11° Μάθημα: 17/12/2020

Εφαρμογές στη Μαθηματική Φυσική:

Σειρές Fourier:

συνοριακές συνθήκες $\left.\begin{array}{l} y'' + \lambda y = 0 \\ y(0) = y(1) = 0 \end{array}\right\}$ $Ay = \lambda y \qquad A = -\dfrac{d^2}{dx}$

Γνωρίζουμε ότι $y_n(x) = \sin\dfrac{n\pi x}{L}$, $n = 0, 1, 2, \dots$

Δηλ. κάθε συνάρτηση $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \sin\dfrac{n\pi x}{L}$

όπου $c_n = \dfrac{\langle y_n | f \rangle}{\|y_n\|^2}$

Σειρά συνημιτόνων:

$y'' + \lambda y = 0$
$y'(0) = y'(L) = 0$

Τότε $y_n = \cos\dfrac{n\pi x}{L}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ και αντίστοιχα

γράφουμε ∀ συνάρτηση $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot \cos\dfrac{n\pi}{L} x =$

$= c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \cos\dfrac{n\pi x}{L}$

τότε $c_0 = \dfrac{\langle y_0 | f \rangle}{\|y_0\|^2}$, $c_n = \dfrac{\langle y_n | f \rangle}{\|y_n\|^2}$

Η πλήρης σειρά:

Θεωρούμε το πρόβλημα συνοριακών τιμών:

$y'' + \lambda y = 0$
$y(0) = y(1) = 0$
$y'(0) = y'(1) = 0$ κ' θέτουμε $\lambda = k^2 > 0$

(θετικό για να είμαι σε ημίτονα κ' σε συν

Η γενική λύση της διαφορικής εξίσωσης είναι
$y(x) = c_1 \cos(kLx) + c_2 \sin(kLx)$
εφαρμόζω συνοριακές συνθήκες.

$$\left.\begin{matrix} y(0)=y(1) \\ y'(0)=y'(1) \end{matrix}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{matrix} c_1 = c_1\cos(kL) + c_2 \sin(kL) \\ c_2 k = -c_1 k \sin(kL) + c_2 k \cos(kL) \end{matrix}\right.$$

$$(\cos(kL) - 1)c_1 + \sin(kL)c_2 = 0$$
$$-\sin(kL)c_1 + (\cos(kL) - 1)c_2 = 0$$

Ομογενές σύστημα και για να έχω λύσεις εκτός της τετριμμένης:

$$\begin{vmatrix} \cos(kL) - 1 & \sin(kL) \\ -\sin(kL) & \cos(kL) - 1 \end{vmatrix} = 0$$

$$\Leftrightarrow (\cos(kL) - 1)^2 + \sin^2(kL) = 0$$

$$\Leftrightarrow \cos^2(kL) - 2\cos(kL) + 1 + \sin^2(kL) = 0$$
$$\Leftrightarrow \cos(kL) = 1 \Leftrightarrow kL = 2n\pi \Rightarrow k = \frac{2n\pi}{L}$$

$\lambda = k^2 = \frac{4n^2\pi^2}{L^2}$ στην ίδια ιδιοτιμή

αντιστοιχούν δύο ιδιοσυναρτήσεις $\left\{\begin{matrix} y_n^{(1)} = \cos \frac{2n\pi}{L} x \\ y_n^{(2)} = \sin \frac{2n\pi}{L} x \end{matrix}\right.$

Το φαινόμενο αυτό λέγεται εκφυλισμός
(σε 1 ιδιοτιμή έχω 2 ιδιοδιανύσματα)

Για την δική μας περίπτωση
$$\langle y_n^{(1)} | y_n^{(2)} \rangle = \int_0^1 \cos \frac{2n\pi x}{L} \sin \frac{2n\pi}{L} x \, dx = 0$$

δηλαδή τα δύο ιδιοδιανύσματα είναι ορθογώνια

Άρα $f(x) = a_0 y_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n y_n^{(1)} + b_n y_n^{(2)})$

με $a_0 = \dfrac{\langle y_0 | f \rangle}{\langle y_0 | y_0 \rangle}$, $a_n = \dfrac{\langle y_n^{(1)} | f \rangle}{\langle y_n^{(1)} | y_n^{(1)} \rangle}$

$b_n = \dfrac{\langle y_n^{(2)} | f \rangle}{\langle y_n^{(2)} | y_n^{(2)} \rangle}$

Εφαρμογές στη Σύγχρονη Φυσική:

Η μαθηματική θεμελείωση της σύγχρονης φυσικής και ιδιαίτερα της κβαντικής βασίζεται εν πολλοίς στην εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi$$

H είναι ένας διαφορικός τελεστής
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{r}), \quad V(\bar{r}) = V(x,y,z)$$

V είναι η "δυναμική ενέργεια" ή το δυναμικό κάτω από το οποίο κινείται το σωματίδιο.

$p_x = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$ είναι ο τελεστής της ορμής

$\hbar$ είναι η σταθερά του planck (διά 2π)

$$H\Psi \sim \frac{p^2}{2m} + V \quad \text{(κλασικά η ορμή } p = mu\text{)}$$
$$\sim \frac{1}{2} m u^2 + V$$

Φυσικό νοήμα: η λύση $\psi(\bar{r},t)$ της εξίσωσης ονομάζεται κυματοσυνάρτηση κ' προσδιορίζει την πιθανότητα ανα μονάδα όγκο να βρεθεί σωματίδιο μη στην γειτονιά του σημείου $\bar{r}$ την χρον. στιγμή t. Η πιθανότητα είναι

$$P = |\psi(\bar{r},t)|^2$$ κ' απαιτούμε.

$$\int |\psi(\bar{r},t)|^2 dv = 1$$

Ισχύουν οι παρακάτω αντιστοιχίες με την κλασική φυσική.

Κλασική Μηχανική	Κβαντική Μηχανική
• Τροχιά $\bar{r} = \bar{r}(t)$	Κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$
• Εξίσωση Newton $m\frac{d^2\bar{r}}{dt^2} = \bar{F}(\bar{r}) = -\bar{\nabla} V(\bar{r})$	$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r})\right]\psi$

Για να προσδιορίσουμε πλήρως τη λύση της εξίσωσης Schrödinger χρειαζόμαστε μια αρχική συνθήκη:

$$\psi(\bar{r},0) = \psi_0(\bar{r}) \quad (\text{γνωστή συνάρτηση})$$

και συνοριακές συνθήκες:

$$\lim_{r\to\infty} \psi(\bar{r},t) = \text{πεπερασμένο}$$

Συνήθως λόγω φυσικών απαιτήσεων έχουμε μηδενικές συνοριακές συνθήκες.

Η λύση της βασίζεται (συνήθως) στη μέθοδο του χωρισμού μεταβλητών. Δηλ. γράφουμε.

$$\psi(\bar{r},t) = \psi(\bar{r})\cdot T(t)$$

$$\dot{T} = \frac{dT}{dt}$$

ώστε $i\hbar \psi \dot{T} = \underbrace{(H\psi)}_{\text{Παράγωγος χώρα}} T \Rightarrow i\hbar \frac{\dot{T}}{T} = \frac{H\psi}{\psi}$

$$\Rightarrow \begin{cases} i\hbar \dot{T} = E T \Rightarrow T(t) \sim e^{-iE/\hbar \cdot t} \\ H\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\bar{r})\psi = E\psi \end{cases}$$

Η δευτερη εξίσωση είναι μια ειδική εξίσωση ιδιοτιμών με ιδιοτιμή E (ενέργεια του σωματιδίου). Ο τελεστής προκύπτει από την κλασική έκφραση της ενέργειας.

$$\frac{p^2}{2m} + V(\bar{r}) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x,y,z)$$

και αντιστοιχίσαμε μεγέθη σε τελεστές βάση τα κανόνα:

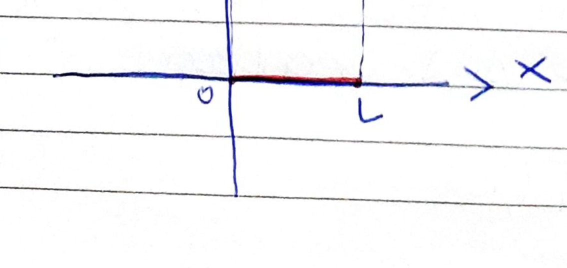
$$\begin{cases} x \to x \quad , y \to y \quad , z \to z \\ p_x \to -i\hbar \frac{d}{dx} , p_y \to -i\hbar \frac{d}{dy} , p_y \to -i\hbar \frac{d}{dz} \end{cases}$$

Το πρόβλημα πλέον είναι ένα ειδικό πρόβλημα ιδιοτιμών τύπου Sturm-Liouville

π.χ.

Σε μια διάσταση θεωρούμε $V(x) = \begin{cases} 0, & 0<x<L \\ \infty, & x<0, x>L \end{cases}$

Απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού



$$\left.\begin{array}{l} \text{Τότε} \quad \psi'' + E\psi = 0 \\ \psi(0) = \psi(1) = 0 \end{array}\right\} \Rightarrow E = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \quad n = 1, 2, \ldots$$

Ποιο το φυσικό νόημα του αποτελέσματος?

Η κβάντωση της ενέργειας. Δηλαδή το σωματίδιο μέσα στο μονοδιάστατο πηγάδι δυναμικού μπορεί να υπάρξει μόνο αν η ενέργεια του ακολουθεί μια διακριτή ακολουθία τιμών κι καμιά άλλη.