμβαση προσήμου αυτού του κεφαλαίου) είναι η κυματική περιγραφή προς προσπίπτοντος σωματιδίου που κινείται προς τα δεξιά και ο Be^{-ikx} παριστάνει ένα ανακλώμενο σωματίδιο που κινείται προς τα αριστερά.

Στην περιοχή 2, $V(x) = V$ και η εξίσωση Schrödinger γίνεται

$$\frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \psi_2(x) = 0 \quad (1.71)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2} - a^2 \psi_2(x) = 0 \quad (1.72)$$

όπου

$$a^2 = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2} \quad (1.73)$$

Αυτή η εξίσωση έχει τη λύση

$$\psi_2(x) = Ce^{-ax} + De^{ax} \quad (1.74)$$

Η πιθανότητα, τώρα, να βρούμε το σωματίδιο στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή 2 εξαρτάται από το τετράγωνο του πλάτους της κυματοσυνάρτησης, $|\psi_2(x)|^2$, με τον περιορισμό ότι για κάθε κυματοσυνάρτηση που πρέπει κανονικοποιηθεί (δηλαδή για

$$\int |\psi_2(x)|^2 dx = 1) \quad (1.75)$$

η κυματοσυνάρτηση $\psi_2(x) \rightarrow 0$, καθώς το $x \rightarrow \infty$.

Αυτός ο περιορισμός αποκλείει το δεύτερο όρο De^{ax} που αυξάνει με το x , αλλά αφήνει την

$$\psi_2(x) = Ce^{-ax} \quad (1.76)$$

που δίνει πεπερασμένη πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο πέρα από το βήμα δυναμικού, μια πιθανότητα που ελαττώνεται ειθετικά με την απόσταση. Αυτή είναι μια σοβαρή απόκλιση από την κλασική συμπεριφορά.

Στο σύνορο, $x=0$, η $\psi(x)$ πρέπει να είναι πεπερασμένη, για να δώσει πεπερασμένη πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο εκεί, αλλά υπάρχει μια πεπερασμένη ασυνέχεια στη $V(x)$. Σε αυτές τις περιπτώσεις η εξίσωση του Schrödinger βεβαιώνει ότι η δεύτερη παράγωγος

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}$$

είναι πεπερασμένη στο $x=0$, που σημαίνει ότι η $\psi(x)$ και η $\partial\psi/\partial x$ είναι συνεχείς στο $x=0$.

Αυτές είναι οι συνοριακές συνθήκες που επιτρέπουν την προσαρμογή των δύο ξεχωριστών λύσεων

$$\psi_1(x) \text{ και } \psi_2(x)$$

της κυματοσυνάρτησης καθώς διασχίζουμε το σύνορο που χωρίζει τις δύο περιοχές.

Η συνέχεια της $\psi(x)$ στο $x=0$ δίνει $\psi_1(x) = \psi_2(x)$, ή $A+B=C$, ενώ η

$$\frac{\partial \psi_1(x)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_2(x)}{\partial x} \quad (1.77)$$

στο $x=0$, δίνει

$$ik_1(A-B) = -aC = -a(A+B) \quad (1.78)$$

Έτσι

$$C = \frac{2ik_1}{ik_1 - a} A \quad (1.79)$$

οι κυματοσυναρτήσεις για τις ξεχωριστές περιοχές γίνονται τότε

$$\psi_1(x) = A \left(e^{ik_1x} + \frac{ik_1 + a}{ik_1 - a} e^{-ik_1x} \right) \quad (1.80)$$

και

$$\psi_2(x) = \frac{2ik_1}{ik_1 - a} A e^{-ax} \quad (1.81)$$

και έχουν σχεδιαστεί στο Σχ. 1.12. Προσέξτε ιδιαίτερος ότι η ένταση του προσπίπτοντος μέρους της κυματοσυνάρτησης είναι

$$|\psi_1(x)|^2 = |A|^2 \quad (1.82)$$

ενώ η ανακλώμενη ένταση είναι

$$|B|^2 = \left| \frac{ik_1 + a}{ik_1 - a} A \right|^2 = |A|^2 \quad (1.83)$$

Έτσι, για κάθε ενέργεια $E < V$, έχουμε ολική ανάκλαση όπως στην κλασική περίπτωση, ακόμα και για εκείνα τα σωματίδια που διεισδύουν στην κλασική απαγορευμένη περιοχή ή $x > 0$, όπου η $\psi_2(x)$ δεν είναι μηδενική.

Η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο στην περιοχή 2 είναι

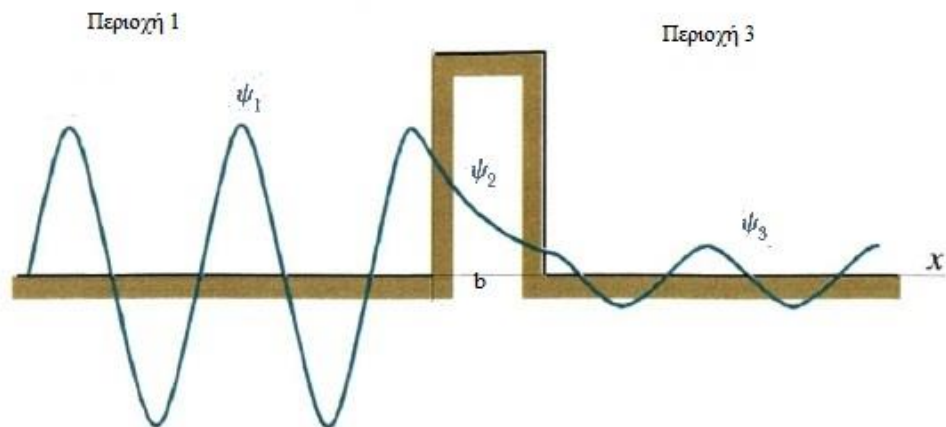
$$\begin{aligned} P(x) &= |\psi_2(x)|^2 = |Ce^{-ax}|^2 \\ &= \left| \frac{2ik_1}{ik_1 - a} Ae^{-ax} \right|^2 = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + a^2} A^2 e^{-2ax} \end{aligned} \quad (1.84)$$

Αφού ο εκθετικός συντελεστής a εξαρτάται από τη $V(x)$, όσο μεγαλύτερη είναι η $V(x)$, τόσο γρηγορότερα η κυματοσυνάρτηση $\psi_2(x)$ τείνει στο μηδέν στην περιοχή 2, για ορισμένη ενέργεια $E < V$.

Όταν $V(x) \rightarrow \infty$, όπως στην περίπτωση του άπειρου πηγαδιού δυναμικού, η $\psi_2(x)$ γίνεται μηδέν, όπως έχουμε δει και δεν υπάρχει διείσδυση στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή.

Διάφορα σημαντικά φαινόμενα μπορούν να ερμηνευτούν με την παραδοχή ότι ένα σωματίδιο με $E < V$, που συναντά ένα βήμα δυναμικού με πεπερασμένο ύψος V και πεπερασμένο πλάτος b , έχει κυματοσυνάρτηση $\psi_2(x)$ που είναι ακόμα πεπερασμένη στο $x = b$, δίνοντας τη δυνατότητα στο σωματίδιο να διαρρέψει μέσα από το φράγμα δυναμικού, Σχ. 1.13. Η πιθανότητα να διεισδύσει το σωματίδιο στο φράγμα μέχρι το $x = b$, δίνεται από την

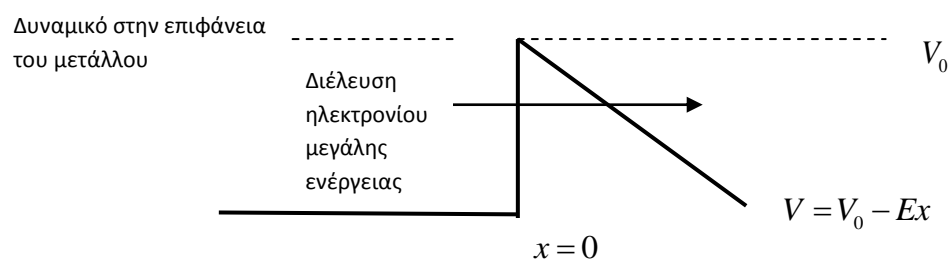
$$P(x) = |\psi_2(x)|^2 \propto e^{-2ax} \quad (1.85)$$



Σχήμα 1.13: Στενό φράγμα δυναμικού εύρους b διαπερνάται από το σωματίδιο που περιγράφεται από την $\psi_1(x)$ και αφήνει ένα πεπερασμένο πλάτος $\psi_3(x)$ σαν μέτρο της ελαττωμένης πιθανότητας να βρούμε το σωματίδιο στην περιοχή 3.

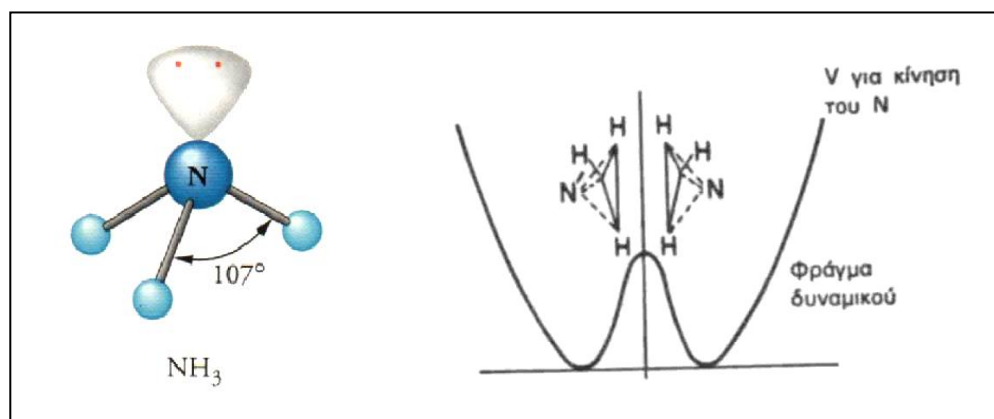
και, πέρα από το φράγμα αυτό, το σωματίδιο θα οδεύσει στην περιοχή 3 με κυματοσυνάρτηση $\psi_3(x)$ που έχει μειωμένο πλάτος. Οι συνοριακές συνθήκες πρέπει τότε να εφαρμοστούν στο $x = b$, για να προσαρμόσουν την $\psi_3(x)$ με την $\psi_2(x)$.

Αυτό το κβαντικό «φαινόμενο σήραγγας» αποτελεί τη βάση για την ερμηνεία της ραδιενεργού διάσπασης του πυρήνα. Ακόμη, το βήμα δυναμικού που βλέπει ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο κοντά στην επιφάνεια ενός μετάλλου μπορεί να παραμορφωθεί, όπως φαίνεται στο Σχ. 1.14, με την εφαρμογή ενός εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, ώστε να σχηματιστεί ένα φράγμα με πεπερασμένο εύρος. Τα ηλεκτρόνια που έχουν τη μεγαλύτερη ενέργεια κοντά στην επιφάνεια του μετάλλου μπορούν να διαρρεύσουν μέσα από το φράγμα σε μια διαδικασία γνωστή σαν ηλεκτρονική εκπομπή πεδίου.

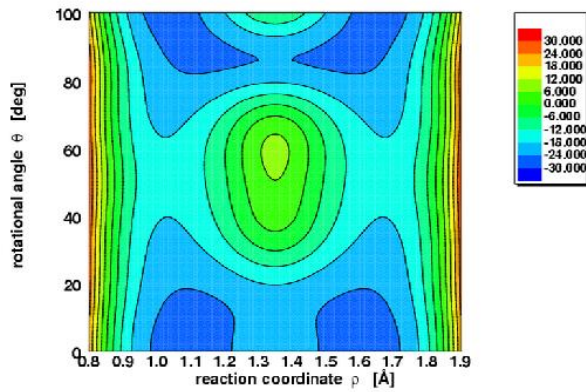


Σχήμα 1.14: Η εφαρμογή ηλεκτρικού πεδίου E στην επιφάνεια ενός μετάλλου με δυναμικό V_0 ελαττώνει το δυναμικό στο $V = V_0 - Ex$, σχηματίζοντας ένα φράγμα με πεπερασμένο εύρος που μπορεί να διαπεραστεί από ένα ηλεκτρόνιο με μεγάλη ενέργεια κοντά στην επιφάνεια του μετάλλου.

Ένα άλλο παράδειγμα προκύπτει από τις δύο δυνατές θέσεις του μοναδικού ατόμου αζώτου σε σχέση με τα τρία άτομα υδρογόνου στο μόριο της αμμωνίας NH_3 . Αυτές οι θέσεις είναι οι N και N' στο Σχ. 1.15 1.16, όπου φαίνεται και το φράγμα δυναμικού που βλέπει το άτομο του αζώτου καθώς πηγαίνει από τις θέσεις N και N' . Για τη θεμελιώδη κατάσταση της NH_3 , η διέλευση πραγματοποιείται με συχνότητα $2.3789 \cdot 10^{10} Hz$ και η μεγάλη ακρίβεια αυτής της συχνότητας χρησιμοποιείται σαν ατομικό ρολόι για τον καθορισμό μιας πρότυπης μονάδας χρόνου.



Σχήμα 1.15: Οι δυο δυνατές θέσεις του ατόμου του αζώτου ως προς την τριγωνική υδρογονική βάση στο μόριο της NH_3 και το πεπερασμένο φράγμα δυναμικού.



Σχήμα 1.16: Το πεπερασμένο φράγμα δυναμικού του μορίου της NH_3 με χρήση του προγράμματος Matlab.

(β) $E > V$

Στην περιοχή $x < 0$ του Σχ. 1.12 έχουμε $V(x) = 0$ και η εξίσωση Schrödinger γίνεται

$$\frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1(x) = 0 \quad (1.86)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_1 = 0 \quad (1.87)$$

$$\text{με } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (1.88)$$

που έχει λύση

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (1.89)$$

Και με τους δύο όρους, προσπίπτοντα και ανακλώμενο.

Η ορμή του σωματιδίου είναι p_1 , όπου $p_1^2/2m = E$.

Στην περιοχή $x > 0$, $V(x) = V$ και η εξίσωση Schrödinger είναι

$$\frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \psi_2(x) = 0 \quad (1.90)$$

ή

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_2 = 0 \quad (1.91)$$

όπου

$$k_2^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \quad (1.92)$$

Και η ορμή του σωματιδίου p_2 δίνεται από την $p_2^2/2m = (E-V)$. Στη λύση για τη κυματοσυνάρτηση σε αυτή την περιοχή θεωρούμε μόνον τον όρο του κύματος που οδεύει προς τα δεξιά, ή μεταδιδόμενου, αφού δεν υπάρχει τίποτα πέρα από το $x=0$ ώστε να προκαλέσει ανάκλαση, οπότε

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} \quad (1.93)$$

Ο κυματαριθμός k , τώρα, συνδέεται με το μήκος κύματος de Broglie του σωματιδίου και βλέπουμε ότι το k αλλάζει όταν το δυναμικό V αλλάζει. Επομένως ένα τέτοιο σωματίδιο αντιδρά σε ένα μεταβαλλόμενο δυναμικό όπως το φως αντιδρά σε ένα

μεταβαλλόμενο δείκτη διάθλασης. Καθώς το δυναμικό V αυξάνει, για $E > V$, η ορμή p και ο κυματικός αριθμός k ($p = \hbar k$) ελαττώνονται και το μήκος κύματος λ αυξάνει.

Στο $x = 0$ οι συνθήκες συνέχειας δίνουν

$$\psi_1(x) = \psi_2(x) \quad (1.94)$$

ή

$$A + B = C \quad (1.95)$$

και

$$\frac{\partial \psi_1(x)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_2(x)}{\partial x} \quad (1.96)$$

ή

$$k_1(A - B) = k_2 C \quad (1.97)$$

Αυτές οι δύο εξισώσεις δίνουν

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad (1.98)$$

και

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \quad (1.99)$$

Αφού το B δεν είναι μηδέν, έχουμε κάποια ανάκλαση στο $x = 0$, μολονότι η ενέργεια $E > V$. Αυτή, σαφώς, δεν αποτελεί κλασική συμπεριφορά. Αν πολλά σωματίδια σχηματίζουν μια δέσμη που προσπίπτει στο $x = 0$ και κάθε σωματίδιο έχει ταχύτητα

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad (1.100)$$

Τότε η ταχύτητα των μεταδιδομένων σωματιδίων θα είναι

$$v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m} \quad (1.101)$$

Η προσπίπτουσα ροή σωματιδίων, δηλαδή ο αριθμός που περνά τη μονάδα της επιφάνειας στη μονάδα του χρόνου, μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι το γινόμενο της ταχύτητας και της έντασης, δηλαδή,

$$v_1 |A|^2$$

Η ανακλώμενη ροή είναι

$$v_1 |B|^2$$

και η μεταδιδόμενη ροή είναι

$$v_2 |C|^2$$

Έτσι ο συντελεστής ανάκλασης, ο λόγος δηλαδή προς ανακλώμενης προς την προσπίπτουσα ροή, είναι

$$R = \frac{v_1 |B|^2}{v_1 |A|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (1.102)$$

Και ο συντελεστής μετάδοσης, ο λόγος της μεταδιδόμενης προς την προσπίπτουσα ροή, είναι

$$T = \frac{v_2 |C|^2}{v_1 |A|^2} = \frac{k_2}{k_1} \frac{(2k_1)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (1.103)$$

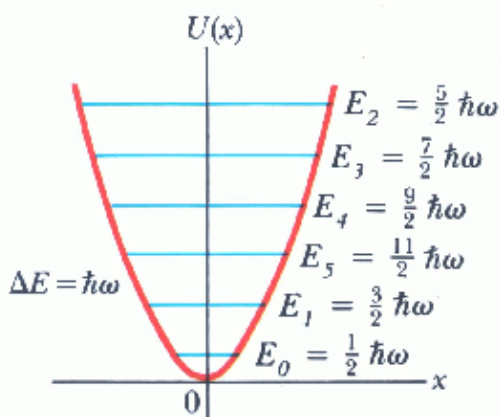
αποτελέσματα που μοιάζουν με εκείνα για τα κλασικά κύματα.

Παρατηρούμε ότι $R+T=1$, που δείχνει ότι ο αριθμός των σωματιδίων διατηρείται.

Εφαρμόσαμε εδώ τους συντελεστές R και T σε ένα πλήθος σωματιδίων που σχηματίζουν μια δέσμη. Οι συντελεστές αυτού, όταν εφαρμόζονται σε κάθε ένα από τα πανομοιότυπα σωματίδια που συγκροτούν τη δέσμη, μετρούν τη μέση πιθανότητα που έχει κάθε ξεχωριστό σωματίδιο να ανακλαστεί ή να μεταδοθεί.

1.9 Ο αρμονικός ταλαντωτής

Τέλος για να περιγράψουμε την προσαρμογή των καμπυλών ψ σε ένα πηγάδι δυναμικού, θα θεωρήσουμε την καμπύλη δυναμικού $V=(1/2)kx^2$ του αρμονικού ταλαντωτή, στο Σχ. 1.17. Ο υπολογισμός των καμπυλών ψ είναι πολύ πολύπλοκος, αλλά τα ουσιαστικά γνωρίσματα επιβεβαιώνουν αυτά που θα μπορούσαμε να περιμένουμε από τα προηγούμενα παραδείγματα. Επί πλέον, με καθαρά κλασικά επιχειρήματα, θα πάρουμε μια πολύ καλή προσέγγιση των κυματομηχανικών αποτελεσμάτων.



Σχήμα 1.17: Καμπύλη δυναμικής ενέργειας V για έναν αρμονικό ταλαντωτή με επιτρεπόμενες ενεργειακές στάθμες $E_n = (n+1/2)h\nu$.

Το 1901 ο Planck δέχτηκε αξιωματικά ότι η ενέργεια ενός τέτοιου ταλαντωτή μπορεί να πάρει τιμές $E = nh\nu$, όπου n είναι ακέραιος και ν η συχνότητα. Ο Schrödinger μπόρεσε να αποδείξει αυτή τη σχέση το 1926, όμως η αρχή της αβεβαιότητας εισάγει μια ουσιαστική διαφορά, απαιτώντας μια ελάχιστη ενεργειακή στάθμη, ή ενέργεια του απολύτου μηδενός, ίση με $(1/2)h\nu$.

Για έναν κλασικό ταλαντωτή, η ελάχιστη ενέργεια $E = 0$, το σημείο 0 στο Σχ. 1.17, δίνει της ακριβείς και ταυτόχρονες τιμές $x = 0$ και $p = 0$, δηλαδή μηδενική ταλάντωση. Η αρχή της αβεβαιότητας το απαγορεύει αυτό. Αν a_0 είναι το ελάχιστο πλάτος ταλάντωσης που είναι συμβιβαστώ με την αρχή της αβεβαιότητας, τότε

$$a_0 \square \frac{1}{2} \Delta x \tag{1.104}$$

Αν p_0 είναι η μέγιστη ορμή του ταλαντωτή με πλάτος a_0 , η ορμή αυτή μπορεί να έχει είτε θετική είτε αρνητική κατεύθυνση και επομένως

$$p_0 \approx \frac{1}{2} \Delta p \quad (1.105)$$

Η ενέργεια του κλασικού ταλαντωτή δίνεται από το

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} m \omega^2 a_0^2 = \frac{1}{2} \omega(a_0)(m \omega a_0) = \frac{1}{2} \omega a_0 p_0 \\ &\approx \frac{1}{8} \omega \Delta x \Delta p \approx \frac{1}{8} h \omega \approx \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} h \nu \end{aligned} \quad (1.106)$$

Ας οι ας ενεργειακές στάθμες προκύπτουν με ακέραια βήματα $h\nu$ πάνω από αυτή την ενέργεια του απολύτου μηδενός.

Ας θεωρήσουμε την ενεργειακή στάθμη του ταλαντωτή που έχει πλάτος a , για την οποία

$$E = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} s x^2 = \frac{1}{2} s a^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 a^2 \quad (1.107)$$

Και επομένως

$$2a = \frac{2}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (1.108)$$

Η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας του ταλαντωτή πάνω στο διάστημα $2a$, μεταξύ $\pm a$ μπορεί να γραφεί

$$\frac{\int_{-a}^a p^2 / 2m}{\int_{-a}^a dx} = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) dx = E - \frac{1}{6} m \omega^2 a^2 = \frac{2}{3} E$$

Διότι

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 a^2 \quad (1.109)$$

Έτσι η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας είναι

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{2}{3} E \quad (1.110)$$

Δίνοντας

$$p = \frac{h}{\lambda} = \sqrt{\frac{4mE}{3}} \quad (1.111)$$

Αυτή δίνει μια μέση τιμή για το μήκος κύματος de Broglie

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{\frac{4mE}{3}}} \quad (1.112)$$

και περιμένουμε ότι θα χωρούν n μισά μήκη κύματος μέσα στο διάστημα $2a$ με ενέργεια E , όπου

$$2a = \frac{2}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (1.113)$$

Επομένως

$$n \frac{\lambda}{2} = \frac{nh}{2\sqrt{4mE/3}} = \frac{2}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (1.114)$$

Γράφοντας $\omega = 2\pi\nu$, έχουμε,

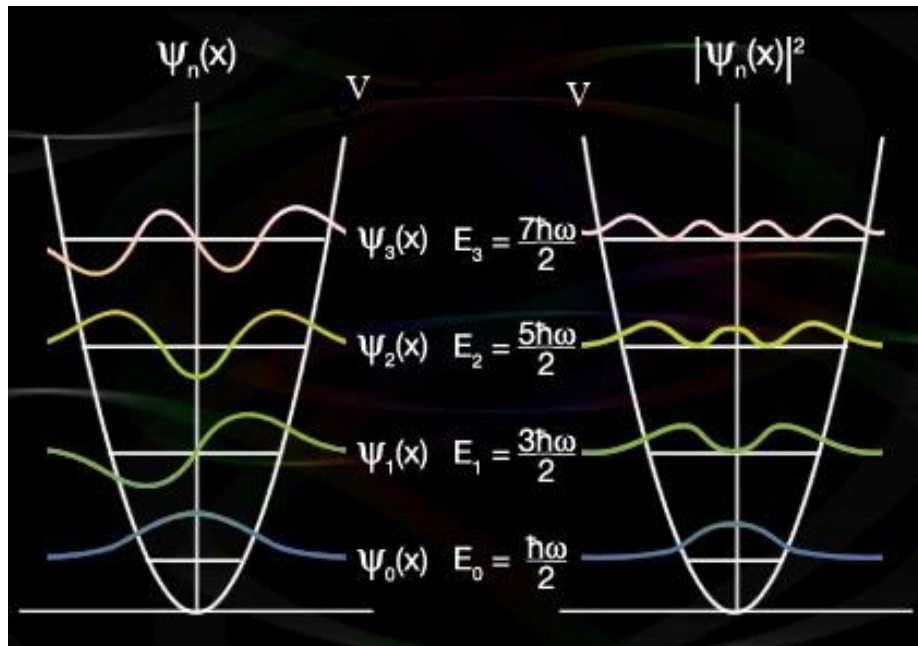
$$E = \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{3}{2}} n h \nu = 0,96 n h \nu \quad (1.115)$$

που είναι αρκετά καλή προσέγγιση στο $n h \nu$. Στο σωστό αποτέλεσμα πάντως πρέπει να λάβουμε υπόψη την ενέργεια του απολύτου μηδενός, $(1/2) h \nu$, και οι ενεργειακές στάθμες δίνονται από την

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) h \nu \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \text{ κλπ} \quad (1.116)$$

Οι καμπύλες του ψ για τις τέσσερες πρώτες ενεργειακές στάθμες δίνονται στο Σχ. 1.18 μαζί με τις καμπύλες για την $|\psi|^2$.

Βλέπουμε ότι, ενώ ένας κλασικός αρμονικός ταλαντωτής δεν μπορεί ποτέ να ξεπεράσει το μέγιστο πλάτος απομάκρυνσης, ένα σωματίδιο που υπακούει σε μια κυματομηχανική περιγραφή έχει μια πεπερασμένη πιθανότητα να βρεθεί πέρα από το όριο αυτό.



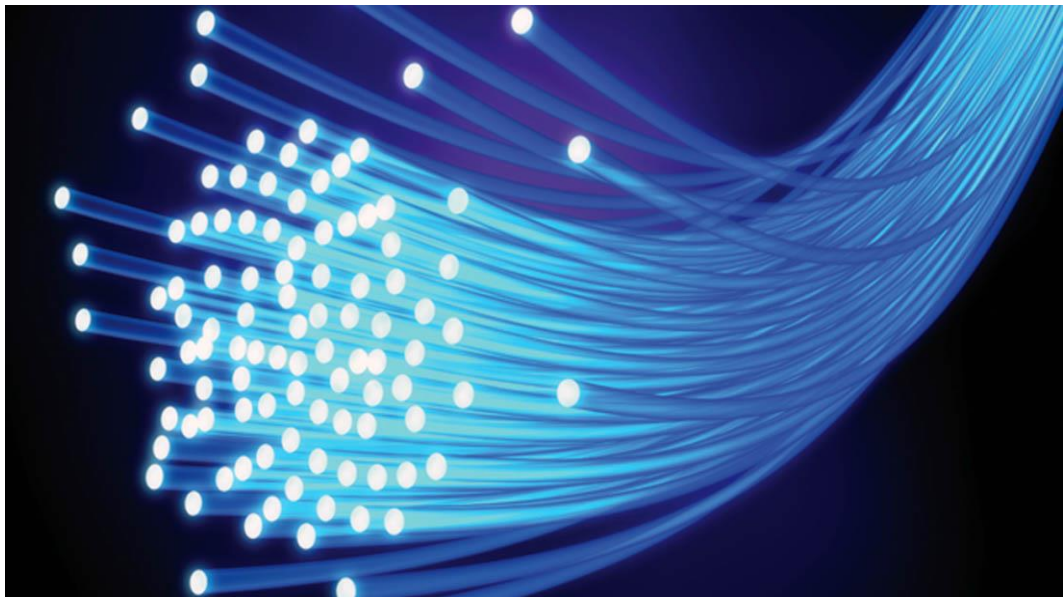
Σχήμα 1.18: Οι κυματοσυναρτήσεις $\psi(x)$ και οι πυκνότητες πιθανότητας $|\psi(x)|^2$ για τις τέσσερες πρώτες ενεργειακές στάθμες του αρμονικού ταλαντωτή.

Κεφάλαιο 2

Εισαγωγή στη φυσική των οπτικών σολιτονίων

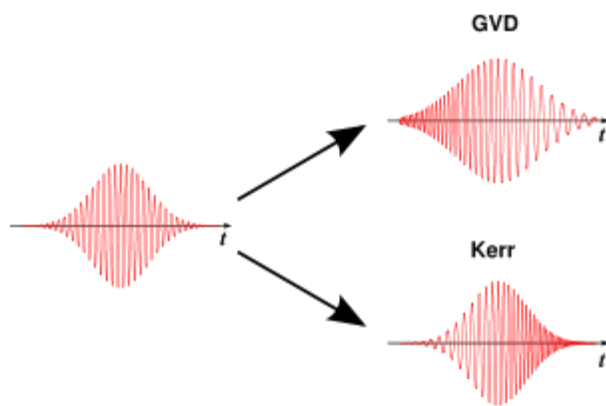
2.1 Εισαγωγή

Ένας σημαντικός κλάδος της Μη Γραμμικής Φυσικής, που γενικά θεωρείται σαν παράγωγο της παγκόσμιας μη γραμμικής συμπεριφοράς της φύσης, είναι η λεγόμενη Φυσική των Σολιτονίων. Η επιστημονική αυτή περιοχή διακρίθηκε για τις μεγάλες της επιτυχίες τις τελευταίες δεκαετίες, γιατί επιτρέπει την παρατήρηση και ανάλυση παρόμοιων δομών και δυναμικής σε πολύ διαφορετικούς κλάδους, όπως στα ρευστά, στο πλάσμα, στα στερεά, στα στοιχειώδη σωματίδια, στην αστροφυσική, στην οπτική, κ.ο.κ. Στην εργασία αυτή παρουσιάζεται μια εισαγωγή στα πλέον βασικά θεωρητικά θέματα της Φυσικής των οπτικών σολιτονίων, που τελευταία παρουσιάζει μια συνεχή ανάπτυξη. Από τη θεωρητική σκοπιά, το ενδιαφέρον έγκειται στη μελέτη της δυναμικής των σολιτονίων στα διάφορα μέσα διάδοσης, δεδομένου ότι τα οπτικά συστήματα έχουν πολλές και διαφορετικές ιδιότητες, όπως μη γραμμικότητα, διασπορά, περίθλαση, μπορεί να είναι ενεργά, παθητικά, κ.ο.κ. Από την άλλη πλευρά, το ενδιαφέρον από τη σκοπιά των εφαρμογών οφείλεται στο γεγονός ότι τα σολιτόνια, έχοντας τη μορφή παλμών ή δεσμών που διαδίδονται χωρίς παραμόρφωση, αφενός αποτελούν ιδανικούς φορείς πληροφορίας σε τηλεπικοινωνιακά συστήματα μεγάλων αποστάσεων, αφετέρου μπορούν να χρησιμοποιηθούν στην οδήγηση ή και μεταγωγή οπτικών δεσμών Σχήμα 2.1.

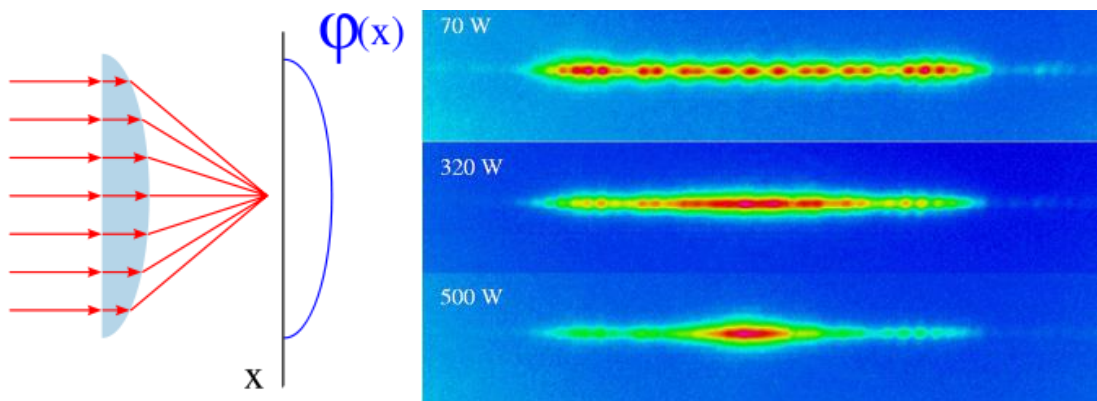


Σχήμα 2.1: Οι οπτικές ίνες χρησιμοποιούνται στην μεταφορά δεδομένων στα ηλεκτρονικά συστήματα.

Τα οπτικά σολιτόνια μπορούν να διακριθούν σε χρονικά σολιτόνια, που είναι χρονικά εντοπισμένοι οπτικοί παλμοί, και σε χωρικά σολιτόνια (Σχήμα 2.2) που είναι χωρικά εντοπισμένες οπτικές δέσμες (Σχήμα 2.3). Τα πρώτα παρατηρούνται σε οπτικές ίνες, ενώ τα δεύτερα σε συμπαγή οπτικά μέσα ή σε επίπεδους διηλεκτρικούς κυματοδηγούς, και τα δύο δε, εξελίσσονται παρουσία της μη γραμμικής μεταβολής του δείκτη διάθλασης του μέσου που επιβάλλεται από την ένταση του διαδιδόμενου κύματος. Όταν τα ανταγωνιζόμενα φαινόμενα της μη γραμμικότητας και της διασποράς (για τα χρονικά σολιτόνια) ή της περίθλασης (για τα χωρικά σολιτόνια) αντισταθμίσουν ακριβώς το ένα το άλλο, ο παλμός (ή η δέσμη) διαδίδεται χωρίς να παραμορφώνεται, εξαιτίας της παγίδευσής του από τη μη γραμμικότητα του μέσου. Η μη γραμμικότητα που είναι υπεύθυνη για το σχηματισμό σολιτονίων είναι συνήθως τύπου Kerr, δηλαδή μεταβάλλει το δείκτη διάθλασης των μέσων ανάλογα με την ένταση του κύματος.



Σχήμα 2.2: Το χρονικό σολιτόνιο παριστάνεται σαν ένας Gaussian παλμός, ο οποίος όταν διαδίδεται μέσω τις οπτικής ίνας παρουσιάζει διασπορά στην ταχύτητα ομάδας. Στις υψηλές συχνότητες θα διαδοθεί λίγο πιο γρήγορα από ότι στις χαμηλές, με αποτέλεσμα να καταλήγουν στο άκρο τις ίνας πιο γρήγορα.



Σχήμα 2.3: Για να κατανοήσουμε πως μπορεί να υπάρχει ένα χωρικό σολιτόνιο, μπορούμε να το παρομοιάσουμε με έναν απλό φακό το οποίο εστιάζει τις οπτικές ακτίνες. Η επίδραση του φακού είναι να εισαγάγει μια μη ομοιόμορφη αλλαγή φάσης που προκαλεί εστίαση.

Η μη γραμμική εξίσωση που διέπει την εξέλιξη του παλμού, είναι η μη γραμμική εξίσωση του Schrödinger, που μπορεί να εκφραστεί σε κανονικοποιημένη μορφή ως ακολούθως:

$$i \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\sigma}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + s |u|^2 u = 0 \quad (2.1)$$

Στην σχέση (2.1), u είναι η περιβάλλουσα του ηλεκτρικού πεδίου, z είναι η απόσταση διάδοσης κατά μήκος του μέσου, ενώ η μεταβλητή ξ , όπως και οι παράμετροι σ και s , έχουν την ακόλουθη σημασία για τα χρονικά ή χωρικά προβλήματα. Στη περίπτωση των χρονικών σολιτονίων στις οπτικές ίνες, ξ είναι ο χρόνος σε ένα σύστημα αναφοράς που κινείται κατά μήκος της ίνας με την ταχύτητα ομάδος και $s = +1$, αφού η μη γραμμικότητα Kerr είναι θετική, ή αυτό-εστιάζουσα, για το τηγμένο SiO_2 από το οποίο είναι κατασκευασμένες οι οπτικές ίνες. Επίσης, στη ίδια περίπτωση, ο 2^{ος} όρος στην Εξ. (2.1) εκφράζει τη διασπορά, που μπορεί να είναι θετική ή αρνητική, ανάλογα με το μήκος κύματος λειτουργίας, οπότε το σ είναι το πρόσημο της διασποράς δεύτερης τάξης ($\sigma = \pm 1$ για μήκος κύματος μικρότερο ή μεγαλύτερο από $1.3 \mu m$ αντίστοιχα). Στην περίπτωση των χωρικών σολιτονίων σε συμπαγή οπτικά μέσα ή σε επίπεδους κυματοδηγούς, ξ είναι η εγκάρσια συντεταγμένη, οπότε ο 2^{ος} όρος της Εξ. (2.1) εκφράζει την περίθλαση, γεγονός που σημαίνει ότι εδώ πάντοτε είναι $\sigma = -1$. Από την άλλη πλευρά όμως, στην περίπτωση αυτή η παράμετρος s μπορεί να παίρνει είτε θετικές, είναι αρνητικές, για αυτοεστιάζοντα, όταν είναι $s = -1$, μη γραμμικά οπτικά μέσα.

Στην περίπτωση $\sigma = -1$ στις οπτικές ίνες, ή $s = +1$ στα συμπαγή μέσα ή στους επίπεδους κυματοδηγούς, η μόνιμη κατάσταση της εξίσωσης NLS, δηλαδή η λύση της που έχει τη μορφή ενός συνεχούς κύματος είναι ασταθής. Η εν λόγω αστάθεια, είναι η λεγόμενη αστάθεια διαμόρφωσης (γνωστή και σαν αστάθεια Benjamin-Feir), η οποία εκδηλώνεται σαν τη διάλυση του συνεχούς κύματος σε μια σειρά παλμών, που είναι τα λεγόμενα φωτεινά σολιτόνια. Στην περίπτωση όμως $\sigma = +1$ στις οπτικές ίνες, ή $s = -1$ στα συμπαγή μέσα ή στους επίπεδους κυματοδηγούς, η λύση cw της εξίσωσης NLS είναι πάντοτε ευσταθής, οπότε τότε δεν υπάρχουν φωτεινά σολιτόνια. Αντίθετα, είναι δυνατόν να υπάρξουν άλλου είδους σολιτόνια, τα λεγόμενα σκοτεινά σολιτόνια, που έχουν τη μορφή βυθισμάτων που οδεύουν επάνω στο ευσταθές υπόβαθρο της λύσης cw .

2.2 Η μη γραμμική εξίσωση του Schrödinger (εξίσωση NLS)

Για την εξαγωγή της βασικής μη γραμμικής κυματικής εξίσωσης, δηλαδή της εξίσωσης NLS, πρέπει να διακριθούν δύο διαφορετικές περιπτώσεις: Η διάδοση παλμών σε οπτικές ίνες και η διάδοση δεσμών σε συμπαγή οπτικά μέσα ή σε επίπεδους διηλεκτρικούς κυματοδηγούς. Ο λόγος της διάκρισης αυτής, είναι ότι τα φαινόμενα που ανταγωνίζονται τη μη γραμμικότητα είναι διαφορετικά σε κάθε περίπτωση: Αυτά είναι η διασπορά στις οπτικές ίνες και η περίθλαση στα συμπαγή μέσα ή στους επίπεδους κυματοδηγούς. Το γεγονός αυτό οδηγεί σε διαφορετικές φυσικές καταστάσεις, που θα συζητηθούν ξεχωριστά στις δύο επόμενες παραγράφους.

2.2.1 Οπτικές ίνες

Οι οπτικές ίνες είναι διηλεκτρικοί κυματοδηγοί κυλινδρικού σχήματος, κατασκευασμένοι από τηγμένα SiO_2 , που χαρακτηρίζονται από ένα δείκτη διάθλασης της ακόλουθης μορφής,

$$n(\omega, |\vec{E}|^2) = n_0(\omega) + n_2 |\vec{E}|^2 \quad (2.2)$$

όπου ω είναι η συχνότητα και $|\vec{E}|$ η ενεργή τιμή του ηλεκτρικού πεδίου του κύματος. Είναι φανερό ότι η οπτική ίνα παρουσιάζει τόσο διασπορά (λόγω της εξάρτησης του γραμμικού δείκτη διάθλασης n_0 από τη συχνότητα), όσο και μη γραμμικότητα (λόγω της εξάρτησης του δείκτη διάθλασης από την ένταση $|\vec{E}|^2$, που είναι γνωστή σαν φαινόμενο Kerr). Η διασπορά οφείλεται στο συντονισμό της ιδιοσυχνότητας ταλάντωσης των δεσμών ηλεκτρονίων με τη συχνότητα του οπτικού κύματος, ενώ η μη γραμμικότητα στην παραμόρφωση των τροχιών των ηλεκτρονίων λόγω του επιβαλλομένου πεδίου. Ο χρόνος απόκρισης του φαινομένου Kerr, παίρνει την περίπου σταθερή (ανεξάρτητη της συχνότητας) και θετική τιμή $1.2 \times 10^{-22} (m/V)^2$.

Ας θεωρήσουμε τώρα τη διάδοση ενός οπτικού κύματος στην ίνα, του οποίου το ηλεκτρικό πεδίο E δίνεται από τη σχέση

$$E = \text{Re} \left\{ A(z, t) \exp[i(k_0 z - \omega_0 t)] \right\} \quad (2.3)$$

όπου $\text{Re}\{\cdot\}$ δηλώνει το πραγματικό μέρος, $A(z, t)$ είναι μια αργά μεταβαλλόμενη περιβάλλουσα σχήματος παλμού, ενώ k_0 και ω_0 είναι ο κυματαριθμός και η συχνότητα του φέροντος (οπτικού) κύματος αντίστοιχα. Σημειώνεται ότι στην πραγματικότητα το ηλεκτρικό πεδίο εξαρτάται και από τις εγκάρσιες συντεταγμένες ρ και φ . Η εξάρτηση όμως αυτή, ορίζεται από το γραμμικό οδηγούμενο ρυθμό της οπτικής ίνας, οπότε μπορεί να αποπλεχθεί από το φαινόμενο της διάδοσης στη διαμήκη θεωρείται αργά μεταβαλλόμενη, το φάσμα συχνότητας του ηλεκτρικού πεδίου E θα είναι εντοπισμένο γύρω από τη συχνότητα ω_0 . Δεδομένου ότι ενδιαφέρει η χωρική εξέλιξη (δηλαδή στη διεύθυνση z) της $A(z, t)$, ο κυματαριθμός k , που δίνεται από τη σχέση διασποράς $k = \omega n(\omega)/c$, αναπτύσσεται τώρα σε σειρά Taylor γύρω από τη συχνότητα ω_0 του φέροντος, οπότε θα είναι:

$$k - k_0 = \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0)^2 + \dots \quad (2.4)$$

Αφού τώρα η περιβάλλουσα $A(z, t)$ μεταβάλλεται αργά ως προς z και t , μπορεί να μετασχηματισθεί κατά Fourier με χρήση των μεταβλητών $\delta\omega = \omega - \omega_0$ και $\delta k = k - k_0$. Από τις ιδιότητες του μετασχηματισμού Fourier είναι φανερό ότι τα $\delta\omega$ και δk

αντιστοιχούν στα $i\partial/\partial t$ και $-i\partial/\partial z$ αντίστοιχα, όποτε η σχέση (2.4) εκφράζεται στο πεδίο του χρόνου σαν $-i\frac{\partial}{\partial z} = ik'\frac{\partial}{\partial t} - \frac{k''}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \dots$. Λαμβάνοντας επιπλέον υπόψη και τη μη γραμμικότητα στο δείκτη διάθλασης, ο κυματαριθμός k θα εξαρτάται επιπλέον και από το $|\vec{E}|^2$, όποτε στη σχέση (2.4) πρέπει να ληφθεί υπόψη και ένας όρος της μορφής $(\partial k/\partial |\vec{E}|^2)|\vec{E}|^2$. Έτσι, αν η προαναφερθείσα τελεστική εξίσωση εφαρμοστεί στη συνάρτηση $A(z,t)$ κρατώντας έως και τον όρο της παραγώγου 2^{ης} τάξης, θα οδηγήσει στην ακόλουθη μη γραμμική κυματική εξίσωση:

$$i\left(\frac{\partial A}{\partial z} - ik'\frac{\partial A}{\partial t}\right) - \frac{k''}{2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{\omega_0 n_2}{c}|A|^2 A = 0 \quad (2.5)$$

Στο σημείο αυτό να κάνουμε κάποιες παρατηρήσεις που αφορούν την σχέση (2.5): Κατ' αρχήν, $k' \equiv \partial k/\partial \omega|_{\omega_0}$ είναι το αντίστροφο της ταχύτητας ομάδος, ενώ $k'' \equiv \partial^2 k/\partial \omega^2|_{\omega_0}$ είναι η διασπορά δεύτερης τάξης (που θα μηδενιζόταν αν ο δείκτης διάθλασης ήταν ανεξάρτητος της συχνότητας). Η τελευταία παίρνει τιμές που εξαρτώνται από το μήκος κύματος λ του φέροντος οπτικού κύματος: Στις συνήθεις οπτικές ίνες η συνάρτηση $k''(\lambda)$ είναι φθίνουσα, μηδενίζεται περίπου στην τιμή $1.3\mu m$ (το σημείο αυτό λέγεται σημείο μηδενικής διασποράς) και είναι θετική (αρνητική) για μήκη κύματος μικρότερα (μεγαλύτερα) από $1.3\mu m$. Η περιοχή μηκών κύματος που αντιστοιχούν σε $k'' > 0$ λέγεται περιοχή της θετικής ή ομαλής διασποράς, ενώ εκείνη στην οποία είναι $k'' < 0$ λέγεται περιοχή της αρνητικής ή ανώμαλης διασποράς.

Από την άλλη πλευρά, όσον αφορά το συντελεστή του μη γραμμικού όρου, αυτός πρέπει να διορθωθεί κατά ένα αδιάστατο παράγοντα S (να γίνει δηλαδή $\omega_0 n_2/cS$), ο οποίος εξαρτάται από την εγκάρσια κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου. Πρέπει πάντως εδώ να παρατηρηθεί ότι αν δεν υπάρχει ο μη γραμμικός όρος στην σχέση (2.5), και θεωρούσαμε τη διάδοση ενός λεπτού παλμού στην ίνα, ο 2^{ος} όρος (όρος της διασποράς) της σχέσης (2.5) θα γινόταν μεγαλύτερος αντιστρόφως ανάλογα με το τετράγωνο του εύρους του παλμού. Αυτό δείχνει ότι ο παλμός θα παραμορφωνόταν (θα διευρυνόταν) λόγω της διασποράς κατά τη διάρκεια της διάδοσής του.

Χρησιμοποιώντας τώρα το μετασχηματισμό $t \rightarrow (t - k'z)/t_0$, $z \rightarrow z|k''|/t_0^2$ (t_0 είναι το αρχικό εύρος του παλμού) και τη συνάρτηση $u = (\omega_0 n_2 t_0^2/cS|k''|)^{1/2} A$, η σχέση (2.5) γράφεται στην ακόλουθη αδιάστατη μορφή, που γνωστή σαν εξίσωση NLS.

$$i\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\sigma}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + |u|^2 u = 0 \quad (2.6)$$

όπου $\sigma = \text{sign}(k'')$ ($\sigma = -1$ για $k'' < 0$, $\sigma = +1$ για $k'' > 0$).

2.2.2 Συμπαγή οπτικά μέσα και επίπεδοι διηλεκτρικοί κυματοδηγοί

Σε αντίθεση με τις οπτικές ίνες, που είναι ουσιαστικά μονοδιάστατοι κυματοδηγοί, η διάδοση δεσμών σε επίπεδους κυματοδηγούς ή σε συμπαγή οπτικά μέσα είναι ένα φαινόμενο στο οποίο πρέπει να ληφθεί υπόψη η κατανομή του πεδίου στην εγκάρσια διεύθυνση. Για να βρούμε την κυματική εξίσωση στην περίπτωση αυτή, θα θεωρήσουμε τη διάδοση ενός βαθμωτού μονοχρωματικού ηλεκτρικού πεδίου σε ένα συμπαγές οπτικό μέσο με δείκτη διάθλασης παρόμοιο με αυτόν στην σχέση (2.2). Έτσι θεωρούμε ότι $n = n_0 + n_{NL}(\mathbf{I})$, όπου n_0 είναι ο γραμμικός δείκτης διάθλασης, ενώ $n_{NL}(\mathbf{I})$ είναι μια συνάρτηση που περιγράφει τη μεταβολή του δείκτη διάθλασης σαν συνάρτηση της έντασης $\mathbf{I} = |\mathbf{E}|^2$ του επιβαλλομένου πεδίου. Η συνάρτηση αυτή, $n_{NL}(\mathbf{I})$, θεωρείται ότι εξαρτάται μόνο από την ένταση \mathbf{I} και είναι φανερό ότι η απλούστερη περίπτωση είναι $n_{NL}(\mathbf{I}) = n_2 \mathbf{I}$, που αντιστοιχεί στην κυβική μη γραμμικότητα (Kerr) που είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Ο συντελεστής Kerr δεν είναι υποχρεωτικά θετικός: Υπάρχουν πολλά υλικά, τόσο στερεά (όπως άμορφο ZnSe , κρύσταλλοι Ti:LiNbO_3 , κλπ.), όσο και αέρια (όπως ατμοί ρουβιδίου, νατρίου, κλπ.), που έχουν $n_2 < 0$. Έτσι, θα διακρίνουμε από εδώ και στο εξής τα μη γραμμικά οπτικά μέσα σε αυτο-εστιάζοντα, όταν έχουν $n_2 > 0$, ή σε αυτό-αποεστιάζοντα, όταν έχουν $n_2 < 0$ (οι οπτικές ίνες, π.χ., είναι αυτό-εστιάζοντα μέσα).

Ας θεωρήσουμε τώρα τη διάδοση μίας μονοχρωματικής οπτικής δέσμης, της οποίας το ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} δίνεται ως

$$\mathbf{E}(x, y, z; t) = \text{Re} \left\{ A(x, y, z) \exp \left[i(\beta_0 z - \omega_0 t) \right] \right\} \quad (2.7)$$

όπου $A(x, y, z)$ είναι η στάσιμη (δηλ ανεξάρτητη του χρόνου t) αργά μεταβαλλόμενη (ως προς z και t) περιβάλλουσα, ενώ $\beta_0 = k_0 n_0 = 2\pi n_0 / \lambda$ και $\omega_0 = 2\pi c / \lambda$ είναι αντίστοιχα ο κυματριθμός και η συχνότητα του φέροντος κύματος (λ είναι το μήκος κύματος της πηγής). Θεωρούμε επίσης ότι η διάδοση λαμβάνει χώρα στη διεύθυνση z , οπότε οι διευθύνσεις x και y είναι οι δύο εγκάρσιες διευθύνσεις. Αντικαθιστώντας τώρα την σχέση (2.7) στη διδιάστατη βαθμωτή κυματική εξίσωση που προκύπτει από τις εξισώσεις Maxwell, και εκμεταλλευόμενοι το γεγονός ότι η συνάρτηση A μεταβάλλεται αργά στη διεύθυνση διάδοσης z , καταλήγουμε στην ακόλουθη κυματική εξίσωση:

$$2ik_0 n_0 \frac{\partial A}{\partial z} + \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} \right) + 2n_0 k_0^2 n_2 |E|^2 E = 0 \quad (2.8)$$

Στη γενική αυτή μη γραμμική παραβολική εξίσωση, οι όροι μέσα στην παρένθεση εκφράζουν την περίθλαση. Είναι σαφές, όπως και στην περίπτωση της σχέσης (2.5), όταν δεν υπάρχει η μη γραμμικότητα, η περίθλαση θα διασπείρει την οπτική δέσμη στις εγκάρσιες διευθύνσεις (x και y). Αυτό όμως που είναι πολύ σημαντικό είναι ότι, στην πραγματικότητα, η σχέση (2.8) είναι μια

διδιάστατη εκδοχή της εξίσωσης NLS. Αυτό φαίνεται εύκολα αν κανονικοποιήσουμε όλες τις χωρικές μεταβλητές στο $k_0 n_0$ και χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση $u = k_0 (n_0 |n_2|)^{1/2} A$, ώστε να ξαναγράψουμε την σχέση (2.8) στην ακόλουθη μορφή,

$$i \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + s |u|^2 u = 0 \quad (2.9)$$

όπου $s = \text{sign}(n_2)$ ($s = +1$ για $n_2 > 0$ και $s = -1$ για $n_2 < 0$).

Στην περίπτωση, τώρα, που έχουμε διάδοση σε επίπεδο διηλεκτρικό κυματοδηγό, η σχέση (2.9) μπορεί να απλοποιηθεί περαιτέρω: Αυτό συμβαίνει γιατί η κατανομή του πεδίου σε μια από τις εγκάρσιες διευθύνσεις, π.χ. στη διεύθυνση y , ορίζεται (όπως και στην περίπτωση της οπτικής ίνας) από τον γραμμικό οδηγούμενο ρυθμό, οπότε αποπλέκεται από τη συνάρτηση A (και u) έτσι, μπορεί να δειχθεί ότι στην περίπτωση αυτή η εξίσωση διάδοσης είναι η σχέση (2.9), αλλά χωρίς την παράγωγο ως προς y , οπότε το αποτέλεσμα είναι η ακόλουθη μονοδιάστατη εξίσωση NLS:

$$i \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + s |u|^2 u = 0 \quad (2.10)$$

Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι οι σχέσεις (2.6) και (2.10) είναι ουσιαστικά ταυτόσημες, αρκεί να παρατηρήσει κανείς ότι όταν εναλλαχθεί το t στην σχέση (2.6) με το x στην σχέση (2.10), οι περιπτώσεις $\sigma = -1, s = +1$ και $\sigma = +1, s = -1$ (με την πρόσθεση αλλαγή $z \rightarrow -z$) οδηγούν στην ίδια εξίσωση κάθε φορά. Έτσι, χωρίς βλάβη της γενικότητας, θα συνεχίσουμε την ανάλυση θεωρώντας στο εξής μόνο την σχέση (2.6).

Παρά την ομοιότητα που διαπιστώνεται στη μαθηματική περιγραφή της διάδοσης παλμών σε οπτικές ίνες και τη διάδοση δεσμών σε συμπαγή μέσα ή σε επίπεδους κυματοδηγούς, θα πρέπει να σημειωθεί ότι η φυσική που διέπει τα δύο αυτά φαινόμενα είναι πολύ διαφορετική: Στις οπτικές ίνες, το μήκος κύματος λειτουργίας επιλέγεται συνήθως κοντά στο σημείο μηδενικής διασποράς, που σημαίνει ότι η πολύ ασθενής μη γραμμικότητα Kerr δεν μπορεί να αντισταθμίσει τη μικρή απομένουσα διασπορά παρά μόνο σε σχετικά μεγάλες αποστάσεις διάδοσης (της τάξης km). Από την άλλη πλευρά, η περίθλαση στα συμπαγή μέσα και στους επίπεδους κυματοδηγούς δεν είναι καθόλου μικρό φαινόμενο, οπότε η μη γραμμικότητα πρέπει να είναι πολύ ισχυρή για να αντισταθμίσει τη διεύρυνση της δέσμης (εδώ οι αποστάσεις είναι της τάξης mm ή cm). Έτσι, σε αυτήν την περίπτωση, η προσέγγιση Kerr για την περιγραφή της μη γραμμικότητας δεν είναι πάντα ικανοποιητική, οπότε πρέπει να χρησιμοποιηθούν άλλα μοντέλα που να λαμβάνουν υπόψη, λ.χ., μη γραμμικούς όρους στη συνάρτηση $n_{NL}(I)$, κορεσμό, κ.λπ..

Θα πρέπει να πούμε ότι οι τιμές ± 1 (∓ 1) που μπορεί να παίρνει η παράμετρος είναι καθοριστικές για την αστάθεια διαμόρφωσης και το είδος των σολιτονίων (φωτεινά ή σκοτεινά) που μπορούν να διαδοθούν στα οπτικά μέσα. Αυτό γίνεται φανερό αν αρχικά παρατηρήσει κανείς ότι η σχέση (2.6) μοιάζει πολύ με την αδιάστατη εξίσωση του Schrödinger το δυναμικό V παγιδεύει το σωματίδιο που αναπαρίσταται από την κυματοσυνάρτηση ψ , οπότε κατ' αναλογία, στην περίπτωση της εξίσωσης NLS, και όταν $\sigma = -1$ ή $s = 1$, το βάθος του ισοδύναμου δυναμικού αυξάνεται ανάλογα με την ένταση $|u|^2$, με αποτέλεσμα την τοπική παγίδευση της ενέργειας του κύματος. Τότε όμως, λόγω διατήρησης της ενέργειας, θα πρέπει το εύρος του παλμού να γίνεται μικρότερο,

αντιστρόφως ανάλογα με το $|\mu|^2$. Από την άλλη πλευρά, το φαινόμενο της διασποράς (ή της περίθλασης), που αυξάνεται αντιστρόφως ανάλογα με το τετράγωνο του εύρους του παλμού (ή της δέσμης), γίνεται ολοένα και πιο ισχυρό με αποτέλεσμα η “διεύρυνση” να ανταγωνίζεται το “στένεμα” εξαιτίας της μη γραμμικότητας. Στην περίπτωση που συμβαίνει μια ακριβής εξισορρόπηση των φαινομένων της παγίδευσης (λόγω μη γραμμικότητας) και της διεύρυνσης (λόγω διασποράς ή περίθλασης) είναι δυνατός ο σχηματισμός παλμών (ή δεσμών) που παραμένουν στάσιμοι, οι οποίοι στην πραγματικότητα είναι οι λύσεις των φωτεινών σολιτονίων της εξίσωσης NLS. Στην περίπτωση τώρα που είναι $\sigma = +1$ ή $s = -1$, το δυναμικό, αντί να παγιδεύει, απωθεί το σωματίο και η απώθηση αυτή, αντί να ανταγωνίζεται, συνεργάζεται με τη διασπορά (ή την περίθλαση). Έτσι, η ενέργεια του κύματος διαδέχεται γρήγορα εξαιτίας της διαδικασίας αυτής, γεγονός που σημαίνει ότι δεν είναι δυνατόν να σχηματιστούν φωτεινά σολιτόνια στην περίπτωση $\sigma = +1$ ή $s = -1$. Όμως, υπάρχει ένα άλλο είδος σολιτονίων που μπορούν να σχηματιστούν στην περίπτωση αυτή, τα λεγόμενα σκοτεινά σολιτόνια, τα οποία είναι ουσιαστικά “οπές”, δηλαδή τμήματα απουσίας ισχύος, που διαδίδονται πάνω στο υπόβαθρο ενός ευσταθούς συνεχούς κύματος.

Κεφάλαιο 3

Λύση της εξίσωσης σολιτονίου NLS

3.1 Κατασκευή της λύσης σολιτονίου

Στην ενότητα αυτή θα κατασκευάσουμε την λύση που αντιστοιχεί στο σολιτόνιο για την μονοδιάστατη εξίσωση NLS, δηλαδή για την σχέση 2.10, όπου $\sigma = -1$ και $s = 1$. Για να βρούμε τις λύσεις σολιτονίων της εξίσωσης, θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο ανάλυσης του φασικού επιπέδου. Η μέθοδος αυτή έγκειται στην αναγωγή της μερικής διαφορικής εξίσωσης (ΜΔΕ) σε μια συνήθη διαφορική εξίσωση (ΣΔΕ) και κατόπιν στον υπολογισμό των διαχωριστικών καμπυλών στο φασικό επίπεδο του δυναμικού συστήματος που αντιπροσωπεύεται από την (ΣΔΕ), στις οποίες αντιστοιχούν οι λύσεις των μοναχικών κυμάτων. Η μέθοδος αυτή οδηγεί γενικά σε λύσεις μοναχικών κυμάτων, όμως η εξίσωση NLS είναι πλήρως ολοκληρώσιμη, οπότε οι λύσεις μοναχικών κυμάτων είναι πράγματι οι ζητούμενες λύσεις σολιτονίων.

Η εξίσωση NLS (σχέση 2.10) μετατρέπεται στο εξής πρόβλημα διαφορικής εξίσωσης:

$$\left. \begin{aligned} iu_z + \nu u_{xx} + s|u|^2 u &= 0, & -\infty < x < +\infty \\ \lim_{|x| \rightarrow +\infty} u(x, z) &= 0 \end{aligned} \right\} \text{NLS}$$

Αναζητούμε λύσεις των οποίων η ισχύς $|u|^2$ είναι στάσιμη στο z . Το $F(x - cz)$ παριστάνει το πλάτος του κύματος, οπότε είναι μια πραγματική συνάρτηση που εξαρτάτε από την θέση x και τον χρόνο z . Υποθέτουμε λοιπόν ότι η άγνωστη συνάρτηση u έχει τη μορφή:

$$\begin{aligned} u(x, z) &= F(x - cz) \cdot e^{i(kx - \omega z)} \\ &= F(\xi) \cdot e^{i\theta} \end{aligned}$$

όπου $\xi = x - cz$, $\theta = kx - \omega z$.

Υπολογίζουμε τις παραγώγους, που αναφέρονται στη εξίσωση NLS, για την συνάρτηση μας.

$$u_z(x, z) = \frac{d}{dz} [F(\xi) \cdot e^{i\theta}] = -cF'(\xi)e^{i\theta} - \omega iF(\xi)e^{i\theta} \Leftrightarrow$$

$$u_z(x, z) = e^{i\theta} [-cF'(\xi) - \omega iF(\xi)] \quad (3.1)$$

$$u_x(x, z) = \frac{d}{dx} [F(\xi) \cdot e^{i\theta}] = F'(\xi) e^{i\theta} + kiF(\xi) e^{i\theta} \Leftrightarrow$$

$$u_x(x, z) = e^{i\theta} [F'(\xi) + kiF(\xi)] \quad (3.2)$$

$$u_{xx}(x, z) = \frac{d}{dx} [e^{i\theta} [F'(\xi) + kiF(\xi)]] = kie^{i\theta} [F'(\xi) + kiF(\xi)] + e^{i\theta} [F''(\xi) + kiF'(\xi)]$$

$$\Leftrightarrow$$

$$u_{xx}(x, z) = e^{i\theta} [F''(\xi) + 2kiF'(\xi) - k^2F(\xi)] \quad (3.3)$$

$$|u|^2 u = |F(\xi) e^{i\theta}|^2 F(\xi) e^{i\theta} = |F(\xi)|^2 F(\xi) e^{i\theta} \quad (3.4)$$

Αντικαθιστούμε τις σχέσεις 3.1, 3.3 και 3.4 στην εξίσωση NLS, όποτε προκύπτει:

$$ie^{i\theta} [-cF'(\xi) - \omega iF(\xi)] + ve^{i\theta} [F''(\xi) + 2kiF'(\xi) - k^2F(\xi)] + s|F(\xi)|^2 F(\xi) e^{i\theta} = 0$$

$$\Leftrightarrow -ciF'(\xi) + \omega F(\xi) + vF''(\xi) + 2kviF'(\xi) - k^2vF(\xi) + s|F(\xi)|^2 F(\xi) = 0 \quad (3.5)$$

Χωρίζουμε το πραγματικό και το φανταστικό μέρος, καταλήγουμε στις ακόλουθες μερικές διαφορικές εξισώσεις:

$$-cF'(\xi) + 2kvF'(\xi) = 0 \quad (\text{φανταστικά μέρη})$$

$$\omega F(\xi) + vF''(\xi) - k^2vF(\xi) + s|F(\xi)|^2 F(\xi) = 0 \quad (\text{πραγματικά μέρη})$$

$$\Leftrightarrow \left. \begin{array}{l} (2kv - c)F'(\xi) = 0 \\ F(\xi)(\omega - k^2v) + vF''(\xi) + sF^3(\xi) = 0 \end{array} \right\}$$

$$(2kv - c)F'(\xi) = 0 \quad (\alpha)$$

$$F''(\xi) + F(\xi) \left(\frac{\omega - k^2v}{v} \right) + \left(\frac{s}{v} \right) F^3(\xi) = 0 \quad (\beta)$$

Α) Εξετάζουμε πρώτα την εξίσωση (α) από την οποία με ολοκλήρωση προκύπτει ότι:

$$\int (2kv - c) F'(\xi) \cdot d\xi = A \Leftrightarrow (2kv - c) F(\xi) = A$$

Από το πρόβλημα NLS παρατηρούμε ότι: $\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} [(2kv - c) F(\xi)] = 0$ άρα $A = 0$ για κάθε

$k, c \in \mathbb{R}$. Οπότε $(2kv - c) F(\xi) = 0$. Αν $2kv \neq c$ τότε $F(\xi) = 0$ για κάθε ξ . Αυτή είναι η τετριμμένη λύση. Άρα επιλέγουμε ως λύση την $2kv = c$.

$$c = 2k\nu \quad (\gamma)$$

B) Εξετάζουμε τώρα την σχέση (β). Θέτουμε $\Lambda = \left[\frac{\omega - k^2\nu}{\nu} \right]$ και $M = \left[\frac{s}{\nu} \right]$, οπότε η εξίσωση (β) παίρνει την μορφή:

$$F''(\xi) + \Lambda F(\xi) + MF^3(\xi) = 0 \quad (\delta)$$

Πραγματοποιούμε ακόμα μια αλλαγή μεταβλητής, θέτοντας:

$$F(\xi) = \left| \frac{\Lambda}{M} \right|^{1/2} Q \left[\left| \Lambda \right|^{1/2} \xi \right] = \left| \frac{\Lambda}{M} \right|^{1/2} Q(\tau), \quad \text{όπου } \tau = \left| \Lambda \right|^{1/2} \xi \quad (\text{I})$$

Υπολογίζουμε την 1^η και 2^η παράγωγο της συνάρτησης και αντικαθιστούμε στην εξίσωση (δ).

$$F'(\xi) = \left| \frac{\Lambda}{M} \right|^{1/2} \left| \Lambda \right|^{1/2} \dot{Q}[\tau] = \frac{|\Lambda|}{|M|^{1/2}} \dot{Q}(\tau) \quad \text{και} \quad F''(\xi) = \frac{|\Lambda|^{3/2}}{|M|^{1/2}} \ddot{Q}(\tau) \quad \text{οπότε προκύπτει:}$$

$$\frac{|\Lambda|^{3/2}}{|M|^{1/2}} \ddot{Q}(\tau) + \Lambda \left| \frac{\Lambda}{M} \right|^{1/2} Q(\tau) + M \left| \frac{\Lambda}{M} \right|^{3/2} Q^3(\tau) = 0$$

Για να μπορέσουμε να συνεχίσουμε την μελέτη μας αντικαθιστούμε στην παραπάνω σχέση όπου Λ και M τα εξής: $\Lambda = \text{sgn}(\Lambda) \cdot |\Lambda|$ και $M = \text{sgn}(M) \cdot |M|$. Οπότε προκύπτει:

$$\frac{|\Lambda|^{3/2}}{|M|^{1/2}} \ddot{Q}(\tau) + \text{sgn}(\Lambda) \cdot \frac{|\Lambda|^{3/2}}{|M|^{1/2}} Q(\tau) + \text{sgn}(M) \cdot \frac{|\Lambda|^{3/2}}{|M|^{1/2}} Q^3(\tau) = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$\ddot{Q}(\tau) + \text{sgn}(\Lambda) Q(\tau) + \text{sgn}(M) Q^3(\tau) = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$\ddot{Q}(\tau) = -\text{sgn}(\Lambda) Q(\tau) - \text{sgn}(M) Q^3(\tau) \quad (3.6)$$

Θέτουμε $\Phi(Q) = -\text{sgn}(\Lambda) Q(\tau) - \text{sgn}(M) Q^3(\tau)$, οπότε προκύπτει το ψευδοδυναμικό για τη εξίσωση NLS:

$$U(Q) = -\int_0^Q \Phi(Q) \cdot dQ = \int_0^Q \left[\text{sgn}(\Lambda) Q(\tau) + \text{sgn}(M) Q^3(\tau) \right] \cdot dQ$$

$$U(Q) = \text{sgn}(\Lambda) \frac{Q^2(\tau)}{2} + \text{sgn}(M) \frac{Q^4(\tau)}{4} \quad (\epsilon)$$

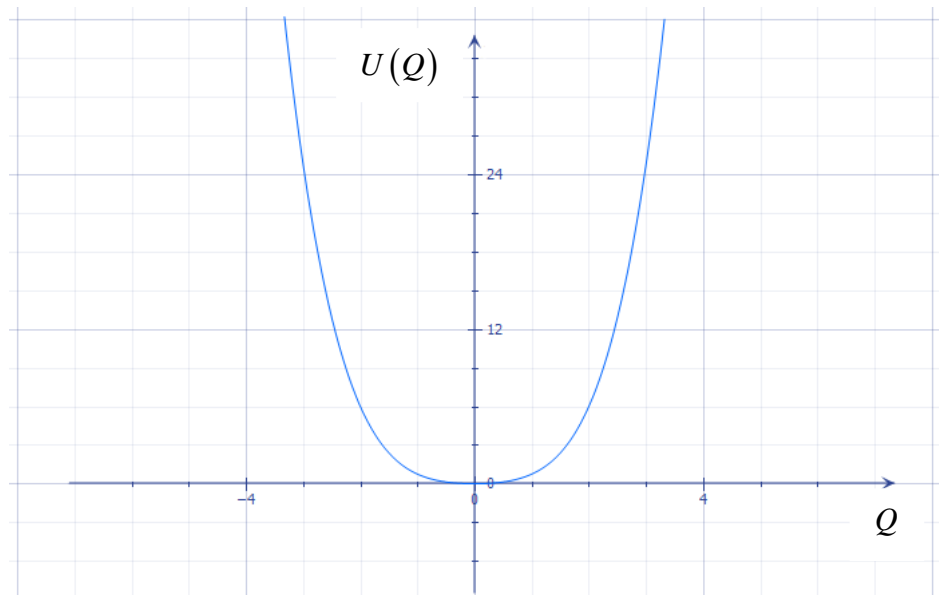
Περίπτωση I: Έστω ότι $\Lambda > 0$ και $M > 0$, οπότε $\text{sgn}(\Lambda) = +1$ και $\text{sgn}(M) = +1$. Από την σχέση (ε) προκύπτει ότι το δυναμικό θα είναι:

$$U(Q) = \frac{Q^2(\tau)}{2} + \frac{Q^4(\tau)}{4}$$

Μελετάμε την δυναμική συμπεριφορά, οπότε υπολογίζουμε την 1^η παράγωγο του δυναμικού και βρίσκουμε τα κρίσιμα σημεία.

$$U'(Q) = -\Phi(Q) \Rightarrow \Phi(Q) = 0 \text{ \acute{a}\rho\alpha } -[-Q - Q^3] = 0 \Rightarrow Q + Q^3 = 0 \Rightarrow Q(1 + Q^2) = 0$$

Το κρίσιμο σημείο είναι όταν $Q = 0$. Στο σημείο αυτό υπολογίζουμε και την 2^η παράγωγο όπου $U''(0) = 1 > 0$, \acute{a}\rho\alpha το κρίσιμο σημείο είναι τοπικό ελάχιστο. Η συμπεριφορά του δυναμικού καθώς το $|Q| \rightarrow \pm\infty$ είναι $\lim_{|Q| \rightarrow \pm\infty} U(Q) = +\infty$. Από την παραπάνω μελέτη μπορούμε να σχεδιάσουμε την γραφική παράσταση του δυναμικού σε συνάρτηση της τιμής Q .



Σχήμα 3.1: Η γραφική απεικόνιση του δυναμικού για την περίπτωση όπου $\Lambda > 0$ και $M > 0$.

Η γραφική παράσταση του δυναμικού για την περίπτωση όπου $\Lambda > 0$ και $M > 0$ αντιστοιχεί σε περιοδική λύση.

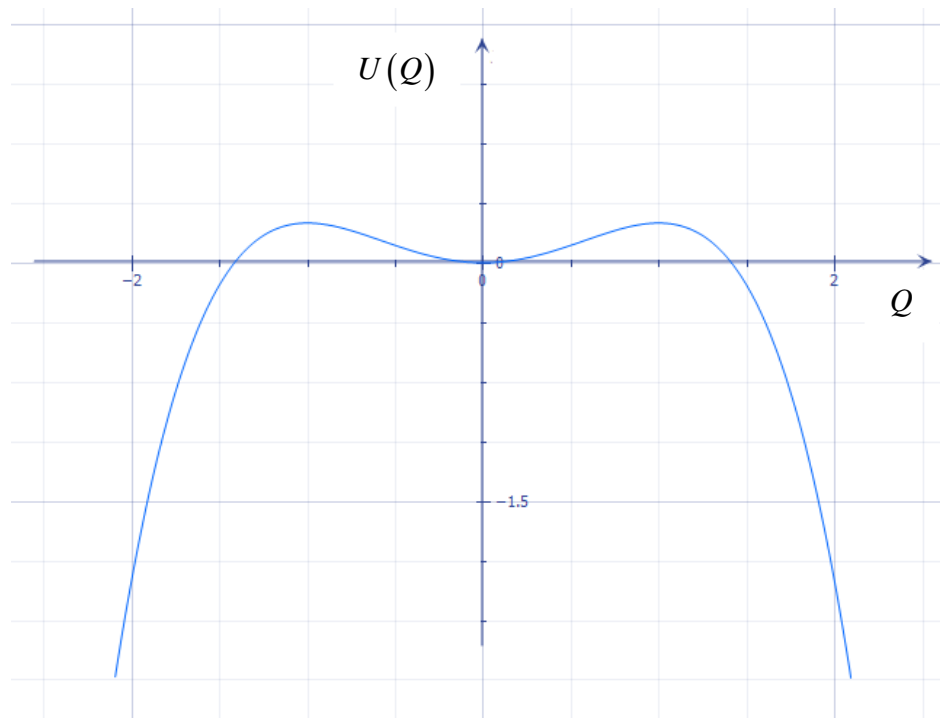
Περίπτωση II: Έστω ότι $\Lambda > 0$ και $M < 0$, οπότε $\text{sgn}(\Lambda) = +1$ και $\text{sgn}(M) = -1$. Από την σχέση (ε) προκύπτει ότι το δυναμικό θα είναι:

$$U(Q) = \frac{Q^2(\tau)}{2} - \frac{Q^4(\tau)}{4}$$

Μελετάμε την δυναμική συμπεριφορά οπότε υπολογίζουμε την 1^η παράγωγο του δυναμικού και βρίσκουμε τα κρίσιμα σημεία.

$$U'(Q) = -\Phi(Q) \Rightarrow \Phi(Q) = 0 \text{ άρα } -[-Q + Q^3] = 0 \Rightarrow Q - Q^3 = 0 \Rightarrow Q(1 - Q^2) = 0$$

Τα κρίσιμα σημεία είναι $Q = 0$, $Q = \pm 1$ και οι τιμές του δυναμικού σε αυτά τα σημεία είναι $U(0) = 0$ και $U(+1) = U(-1) = \frac{1}{4}$. Η 2^η παράγωγος του δυναμικού είναι $U''(Q) = 1 - 3Q^2$. Για το κρίσιμο σημείο $Q = 0$ το $U''(0) = 1 > 0$ οπότε είναι τοπικό ελάχιστο. Για τα σημεία $Q = \pm 1$ το $U''(\pm 1) = -2 < 0$ οπότε είναι τοπικά μέγιστα. Η συμπεριφορά του δυναμικού καθώς το $|Q| \rightarrow \pm\infty$ είναι $\lim_{|Q| \rightarrow \pm\infty} U(Q) = -\infty$. Από την παραπάνω μελέτη μπορούμε να σχεδιάσουμε την γραφική παράσταση του δυναμικού σε συνάρτηση της τιμής Q .



Σχήμα 3.2: Η γραφική απεικόνιση του δυναμικού για την περίπτωση όπου $\Lambda > 0$ και $M < 0$.

Η γραφική παράσταση του δυναμικού για την περίπτωση όπου $\Lambda > 0$ και $M < 0$ αντιστοιχεί σε περιοδική λύση όταν $-1 < Q < 1$.

Περίπτωση III: Έστω ότι $\Lambda < 0$ και $M < 0$, οπότε $\text{sgn}(\Lambda) = -1$ και $\text{sgn}(M) = -1$. Από την σχέση (ε) προκύπτει ότι το δυναμικό θα είναι:

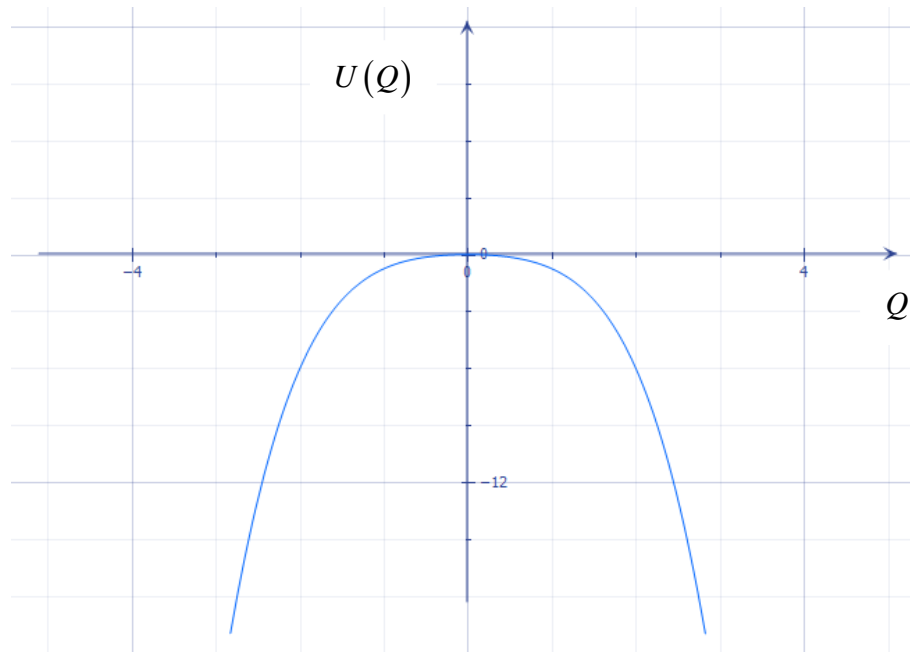
$$U(Q) = -\frac{Q^2(\tau)}{2} - \frac{Q^4(\tau)}{4}$$

Μελετάμε την δυναμική συμπεριφορά, οπότε υπολογίζουμε την 1^η παράγωγο του δυναμικού και βρίσκουμε τα κρίσιμα σημεία.

$$U'(Q) = -\Phi(Q) \Rightarrow \Phi(Q) = 0 \text{ \acute{a}\rho\alpha } -[Q + Q^3] = 0 \Rightarrow Q + Q^3 = 0 \Rightarrow Q(1 + Q^2) = 0$$

Το κρίσιμο σημείο είναι όταν $Q = 0$. Στο σημείο αυτό υπολογίζουμε και την 2^η παράγωγο όπου $U''(Q) = -1 - 3Q^2 \Rightarrow U''(0) = -1 < 0$, \acute{a}\rho\alpha το κρίσιμο σημείο είναι τοπικό μέγιστο.

Η συμπεριφορά του δυναμικού καθώς το $|Q| \rightarrow \pm\infty$ είναι $\lim_{|Q| \rightarrow \pm\infty} U(Q) = -\infty$. Από την παραπάνω μελέτη μπορούμε να σχεδιάσουμε την γραφική παράσταση του δυναμικού σε συνάρτηση της τιμής Q .



Σχήμα 3.3: Η γραφική απεικόνιση του δυναμικού για την περίπτωση όπου $\Lambda < 0$ και $M < 0$.

Η γραφική παράσταση του δυναμικού για την περίπτωση όπου $\Lambda < 0$ και $M < 0$ αντιστοιχεί σε μη φραγμένη λύση.

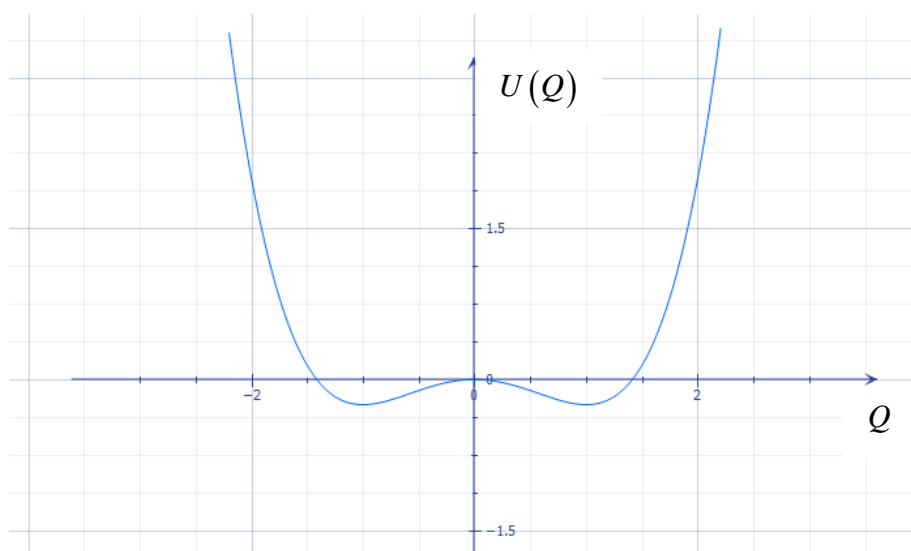
Περίπτωση IV: Έστω ότι $\Lambda < 0$ και $M > 0$, οπότε $\text{sgn}(\Lambda) = -1$ και $\text{sgn}(M) = +1$. Από την σχέση (ε) προκύπτει ότι το δυναμικό θα είναι:

$$U(Q) = -\frac{Q^2(\tau)}{2} + \frac{Q^4(\tau)}{4}$$

Μελετάμε την δυναμική συμπεριφορά, οπότε υπολογίζουμε την 1^η παράγωγο του δυναμικού και βρίσκουμε τα κρίσιμα σημεία.

$$U'(Q) = -\Phi(Q) \Rightarrow \Phi(Q) = 0 \text{ άρα } -[Q - Q^3] = 0 \Rightarrow -Q + Q^3 = 0 \Rightarrow Q(Q^2 - 1) = 0$$

Τα κρίσιμα σημεία είναι $Q = 0$, $Q = \pm 1$ και οι τιμές του δυναμικού σε αυτά τα σημεία είναι $U(0) = 0$ και $U(+1) = U(-1) = -\frac{1}{4}$. Η 2^η παράγωγος του δυναμικού είναι $U''(Q) = 3Q^2 - 1$. Για το κρίσιμο σημείο $Q = 0$ το $U''(0) = -1 < 0$ οπότε είναι τοπικό μέγιστο. Για τα σημεία $Q = \pm 1$ το $U''(\pm 1) = 2 > 0$ οπότε είναι τοπικά ελάχιστα. Η συμπεριφορά του δυναμικού καθώς το $|Q| \rightarrow \pm\infty$ είναι $\lim_{|Q| \rightarrow \pm\infty} U(Q) = +\infty$. Από την παραπάνω μελέτη μπορούμε να σχεδιάσουμε την γραφική παράσταση του δυναμικού σε συνάρτηση της τιμής Q .



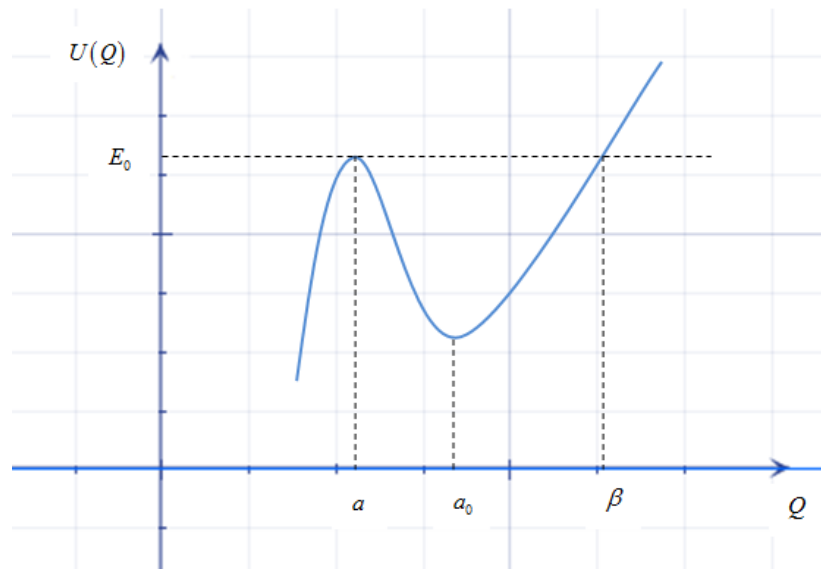
Σχήμα 3.4: Η γραφική απεικόνιση του δυναμικού για την περίπτωση όπου $\Lambda < 0$ και $M > 0$.

Η γραφική παράσταση του δυναμικού για την περίπτωση όπου $\Lambda < 0$ και $M > 0$ αντιστοιχεί σε περιοδικές λύσεις για σημεία κοντά στο $Q = \pm 1$ και για $Q = 0$ σε ασταθής λύση. Όπως παρατηρούμε από το σχήμα 3.4 πρέπει να υπάρχει μια τροχιά η οποία συνδέει το τοπικό μέγιστο με το σημείο τομής της $U(Q)$ που διαγράφεται καθώς $Q \rightarrow \pm\infty$. Η τροχιά αυτή αντιστοιχεί στην ενεργειακή στάθμη $U(Q) = 0$. Θα εκμεταλλευτούμε το

γεγονός αυτό για να μπορέσουμε να βρούμε την ομοκλινική τροχιά που θα απεικονίζετε στο διάγραμμα (Q, τ) και θα μπορέσουμε μέσω αυτής να λύσουμε την εξίσωση (3.6).

Θα υπολογίσουμε το γενικό αποτέλεσμα της δυναμικής συνάρτησης $U(Q)$ για την περίπτωση που η τροχιά συνδέει το τοπικό μέγιστο με το σημείο τομής της $U(Q)$, η οποία διαγράφεται καθώς $Q \rightarrow \pm\infty$.

Απόδειξη του Γενιότερου Αποτελέσματος: Θεωρούμε ότι το γράφημα της δυναμικής ενέργειας έχει την παρακάτω μορφή.



Σχήμα 3.5: Η γραφική απεικόνιση ενός τυχαίου δυναμικού όπου στο σημείο a_0 έχει τοπικό ελάχιστο και σημείο το a έχει τοπικό μέγιστο.

Όπως παρατηρούμε από το παραπάνω σχήμα, τα σημεία a και β έχουν ίδια ενέργεια E_0 . Για το σημείο a επειδή είναι τοπικό μέγιστο θα ισχύει ότι $U'(a)=0$ και $U''(a)<0$, ενώ για το β έχω $U'(\beta)\neq 0$. Επίσης παρατηρείται ότι για τα δυο σημεία έχουμε $U(a)=U(\beta)=E_0$. Από την αρχή διατήρησης της μηχανικής ενέργειας (ΑΔΜΕ) και δεδομένου του $m=1$, λαμβάνουμε την διαφορική εξίσωση 1^{ης} τάξης:

$$\frac{1}{2}\dot{Q}^2 + U(Q) = E_0 \Rightarrow \left(\frac{dQ}{dt}\right)^2 = 2(E_0 - U(Q)) \Rightarrow \frac{dQ}{dt} = \sqrt{2(E_0 - U(Q))} \Rightarrow$$

$$\frac{dQ}{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}} = dt$$

Ολοκληρώνουμε την παραπάνω διαφορική χωριζόμενων μεταβλητών εξίσωση, από το σημείο a μέχρι το a_0 , στο χρονικό διάστημα $[T, T_0]$. Οπότε προκύπτει:

$$\int_{a_0}^a \frac{dQ}{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}} = \int_{T_0}^T dt \Rightarrow \int_{a_0}^a \frac{dQ}{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}} = T - T_0$$

Παρατηρούμε ότι καθώς το $Q \rightarrow a$ τότε ο όρος $\frac{1}{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}} \rightarrow +\infty$. Θα θέλαμε να

δείξουμε ότι καθώς $Q \rightarrow a$ τότε $\frac{1}{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}} \square \frac{1}{Q-a}$ ή $\frac{N}{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}} \square \frac{1}{Q-a}$

\Rightarrow ισοδύναμα $\frac{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}}{Q-a} \square N$, με άλλα λόγια καθώς $Q \rightarrow a$ τότε

$\lim_{Q \rightarrow a} \frac{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}}{Q-a} = N$, όπου N μια σταθερά. Προς απόδειξη παραπάνω παίρνω το

όριο:

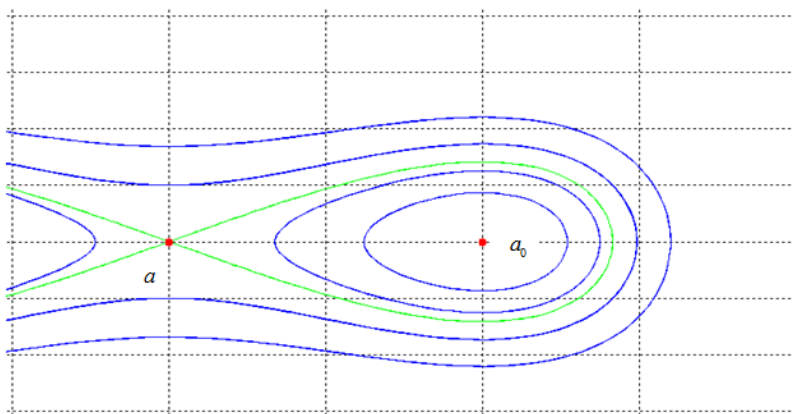
$$\lim_{Q \rightarrow a} \frac{2(E_0 - U(Q))^{0/0}}{(Q-a)^2} = -2 \lim_{Q \rightarrow a} \frac{U'(Q)}{2(Q-a)} = - \lim_{Q \rightarrow a} \frac{U'(Q)}{Q-a} \stackrel{U'(a)=0}{=} - \lim_{Q \rightarrow a} \frac{U'(Q) - U'(a)}{Q-a} \Rightarrow$$

$$\lim_{Q \rightarrow a} \frac{2(E_0 - U(Q))}{(Q-a)^2} = -U''(a) \stackrel{U''(a) < 0}{=} N^2 > 0$$

Άρα για κάθε $Q \rightarrow a$ ισχύει ότι $\frac{N}{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}} \square \frac{1}{Q-a}$ και

$\int_{a_0}^a \frac{dQ}{\sqrt{2(E_0 - U(Q))}} \square \int_{a_0}^a \frac{1}{Q-a} da$. Οπότε $\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} Q(\tau) = a$ η ισοσταθμική καμπύλη στην γενική

περίπτωση παρουσιάζετε στο σχήμα 2.9.



Σχήμα 3.6: Το φασικό πορτρέτο μιας συνάρτησης όπου η πράσινη γραμμή απεικονίζει την ομοκλινική καμπύλη, τα σημεία a είναι ένα τοπικό μέγιστο ενώ το a_0 ένα τοπικό ελάχιστο στο ενεργειακό διάγραμμα 2.8.

Επαναφορά στην περίπτωση NLS: Για την περίπτωση αυτή έχουμε το $a=0$, οπότε προκύπτει η διαφορική εξίσωση:

$$\frac{1}{2}\dot{Q}^2 + \frac{Q^4}{4} - \frac{Q^2}{2} = 0 \Rightarrow \dot{Q}^2 + \frac{1}{2}Q^4 - Q^2 = 0 \Rightarrow \dot{Q} = \pm \sqrt{Q^2 - \frac{1}{2}Q^4}$$

Η λύση αυτής της διαφορικής εξίσωσης δεν επηρεάζεται από το ποιον κλάδο θα επιλέξουμε, και έτσι χάριν ευκολίας χρησιμοποιούμε το θετικό. Άρα έχω την εξίσωση $\dot{Q} = \sqrt{Q^2 - \frac{1}{2}Q^4}$ και απαιτούμε για κάθε τ το $Q > 0$. Η εξίσωση είναι χωριζομένων μεταβλητών οπότε:

$$\frac{dQ}{Q\sqrt{1-\frac{1}{2}Q^2}} = d\tau \Rightarrow \int \frac{dQ}{Q\sqrt{1-\frac{1}{2}Q^2}} = \int d\tau \quad (\zeta)$$

Το ολοκλήρωμα $\frac{dQ}{Q\sqrt{1-\frac{1}{2}Q^2}}$ είναι της μορφής $\int \frac{dx}{x\sqrt{a-bx^2}}$ με $a > 0$ και $b > 0$, το

οποίο επιλύεται με τον μετασχηματισμό $x = \sqrt{\frac{a}{b}} \operatorname{sech} \theta$. Όπου:

$$(\operatorname{sech} \theta)' = \left(\frac{1}{\cosh \theta} \right)' = -\frac{(\cosh \theta)'}{\cosh^2 \theta} = -\frac{\sec h \theta}{\cosh^2 \theta} = -\sec h \theta \cdot \tanh \theta$$

Άρα η παράγωγος του μετασχηματισμού είναι:

$$\frac{dx}{d\theta} = -\sqrt{\frac{a}{b}} \sec h \theta \cdot \tanh \theta \Rightarrow dx = -\sqrt{\frac{a}{b}} \sec h \theta \cdot \tanh \theta \cdot d\theta$$

Οπότε επανερχόμαστε στο ολοκλήρωμα $\int \frac{dx}{x\sqrt{a-bx^2}}$ και έχουμε:

$$\int \frac{dx}{x\sqrt{a-bx^2}} = \int \frac{-\sqrt{\frac{a}{b}} \sec h \theta \cdot \tanh \theta \cdot d\theta}{\sqrt{\frac{a}{b}} \sec h \theta \cdot \sqrt{a-b\left(\sqrt{\frac{a}{b}} \sec h \theta\right)^2}} = \int \frac{-\tanh \theta \cdot d\theta}{\sqrt{a-a \sec h^2 \theta}} = -\int \frac{\tanh \theta \cdot d\theta}{\sqrt{a}\sqrt{1-\sec h^2 \theta}}$$

Στο σημείο αυτό κάνουμε χρήση της ταυτότητας $\tanh^2 \theta = 1 - \sec h^2 \theta$ οπότε:

$$\int \frac{dx}{x\sqrt{a-bx^2}} = -\int \frac{d\theta}{\sqrt{a}} = -\frac{\theta}{\sqrt{a}} + c_1 \quad (\eta)$$

Όπου c_1 είναι μια σταθερά ολοκλήρωσης.

Εφαρμόζουμε τώρα την σχέση (η) στην (ζ) για $a=1$, $b=\frac{1}{2}$ και $Q = \sqrt{\frac{a}{b}} \operatorname{sech} \theta$

άρα προκύπτει:

$$-\frac{\theta}{\sqrt{a}} = \tau - \tau_0 \Rightarrow \theta = -(\tau - \tau_0) \text{ και}$$

$$Q(\tau) = \sqrt{2} \operatorname{sech}[-(\tau - \tau_0)] \Rightarrow Q(\tau) = \sqrt{2} \operatorname{sech}(\tau - \tau_0)$$

Για $\tau_0 = 0$ έχουμε $Q(\tau) = \sqrt{2} \operatorname{sech} \tau$. Αντικαθιστούμε το $Q(\tau)$ στην σχέση (I).

$$F(\xi) = \left| \frac{\Lambda}{M} \right|^{\frac{1}{2}} Q(\tau) = \left| \frac{\Lambda}{M} \right|^{\frac{1}{2}} Q(|\Lambda|^{\frac{1}{2}} \cdot \xi)$$

$$F(x - cz) = \left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{\frac{1}{2}} \cdot \sqrt{2} \operatorname{sech} \left[\left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{\frac{1}{2}} \cdot (x - cz) \right]$$

Η συνάρτηση αυτή είναι πραγματική και αναπαριστά το πλάτος της κυματικής ταλάντωσης. Αντικαθιστώ την τιμή του $F(x - cz)$ στην λύση της διαφορικής εξίσωσης οπότε:

$$u(x, z) = F(x - cz) \cdot e^{i(kx - \omega z)}$$

$$u(x, z) = \left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{\frac{1}{2}} \cdot \sqrt{2} \operatorname{sech} \left[\left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{\frac{1}{2}} \cdot (x - cz) \right] \cdot e^{i(kx - \omega z)} \quad (3.7)$$

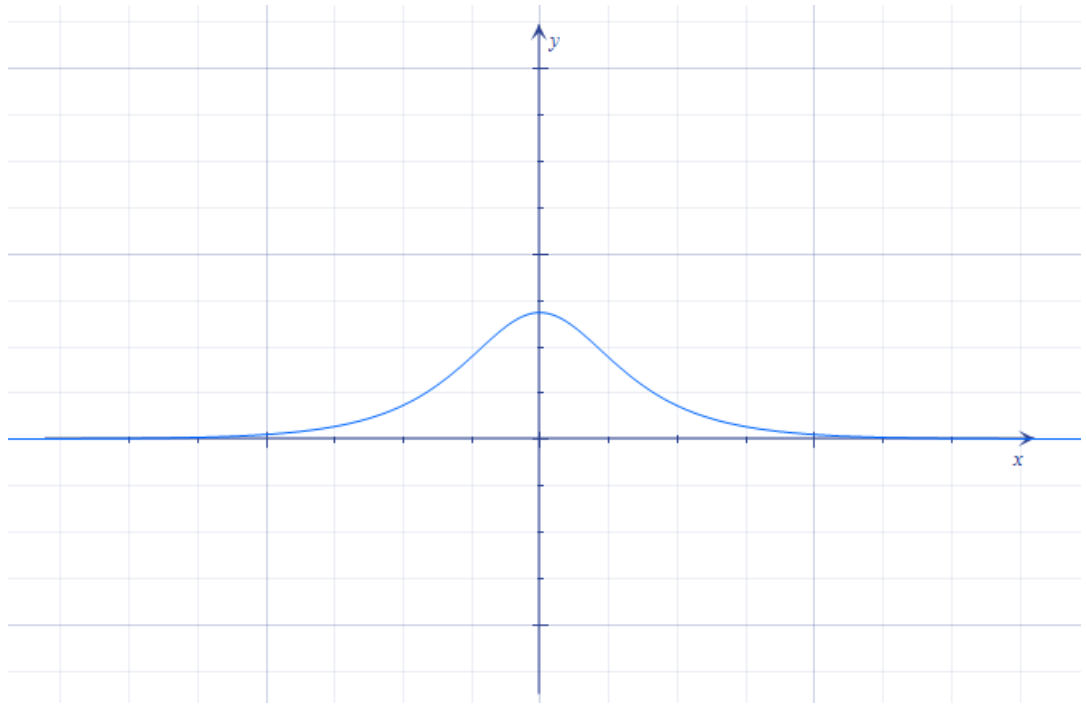
Η σχέση 3.7 είναι η γενική λύση της διαφορικής εξίσωσης NLS.

3.2 Ο ρόλος της σταθεράς v στην λύση της διαφορικής εξίσωσης NLS

Από την εξίσωση 3.7 διαπιστώνουμε ότι η σταθερά v παίζει καθοριστικό ρόλο στην συνάρτηση $F(x - cz)$, όπου για $0 \leq v \leq \frac{\omega}{k^2}$ η εξίσωση έχει λύση. Για διαφορετικές τιμές του v η συνάρτηση τείνει στο μηδέν και είναι αδύνατο να υπολογίσουμε τις λύσεις της με το προγραμματιστικό πρόγραμμα Mathematica 6.0. Η συνάρτηση $F(x - cz)$ λαμβάνοντας υπόψη και την σχέση (γ) $c = 2kv$ γίνεται:

$$F(x - cz) = F(x - 2kvz) = \left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{1/2} \cdot \sqrt{2} \operatorname{sech} \left[\left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{1/2} \cdot (x - 2kvz) \right]$$

Στο πρώτο κομμάτι της συνάρτησης η τιμή του $\left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{1/2} \geq 0$ για οποιοδήποτε τιμή του v . Το $\operatorname{sech} x$ έχει γραφική παράσταση :



Σχήμα 3.7: Η γραφική παράσταση της συνάρτησης $y = \operatorname{sech} x$

Με την βοήθεια του παραπάνω διαγράμματος και λαμβάνοντας υπόψη ότι το $\sigma = -1$ οπότε το $v \geq 0$, μπορούμε να κατανοήσουμε γιατί οι λύσεις της εξίσωσης NLS τείνουν στο μηδέν και είναι αδύνατο να τις υπολογίσουμε, όταν η σταθερά v είναι εκτός του πεδίου $\left[0, \frac{\omega}{k^2} \right]$. Ο λόγος είναι ότι όταν η σταθερά v είναι εκτός του πεδίου $\left[0, \frac{\omega}{k^2} \right]$, ο

συντελεστής του x , $\left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{1/2}$ μεγαλώνει, οπότε έχουμε $\operatorname{sech} \left[\left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{1/2} x \right] \rightarrow 0$ καθώς

$\left| \frac{\omega - k^2 v}{s} \right|^{1/2} x \rightarrow +\infty$ και μάλιστα με πιο γρήγορο ρυθμό.

Όταν η σταθερά v είναι εντός του πεδίου $\left[0, \frac{\omega}{k^2}\right]$, η ποσότητα $\left|\frac{\omega - k^2 v}{s}\right|^{1/2} x \rightarrow 0$ και το $\operatorname{sech}\left[\left|\frac{\omega - k^2 v}{s}\right|^{1/2} x\right] \rightarrow 1$. Οπότε προκύπτει ότι η τιμή της συνάρτησης $F(x - 2kvz)$ είναι πραγματικός αριθμός και ίσος με το μηδέν μόνο όταν η σταθερά $v = \frac{\omega}{k^2}$.

Παρακάτω θα δούμε κάποια παραδείγματα στα οποία θα δώσουμε διάφορες τιμές στη σταθερά v , ενώ έχουμε διατηρήσει αμετάβλητες τις τιμές όλων των υπολοίπων σταθερών που μετέχουν στην εξίσωση NLS.

3.3 Αριθμητικές εξομοιώσεις για τη λύση σολιτονίου

Στην παράγραφο αυτή θα παραθέσουμε μια σειρά αριθμητικών παραδειγμάτων της διαφορικής εξίσωσης NLS, τα οποία θα μπορέσουν να μας δώσουν σαφή εικόνα για τον ρόλο που κατέχει η σταθερά v στην λύση της εν λόγω εξίσωσης. Οι τιμές αυτές θα είναι εντός του πεδίου τιμών $\left[0, \frac{\omega}{k^2}\right]$.

Για $\omega = 2$, $k = 1$ και $s = 1$, οι τιμές της μεταβλητής v θα είναι εντός του πεδίου ορισμού $[0, 2]$. Η λύση της εξίσωσης NLS παίρνει την μορφή:

$$u(x, z) = \sqrt{(4 - 2v)} \operatorname{sech}[x - cz] e^{i(x - 2z)}$$

Αν στην εξίσωση αυτή αντικαταστήσω και $c = 2kv = 2v$, έχουμε:

$$u(x, z) = \sqrt{4 - 2v} \operatorname{sech}\left[\sqrt{2 - v}(x - 2vz)\right] e^{i(x - 2z)} \quad (3.8)$$

Η αρχική συνθήκη, για $z = 0$, της παραπάνω εξίσωσης είναι:

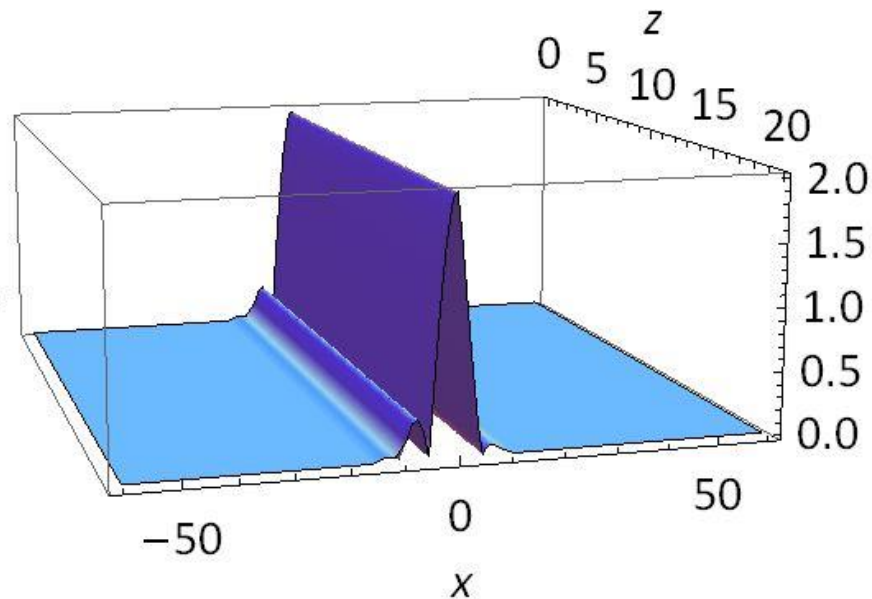
$$u(x, 0) = \sqrt{4 - 2v} \cdot \operatorname{sech}\left[\sqrt{2 - v} \cdot x\right] \cdot e^{ix} \quad (3.9)$$

A. Μελέτη της Λύσης της εξίσωσης NLS για: $\nu = 0$

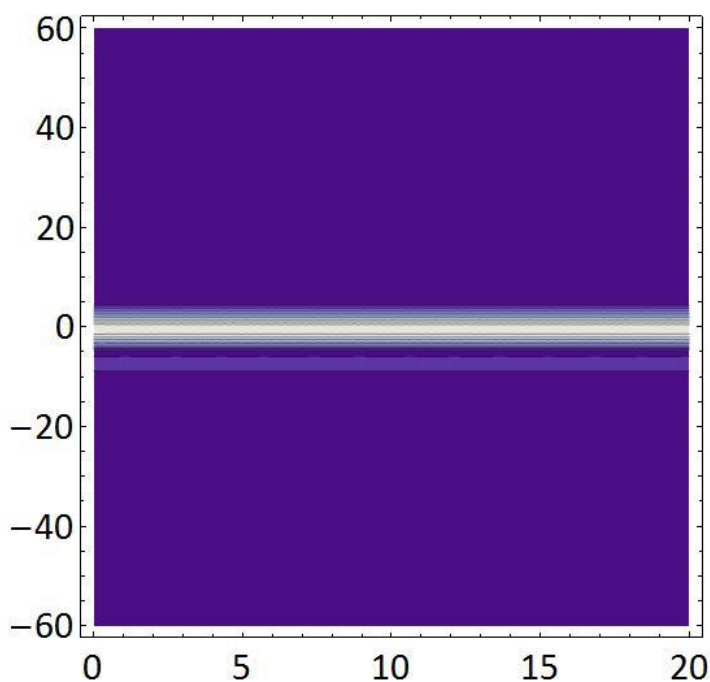
Με την χρήση του προγράμματος Wolfram Mathematica 6.0 λύσαμε την εξίσωση NLS για τις σταθερές $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$, $\nu = 0$. Από την σχέση 3.9 η αρχική συνθήκη λαμβάνει την μορφή:

$$u(x,0) = 2 \operatorname{sech}[\sqrt{2}x] e^{ix}$$

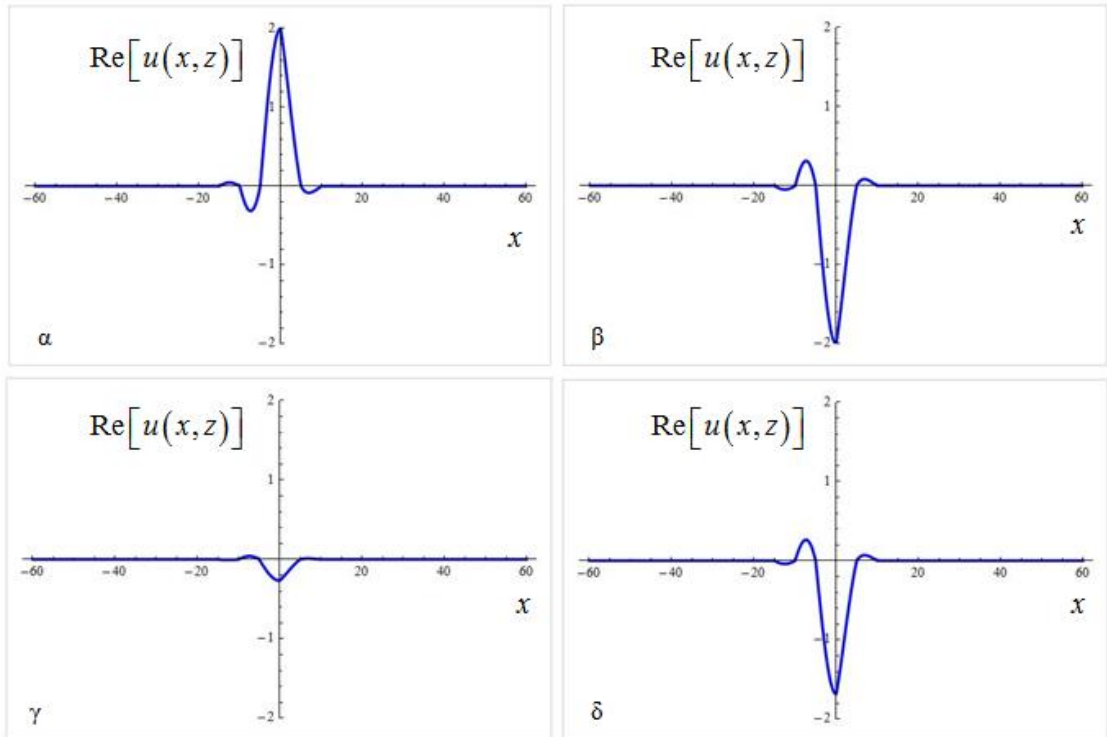
Οι εικόνες που λαμβάνουμε από το Mathematica είναι:



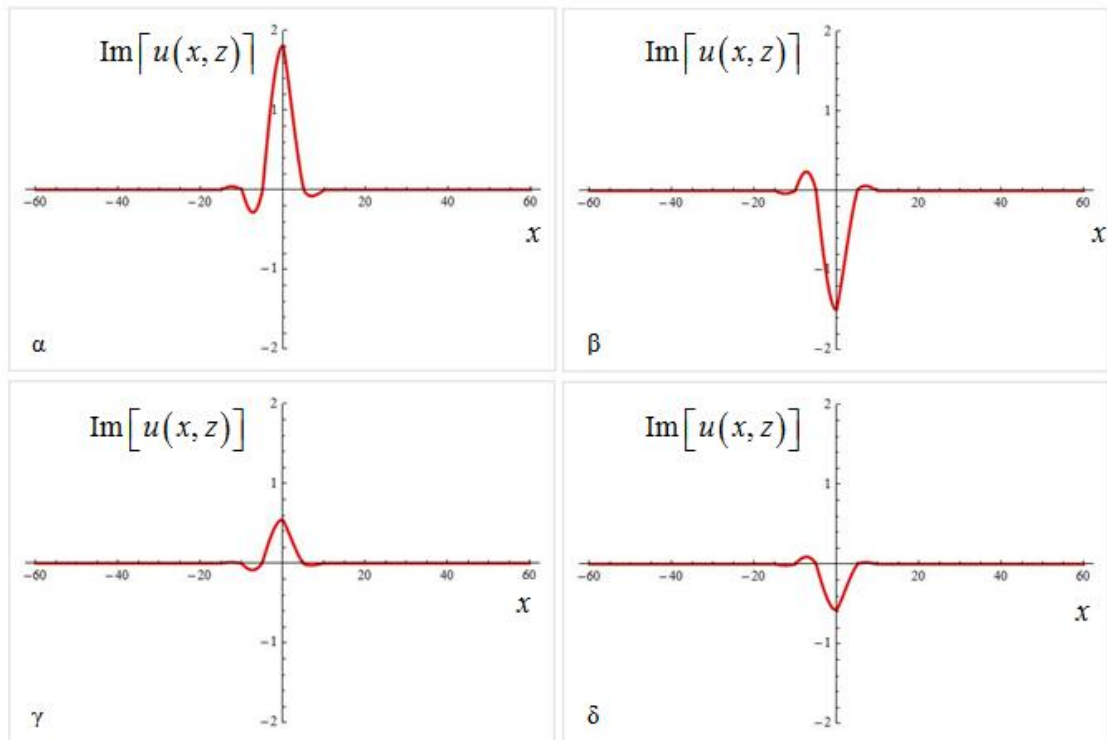
Σχήμα 3.8: Μια 3D απεικόνιση της λύσης του προβλήματος NLS, για $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$ και $\nu = 0$, όπου στον άξονα του ύψους τοποθετήθηκε το μέγεθος $|u(x,z)|$.



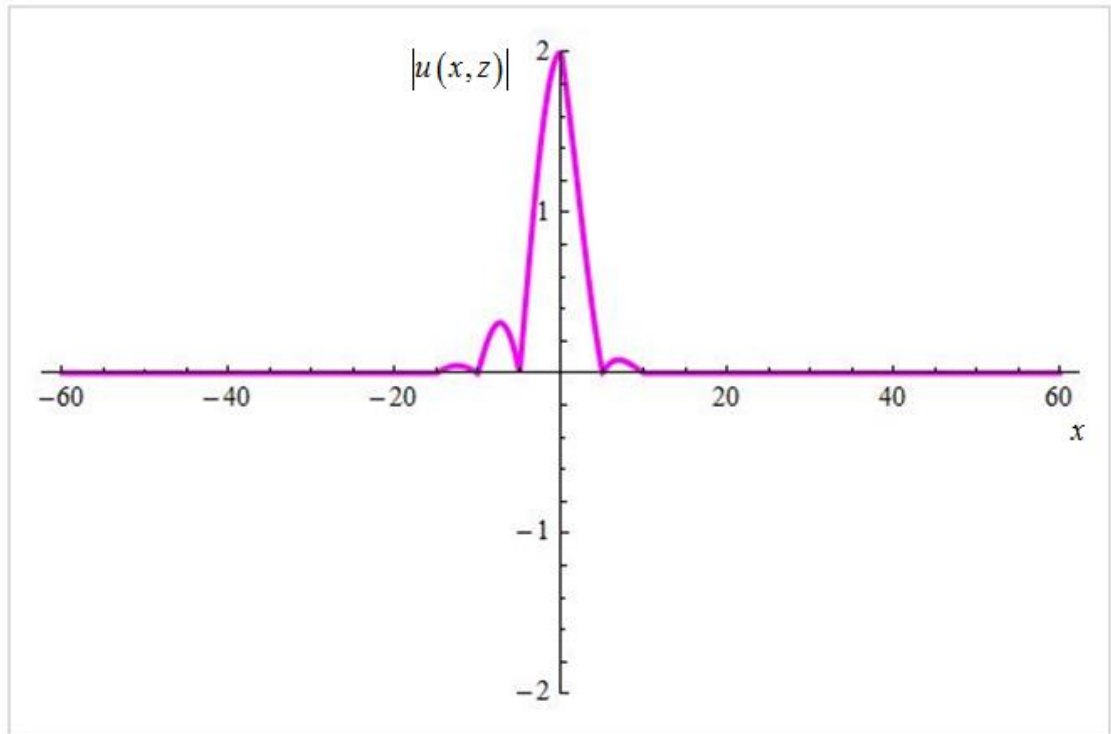
Σχήμα 3.9: Προβολή της 3D απεικόνιση της λύσης $|u(x,z)|$ στο επίπεδο xz.



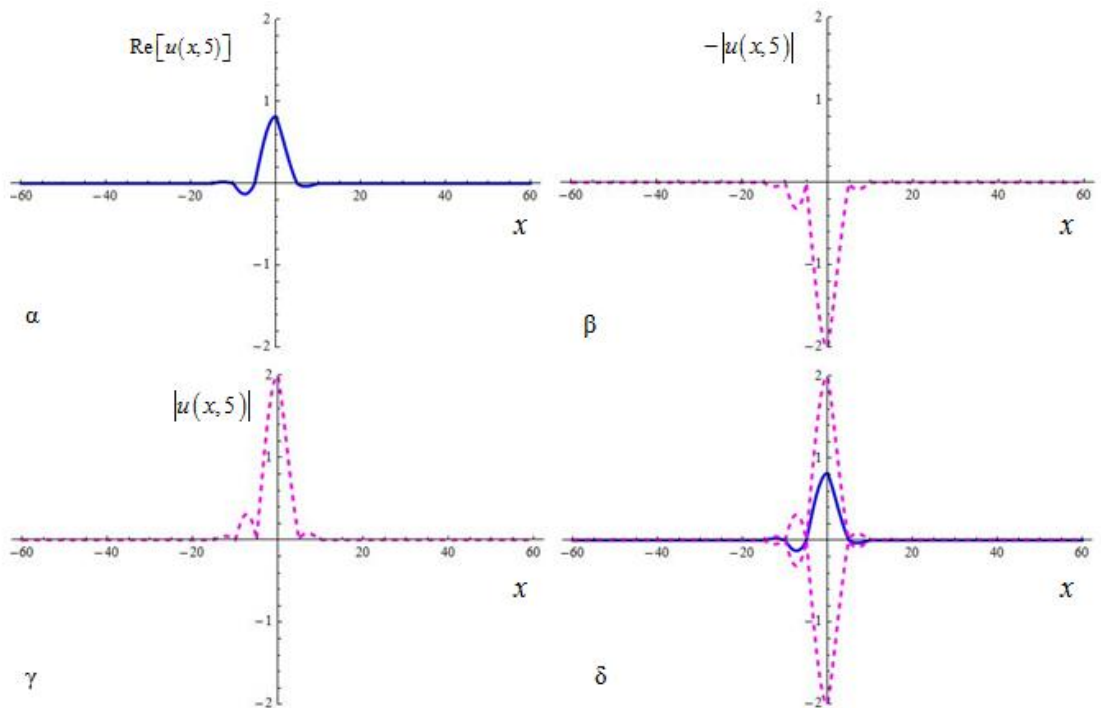
Σχήμα 3.10: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



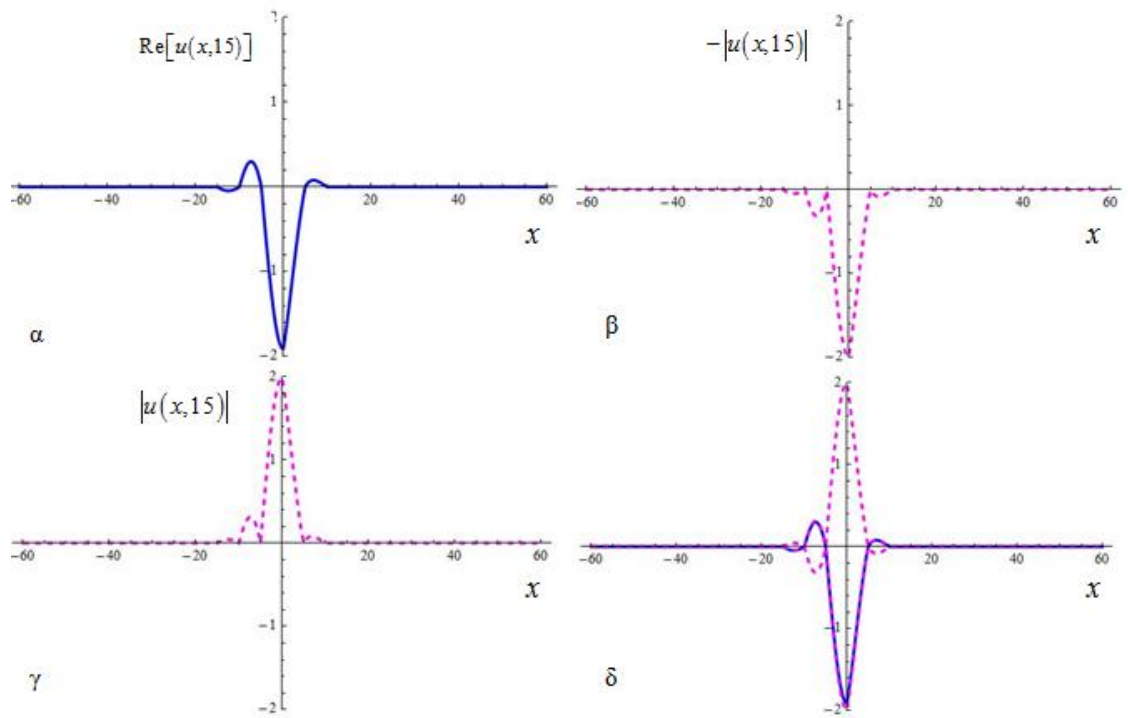
Σχήμα 3.11: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το φανταστικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



Σχήμα 3.12: Στο παραπάνω γράφημα απεικονίζεται το απόλυτο της λύσης $u(x, z)$ που ταξιδεύει στον άξονα x .



Σχήμα 3.13: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 5$.



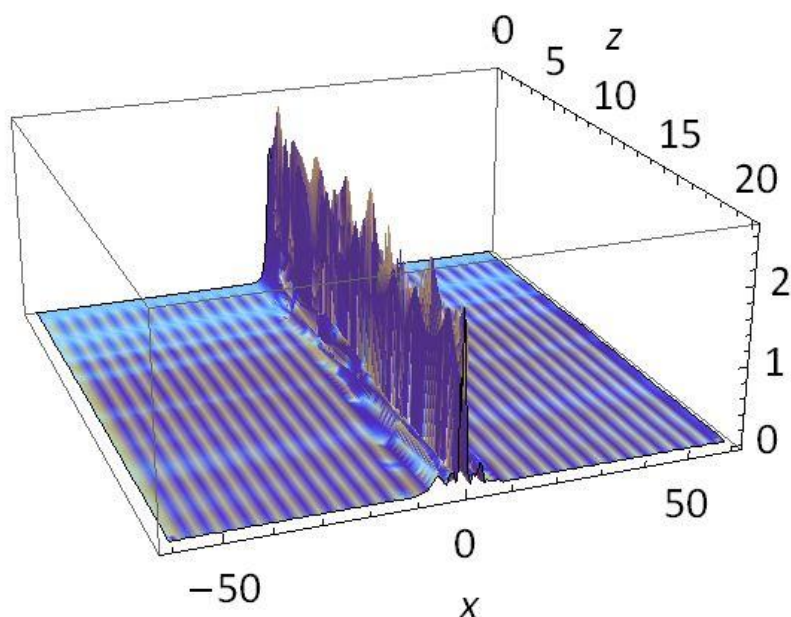
Σχήμα 3.14: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 15$.

B. Μελέτη της Λύσης της εξίσωσης NLS για: $v = 1/32$

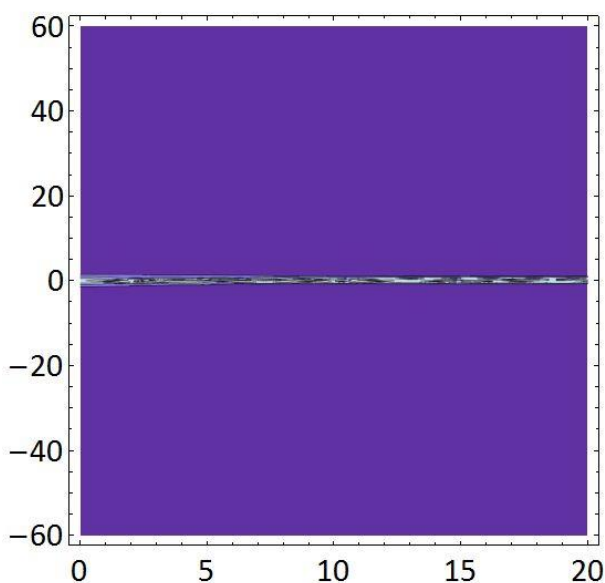
Με την χρήση του προγράμματος Wolfram Mathematica 6.0 λύσαμε την εξίσωση NLS για τις σταθερές $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$, $v = 1/32$. Από την σχέση 3.9 η αρχική συνθήκη λαμβάνει την μορφή:

$$u(x, 0) = \frac{\sqrt{63}}{4} \operatorname{sech} \left[\sqrt{\frac{63}{32}} x \right] e^{ix}$$

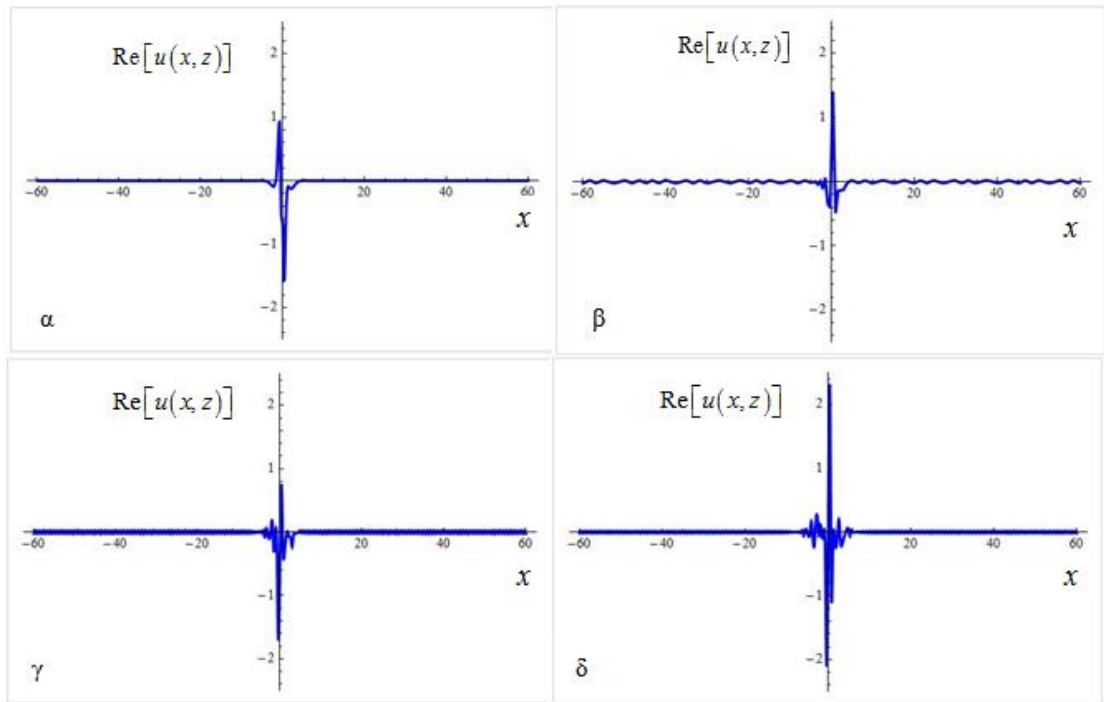
Οι εικόνες που λαμβάνουμε από το Mathematica είναι:



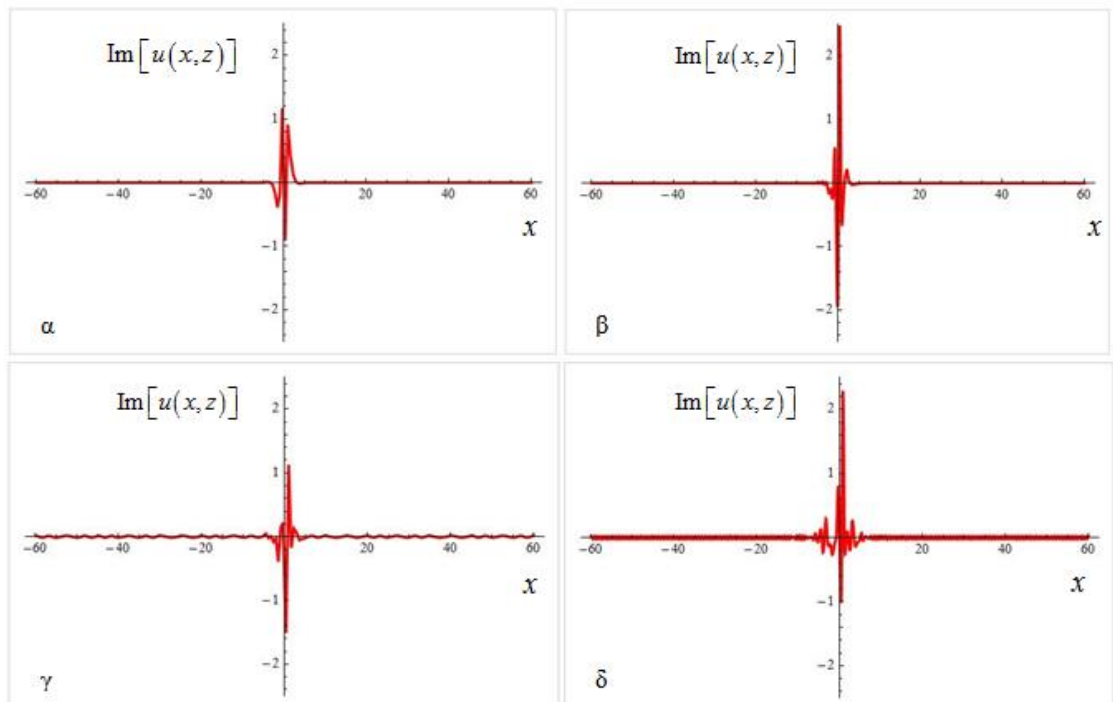
Σχήμα 3.15: Μια 3D απεικόνιση της λύσης του προβλήματος NLS, για $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$ και $v = 1/32$, όπου στον άξονα του ύψους τοποθετήθηκε το μέγεθος $|u(x, z)|$.



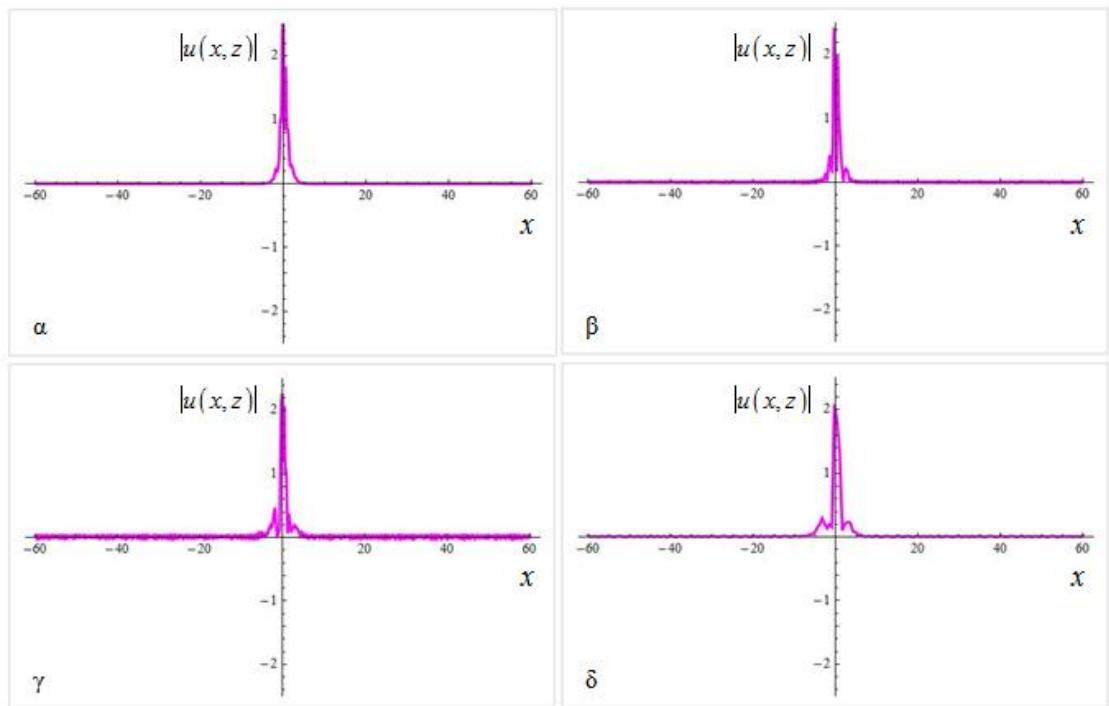
Σχήμα 3.16: Προβολή της 3D απεικόνιση της λύσης $|u(x, z)|$ στο επίπεδο xz.



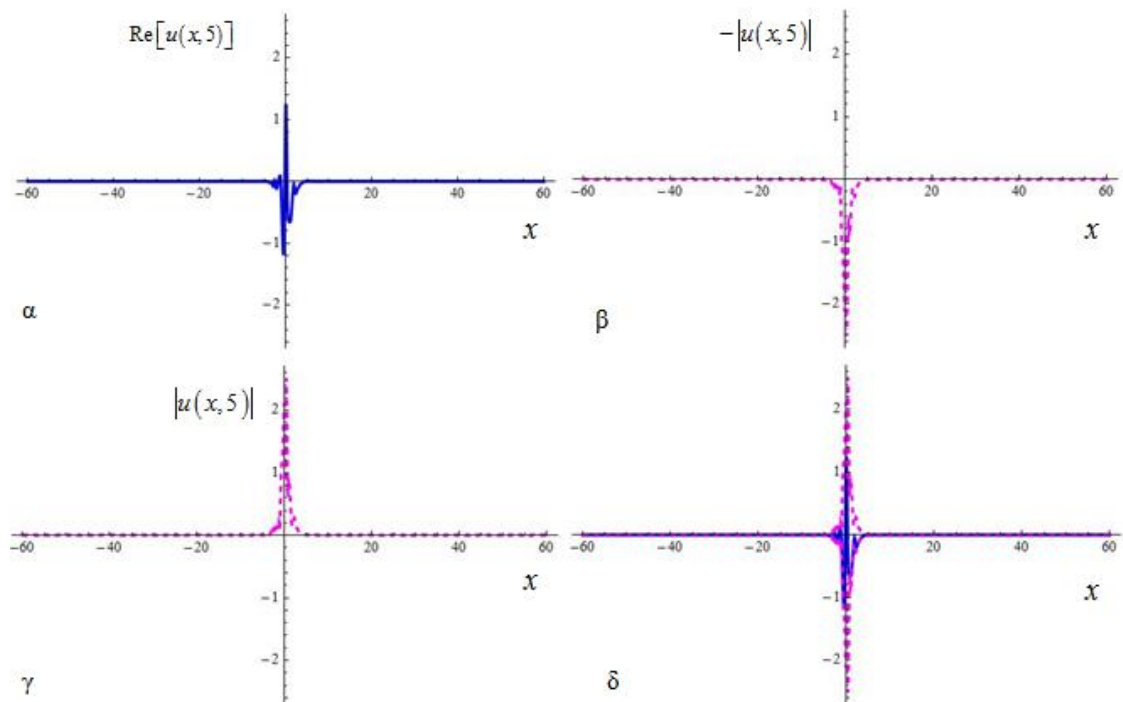
Σχήμα 3.17: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



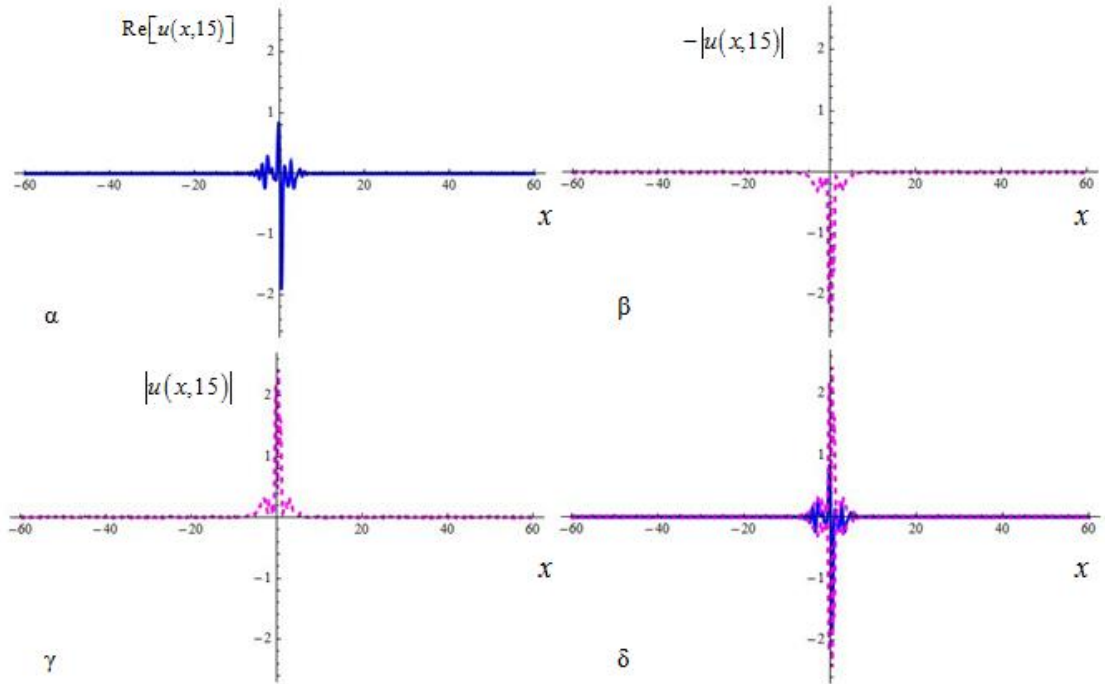
Σχήμα 3.18: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το φανταστικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



Σχήμα 3.19: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το απόλυτο της λύσης $u(x, z)$ στον χώρο x .



Σχήμα 3.20: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 5$.



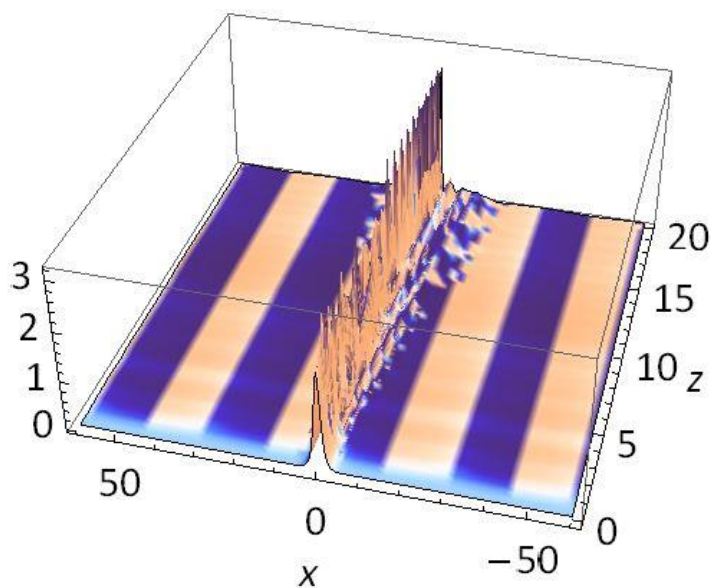
Σχήμα 3.21: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 15$.

Γ. Μελέτη της Λύσης της εξίσωσης NLS για: $\nu = 1/16$

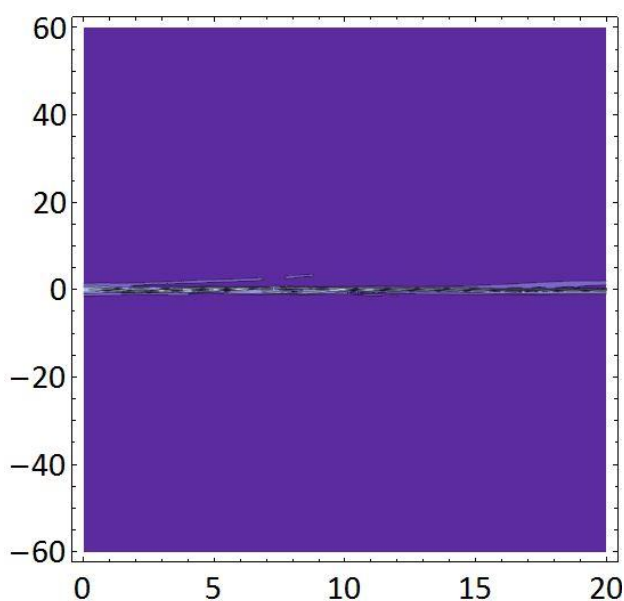
Με την χρήση του προγράμματος Wolfram Mathematica 6.0 λύσαμε την εξίσωση NLS για τις σταθερές $\omega = 2, k = 1, s = 1, \nu = 1/16$. Από την σχέση 3.9 η αρχική συνθήκη λαμβάνει την μορφή:

$$u(x, 0) = \frac{\sqrt{62}}{4} \operatorname{sech} \left[\frac{\sqrt{31}}{4} x \right] e^{ix}$$

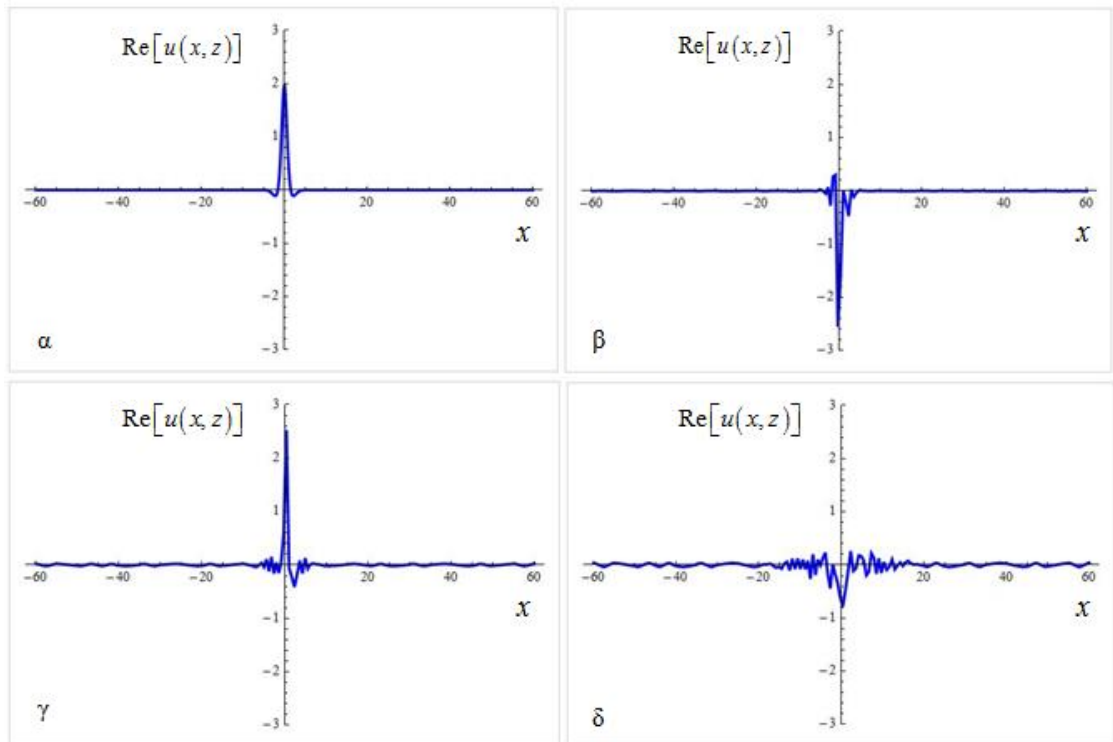
Οι εικόνες που λαμβάνουμε από το Mathematica είναι:



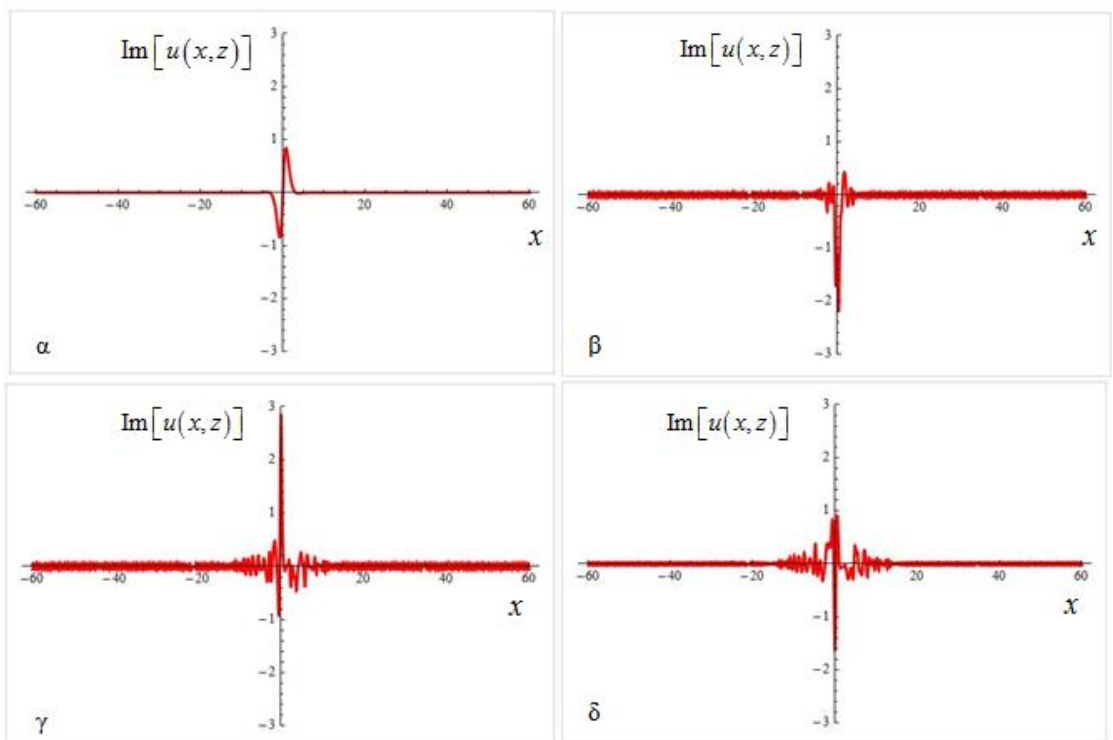
Σχήμα 3.22: Μια 3D απεικόνιση της λύσης του προβλήματος NLS, για $\omega = 2, k = 1, s = 1$ και $\nu = 1/16$, όπου στον άξονα του ύψους τοποθετήθηκε το μέγεθος $|u(x, z)|$.



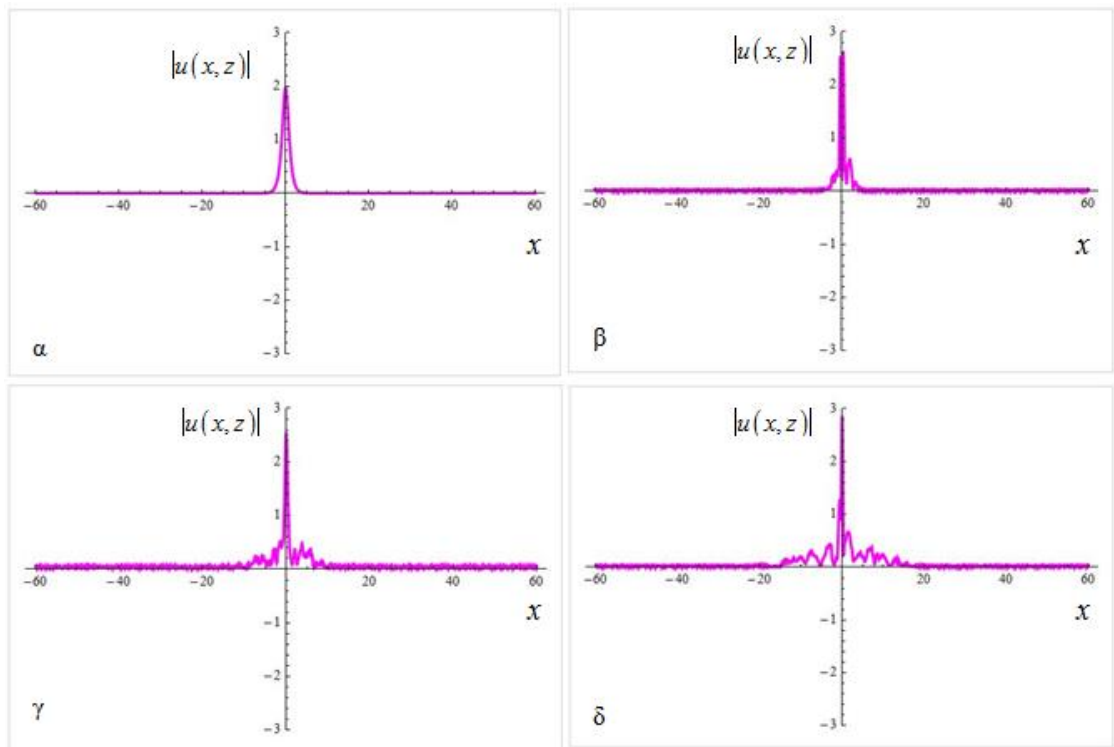
Σχήμα 3.23: Προβολή της 3D απεικόνιση της λύσης $|u(x, z)|$ στο επίπεδο xz.



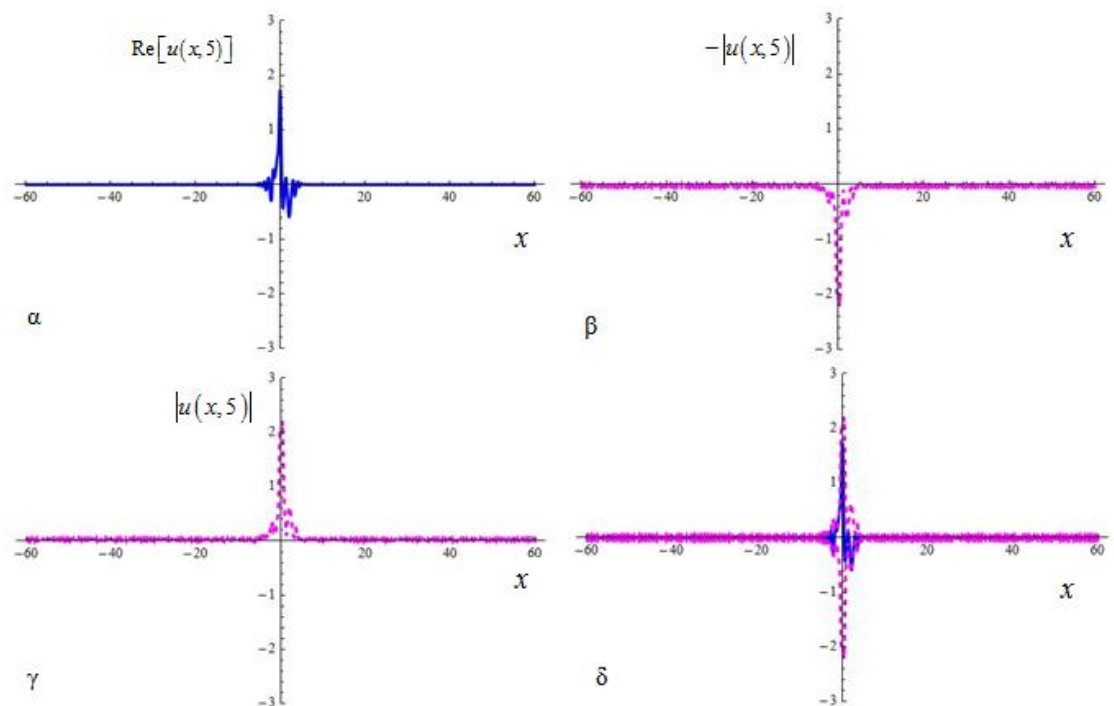
Σχήμα 3.24: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



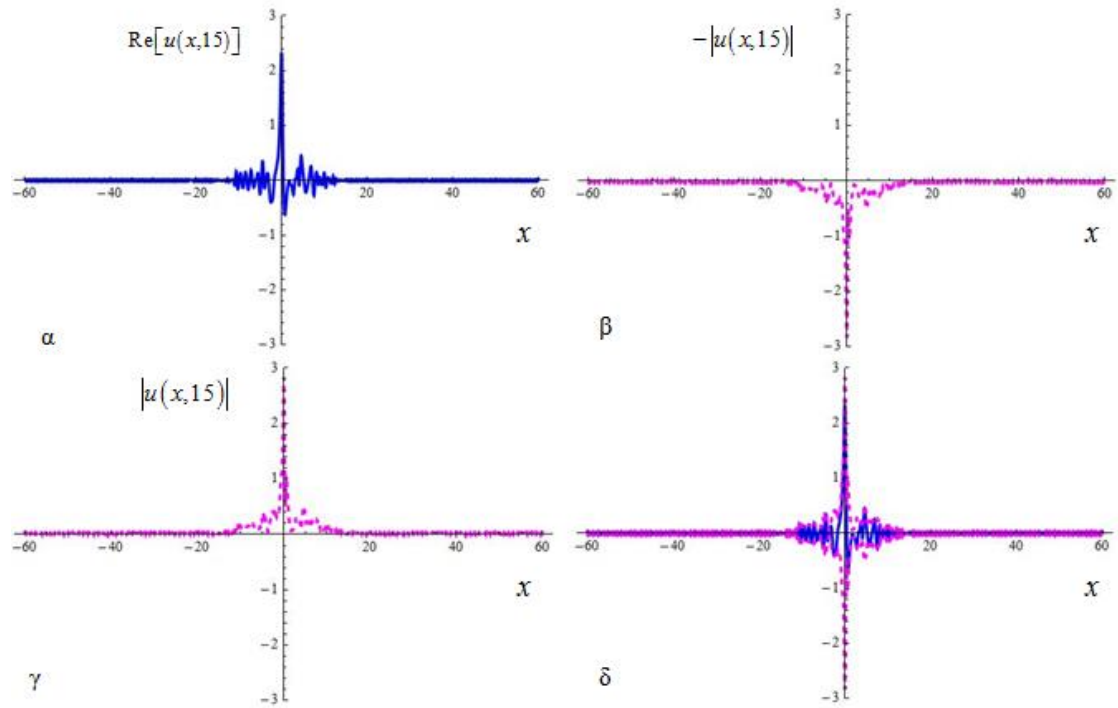
Σχήμα 3.25: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το φανταστικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



Σχήμα 3.26: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το απόλυτο της λύσης $u(x, z)$ στον χώρο x .



Σχήμα 3.27: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z=5$.



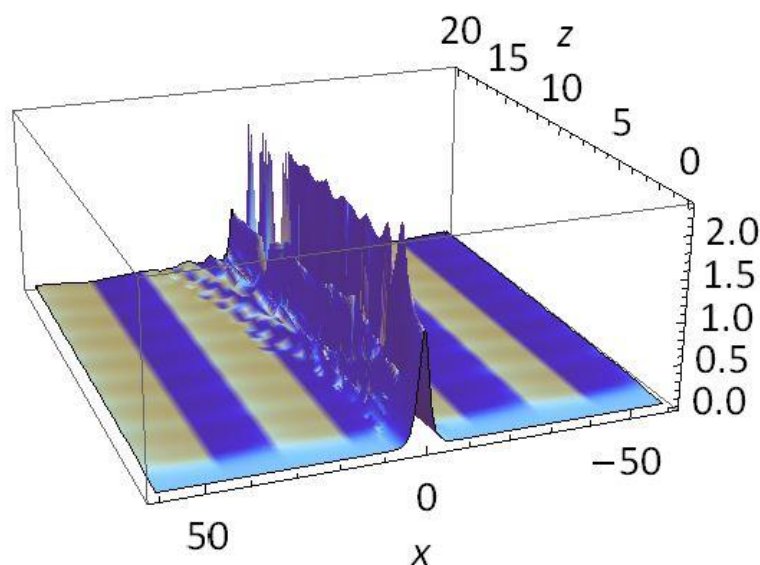
Σχήμα 3.28: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμότυπο $z = 15$.

Δ. Μελέτη της Λύσης της εξίσωσης NLS για: $\nu = \frac{1}{8}$

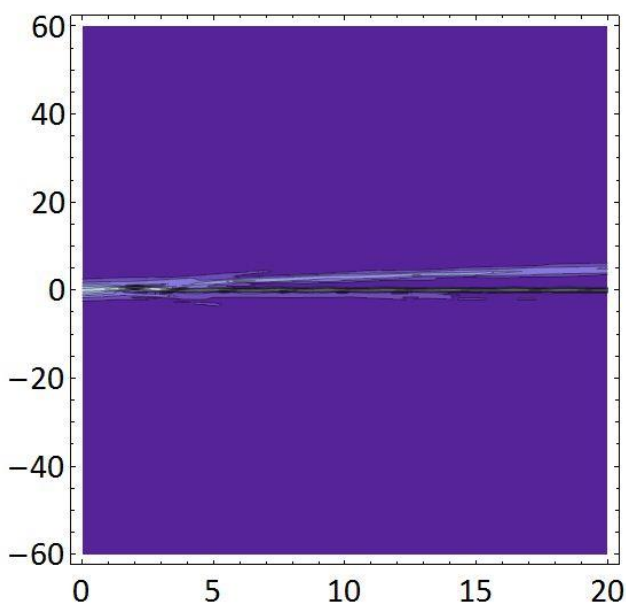
Με την χρήση του προγράμματος Wolfram Mathematica 6.0 λύσαμε την εξίσωση NLS για τις σταθερές $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$, $\nu = \frac{1}{8}$. Από την σχέση 3.9 η αρχική συνθήκη λαμβάνει την μορφή:

$$u(x, 0) = \frac{\sqrt{7}}{2} \operatorname{sech} \left[\sqrt{\frac{7}{8}} x \right] e^{ix}$$

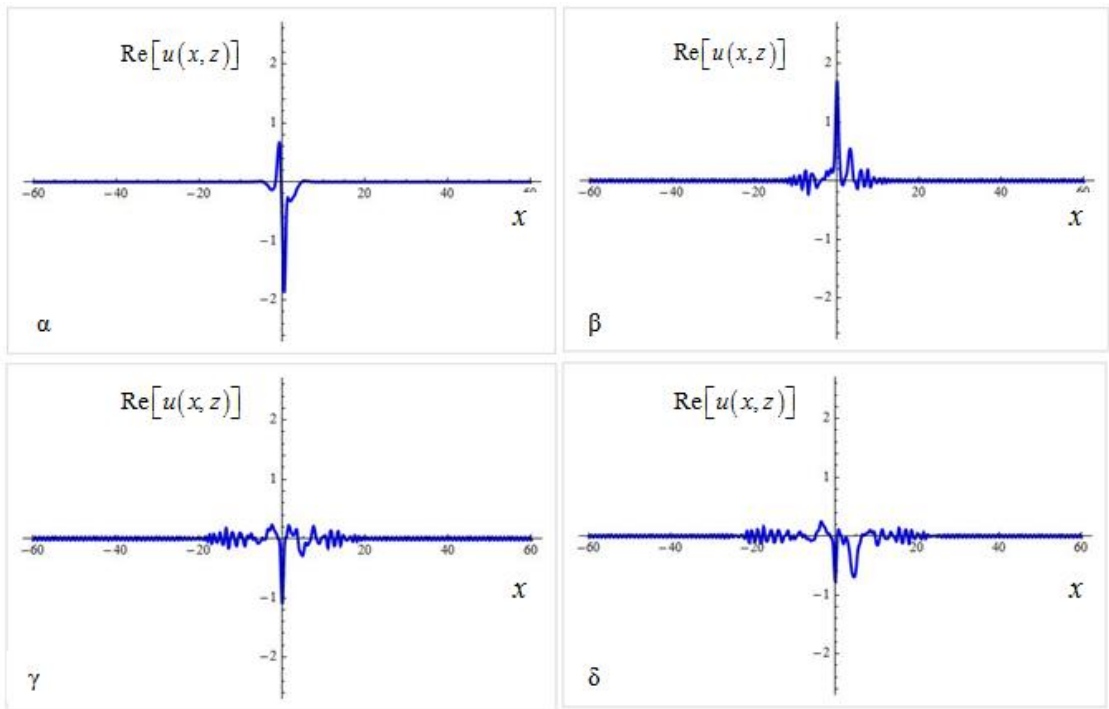
Οι εικόνες που λαμβάνουμε από το Mathematica είναι:



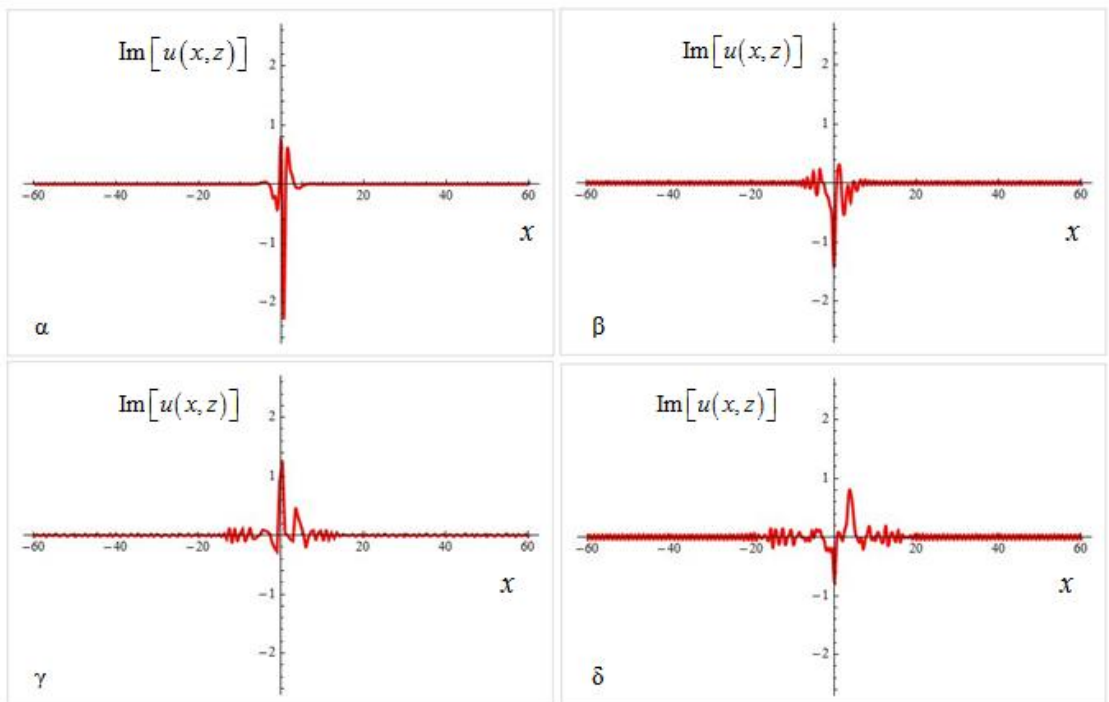
Σχήμα 3.29: Μια 3D απεικόνιση της λύσης του προβλήματος NLS, για $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$ και $\nu = \frac{7}{8}$, όπου στον άξονα του ύψους τοποθετήθηκε το μέγεθος $|u(x, z)|$.



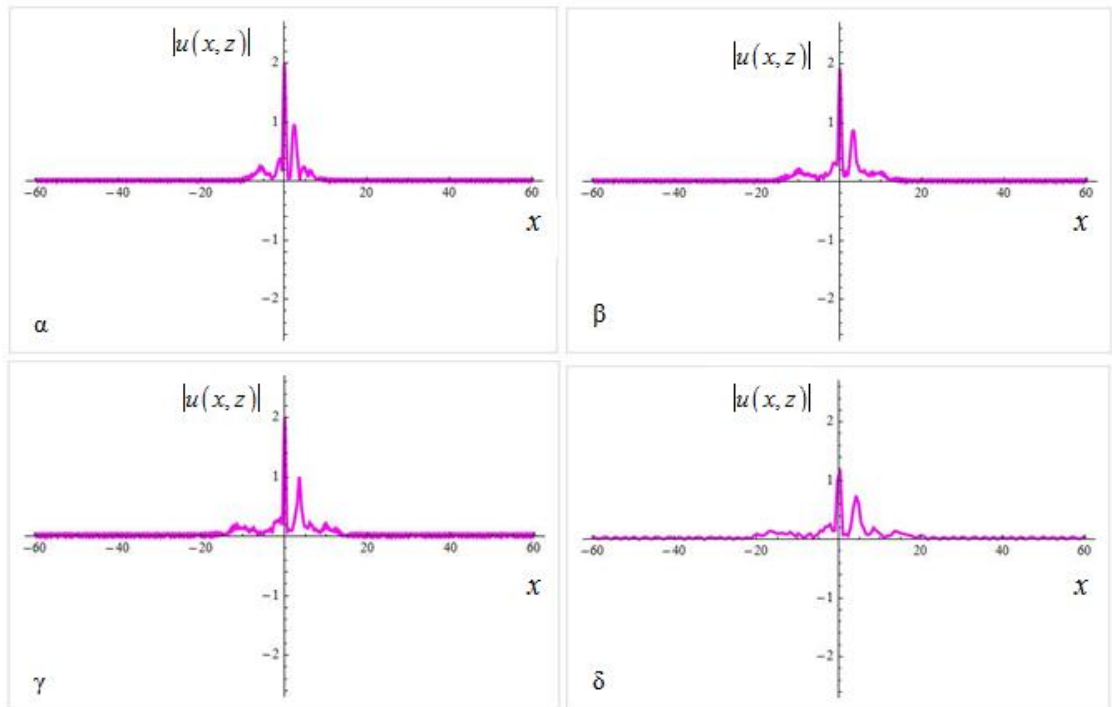
Σχήμα 3.30: Προβολή της 3D απεικόνιση της λύσης $|u(x, z)|$ στο επίπεδο xz.



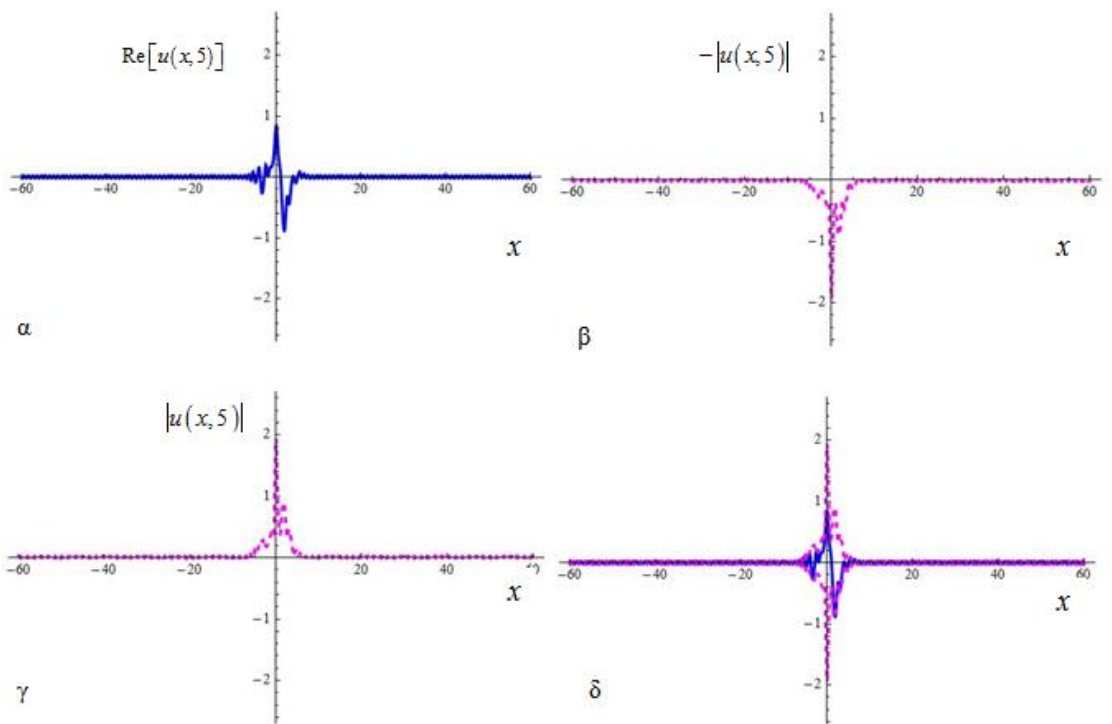
Σχήμα 3.31: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



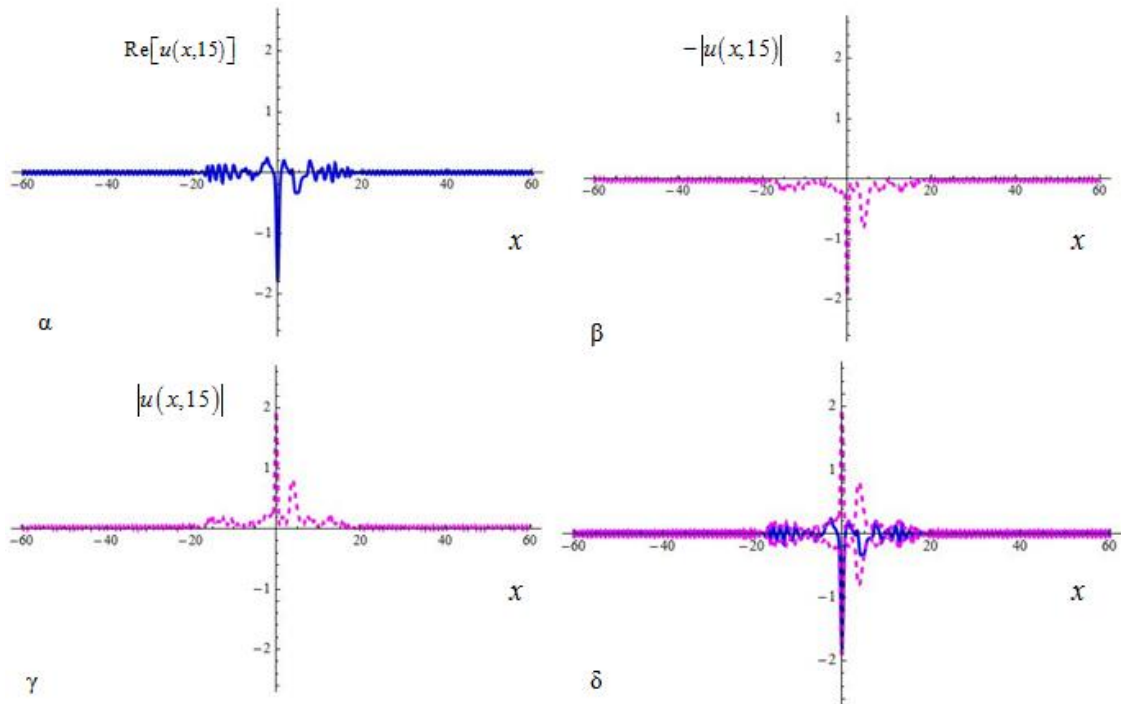
Σχήμα 3.32: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το φανταστικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



Σχήμα 3.33: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το απόλυτο της λύσης $u(x, z)$ στον χώρο x .



Σχήμα 3.34: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 5$.



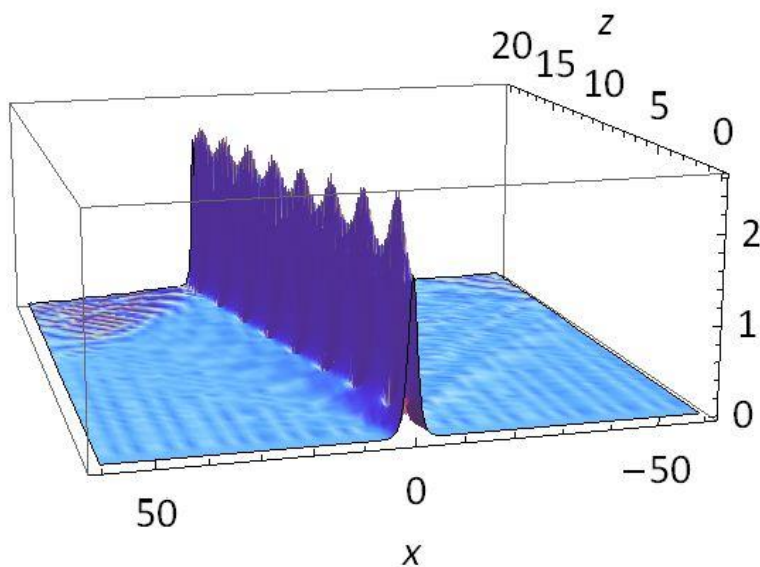
Σχήμα 3.35: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το σινημιότυπο $z = 15$.

Ε. Μελέτη της Λύσης της εξίσωσης NLS για: $v = \frac{1}{2}$

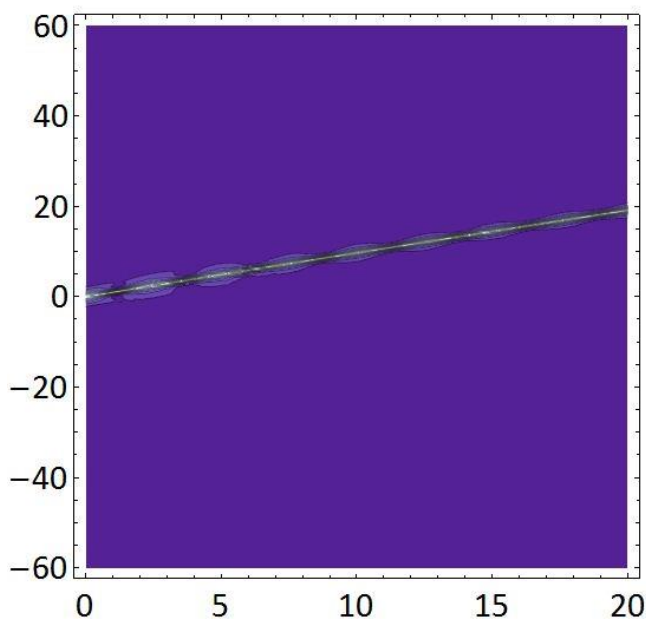
Με την χρήση του προγράμματος Wolfram Mathematica 6.0 λύσαμε την εξίσωση NLS για τις σταθερές $\omega = 2, k = 1, s = 1, v = \frac{1}{2}$. Από την σχέση 3.9 η αρχική συνθήκη λαμβάνει την μορφή:

$$u(x, 0) = \sqrt{3} \operatorname{sech} \left[\sqrt{\frac{3}{2}} x \right] e^{ix}$$

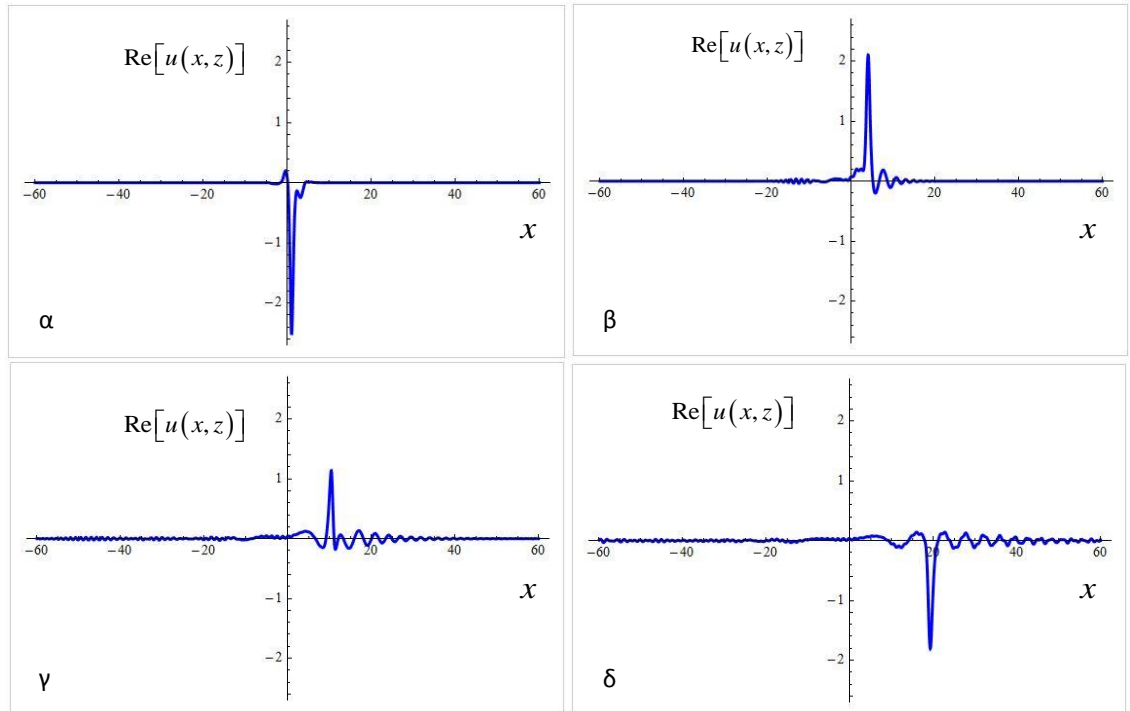
Οι εικόνες που λαμβάνουμε από το Mathematica είναι:



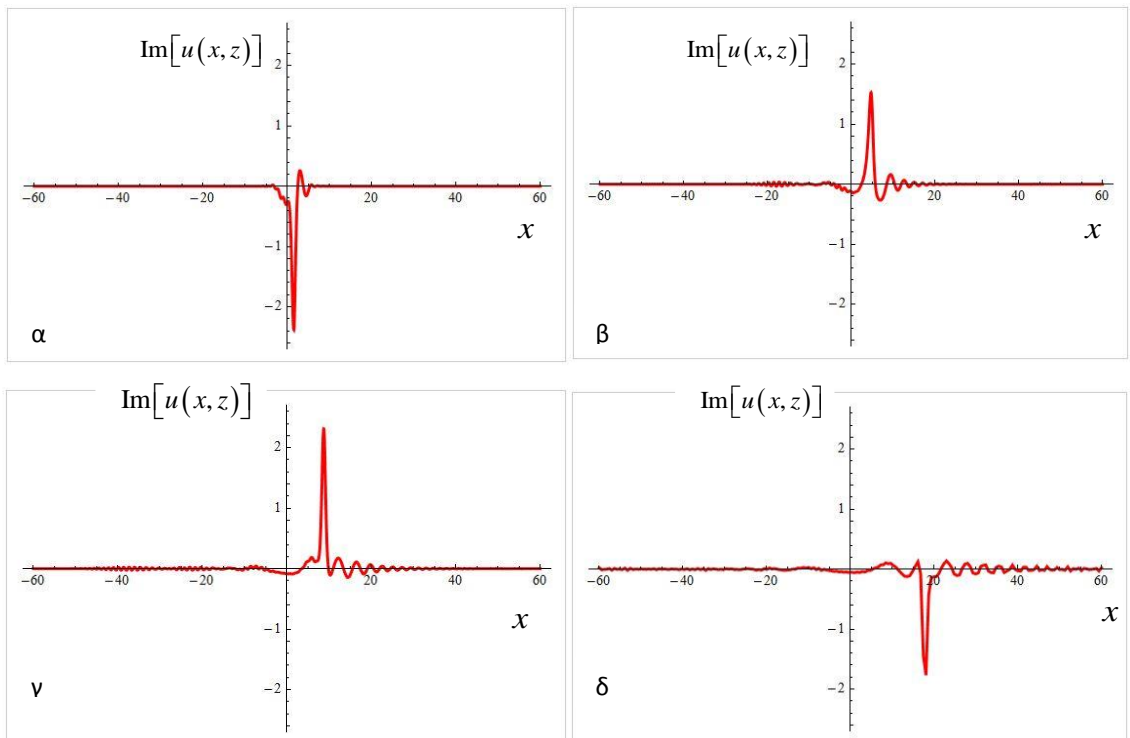
Σχήμα 3.36: Μια 3D απεικόνιση της λύσης του προβλήματος NLS, για $\omega = 2, k = 1, s = 1$ και $v = \frac{1}{2}$, όπου στον άξονα του ύψους τοποθετήθηκε το μέγεθος $|u(x, z)|$.



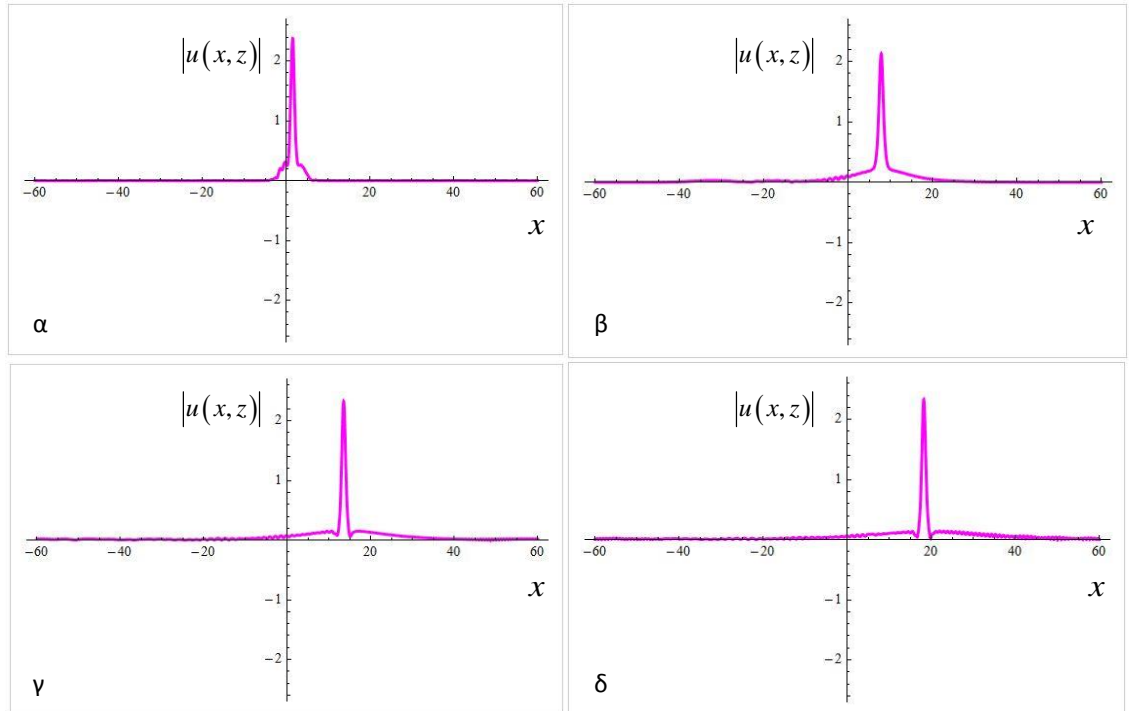
Σχήμα 3.37: Προβολή της 3D απεικόνιση της λύσης $|u(x, z)|$ στο επίπεδο xz.



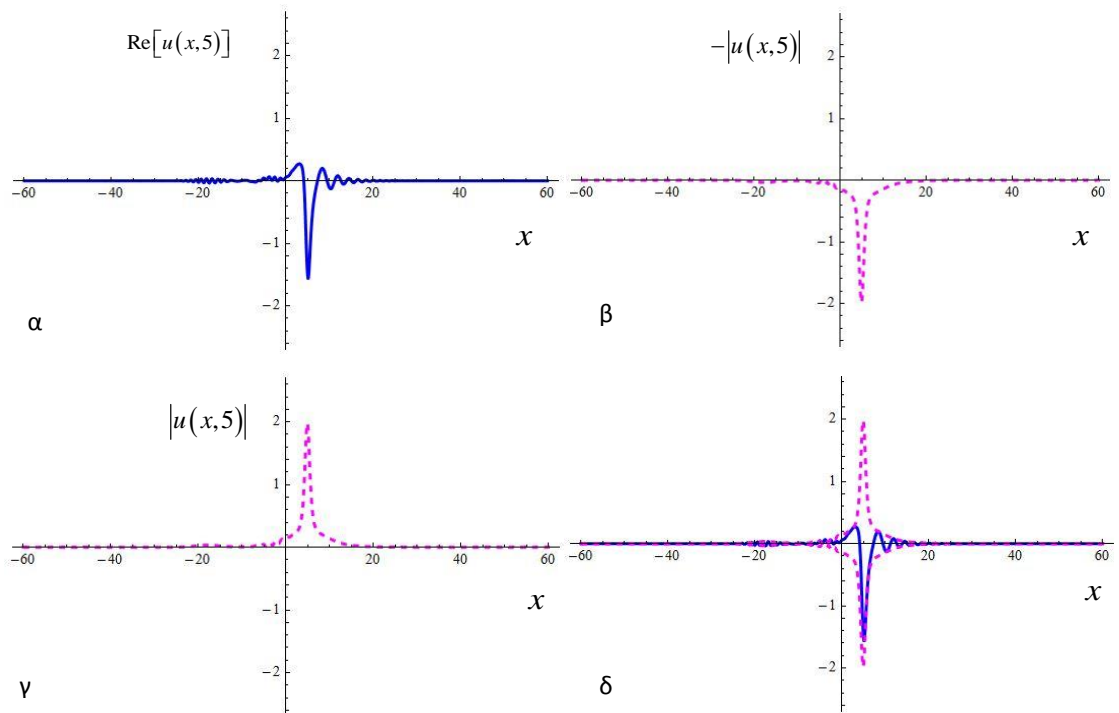
Σχήμα 3.38: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



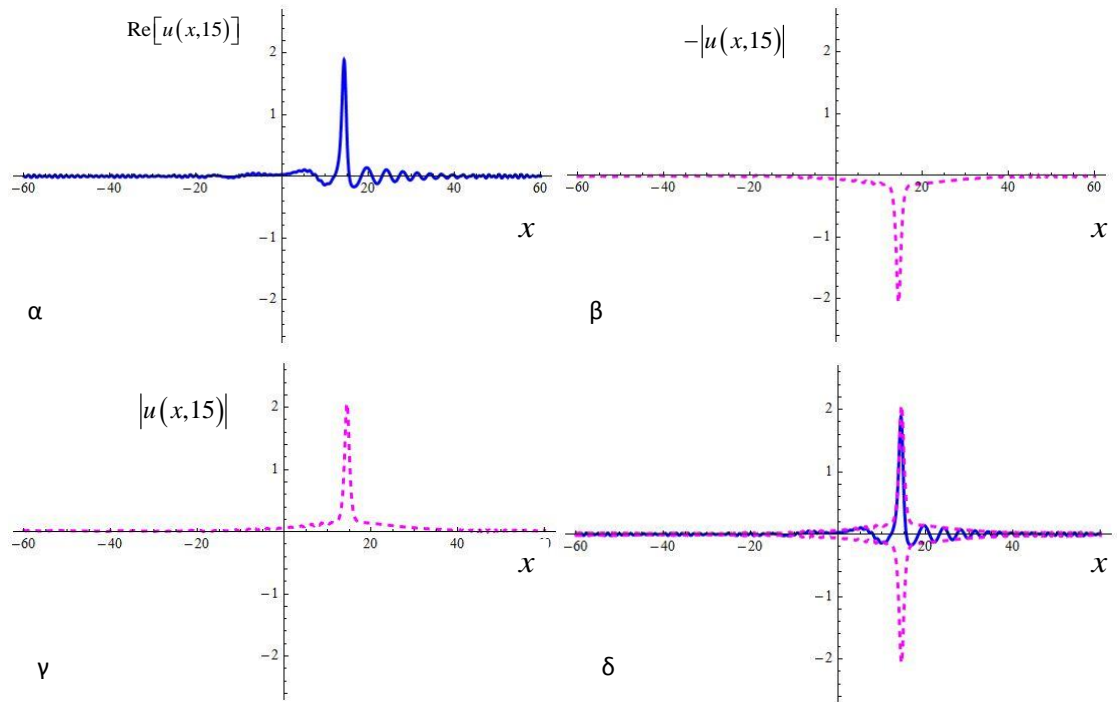
Σχήμα 3.39: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τα τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το φανταστικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



Σχήμα 3.40: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το απόλυτο της λύσης $u(x, z)$ στον χώρο x .



Σχήμα 3.41: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 5$.



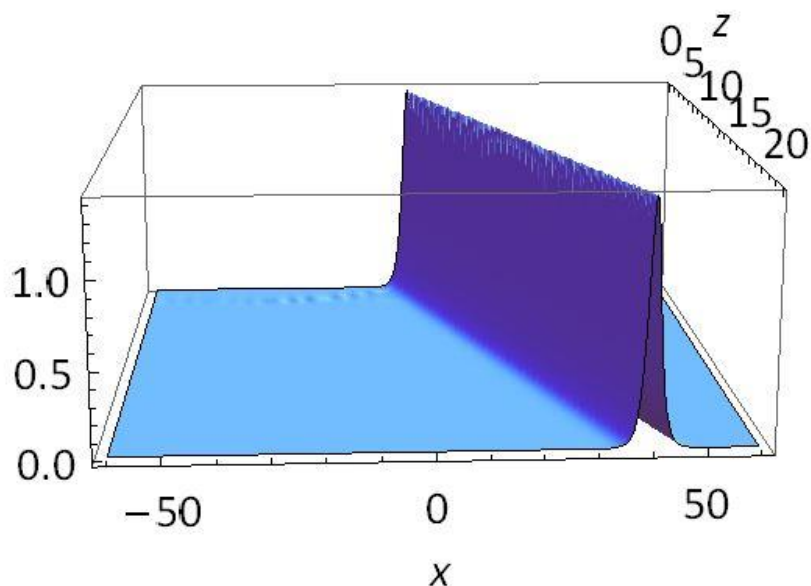
Σχήμα 3.42: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον γόρο x για το στιγμιότυπο $z = 15$.

Z. Μελέτη της Λύσης της εξίσωσης NLS για: $\nu = 1$

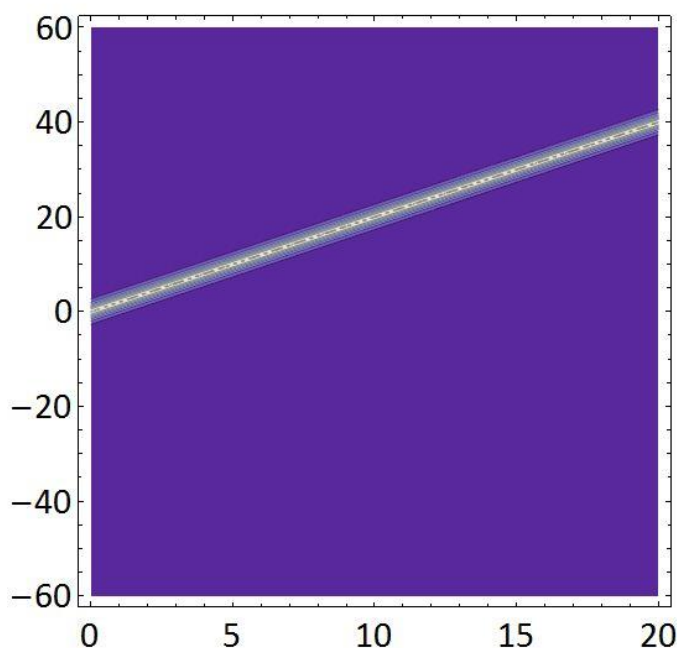
Με την χρήση του προγράμματος Wolfram Mathematica 6.0 λύσαμε την εξίσωση NLS για τις σταθερές $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$, $\nu = 1$. Από την σχέση 3.9 η αρχική συνθήκη λαμβάνει την μορφή:

$$u(x,0) = \sqrt{2} \operatorname{sech} x \cdot e^{ix}$$

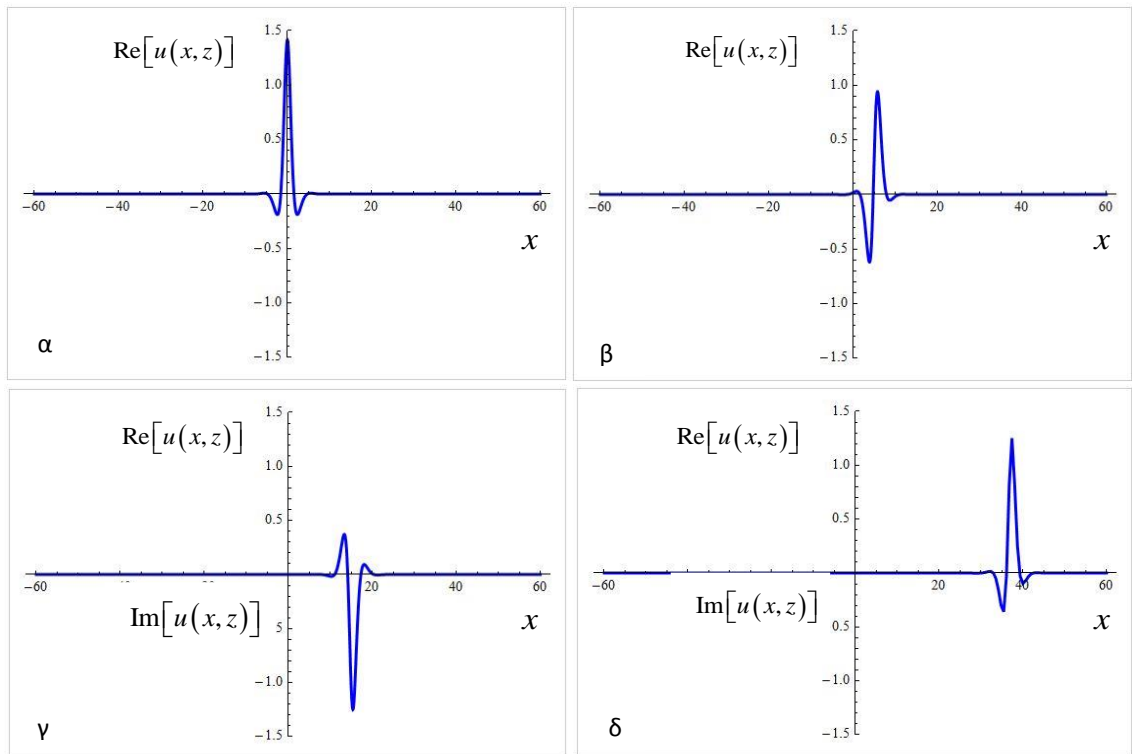
Οι εικόνες που λαμβάνουμε από το Mathematica είναι:



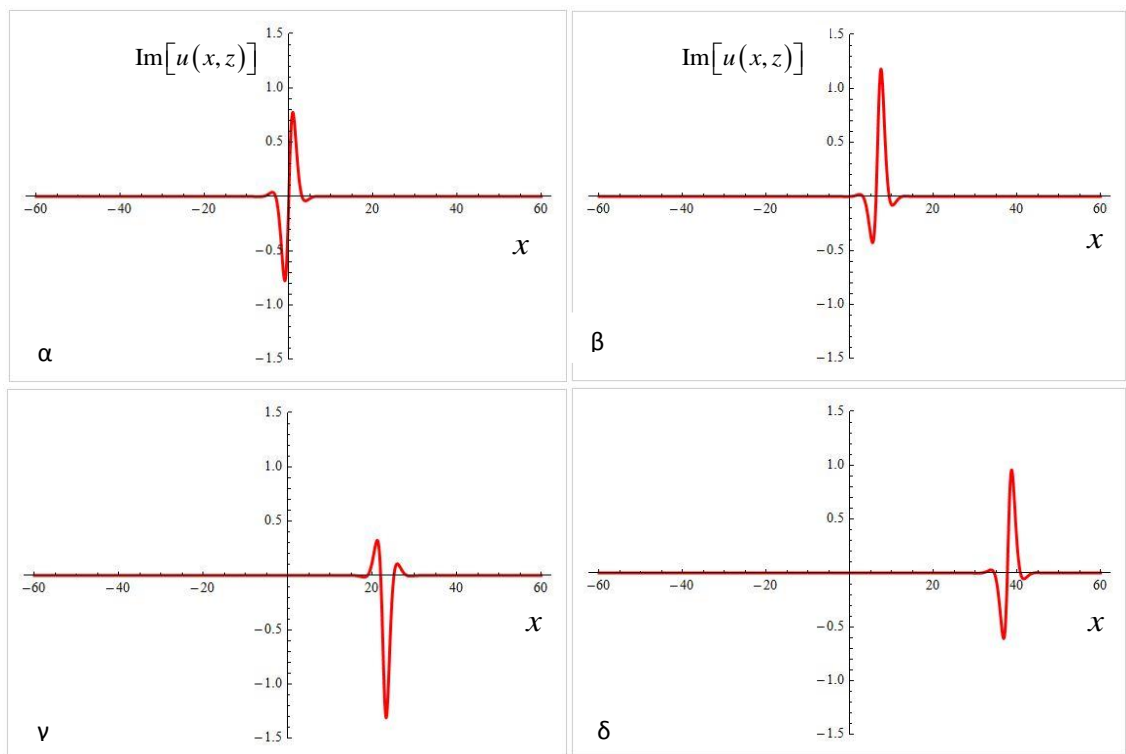
Σχήμα 3.43: Μια 3D απεικόνιση της λύσης του προβλήματος NLS, για $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$ και $\nu = 1$, όπου στον άξονα του ύψους τοποθετήθηκε το μέγεθος $|u(x, z)|$.



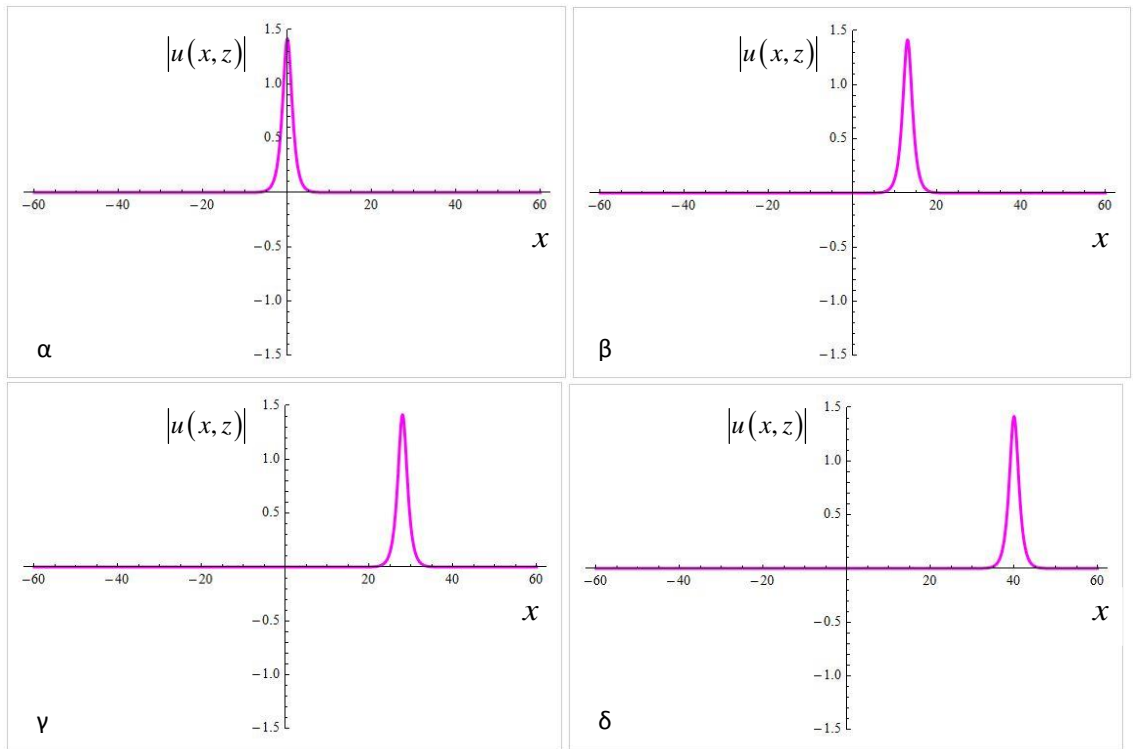
Σχήμα 3.44: Προβολή της 3D απεικόνιση της λύσης $|u(x, z)|$ στο επίπεδο xz .



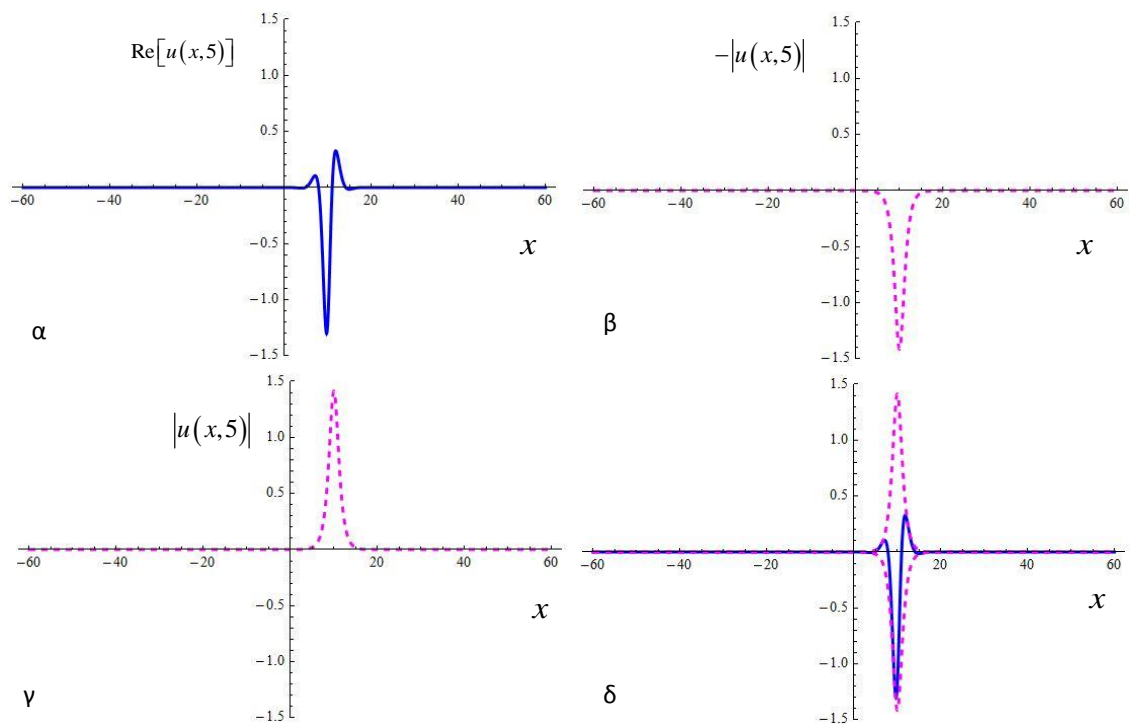
Σχήμα 3.45: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



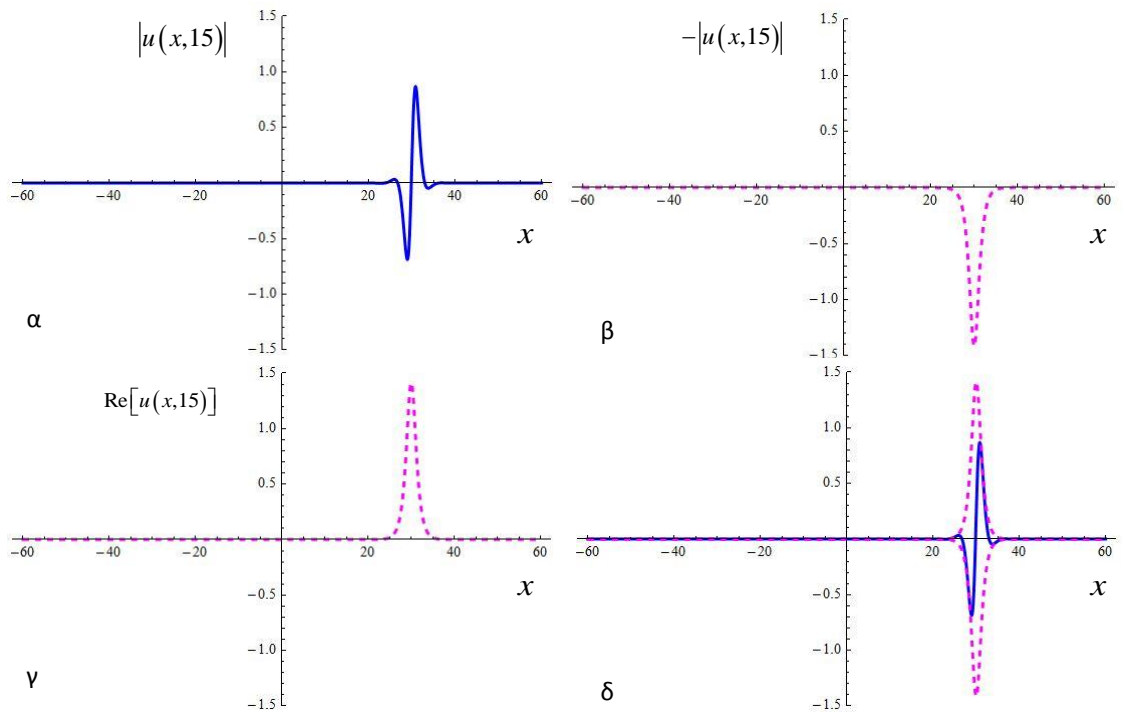
Σχήμα 3.46: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τα τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το φανταστικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



Σχήμα 3.47: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το απόλυτο της λύσης $u(x, z)$ στον χώρο x .



Σχήμα 3.48: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 5$.



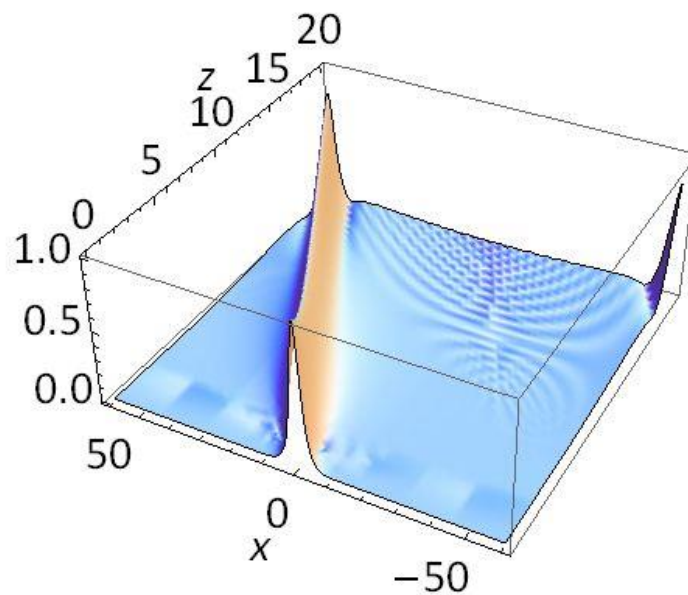
Σχήμα 3.49: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον γόο x για το στινμιότυπο $z = 15$.

Η. Μελέτη της Λύσης της εξίσωσης NLS για: $\nu = \frac{3}{2}$

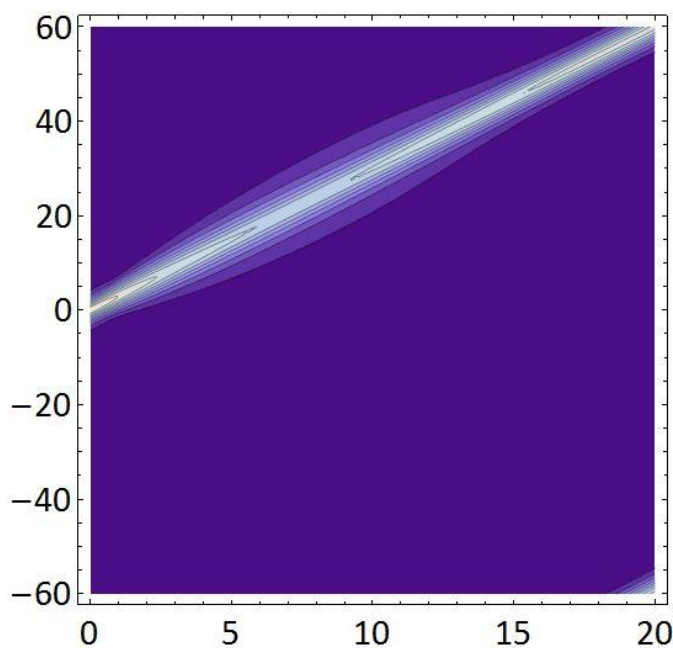
Με την χρήση του προγράμματος Wolfram Mathematica 6.0 λύσαμε την εξίσωση NLS για τις σταθερές $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$, $\nu = \frac{3}{2}$. Από την σχέση 3.9 η αρχική συνθήκη λαμβάνει την μορφή:

$$u(x, 0) = \operatorname{sech} \left[\frac{x}{\sqrt{2}} \right] e^{ix}$$

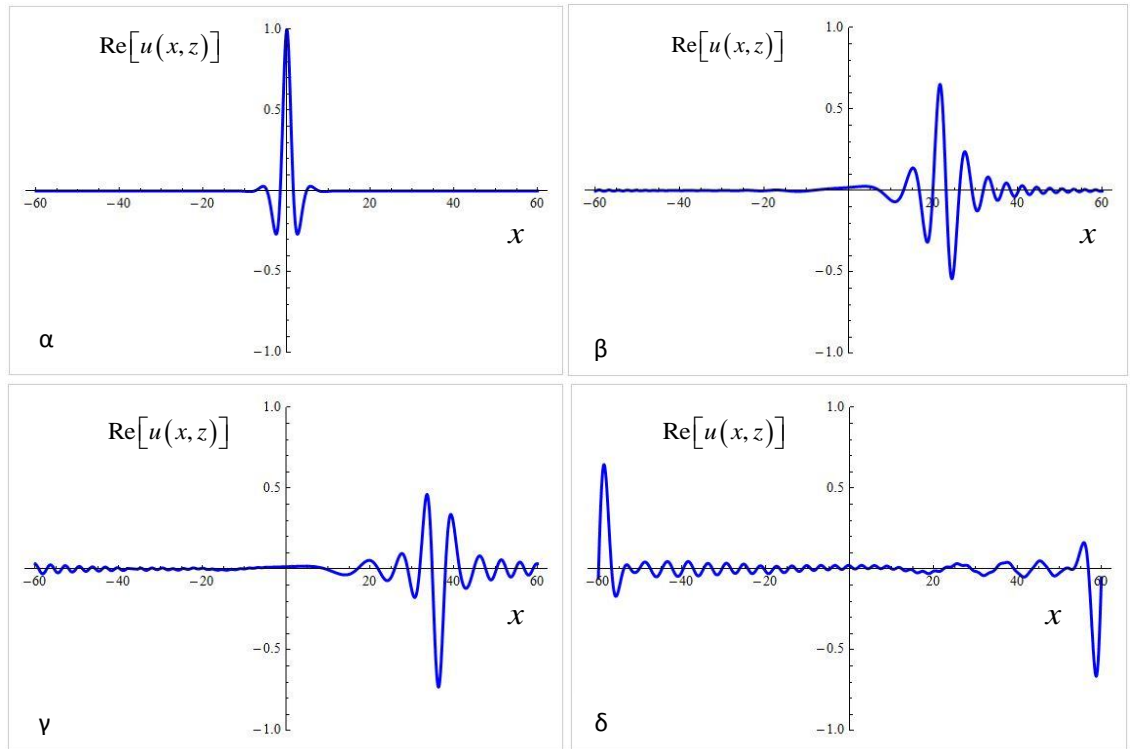
Οι εικόνες που λαμβάνουμε από το Mathematica είναι:



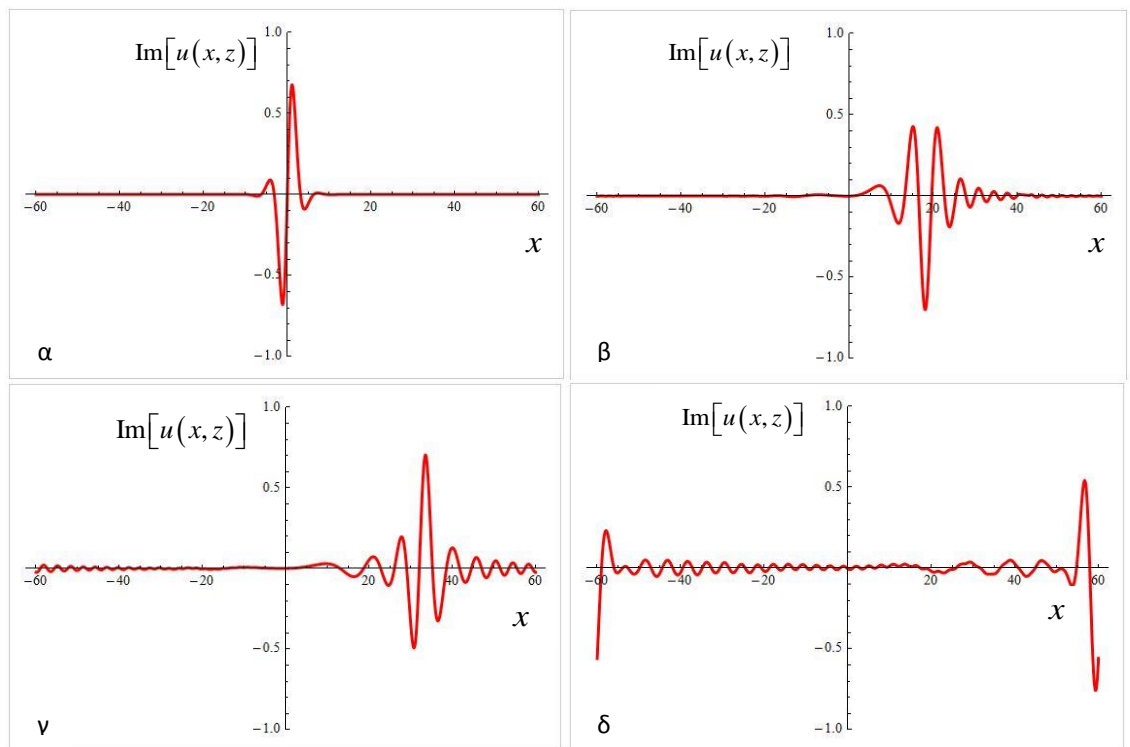
Σχήμα 3.50: Μια 3D απεικόνιση της λύσης του προβλήματος NLS, για $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$ και $\nu = \frac{3}{2}$, όπου στον άξονα του ύψους τοποθετήθηκε το μέγεθος $|u(x, z)|$.



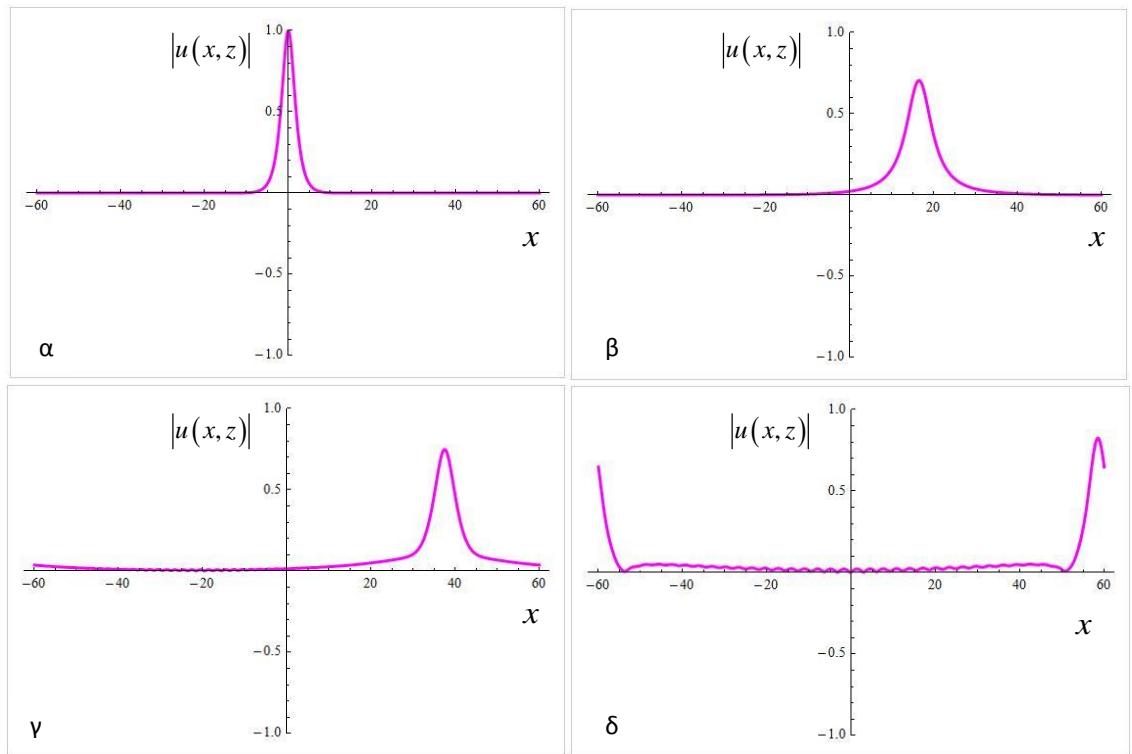
Σχήμα 3.51: Προβολή της 3D απεικόνιση της λύσης $|u(x, z)|$ στο επίπεδο xz .



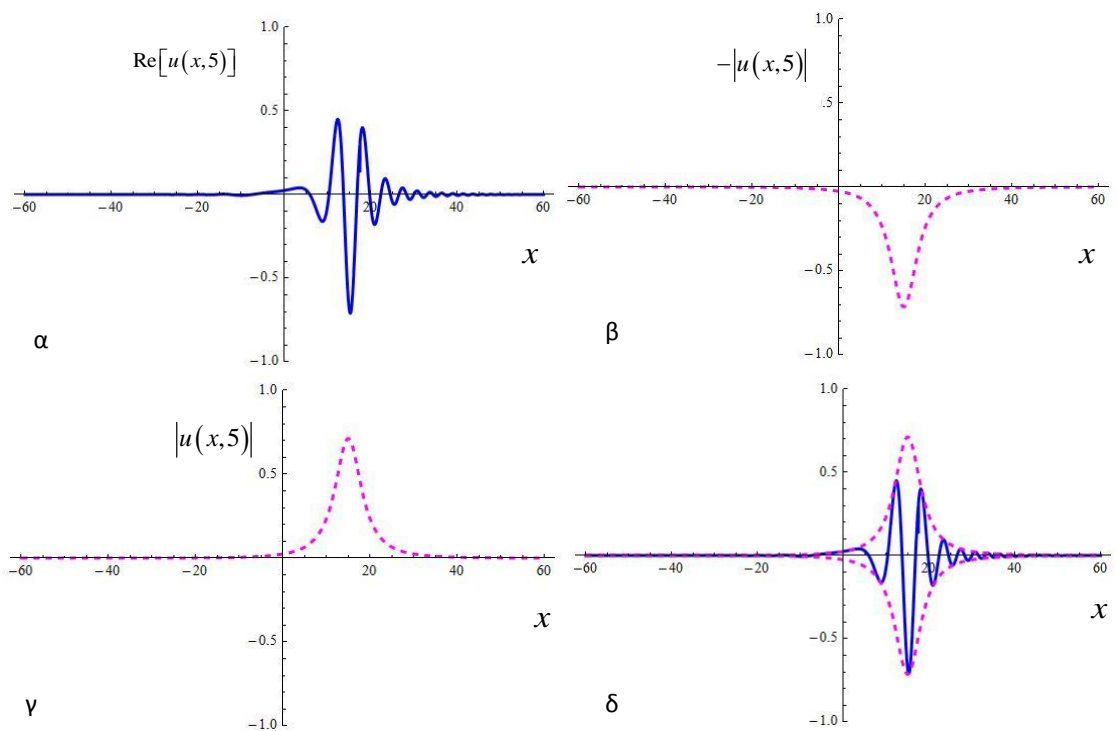
Σχήμα 3.52: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



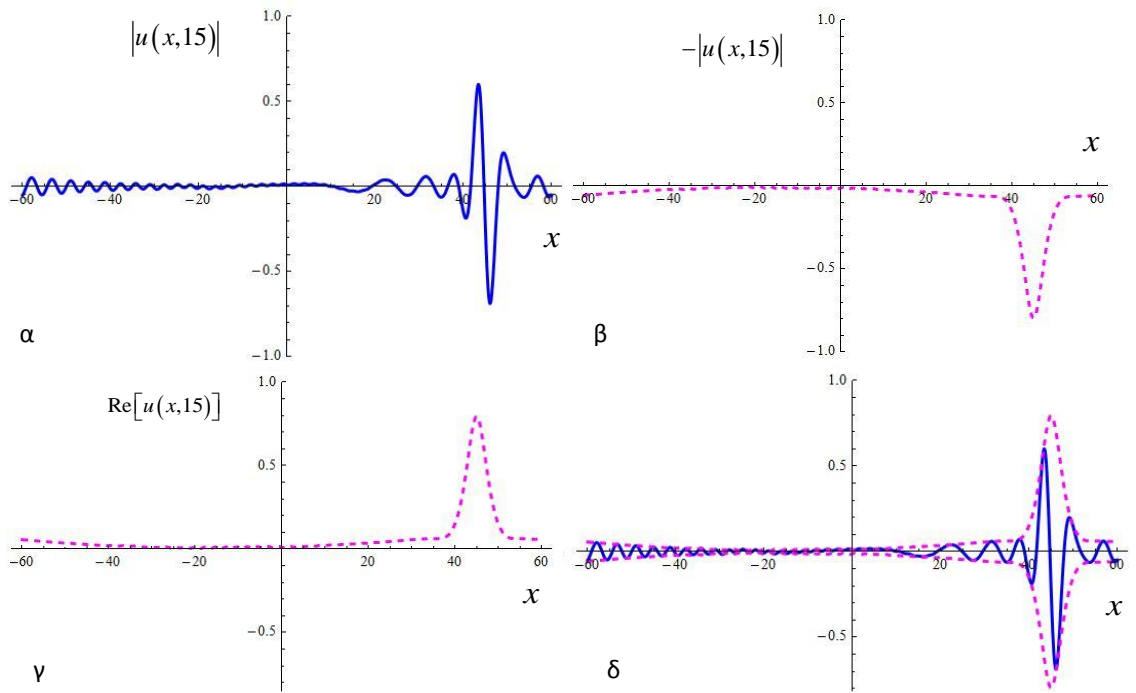
Σχήμα 3.53: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τα τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το φανταστικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



Σχήμα 3.54: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το απόλυτο της λύσης $u(x, z)$ στον χώρο x .



Σχήμα 3.55: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 5$.



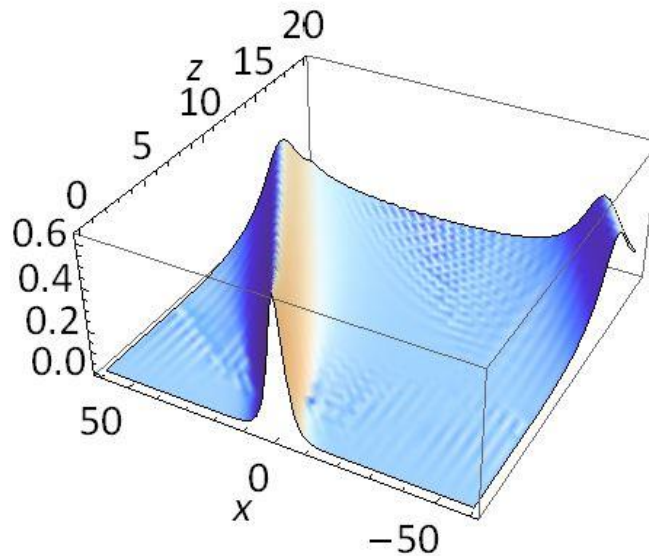
Σχήμα 3.56: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το σινημιότυπο $z = 15$.

Θ. Μελέτη της Λύσης της εξίσωσης NLS για: $v = 9/5$

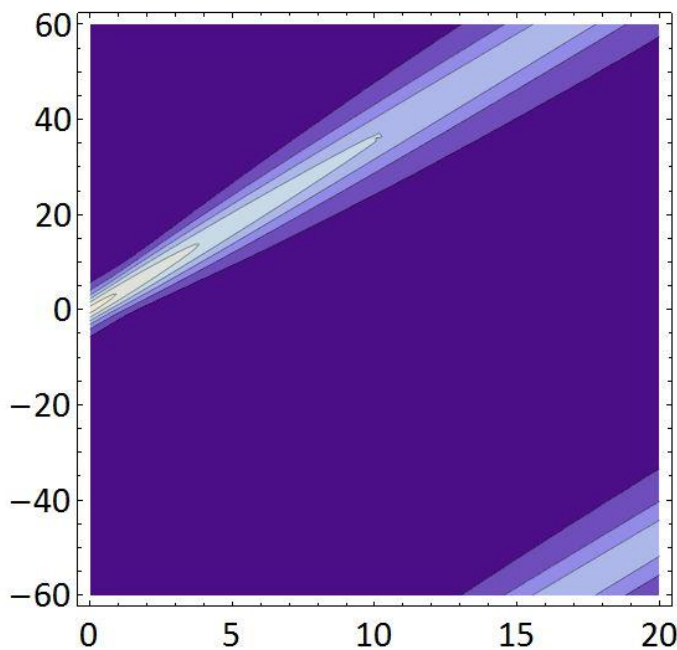
Με την χρήση του προγράμματος Wolfram Mathematica 6.0 λύσαμε την εξίσωση NLS για τις σταθερές $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$, $v = 9/5$. Από την σχέση 3.9 η αρχική συνθήκη λαμβάνει την μορφή:

$$u(x,0) = \sqrt{\frac{2}{5}} \cdot \operatorname{sech}\left[\frac{x}{\sqrt{5}}\right] \cdot e^{ix}$$

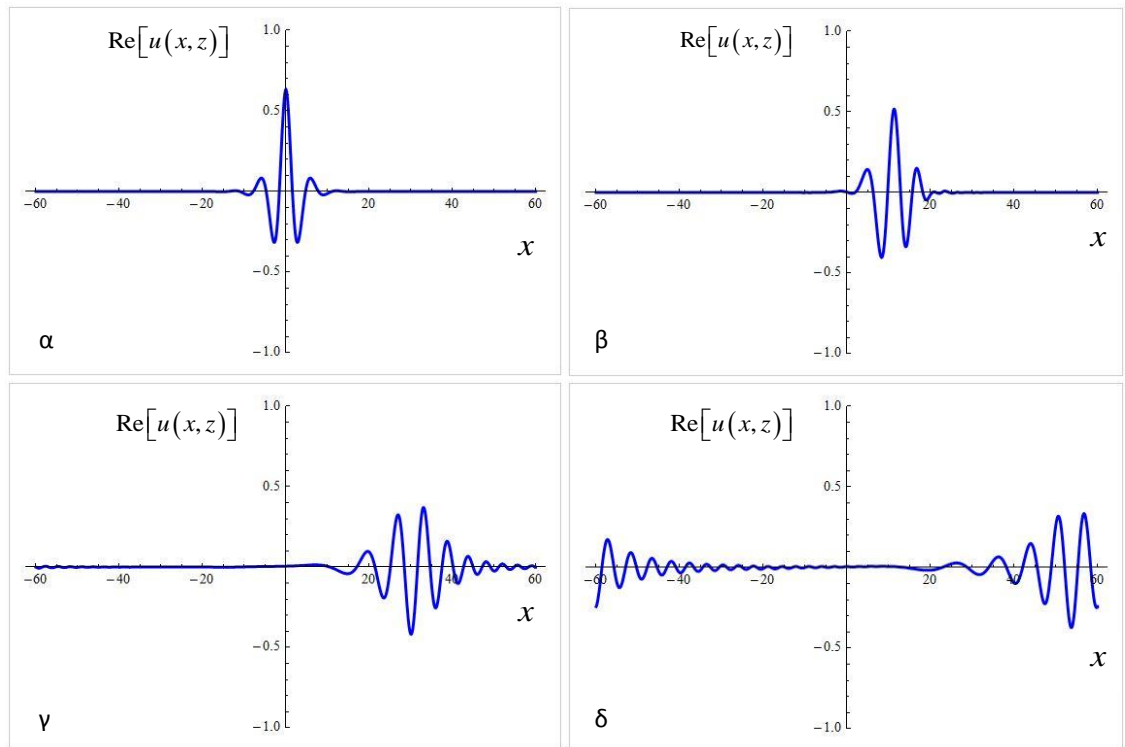
Οι εικόνες που λαμβάνουμε από το Mathematica είναι:



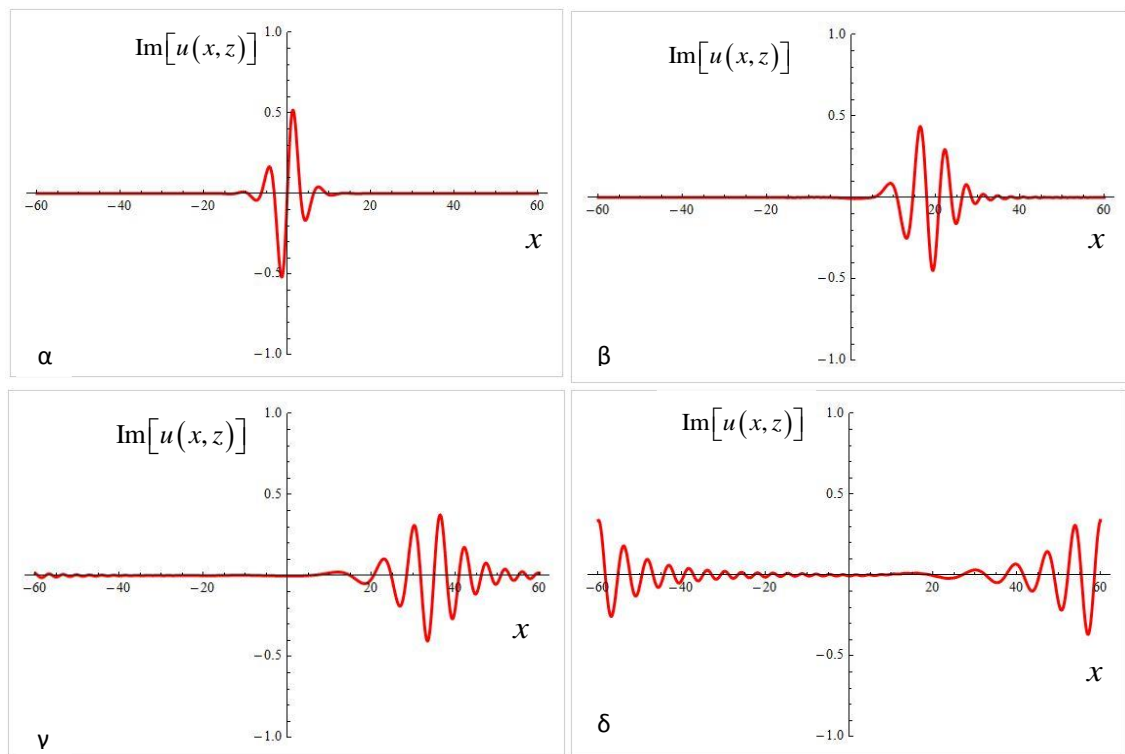
Σχήμα 3.57: Μια 3D απεικόνιση της λύσης του προβλήματος NLS, για $\omega = 2$, $k = 1$, $s = 1$ και $v = 9/5$, όπου στον άξονα του ύψους τοποθετήθηκε το μέγεθος $|u(x,z)|$.



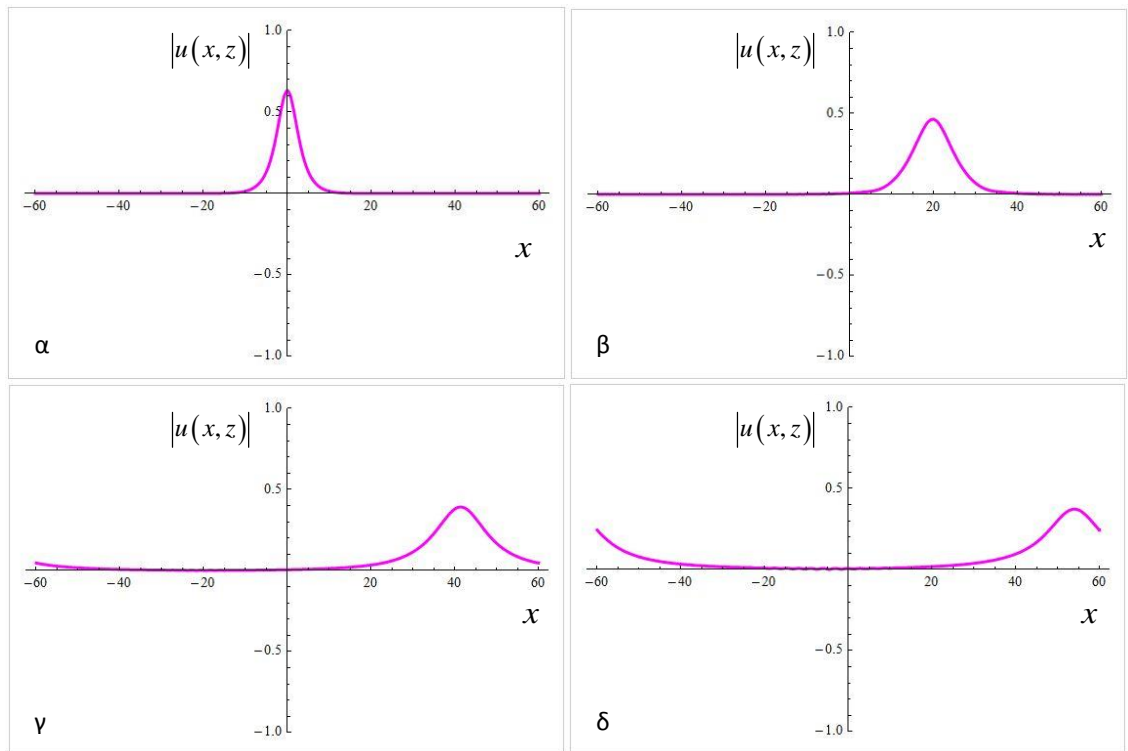
Σχήμα 3.58: Προβολή της 3D απεικόνιση της λύσης $|u(x,z)|$ στο επίπεδο xz.



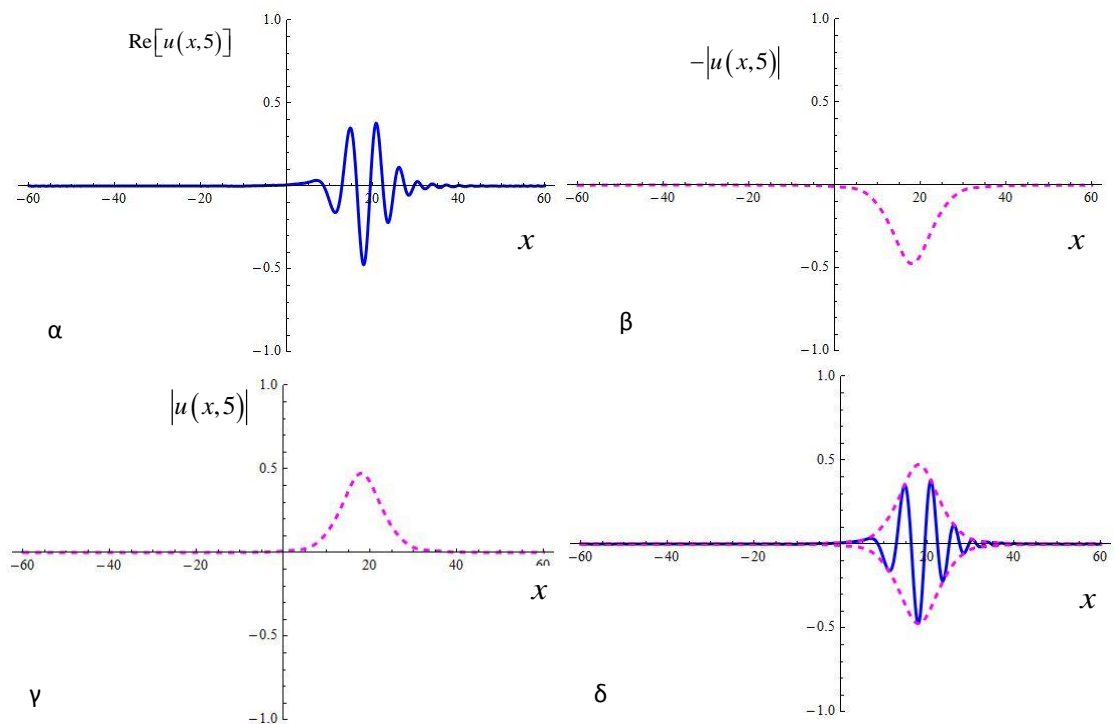
Σχήμα 3.59: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



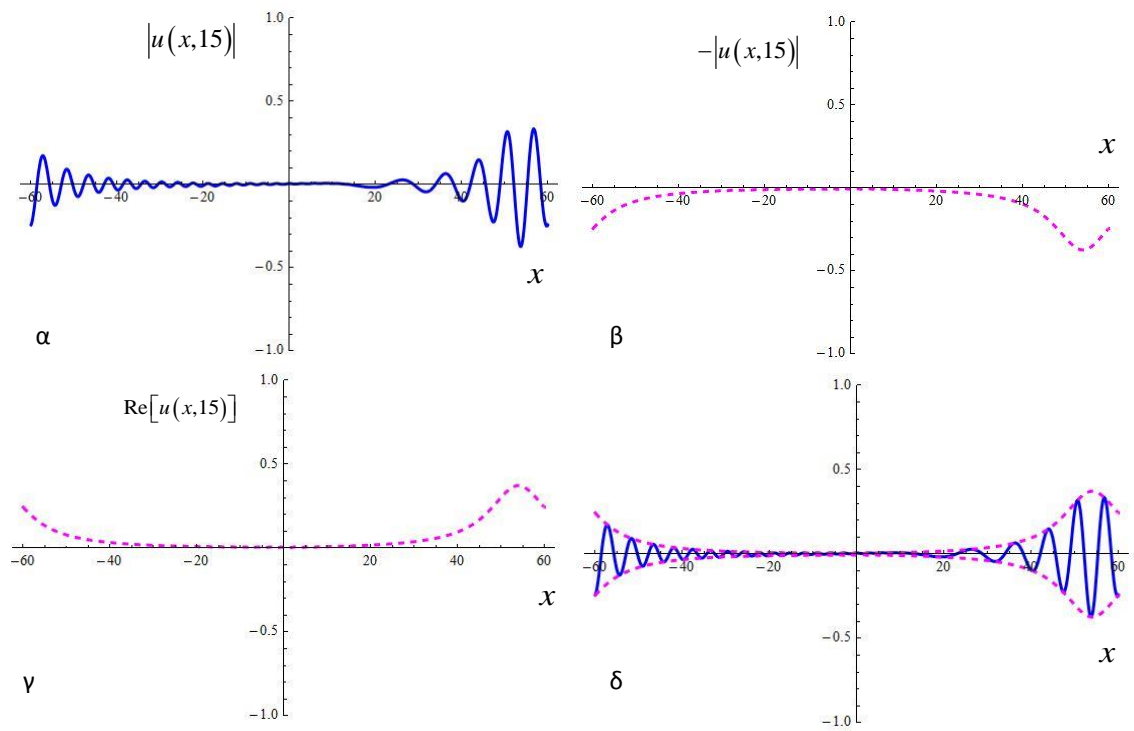
Σχήμα 3.60: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τα τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το φανταστικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ στον άξονα x .



Σχήμα 3.61: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζονται τέσσερα στιγμιότυπα στις οποίες ταξιδεύει το απόλυτο της λύσης $u(x, z)$ στον χώρο x .



Σχήμα 3.62: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το στιγμιότυπο $z = 5$.



Σχήμα 3.63: Στα παραπάνω γραφήματα απεικονίζεται το πραγματικό μέρος της λύσης $u(x, z)$ να ταξιδεύει στον χώρο x για το σινημιότυπο $z = 15$.

Βιβλιογραφία

- [1] H.J. Pain, Φυσική των ταλαντώσεων και των κυμάτων, Εκδόσεις Συμμετρία, Αθήνα 1997
- [2] Χρόνης Πολυμίδης, Δημήτρης Φραντζεσκάκης και Κυριάκος Χιτζανίδης, Τάξη και χάος στα μη γραμμικά συστήματα, Τόμος Πέμπτος, Εκδόσεις Γ.Α. Πνευματικός, Αθήνα 1999
- [3] Ν.Δ. Αλικάκος και Γ.Η. Καλογερόπουλος, Συνήθεις διαφορικές εξισώσεις, Εκδόσεις Σύγχρονη Εκδοτική, Αθήνα 2003
- [4] Arthur Beiser, Σύγχρονη Φυσική, Εκδόσεις Τυπωθήτω Γιώργος Δαρδανός, Αθήνα 2002
- [5] Στέφανος Τραχανάς, Κβαντομηχανική I, Εκδόσεις Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2007
- [6] Κυριάκου Ταμβάκη, Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική, Εκδόσεις Leader Books A.E., Αθήνα 2003
- [7] Γεώργιος Θεωδώρου και Χριστίνα Θεωδώρου, Mathematica και εφαρμογές, Εκδόσεις Γιαχούδη, Θεσσαλονίκη 2005