Η Εξίσωση του Schrödinger ….

Κατευθυντήριες σκέψεις:

1. Η σωστή μαθηματική περιγραφή των υλικών κυμάτων απαιτεί την χρήση μιας **κυματικής εξίσωσης** ανάλογης (αλλά όχι ταυτόσημης) με εκείνη των κλασικών κυμάτων.
2. Στην Κλασική Φυσική ένα κύμα καθορισμένου μήκους κύματος λ (και κυματαριθμού $k=2\pi/\lambda$) περιγράφεται από τη συνάρτηση $y = A\,sin\left(2\pi x/\lambda\right) = A\,sin(kx)$ και ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση (Δ.Ε.) $y'' + k^2 y = 0$.
3. Κατ' αναλογία με τα κλασικά κύματα, υποθέτουμε ότι η **κυματοσυνάρτηση** $\psi\left(x\right)$ ενός **υλικού κύματος** κυματαριθμού $k = p/\hbar$ ικανοποιεί τη Δ.Ε.
$$\psi'' + k^2\psi = \psi'' + \frac{p^2}{\hbar^2}\psi = 0 \qquad (1)$$
4. …κι αν υποθέσουμε επιπλέον ότι η (1) ισχύει και όταν το σωματίδιο κινείται υπό την επίδραση ενός δυναμικού *V(x),* όποτε θα είναι $E = \frac{p^2}{2m} + V\left(x\right) \Rightarrow p^2 = 2m\left(E - V\left(x\right)\right)$, τότε η (1) καταλήγει στην "**εξίσωση Schrödinger**" $\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V\left(x\right)\right)\psi = 0$ ως υποψήφια θεμελιώδη εξίσωση της Κβαντικής Φυσικής.

Εξίσωση Schrödinger *	
$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V\left(x\right)\right)\psi = 0$	1-D
$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V\left(x,y,z\right)\right)\psi = 0$, $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$	3-D

* Η, ακριβέστερα, **χρονοανεξάρτητη Εξίσωση Schrödinger**

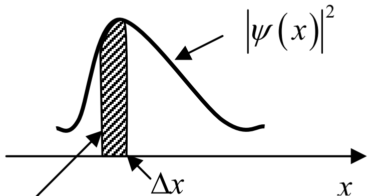
…και η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης (Ι)

<table>
<tr>
<td>

$$P\left(x\right) = \left|\psi\left(x\right)\right|^2$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi\left(x\right)\right|^2 dx = 1$$

Συνθήκη κανονικοποίησης



Πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο σ' ένα διάστημα Δx γύρω από το σημείο x.

</td>
<td>

- Η κυματοσυνάρτηση δεν περιγράφει ένα μετρήσιμο φυσικό κύμα αλλά ένα **κύμα πιθανότητας**. Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της δίνει την **πιθανότητα ανά μονάδα μήκους** να βρούμε το σωματίδιο στη γειτονιά του σημείου *x*.
- Η στατιστική ερμηνεία της ψ αίρει την αντίφαση «σωματίδιο – κύμα», διότι τώρα το κύμα περιγράφει την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο εδώ ή εκεί αλλά ποτέ εδώ και εκεί ταυτόχρονα.
- Αναγκαία συνθήκη για να είναι μια κυματοσυνάρτηση φυσικά παραδεκτή είναι **να μηδενίζεται στο** $\pm\infty$.

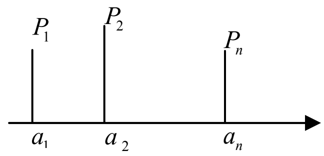
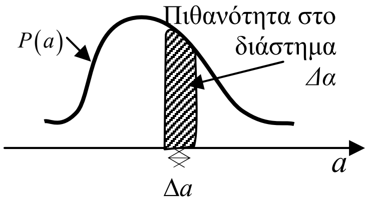
</td>
</tr>
</table>

ΜΕΛΕΤΗ: *Σ. Τραχανά, Κβαντομηχανική Ι, σελ. 107 – 124.*

Η στατιστική ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης ΙΙ

[Μέση θέση και αβεβαιότητα θέσης]

Α: Ανασκόπηση των βασικών στατιστικών εννοιών

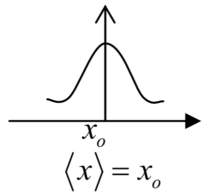
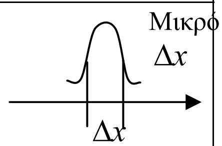
<table>
<tr><td></td><td>Διάκριτη κατανομή</td><td>Συνεχής κατανομή</td></tr>
<tr><td></td><td>
</td><td>
</td></tr>
<tr><td>Μέση τιμή</td><td>$\langle A\rangle = \sum_n a_n P_n$</td><td>$\langle A\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} aP(a)\,da$</td></tr>
<tr><td></td><td>Η μέση τιμή ισούται με το άθροισμα των δυνατών τιμών του μεγέθους πολλαπλασιασμένων με τις αντίστοιχες πιθανότητες.</td><td>Η μέση τιμή ισούται με το ολοκλήρωμα του γινομένου της στατιστικής μεταβλητής επί την αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας.</td></tr>
<tr><td>Διασπορά
ή αβεβαιότητα</td><td colspan="2">$(\Delta \mathrm{A})^2 \underset{op}{=} \left\langle \left(\mathrm{A}-\langle \mathrm{A}\rangle\right)^2 \right\rangle = \langle \mathrm{A}^2\rangle - \langle \mathrm{A}\rangle^2$
Το τετράγωνο της αβεβαιότητας (ή διασποράς) ισούται με:
1. Τη μέση τιμή της τετραγωνισμένης απόκλισης από τη μέση τιμή (ορισμός).
2. Τη μέση τιμή του τετραγώνου μείον το τετράγωνο της μέσης τιμής (συνέπεια).</td></tr>
<tr><td></td><td>$\langle A^2\rangle = \sum a_n^2 P_n$</td><td>$\langle A^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 P(a)\,da$</td></tr>
<tr><td></td><td>$\sum P_n = 1$</td><td>$\int_{-\infty}^{+\infty} P(a)\,da = 1$</td></tr>
</table>

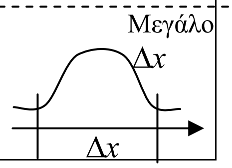
$$\sum_n \;\to \int da$$

Διακριτό → Συνεχές

Β: Εφαρμογή στην Κβαντομηχανική

$[\,a \to x\,,\; P(a) \to P(x) = |\psi(x)|^2\,]$

<table>
<tr><td>Μέση θέση</td><td>$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\psi(x)|^2\,dx$</td><td>➢ Αποτελεί χονδρική ένδειξη για το πού περίπου βρίσκεται το σωματίδιο.
➢ Για μια συμμετρική κατανομή η μέση θέση βρίσκεται στο κέντρο συμμετρίας της</td><td>
</td></tr>
<tr><td>Αβεβαιότητα θέσης</td><td>$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$
$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,|\psi(x)|^2\,dx$</td><td>➢ Αποτελεί ένα χονδρικό μέτρο του εύρους της περιοχής γύρω από τη μέση τιμή μέσα στην οποία με μεγάλη πιθανότητα βρίσκεται το σωματίδιο.
➢ Οι «ψιλόλιγνες» κυματοσυναρτήσεις έχουν μικρό Δx και οι «κοντόχοντρες» μεγάλο.</td><td>


</td></tr>
</table>

ΜΕΛΕΤΗ: *Σ. Τραχανά, Κβαντομηχανική Ι, σελ. 124 – 132.*