Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 5: Κυματομηχανική

Ανδρέας Τερζής
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Σκοπός ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης, δηλαδή της λύσης της εξίσωσης Schrödinger και γενικότερα η στατιστική ερμηνεία της κβαντομηχανικής.

Περιεχόμενα ενότητας

- Ιδιότητες της κυματοσυνάρτησης
- Εισαγωγή στις έννοιες **μέση θέση**, **αβεβαιότητα θέσης σωματιδίου**
- Διαφορές κβαντικής και κλασικής μηχανικής

Η φύση της κβαντομηχανικής

- Η κυματοσυνάρτηση αποτελεί ένα «**κύμα πιθανότητας**». Διαφέρει από το κλασικά παρατηρήσιμο κύμα. Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης δίνει την πυκνότητα πιθανότητας, δηλαδή την πιθανότητα ανά μονάδα μήκους ή όγκου, να βρεθεί το σωμάτιο σε μια περιοχή του χώρου.
- Η φύση λοιπόν της κβαντομηχανικής είναι καθαρά πιθανοκρατική.
- Αν ψ_1, ψ_2 είναι λύσεις της Schrödinger, τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός αυτών είναι επίσης λύση. Άρα λύση αποτελεί και η $\psi(\boldsymbol{r}, t) = c_1\psi_1(\boldsymbol{r}, t) + c_2\psi_2(\boldsymbol{r}, t)$.

Άσκηση 5.1

Ποια από τις παρακάτω κυματοσυναρτήσεις αποτελεί λύση της Schrödinger;

1. $\psi(x,t) = cos\omega t$.

Η παραπάνω συνάρτηση δεν μπορεί να αποτελέσει λύση για δύο λόγους: α) Οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger είναι **μιγαδικές**, ενώ η (1) είναι πραγματική, β) Παρατηρούμε ότι για κάποιες χρονικές στιγμές η (1) μηδενίζεται που σημαίνει ότι το σωμάτιο εξαφανίζεται(αφού μηδενίζεται η πιθανότητα να βρίσκεται κάπου στον χώρο), πράγμα άτοπο.

Άσκηση 5.1(συνέχεια..)

2. $\psi(x,t) = isinkx$

Δεν μπορεί να αποτελεί λύση διότι όπως αναφέραμε οι λύσεις είναι καθαρά μιγαδικές, ενώ η (2) είναι φανταστική.

3. $\psi(x,t) = e^{i\omega t}coskx$.

Η (3) μπορεί να αποτελέσει λύση.

Στατιστική ερμηνεία

- Έστω ότι κάνουμε λόγο για μονοδιάστατο πρόβλημα. Η γενίκευση σε περισσότερες διαστάσεις είναι τετριμμένη. Η πυκνότητα πιθανότητας θα δίνεται από την σχέση
$$P(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t).$$

Άρα η πιθανότητα να βρούμε το σωμάτιο μεταξύ των θέσεων x και $x + dx$, θα είναι
$$P(x,t)dx = |\psi(x,t)|^2 \, dx$$

Επομένως η πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο οπουδήποτε θα είναι
$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$$

Συνθήκη κανονικοποίησης

- Η ολική πιθανότητα θα πρέπει να είναι μονάδα. Δηλαδή,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1.$$

Η παραπάνω συνθήκη αποτελεί την λεγόμενη **συνθήκη κανονικοποίησης** (ή νορμαλισμού). Οι κυματοσυναρτήσεις που την ικανοποιούν ονομάζονται **κανονικοποιημένες** (ή νορμαλισμένες).

Τετραγωνικά ολοκληρώσιμες κυματοσυναρτήσεις

- Για να μπορεί να γίνει μια κυματοσυνάρτηση κανονικοποιημένη (αν δεν είναι ήδη), θα πρέπει το ολοκλήρωμα $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2dx$ να συγκλίνει (να μην απειρίζεται). Δηλαδή να ισχύει

$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2dx \ = C$, όπου C πεπερασμένη σταθερά.

Οι κυματοσυναρτήσεις που ικανοποιούν την παραπάνω σχέση ονομάζονται **τετραγωνικά ολοκληρώσιμες**, και είναι αυτές που έχουν φυσική σημασία στην κβαντομηχανική.

Τετραγωνικά ολοκληρώσιμες κυματοσυναρτήσεις(συνέχεια..)

- Βασική ιδιότητα των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων είναι ο μηδενισμός τους στο $\pm\infty$, δηλαδή $\psi(+\infty) = \psi(-\infty) = 0$.
- Αν μια κυματοσυνάρτηση είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη μπορούμε να την πολλαπλασιάσουμε με έναν κατάλληλο συντελεστή, τον συντελεστή κανονικοποίησης, προκειμένου η πιθανότητα να είναι μονάδα (και άρα η κυματοσυνάρτηση κανονικοποιημένη).
- Δηλαδή στην περίπτωσή μας όπου $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx \ = C$, για να κανονικοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση θα έχουμε

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\psi^*(x,t)}{\sqrt{c}} \frac{\psi(x,t)}{\sqrt{c}} = 1.$$

Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ είναι η τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και η $\frac{\psi(x,t)}{\sqrt{c}}$ είναι η κανονικοποιημένη.

Άσκηση 5.2- Ερώτημα 1.

- Έστω ότι η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου την χρονική στιγμή $t = 0$ είναι $\psi(x, t = 0) = Ne^{-\lambda x^2/2}$.

1. Ποια θα πρέπει να είναι η σταθερά Ν, για να είναι η κυματοσυνάρτηση κανονικοποιημένη;

Θα πρέπει $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t = 0)\, \psi(x, t = 0) dx = 1$

Κάνοντας αντικατάσταση την κυματοσυνάρτηση στην σχέση κανονικοποίησης έχουμε

$$\mathrm{N}^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = 1$$

Ολοκληρώματα Gauss

- Τα ολοκληρώματα $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}, \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}},$

ονομάζονται ολοκληρώματα Gauss και συναντώνται συχνά στην κβαντομηχανική.

- Γενικά δίνονται από τον τύπο

$$\mathrm{I}_{2n} = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \ldots \cdot (2n-1)}{(2\lambda)^n} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

Όπως βλέπουμε η μεταβλητή x θα είναι υψωμένη σε άρτια δύναμη. Αν είναι σε περιττή, τότε το ολοκλήρωμα δίνει αποτέλεσμα μηδέν. Γενικά ισχύει ότι το ολοκλήρωμα του γινομένου μιας άρτιας και μιας περιττής συνάρτησης σε συμμετρικό διάστημα ολοκλήρωσης είναι μηδέν.

Ολοκλήρωση ερωτησης 1)

- Άρα λοιπόν, για την εξίσωση $\mathrm{N}^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = 1$ θα έχουμε:

$$\mathrm{N}^2 \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = 1 \Rightarrow \mathrm{N} = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4}$$

- Επομένως η κυματοσυνάρτηση γράφεται ως

$$\psi(x, t = 0) = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\lambda x^2/2}.$$

Παρατήρηση: Η σταθερά λ έχει μονάδες αντιστρόφου μήκους στο τετράγωνο(για να είναι ο εκθέτης του εκθετικού αδιάστατος). Άρα παρατηρούμε ότι η κυματοσυνάρτηση έχει μονάδες $1/\sqrt{\text{μήκος}}$. Είναι αυτό φυσιολογικό;

Ναι, διότι η κυματοσυνάρτηση εκφράζει **πυκνότητα** πιθανότητας.

Ερώτημα 2)

- Ποια η μέση θέση του σωματιδίου;

Η μέση θέση γενικά θα δίνεται από τον τύπο

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t=0)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\psi^*(x,t=0)\,\psi(x,t=0)dx$$

$$= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\lambda x^2} dx = 0$$

Το ολοκλήρωμα αυτό μηδενίζεται για τον λόγο που αναφέραμε και πριν: Έχουμε γινόμενο άρτιας επί περιττή συνάρτηση σε συμμετρικό διάστημα ολοκλήρωσης.

Ερώτημα 3)

- Ποια η αβεβαιότητα της θέσης του σωματιδίου;

Η αβεβαιότητα της θέσης δίνεται από τον τύπο

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

Στην δική μας περίπτωση έχουμε βρει ότι $\langle x \rangle = 0$, άρα

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

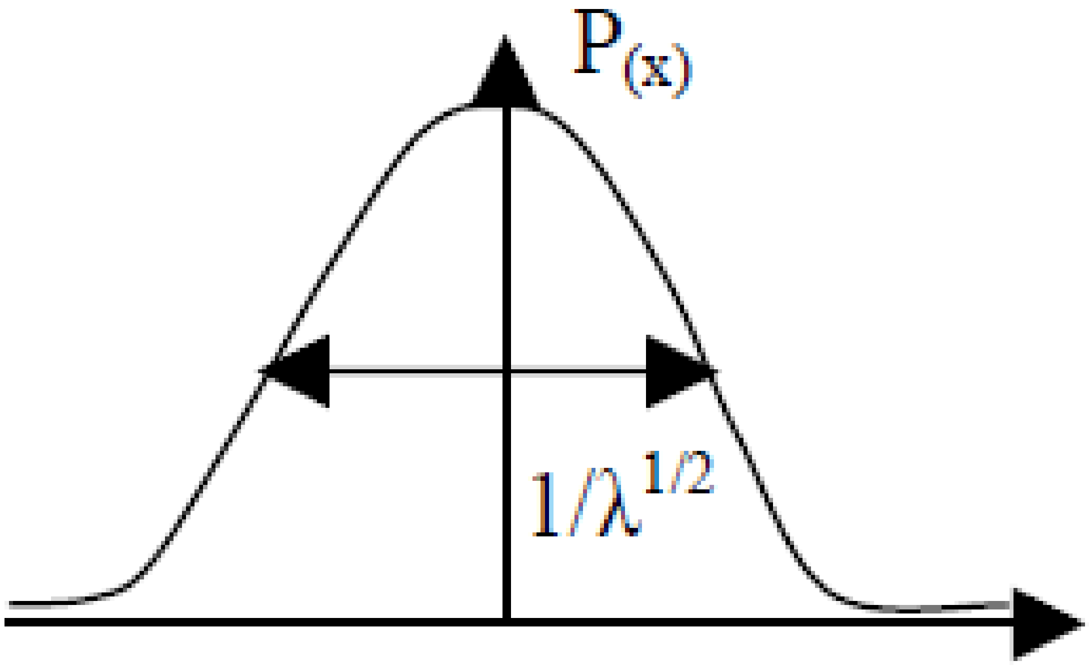
Θα έχουμε επομένως,

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 P(x, t = 0) dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \psi^*(x, t = 0) \psi(x, t = 0) dx = \frac{1}{2\lambda}$$

Άρα $\Delta \mathrm{x} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}$. Η αβεβαιότητα εκφράζει πόσο διασκορπισμένο είναι το σωμάτιο γύρω από την μέση τιμή.

Γράφημα



Πράγματι, σε μια γκαουσιανή καμπύλη, το εύρος είναι ανάλογο προς την αντίστροφη ρίζα λ.

Σύγκριση κβαντικής-κλασικής

- Στην κλασική μηχανική το σωμάτιο μπορεί να έχει οποιαδήποτε τιμή ενέργειας και ορμής. Στην κβαντική οι τιμές της ενέργειας και ορμής είναι κβαντισμένες(διακριτές).
- Οι νόμοι του Νεύτωνα επιτρέπουν τον προσδιορισμό της ταχύτητας και της θέσης του σωματιδίου σε κάποια μελλοντική χρονική στιγμή. Η κβαντομηχανική δίνει την **πιθανότητα** να βρεθεί το σωμάτιο σε μια θέση σε μελλοντική στιγμή. Η πιθανοκρατική φύση της κβαντικής είναι αυτή που την διαφοροποιεί σημαντικά από την κλασική φυσική.
- Η κβαντομηχανική επιτρέπει την επαλληλία καταστάσεων (το είδαμε στην διαφάνεια 4..Το φυσικό νόημα θα εξηγηθεί σε επόμενο μάθημα).

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. Κυματομηχανική». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης