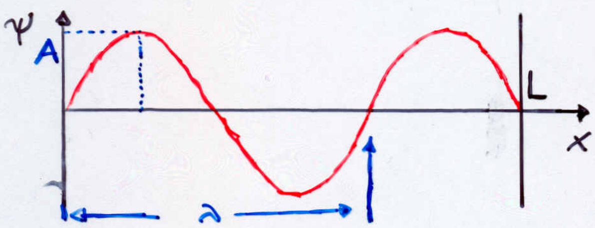
Η εξίσωση του Schrödinger

"Από πού την πήραμε αυτή την εξίσωση;
Από πουθενά. Δεν προκύπτει από τίποτε από αυτά που ξέρουμε.
Βγήκε από το μυαλό του Schrödinger."

R. Feynman

ψάχνουμε : • κυματική εξίσωση
• χρονοανεξάρτητη

α) στάσιμο κύμα (σε 1-D)



$\psi(x) = A\sin\frac{2\pi x}{\lambda}$: κυματοσυνάρτηση

β) παραγωγίζουμε 2 φορές ως προς x ⇒ ΔΕ

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{2\pi A}{\lambda}\cos\frac{2\pi x}{\lambda} \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{-4\pi^2 A}{\lambda^2}\sin\frac{2\pi x}{\lambda} \Rightarrow \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{-4\pi^2}{\lambda^2}\psi}$$

γ) Συνοριακές Συνθήκες

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \Rightarrow A\sin\frac{2\pi L}{\lambda} = 0 \Rightarrow \frac{2\pi L}{\lambda} = n\pi \Rightarrow \boxed{\lambda = \frac{2L}{n}} \quad n=1,2,3,\ldots$$

ok από αρχική υπόθεση

Οι συνοριακές συνθήκες στην κυματοσυνάρτηση οδηγούν στην κβάντωση της Ενέργειας

δ) Υλικά - Κύματα $p = \frac{h}{\lambda}$ de Broglie

$$\left.\begin{array}{l} \Delta E \Rightarrow \dfrac{d^2\psi}{dx^2} = \dfrac{-4\pi^2}{h^2}p^2\psi \\ \left.\begin{array}{l} T = \frac{1}{2}mv^2 = \dfrac{p^2}{2m} \\ T = E - V(x) \end{array}\right\} p^2 = 2m(E-V) \end{array}\right\} \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi \Rightarrow$$

$$\boxed{-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi}$$

εξίσωση Schrödinger

$\hbar = \frac{h}{2\pi} \Rightarrow \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi + V(x)\Psi = E\cdot\Psi$

$\Downarrow$ 3-D

$\Psi(x) \rightarrow \Psi(x,y,z)$

$V(x) \rightarrow V(x,y,z)$

$\frac{d^2}{dx^2} \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \nabla^2$: Λαπλασιανή

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(x,y,z)\Psi = E\Psi$$

$\Downarrow \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)$: Χαμιλτονιανή

$\boxed{\hat{H}\Psi = E\Psi}$ εξ. Schrödinger

ΚΛΑΣΣΙΚΗ	ΜΗΧΑΝΙΚΗ	ΚΒΑΝΤΙΚΗ
συνάρτηση Hamilton	$\rightarrow$	Χαμιλτονιανή
$H_F = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x,y,z)$	$\rightarrow$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z)$
x	$\rightarrow$	x
p_x	$\rightarrow$	$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

αρχή της αντιστοιχίας

Φυσική Σημασία Κυματοσυνάρτησης

"Η κυματοσυνάρτηση δεν αντιπροσωπεύει ένα φυσικά παρατηρήσιμο κλασσικό κύμα αλλά ένα κύμα πιθανότητας.
Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης δίνει την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο σε μια περιοχή του χώρου" Max Born 1926

$\psi(x)$: κυματοσυνάρτηση ($\psi(x) \in \mathbb{Z}$)

$P(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x) \cdot \psi(x)$: πυκνότητα πιθανότητας

$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)\,dx = \boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1}$: συνθήκη κανονικοποίησης

Κανονικοποίηση Κυματοσυνάρτησης

$H\psi = E\psi$: εξ. ιδιοτιμών $\Rightarrow$ Αν ψ: λύση (ιδιοσυνάρτηση του τελεστή H)

$\Downarrow$

$k\,\psi$: λύση

κανονικοποιούμε πολ/ντας με N : $\int_{-\infty}^{+\infty} N^2 \psi^2_{(x)}\,dx = 1 \Rightarrow N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2_{(x)}\,dx = 1 \Rightarrow$

$\Rightarrow N = \dfrac{1}{\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2_{(x)}\,dx}}$ ή $\boxed{N^{-2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2_{(x)}\,dx}$ συντελεστής κανονικοποίησης

"Η κβαντική μηχανική είναι πολύ εντυπωσιακή. Όμως μια εσωτερική φωνή μου λέει ότι δεν πρόκειται γι'αυτό που πραγματικά αποζητούμε. Η θεωρία παράγει πολλές προβλέψεις αλλά δεν μας φέρνει πλησιέστερα στο μυστικό του Δημιουργού. Είμαι απολύτως πεπεισμένος ότι <u>Εκείνος δεν παίζει ζάρια</u>" A. Einstein (επιστολή προς Born)

"Επισημαίνω τη μεγάλη περίσκεψη που συνιστούσαν ήδη οι αρχαίοι στοχαστές, με την οποία πρέπει να χρησιμοποιείται η καθημερινή γλώσσα όταν πρόκειται να αποδοθούν κατηγορήματα στη Θεία Πρόνοια"

Niels Bohr (συνέδριο 1927)

ψ^2 : πυκνότητα πιθανότητας ⇒ Δεν μπορούμε να πούμε ακριβώς που βρίσκεται το σωματίδιο σε συγκεκριμένη χρονική στιγμή

⇓

Αρχή της Αβεβαιότητας Heisenberg

⇓

$$(\Delta x)(\Delta p) \geqslant \hbar$$

"Η φωτεινή ενέργεια μεταφέρεται κατά ορισμένα ποσά. Κάνοντας μια μέτρηση, αναγκαστικά προκαλούμε μια σημαντική διαταραχή στο αντικείμενο στο οποίο κάνομε τη μέτρηση. Για αντικείμενα μικροσκοπικών διαστάσεων τέτοιες διαταραχές δεν είναι αμελητέες και δεν υπάρχει πρακτικός ή θεωρητικός τρόπος να μειώσουμε τη διαταραχή αυτή στο μηδέν."

Για να προσδιορίσουμε με μεγάλη ακρίβεια τη θέση πρέπει αναγκαστικά να χρησιμοποιήσουμε φως με πολύ μικρό μήκος κύματος

⇓ $\lambda = \frac{c}{\nu}$

μεγάλη συχνότητα

⇓ $E = h \cdot \nu$

φωτόνια με μεγάλη Ενέργεια

⇓

μεγάλη διαταραχή στο σύστημα

⇓

μεγάλη απροσδιοριστία στη μέτρηση της ορμής

Μακροσκοπικά... $(\Delta x)\cdot(\Delta p) \approx 10^{-27}$ erg.sec

οπότε μπορούμε να επιτύχουμε ακρίβεια : $\Delta x = 10^{-13}$ cm και $\Delta p = 10^{-14}$ gr.cm/sec

για $m = 1$gr ⇒ $\Delta u = \frac{\Delta p}{m}$ ⇒ $\Delta u = 10^{-14}$ cm/sec