Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 15: Η έννοια του κυματοπακέτου στην Κβαντομηχανική

Τερζής Ανδρέας

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοπός ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να ολοκληρώσει την εφαρμογή της προηγούμενης και να παραθέσει μια εισαγωγή στην έννοια του κυματοπακέτου στην Κβαντομηχανική.

Περιεχόμενα ενότητας

- Ολοκλήρωση εφαρμογής
- Κυματοπακέτα

Συνέχεια εφαρμογής

- Στην προηγούμενη ενότητα χρησιμοποιώντας το δεδομένο που αφορά την μέση θέση, προσδιορίσαμε ότι $\varphi_{12} = \pm\frac{\pi}{2}$ και $\delta_{21} = \pi$.
- Θα χρησιμοποιήσουμε τώρα το δεδομένο που αφορά την μέση ορμή. Ο γενικός τύπος θα είναι:

$$\langle p \rangle = |c_1|^2 p_{11} + |c_2|^2 p_{22} + 2|c_1||c_2||p_{21}|\cos(\tilde{\delta}_{21} \pm \frac{\pi}{2})$$

- Έχουμε $p_{11} = (\psi_1, \hat{p}\psi_1) = 0$

Το p_{11} εκφράζει την μέση ορμή αν είχαμε μόνο την κατάσταση με ενέργεια E_1. Είχαμε αναφέρει σε προηγούμενη ενότητα ότι η μέση τιμή της ορμής, όταν η κυματοσυνάρτηση μέσα στο ολοκλήρωμα είναι πραγματική, είναι μηδέν. Γι’ αυτόν τον λόγο, ομοίως $p_{22} = 0$.

Υπολογισμός του p_{21}

- $p_{21} = (\psi_2, \hat{p}\psi_1) = \int_0^\alpha \psi_2{}^* \left(-i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial x}\right) dx =$

$$= -\frac{2i\hbar\pi}{\alpha^2}\int_0^\alpha sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx =$$

$$= -\frac{2i\hbar\pi}{\alpha^2}\int_0^\alpha 2sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx =$$

$$= \frac{4i\hbar}{a}\int_0^a cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) d\left(cos\frac{\pi x}{a}\right) = -\frac{8i\hbar}{3a}$$

- Θα έχουμε $p_{21} = |p_{21}|e^{i\tilde{\delta}_{21}} \Rightarrow -\frac{8i\hbar}{3a} = \frac{8\hbar e^{i\tilde{\delta}_{21}}}{3\alpha} \Rightarrow$

$$e^{i\tilde{\delta}_{21}} = -i \Rightarrow \tilde{\delta}_{21} = -\frac{\pi}{2}$$

- Αντικαθιστώντας τα δεδομένα μας στον γενικό τύπο έχουμε

$\langle p \rangle = \frac{8\hbar}{3a} = 2|c_1||c_2|\frac{8\hbar}{3a} cos\left(-\frac{\pi}{2} \pm \frac{\pi}{2}\right)$ (1)

Προσδιορισμός συντελεστών

- Από την σχέση (1) σωστή είναι η περίπτωση όπου $\varphi_{12} = +\frac{\pi}{2}$. Αν επιλέγαμε $\varphi_{12} = -\frac{\pi}{2}$ θα καταλήγαμε σε άτοπο(γιατί θα είχαμε κάτι θετικό ίσο με κάτι αρνητικό).
- Έχουμε λοιπόν $cos\left(-\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2}\right) = 1$ και απλοποιώντας το $\frac{8\hbar}{3a}$ καταλήγουμε ότι $2|c_1||c_2| = 1$. Ξέρουμε και την συνθήκη $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ και άρα $|c_1| = |c_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Μέση ενέργεια και κυματοσυνάρτηση

- Η μέση ενέργεια θα είναι

$$\langle \mathrm{E} \rangle = \mathrm{P}_1 E_1 + P_2 E_2 = \frac{1}{2}(E_1 + 4E_1) = \frac{5\hbar^2\pi^2}{4ma^2}$$

- Στην ενότητα 13 εξηγήσαμε γιατί οι κυματοσυναρτήσεις

1. $\psi(x,t) =$
   $|c_1|e^{i\varphi_1}e^{-iE_1 t/\hbar}\psi_1(x) + |c_2|e^{i\varphi_2}e^{-iE_2 t/\hbar}\psi_2(x)$ και
2. $\tilde{\psi}(x,t) =$

$$|c_1|e^{i(\varphi_1-\varphi_2)}e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}\psi_1(x) + |c_2|e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}\psi_2(x)$$

περιγράφουν ουσιαστικά την ίδια κατάσταση.

Κυματοσυνάρτηση

- Επομένως για να εκφράσουμε την κυματοσυνάρτηση σ’ ένα οποιοδήποτε σύστημα δύο επιπέδων μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον γενικό τύπο

$$\tilde{\psi}(x,t) = |c_1| e^{i(\varphi_1-\varphi_2)} e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \psi_1(x) + |c_2| e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \psi_2(x)$$

ή αντίστοιχα τον

$$\tilde{\psi}(x,t) = |c_1| \psi_1(x) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + |c_2|\, e^{i(\varphi_2-\varphi_1)} \psi_2(x) e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}$$

- Αντικαθιστώντας τα δεδομένα μας καταλήγουμε στην έκφραση

$$\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{(-i)}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{a}} sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \left[1 - 2i sin\frac{\pi x}{a}\right]$$

Συνεχές και διακριτό φάσμα στην κβαντομηχανική

- Γενικά μια φυσική ποσότητα θα λέμε ότι έχει **διακριτό φάσμα**, αν λαμβάνει μόνο διακριτές τιμές (και προφανώς **συνεχές φάσμα** αν συμβαίνει το αντίθετο).
- Συγκεκριμένα στην κβαντομηχανική το διακριτό φάσμα μιας μεταβλητής αντιστοιχεί στις ιδιοτιμές του τελεστή που την περιγράφει.
- Θα δούμε λοιπόν πώς επεκτείνονται όσα έχουμε πει ως ώρας στην περίπτωση που το πρόβλημα ιδιοτιμών ενός τελεστή Α δεν έχει διακριτό φάσμα αλλά συνεχές.

Από το διακριτό στο συνεχές

- Είδαμε για την περίπτωση του διακριτού φάσματος ότι η λύση της εξίσωσης Schrödinger δίνεται από το γνωστό ανάπτυγμα $\psi = \sum c_n \psi_n$.
- Θα θεωρήσουμε μια εύλογη επέκταση στο συνεχές, αν αντικαταστήσουμε το άθροισμα με ολοκλήρωμα, δηλαδή $\psi = \int c(a)\psi_a(x)d\alpha$, όπου ψ είναι η λύση της εξίσωσης ιδιοτιμών $\mathrm{A}\psi_a = a\psi_a$ με την ιδιοτιμή α να εκτείνεται πλέον στο συνεχές φάσμα $(-\infty, \infty)$.
- Ο τύπος για τους συντελεστές θα είναι όπως και στο διακριτό, δηλ. $\mathrm{c}(\alpha) = (\psi_\alpha, \psi)$ και οι πιθανότητα εμφάνισης της ιδιοτιμής α θα είναι $P(a) = |c_a|^2$.

Η συνθήκη κανονικοποίησης στο συνεχές

- Είχαμε δει στην περίπτωση του διακριτού φάσματος ότι η συνθήκη κανονικοποίησης είναι

$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm}$, (όπου θυμίζουμε δ_{nm} είναι το δέλτα του Kronecker με τιμή μονάδα αν $n = m$ και μηδέν αν $m \neq n$).

- Ποια είναι λοιπόν η ανάλογη συνθήκη κανονικοποίησης για το συνεχές φάσμα;

- Θα γράψουμε λοιπόν το συνεχές ανάλογο ως

$(\psi_\alpha, \psi_{\alpha'}) = \delta(\alpha, \alpha')$. Η συνάρτηση $\delta(\alpha, \alpha')$ ζητάμε να έχει τις εξής ιδιότητες: 1) Για $\alpha \neq \alpha'$ θα πρέπει να είναι μηδέν γιατί οι ιδιοσυναρτήσεις ψ_α και $\psi_{\alpha'}$ είναι ορθογώνιες. 2)Για $\alpha = \alpha'$ θα πρέπει να απειρίζεται. Αυτό συμβαίνει γιατι οι ιδιοσυναρτήσεις του συνεχούς φάσματος **δεν είναι πλέον τετραγωνικά ολοκληρώσιμες.** Άρα το ολοκλήρωμα $\int |\psi_\alpha|^2 dx$ είναι άπειρο.

Συνάρτηση δέλτα του Dirac

- Η συνάρτηση που ικανοποιεί τις παραπάνω ιδιότητες είναι η λεγόμενη **συνάρτηση δέλτα του Dirac**(αν θέλουμε να είμαστε ακριβείς είναι συναρτησιακό και όχι συνάρτηση, αλλά για ευκολία θα την αποκαλούμε «συνάρτηση»).
- Η συνάρτηση δέλτα $\delta(x-a)$ είναι παντού μηδέν πλην του σημείου $x=a$ όπου απειρίζεται. Ακόμη έχει την ιδιότητα $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)dx = 1$. Επιπλέον για μια τυχούσα συνάρτηση $\varphi(x)$, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\varphi(x)dx = \varphi(\alpha)$.

Κυματοπακέτα

- Έχουμε αναφέρει ότι η μόνη περίπτωση μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων στην κβαντομηχανική που έχει φυσική σημασία είναι αυτές του ελεύθερου σωματίου.
- Το φάσμα των ενεργειών για το ελεύθερο σωμάτιο είναι συνεχές. Θυμίζουμε ότι οι ενέργειες δίνονται από τον τύπο $\mathrm{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ με $k \exists (-\infty, \infty)$. Άρα εφαρμόζονται όσα αναφέραμε για το συνεχές φάσμα. Το κυματοπακέτο στην περίπτωσή μας είναι η κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{\frac{-iE(k)t}{\hbar}} \psi_k(x) dk =$

$$\int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{\frac{-iE(k)t}{\hbar}} e^{ikx}\, dk$$

Θεώρημα Fourier

- Με συντομία υπενθυμίζουμε ότι το θεώρημα Fourier αναφέρει ότι αν

$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk$, τότε

$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$. Η $\tilde{f}(k)$ είναι γνωστή ως ο μετασχηματισμός Fourier της $f(x)$.

Εφαρμογή θεωρήματος Fourier

- Σύμφωνα με το θεώρημα Fourier λοιπόν θα έχουμε ότι

$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{\frac{-iE(k)t}{\hbar}} e^{ikx}\, dk$ (1) (Η σταθερά μπροστά από το ολοκλήρωμα προφανώς δεν επηρεάζει κάπου καθώς μπορούμε αν θέλουμε να θεωρήσουμε ότι απορροφάται από τους συντελεστές. Την τοποθετούμε εδώ για να είμαστε σε συμφωνία με το θεώρημα Fourier).

- Άρα $c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx}\psi(x, t=0)dx$. (2)
- Αντικαθιστούμε τα πλάτη στην κυματοσυνάρτηση κι έχουμε $\psi(x, t=0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\left[\int e^{-ikx'}\psi(x', t=0)dx'\right]e^{ikx}$
- Έχουμε χρησιμοποιήσει τους τόνους για να δηλώσουμε ότι η μεταβλητή x που βρίσκεται στο ολοκλήρωμα (2) δεν είναι η ίδια με αυτή του ολοκληρώματος (1).

Συνθήκη νορμαλισμού

- Άρα καταλήγουμε ότι

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x', t=0) \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik(x'-x)}}{2\pi} dk \right] dx'$$

- Για να ισχύει η παραπάνω ισότητα θα πρέπει

$\delta(x - x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik(x'-x)}}{2\pi} dk$ (Θυμίζουμε $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\varphi(x)dx = \varphi(\alpha)$).

- Επομένως είδαμε και με αναλυτικό τρόπο(πέρα από τις απλές γενικεύσεις για την μετάβαση από το γραμμικό στο συνεχές) πώς εξάγεται η συνθήκη νορμαλισμού για το ελεύθερο σωμάτιο.

- Η συνθήκη λοιπόν είναι $\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{ikx'}\right)^* e^{ikx} dk = \delta(x - x')$ ή

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{ik'x}\right)^* e^{ikx} dx = \delta(k - k')$$

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.

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών,Ανδρέας Τερζής ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι. Η έννοια του κυματοπακέτου στην Κβαντομηχανική». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης