Μάθημα 4^{o}, 7 Οκτωβρίου 2008 (9:00-11:00).

ΕΞΙΣΩΣΗ SCHRÖDINGER.

Schrödinger

μεταπτυχιακός του Debye
→σε ένα από τα 'group meetings' της ερευνητικής ομάδας του Debye, καθώς δεν είχε ακόμα αποτελέσματα από την δική του ερευνητική εργασία, παρουσίασε τα αποτελέσματα της εργασίας του De Broglie
→ο Debye (μαθητής του Sommerfeld, και θιασώτης της κλασικής φυσικής –μηχανική, κυματική, ηλεκτρομαγνητισμός--) κορόιδευε τον Schrödinger, γιατί περιέγραψε μια τόσο κυματική ερμηνεία χωρίς την παρουσία μιας κυματικής εξίσωσης.

Για την επόμενη διάλεξη του προσπάθησε να βρει μια κυματική εξίσωση.

ΕΛΕΥΘΕΡΟ ΣΩΜΑΤΙΟ
Ολική ενέργεια ίση με την κινητική.
$\boxed{E = T = p^2/2m}$.
Συσχέτιση του ελεύθερου σωματίου με το επίπεδο κύμα.
Το πιο απλό κύμα είναι το επίπεδο κύμα: cos(κx+ωt) ή sin(κx+ωt)
Συνήθως περιγράφεται σε μιγαδική μορφή (μαθηματική ευκολία): $e^{i(\kappa x-\omega t)}$

Κυματικά χαρακτηριστικά *κ*(κυματάνυσμα), *ω*(κυκλική συχνότητα) [χαρακτηριστικά του κύματος, όχι του σωματιδίου].
Αυτά μπορούν να συνδεθούν με τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά φυσικά μεγέθη *E*(ενέργεια) και *p*(ορμή) από τις σχέσεις του De Broglie (βλέπε προηγούμενα μαθήματα)

$$E = h\cdot\nu = \frac{h}{2\pi}2\pi\nu = \hbar\omega \rightarrow \boxed{\omega = \frac{E}{\hbar}}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \xrightarrow{\kappa=\frac{2\pi}{\lambda}\rightarrow\lambda=\frac{2\pi}{\kappa}} \frac{h}{\frac{2\pi}{\kappa}} = \frac{h}{2\pi}\kappa = \hbar\kappa \rightarrow \boxed{\kappa = \frac{P}{\hbar}}$$

Άρα $e^{i(\kappa x-\omega t)} = e^{i(px-Et)/\hbar}$.
Ο Schrödinger σκέφτηκε με ποιές απλές μαθηματικές πράξεις θα πάρουμε την κλασική σχέση $\frac{p^2}{2m} + V(x) = E$;
Παραγωγίζω δύο φορές ως προς *x* για να πάρουμε το κ^2:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(e^{i(px-Et)/\hbar}\right) = i\frac{p}{\hbar}e^{i(px-Et)/\hbar} = \frac{i^2p^2}{\hbar^2}e^{i(px-Et)/\hbar} = -\frac{p^2}{\hbar^2}e^{i(px-Et)/\hbar},$$

δηλαδή χρειάζομαι το μαθηματική τελεστή, $-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.
Παραγωγίζουμε μια φορά ως προς *t* για να πάρουμε το *E*:

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{i(Px-Et)/\hbar} = -\frac{iE}{\hbar} e^{i(Px-Et)/\hbar},$$

δηλαδή χρειάζομαι το μαθηματική τελεστή, $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$.

Επομένως, η ζητούμενη κυματική εξίσωση, που έχει προέρθει από την εξίσωση περιγραφής της κίνησης σωματιδίων (μάζας *m*), είναι η

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

Η οποία είναι η εξίσωση Schrödinger για το ελέυθερο σωμάτιο.

ΣΩΜΑΤΙΟ ΣΕ ΔΥΝΑΜΙΚΟ.

Εξίσωση που περιγράφει την κίνηση των σωματιδίων
(κλασική περιγραφή, μονοδιάστατη κίνηση):

$$\boxed{E = T + V(x)}$$

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

Εργαζόμαστε ανάλογα με την προηγούμενη περίπτωση

Επομένως, η ζητούμενη κυματική εξίσωση, που έχει προέρθει από την εξίσωση περιγραφής της κίνησης σωματιδίων (μάζας *m*), σε δυναμικό V(x)είναι η

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

==

<u>Μεθοδολογία (ΣΥΝΤΑΓΗ) για να βρω εξίσωση Schrödinger</u>:

$$P \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \hat{E}$$

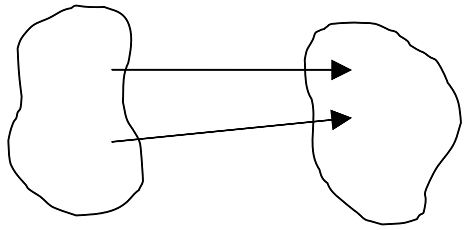
Τελεστές
(Operators)

$$\hat{P} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \longrightarrow \text{τελεστής της ορμής.}$$

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow \text{τελεστής της ενέργειας.}$$

Ένας **τελεστής** είναι μια συνταγή, μια μαθηματική πράξη.

Έχω ένα σύνολο A με όλες τις συναρτήσεις και τις αντιστοιχώ με άλλο σύνολο B με άλλες συναρτήσεις.



π.χ. $1\cdot f_{(x)}=f_{(x)}$

$$\frac{d}{dx}f_{(x)}=f'_{(x)}$$

Στην κβαντομηχανική θα είναι όλοι *γραμμικοί τελεστές*.

π.χ. $\left(x+\frac{d}{dx}+\frac{d^3}{dx^3}\right)P$

$$\left[g_{(x)}+3\left(x+\frac{d}{dx}+\frac{d^3}{dx^3}\right)\right]f$$

<u>Ιδιότητες</u>

$\hat{A}(c_1f_1+c_2f_2)=c_1\hat{A}f_1+c_2\hat{A}f_2$

$(\hat{A}+\hat{B})f=\hat{A}f+\hat{B}f$

$\hat{A}\cdot\cancel{\hat{B}f=\hat{B}\hat{A}}f$

$\hat{A}\cdot\hat{B}f\neq\hat{B}\hat{A}f$

Απόδειξη

π.χ. $\hat{A}=\frac{d}{dx}$

$\hat{B}=x$

$\hat{A}\cdot\hat{B}f=\frac{d}{dx}(xf)=f+x\frac{df}{dx}$

$\hat{B}\cdot\hat{A}f=x\frac{df}{dx}\neq\hat{A}\cdot\hat{B}f$

<u>Άσκηση 3</u>

Να βρεθεί η εξίσωση Schrödinger για σχετικιστικό ελεύθερο σωμάτιο;

Η Σχετικιστικη σχέση ενέργειας $\rightarrow$ $E=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}\ \Rightarrow E^2=p^2c^2+m^2c^2$ (1)

Αντικαθιστώ στα φυσικά μεγέθη τους αντίστοιχους τελεστές

Από την 3^{η} ιδιότητα τελεστών

Όπου έχω για τον τελεστή τετράγωνο της ενέργειας, που ουσιαστικά είναι ισοδύναμο με την διαδοχική εφαρμογή του τελεστή της ενέργειας

$$\rightarrow\ (i\hbar\frac{\partial}{\partial t})(i\hbar\frac{\partial f}{\partial t})=-\hbar^2\frac{\partial}{\partial t}(\frac{\partial f}{\partial t})=-\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$$

→Άρα με την (1) παίρνουμε την εξίσωση του Schrödinger για σχετικιστικό σωμάτιο

$$\rightarrow \quad \frac{\hbar^2 \partial^2 \psi(x,t)}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + m^2 c^4 \psi(x,t)$$

Από τις σημειώσεις των Ε. Τακτικού, Δ. Γαβρέλα, (ακ. Έτος 2007-2008).