



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά
μαθήματα ΠΠ

Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 4: Εξίσωση Schrödinger

Ανδρέας Τερζής
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Σκοπός ενότητας

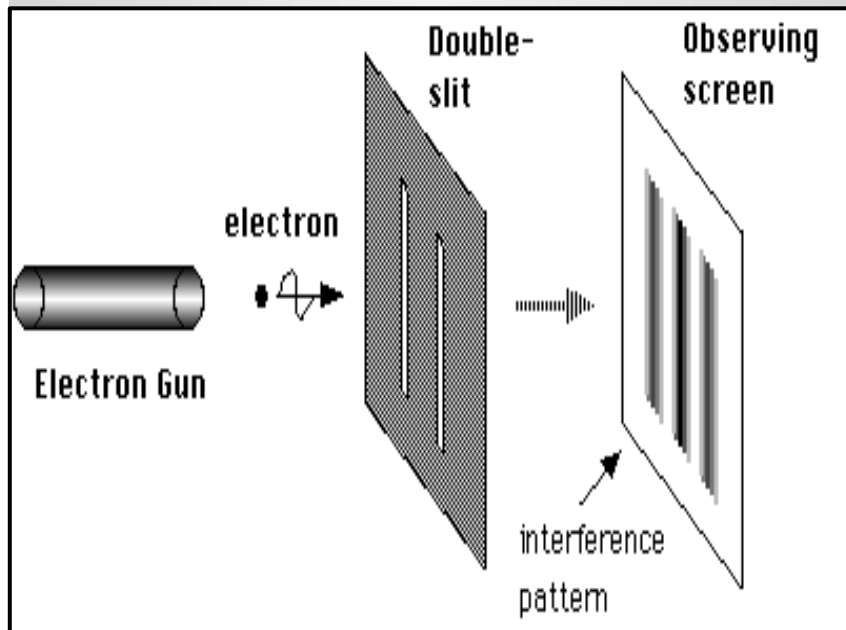
- Σκοπός της ενότητας είναι η εξαγωγή της εξίσωσης Schrödinger καθώς και μια πρώτη επαφή με την έννοια του τελεστή.

Περιεχόμενα ενότητας

- Το πείραμα των δύο σχισμών
- Κατασκευή εξίσωσης Schrödinger για μη σχετικιστικό σωματίο
- Προσαρμογή της εξίσωσης Schrödinger για σχετικιστικό σωματίο

Το πείραμα των δύο σχισμών(I)

Εικόνα 1: Το πείραμα των δύο σχισμών



- Σωματίδια ύλης ή φωτός εκπέμπονται από πηγή. Στην συνέχεια διέρχονται από δύο παράλληλες σχισμές και αφήνουν το ίχνος τους σε οθόνη.
- Η κατανομή των ιχνών δίνει τέτοιο σχήμα, που φαίνεται να είναι αποτέλεσμα συμβολής, η οποία αποτελεί κυματικό φαινόμενο.



Το πείραμα των δύο σχισμών(II)

- Η ύλη επομένως της ατομικής κλίμακας παρουσιάζει κυματικές ιδιότητες.
- Στην περίπτωση του ηλεκτρονίου που περνά από διπλή σχισμή, τοποθετήθηκε μετρητική συσκευή, προκειμένου να διαπιστωθεί από ποια σχισμή διέρχεται.
- Τότε παύει να συμπεριφέρεται ως κύμα και δεν παρατηρούνται φαινόμενα συμβολής.
- Άρα η παρουσία ή μη του παρατηρητή, μεταβάλλει το αποτέλεσμα που φαίνεται στην οθόνη.



Προστάδιο-Εξίσωση Schrödinger

- Όπως έχει αναφερθεί, ένα ελεύθερο σωματίο εμφανίζει και κυματική συμπεριφορά. Τα κυματικά και σωματιδιακά χαρακτηριστικά συνδέονται με τις σχέσεις του De Broglie : $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$.
- Από την **μη σχετικιστική** αρχή διατήρησης της ενέργειας για ελεύθερο σωματίο (δηλαδή σωματίο που δεν υπόκειται σε δυναμικό) έχουμε ότι $E = \frac{p^2}{2m}$.
- Κάνοντας αντικατάσταση των σχέσεων De Broglie στην τελευταία σχέση , παίρνουμε την σχέση διασκεδασμού για το ελεύθερο σωματίο: $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$.



Συνέχεια συλλογισμών

- Το ερώτημα που προέκυψε ήταν το εξής:
 - ❖ Ποια η διαφορική εξίσωση, που θα έχει ως λύση οποιοδήποτε επίπεδο κύμα που ικανοποιεί την σχέση διασκεδασμού για το ελεύθερο σωματίο;
- (Οποιοδήποτε σημαίνει για όλα τα δυνατά k που ικανοποιούν την σχέση διασκεδασμού του ελεύθερου σωματιδίου).



Διαδικασία κατασκευής

- Ξέρουμε ότι το επίπεδο κύμα περιγράφεται με την βοήθεια της συνάρτησης $\psi = e^{i(kx - \omega t)}$. Από τις σχέσεις του De Broglie η συνάρτηση μπορεί να πάρει την μορφή

$$\psi = e^{i\left(\frac{px - Et}{\hbar}\right)}.$$

- Ο Schrödinger σκέφτηκε με ποιες απλές μαθηματικές πράξεις θα πάρουμε την κλασική σχέση $E = \frac{p^2}{2m}$.
- Παραγωγίζοντας την συνάρτηση $e^{i\left(\frac{px - Et}{\hbar}\right)}$ δύο φορές ως προς x παίρνουμε το p^2 . Θα ισχύει δηλαδή ότι $-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x} = p^2 \psi$ (1).
- Παραγωγίζοντας μια φορά ως προς t παίρνουμε το E . Θα ισχύει δηλαδή ότι $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi$ (2).



Η έννοια του τελεστή

- Πριν συνεχίσουμε είναι χρήσιμο να παραθέσουμε την έννοια του τελεστή.
- Ένας τελεστής είναι μια συνάρτηση στον χώρο των φυσικών καταστάσεων. Όταν δρα σε μια φυσική κατάσταση, το αποτέλεσμα είναι μια άλλη φυσική κατάσταση.
- Στην κβαντομηχανική οι τελεστές είναι γραμμικοί, δηλαδή έχουν τις εξείς ιδιότητες:

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

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

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

\hat{A} και \hat{B} είναι οι τελεστές, c_1 και c_2 είναι σταθερές και f είναι η συνάρτηση πάνω στην οποία δρουν οι τελεστές.



Επιστροφή στην κατασκευή

- Με βάση όσα αναφέρθηκαν για την έννοια του τελεστή καταλαβαίνουμε ότι στις σχέσεις (1) και (2) μπορούμε να ανάγουμε τα μεγέθη της ενέργειας και της ορμής σε κβαντικούς τελεστές (Στις σχέσεις (1) και (2) η f είναι η ψ).
- Άρα θα έχουμε $\hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ και $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$.
- Κάνοντας αντικατάσταση στην αρχή διατήρησης ενέργειας $E = \frac{p^2}{2m}$ (η οποία έχει αναχθεί σε σχέση τελεστών που δρουν στην συνάρτηση ψ), παίρνουμε την εξίσωση Schrödinger για το ελεύθερο σωματίο:

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



Γενίκευση της εξίσωσης

- Το παραπάνω αποτέλεσμα γενικεύεται και στην περίπτωση που το σωματίο δεν είναι ελεύθερο αλλά υπόκειται σε δυναμικό $V(x)$. Στα πλαίσια του μαθήματος το δυναμικό θα έχει εξάρτηση μόνο από την θέση και όχι από τον χρόνο, δηλαδή θα μελετάμε **κλειστά** συστήματα.
- Σ' αυτήν την περίπτωση η εξίσωση Schrödinger έχει την μορφή
$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t).$$
- Για την κατασκευή της, οι συλλογισμοί είναι ακριβώς ίδιοι μόνο που τώρα η αφετηρία θα είναι η αρχή διατήρησης της ενέργειας με την μορφή $E = \frac{p^2}{2m} + V(x).$
- Το $V(x)$ είναι αυτονόητο ότι έχει αναχθεί σε κβαντικό τελεστή που δρα με την σειρά του πάνω στην $\psi(x, t)$.



Εξίσωση για τρισδιάστατη κίνηση

- Στην περίπτωση των τριών διαστάσεων η αρχή διατήρησης ενέργειας παίρνει την μορφή

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)$$

όπου $\hat{p}_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$, $\hat{p}_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$.

Άρα η εξίσωση Schrödinger θα είναι

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + V(x, y, z) \psi$$

Η λύση ψ της εξίσωσης σε όλες τις παραπάνω περιπτώσεις αποτελεί την λεγόμενη **κυματοσυνάρτηση**.



Εξίσωση για σχετικιστικό σωματίο

- Όπως αναφέρθηκε, στις παραπάνω περιπτώσεις είχαμε ως αφετηρία την **κλασική** αρχή διατήρησης ενέργειας.
- Αυτό σημαίνει ότι η εξίσωση Schrödinger που προέκυψε, αφορά **μη σχετικιστικά** σωματίια.
- Έχοντας τώρα σαν αφετηρία την σχετικιστική σχέση για την αρχή διατήρησης ενέργειας,

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

με τους ίδιους ακριβώς συλλογισμούς παίρνουμε την σχετικιστική εξίσωση Schrödinger ή εξίσωση **Klein-Gordon**

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



Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών, **Ανδρέας Τερζής**. Ανδρέας Τερζής
«**Κβαντική Φυσική Ι. Εξίσωση Schrödinger**». Έκδοση: **1.0**. Πάτρα **2015**.

Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:

<https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/>



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά Δημιουργού, Μη Εμπορική Χρήση, Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

Ως **Μη Εμπορική** ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου, για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό όφελος (π.χ. διαφημίσεις) από την προβολή του έργου σε διαδικτυακό τόπο

Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

Εικόνα 1: http://en.wikipedia.org/wiki/Double-slit_experiment

