ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΕΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ



Συνοπτικές Σημειώσεις Μαθήματος

Κβαντομηχανικής ΙΙ

Ακαδημαϊκής Χρονιάς 2018-2019



ΥΠΕΥΘΥΝΟΣ: ΤΣΕΤΣΕΡΗΣ ΛΕΩΝΙΔΑΣΣΠΟΥΔΑΣΤΗΣ: *ΛΑΠΠΑΣ ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ* ΑΡ.ΜΗΤΡΩΟΥ: *09107019*

## Κεφάλαιο 1

## Οι Θεμελιώδεις Αρχές

## 1.Η αρχή του κυματοσωματιδιακού δυισμού

Η αρχή του σωματιδιακού δυισμού ήρθε ως η λύση σε πολλά προβλήματα της εποχής της δύσης της επικράτησης της κλασικής φυσικής. Αυτή διατυπώνεται ως εξής:

***Αρχή κυματοσωματιδιακού δυϊσμού:*** *Τα πάντα στη φύση έχουν διπλή υφή, είναι σωματίδια και κύματα ταυτόχρονα. ‘Ο,τι θεωρούσαμε πριν αποκλειστικά ως κύμα –π.χ. το φώς– έχει ταυτόχρονα και σωματιδιακή υπόσταση, ενώ ό,τι θεωρούσαμε πριν αποκλειστικά ως σωματίδιο –πχ. Το ηλεκτρόνιο, το πρωτόνιο κ.λπ. – συμπεριφέρεται ταυτόχρονα και ως κύμα. Οι σχέσεις που συνδέον αυτές τις δύο, κλασικά ασυμβίβαστες, όψεις των πραγμάτων –την κυματική με τη σωματιδιακή– είναι οι:*

*,*  (Α)

ή, ισοδύναμα

*, .* (B

*Στη μορφή (Α) οι σχέσεις του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού αναφέρονται σε ό,τι θεωρούνταν αρχικά μόνο ως κύμα –π.χ. τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα– και συνδέουν τα κυματικά χαρακτηριστικά f και λ (συχνότητα και μήκος κύματος) με τα σωματιδιακά χαρακτηριστικά Ε και p (ενέργεια και ορμή) του αντίστοιχου σωματιδίου. Αντίστοιχα, στη μορφή (Β) αναφέρονται σε ό,τι θεωρούνταν αρχικά μόνο ως σωματίδιο –π.χ. το ηλεκτρόνιο– και συνδέουν τα σωματιδιακά του χαρακτηριστικά Ε και p με τα κυματικά χαρακτηριστικά f και λ του αντίστοιχου κύματος. Ο συνδετικός κρίκος είναι η σταθερά h του Planck με αριθμητική τιμή:*

Ακόμη, μπορούμε να παράγουμε τις εξισώσεις του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού χρησιμοποιώντας την:

*Κυκλική συχνότητα: , τον κυματαριθμό: , οπότε οι σχέσεις γίνονται:*

*, (1.1)*

*Όπου η ανηγμένη (ή σύγχρονη) σταθερά του Planck*

### 2.Η εξίσωση Schrödinger

Το αποτέλεσμα των αναζητήσεων για μια σοβαρή ποσοτική περιγραφή των υλικών κυμάτων που «συνοδεύουν» την κίνηση των υλικών σωματιδίων (σύμφωνα με την άνω περιγραφείσα αρχή του σωματιδιακού δυϊσμού) έδωσε την λεγόμενη εξίσωση Schrödinger:

*εξίσωση* Schrödinger (1.3)

Όπου

η περίφημη ***κυματοσυνάρτηση***και

*V(****r****)* το***δυναμικό υπό την επίδραση του οποίου κινείται το σωματίδιο.***

H (1.3) γράφεται και στη μορφή (1.4) , όπου ο ***Χαμιλτωνιανός τελεστής.***

Απλό *παράδειγμα* αποτελεί το σωματίδιο που εκτελεί μονοδιάστατη κίνηση από ελκτική δύναμη ανάλογη της απομάκρυνσης του σωματιδίου γύρω από ελκτικό κέντρο στο . (Δηλαδή ). Σε αυτή την περίπτωση για το δυναμικό έχουμε: , οπότε για την εξίσωση Schrödinger θα έχουμε:

O ***Χαμιλτωνιανός τελεστής*** μπορεί να θεωρηθεί ότι προκύπτει από την κλασική έκφραση της ολικής ενέργειας:

με τις αντικαταστάσεις:

, , , (1.6)

Και , , ,

O όρος *τελεστής* αναφέρεται σε κάθε «πράξη» -«σε κάθε κανόνα αντιστοίχησης»- που απεικονίζει ένα σύνολο μαθηματικών αντικειμένων σε ένα άλλο. Οι τελεστές που χρησιμοποιούμε στην κβαντομηχανική έχουν επιπλέον την ιδιότητα να είναι «*γραμμικοί»,* δηλαδή:

Επειδή ο Χαμιλτωνιανός τελεστής είναι γραμμικός, βλέπουμε λοιπόν με έναν ακόμη τρόπο ότι η ***εξίσωση Schrödinger είναι γραμμική***. Μια συνέπεια τεράστιας σημασίας αυτής της γραμμικότητας είναι ξ εξής:

* *Κάθε γραμμικός συνδυασμός λύσεων της εξίσωσης Schrödinger είναι επίσης λύση της.*

*(Η απόδειξη στηρίζεται στην γραμμικότητα των επί μέρους τελεστών της εξίσωσης Schrödinger*

Παρά την ομοιότητα που παρουσιάζει η *εξίσωση Schrödinger* με την *κλασική εξίσωση της κυματικής* ως αναφορά την γραμμικότητα τους, παρουσιάζουν και κάποιες **διαφορές**. Οι πιο σημαντικές, ίσως, είναι οι εξής:

* Α) *Η εξίσωση Schrödinger έχει μιγαδικούς συντελεστές ενώ η κλασική κυματική εξίσωση είναι καθαρά πραγματική.*

Ως *συνέπεια* οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger είναι *καθαρά μιγαδικές* και **δεν είναι δυνατόν να αναπαριστούν ένα φυσικά παρατηρήσιμο κύμα**.

* Β) *Η εξίσωση Schrödinger είναι πρώτης τάξεως ως προς τον χρόνο, ενώ η αντίστοιχη κλασική είναι δευτεροτάξια.*

Αυτό έχει ως συνέπεια να απαιτείται μόνο η γνώση της αρχικής μορφής της κυματοσυνάρτηση για την λύση της εξίσωσης Schrödinger, ενώ για την αντίστοιχη κλασική κυματική εξίσωση χρειαζόμαστε και την αρχική μορφή και την αρχική ταχύτητα όλων των σημείων του σώματος .

Στην περίπτωση της *ελεύθερης κίνησης* και έστω για ***μία διάσταση***, η μορφή της εξίσωσης Schrödinger: (1.9)

φαίνεται ικανοποιητική από φυσικής πλευράς. Πράγματι, αν απαιτήσουμε να ικανοποιείται από ένα «επίπεδο μιγαδικό κύμα» της μορφής:

σύμφωνα με την αρχή του κυματοσωματιδιακού δυϊσμού απουσίας δυναμικού θα πάρουμε:

σχέση που ικανοποιείται μόνο αν

Αυτή είναι η *μη σχετικιστική σχέση ενέργειας-ορμής*, απ’ όπου προκύπτει ότι η εξίσωση Schroedinger είναι μια *μη σχετικιστική εξίσωση.* Δηλαδή για να είναι ικανή να περιγράψει τον μικρόκοσμο πρέπει οι ταχύτητες των σωματιδίων να είναι αρκετά μικρότερες από την ταχύτητα του φωτός.

### 3.Η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης

*Πώς είναι δυνατόν ένα σωματίδιο να είναι ταυτόχρονα και κύμα χωρίς να χάνει την σωματιδιακή του υπόσταση;*

Η αδυναμία μας στο να απαντήσουμε μέσω μιας συμβατικής κλασικής ερμηνείας σε αυτήν την ερώτηση οφείλεται από το καθαρά μαθηματικό γεγονός που αναφέραμε πριν, ότι δηλαδή οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger είναι *υποχρεωτικά* **μιγαδικές**. Επομένως δεν είναι δυνατόν να αντιπροσωπεύουν μια μετρήσιμη φυσική διαταραχή.

Έτσι οδηγούμαστε στην περίφημη πλέον στατιστική ερμηνεία της (M.Born 1926):

***H στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης:*** *Η κυματοσυνάρτηση δεν αντιπροσωπεύει ένα φυσικά παρατηρήσιμο κλασικό κύμα αλλά ένα «κύμα πιθανότητας». Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης μας δίνει την πυκνότητα πιθανότητας –δηλαδή την πιθανότητα ανά μονάδα μήκους (ή όγκου)– να βρούμε το σωματίδιο σε μια περιοχή του χώρου.*

Δηλαδή, για *μονοδιάστατο* πρόβλημα η ***πυκνότητα πιθανότητας*** *θα είναι:*

Όπου γράφουμε απλά ψ(x) εννοώντας απλά ένα *στιγμιότυπο* της ψ(x,t), δηλαδή τη μορφή της για μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή , καθώς, για τη στατιστική ερμηνεία, ο χρόνος t είναι μόνο μια *παράμετρος* χωρίς ιδιαίτερη σημασία, γ αυτό και απ την άνω σχέση παραλείψαμε τη χρονική μεταβλητή απ το σύμβολο της κυματοσυνάρτησης.

Η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο *κάπου μεταξύ x και x +dx* θα είναι:

οπότε η ολική πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο οπουδήποτε στο πλήρες διάστημα θα είναι:

που *πρέπει να ισούται με τη μονάδα:*

(1.10)

που ονομάζεται *συνθήκη κανονικοποίησης,* ενώ μια κυματοσυνάρτηση που την ικανοποιεί ονομάζεται κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση.

Για να *μπορεί μια κυματοσυνάρτηση να κανονικοποιηθεί* πρέπει κατά πρώτο λόγο να ισχύει η ακόλουθη σχέση:

δηλαδή πρέπει *το ολοκλήρωμα του τετραγώνου της μεταξύ των απείρων να συγκλίνει*. Αυτές οι συναρτήσεις ονομάζονται ***τετραγωνικά ολοκληρώσιμες.*** Όλες τις τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις, *μπορούμε να τις πολλαπλασιάσουμε* με έναν κατάλληλο πολλαπλασιαστικό παράγοντα *(συντελεστή κανονικοποίησης)* ώστε *η συνολική πιθανότητα να βγαίνει ίση με μονάδα.*

*Τα άνω συνεπάγονται επίσης ότι για να περιγράφει μια κυματοσυνάρτηση μια πραγματοποιήσιμη φυσική κατάσταση του σωματιδίου πρέπει να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη!* Για να ισχύει αυτό, πρέπει, ακόμα

δηλαδή να μηδενίζεται η κυματοσυνάρτηση στο

Παρ όλα αυτά, θα γίνουν δεκτές και κυματοσυναρτήσεις που *δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες,* όπως πχ το επίπεδο κύμα (). Οι συναρτήσεις αυτές πρέπει παρ’ όλα αυτά να είναι παντού πεπερασμένες. Αυτές οι κυματοσυναρτήσεις αποτελούν κάποιες μαθηματικά πολύ εύχρηστες *εξιδανικεύσεις* φυσικά πραγματοποιήσιμων καταστάσεων.

Για την **τρισδιάστατη περίπτωση**, για την πυκνότητα πιθανότητας έχουμε:

ενώ για την συνθήκη κανονικοποίησης θα έχουμε:

Με την ερμηνεία της ως κύματος πιθανότητας η αντίφαση της κλασικής φυσικής αντίληψης μεταξύ των εννοιών σωματιδίου και κύματος εξαφανίζεται αφού τώρα τι σωματίδιο δεν είναι πια υποχρεωμένο να αρνηθεί τη σωματιδιακή του υπόσταση και να «διαχυθεί» σε όλο τον όγκο του κύματος.