Σ.Η. ΜΑΣΕΝ
ΣΠΟΥΔΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ Ι

ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗ 2011

Πρόλογος

Η Κβαντομηχανική είναι ένα από τα πλέον βασικά μαθήματα του προγράμματος σπουδών του Τμήματος Φυσικής (Τ.Φ.). Ο λόγος είναι ότι σ' αυτήν στηρίζεται η εξήγηση και η μελέτη όλων σχεδόν των φαινομένων που μας οδήγησαν στις επαναστατικές ανακαλύψεις των τελευταίων εκατό ετών. Μερικά μόνο από αυτά, είναι η δομή των Στοιχειωδών Σωματιδίων, των Πυρήνων, του Περιοδικού Πίνακα των Στοιχείων, της Στερεάς Κατάστασης της Ύλης, της Νανοτεχνολογίας. Επιπλέον αποτελεί βασική γνώση για τη μελέτη της Αστροφυσικής και της Κοσμολογίας.

Η καταννόηση της Κβαντομηχανικής παρουσιάζει μια σχετική δυσκολία σε σύγκριση με τις άλλες θεωρίες της Φυσικής, επειδή η δομή και η "γλώσσα" που χρησιμοποιεί είναι πολύ πιο αφηρημένη και συμπαγής από ότι, για παράδειγμα, η "γλώσσα" της Νευτώνειας Μηχανικής. Μια άλλη δυσκολία προκύπτει από τον τρόπο με τον οποίο εξηγεί τα φαινόμενα του μικρόκοσμου σε "ατομική" κλίμακα που φαίνεται ότι έρχεται σε αντίθεση με την "κοινή λογική". Δηλαδή, με το σύνολο των "προκαταλήψεων" που αποκτά ο άνθρωπος από τα πρώτα χρόνια της ζωής του. Για παράδειγμα η κοινή λογική λέγει ότι αν ρίξουμε ένα σώμα με ενέργεια μικρότερη από τη μέγιστη τιμή ενός φράγματος δυναμικού, αυτό θα ανακλαστεί και δεν θα βρεθεί από την άλλη μεριά του φράγματος. Η Κβαντομηχανική απαντάει ότι υπάρχει κάποια πιθανότητα να βρεθεί από την άλλη μεριά του φράγματος. Με άλλα λόγια, ενώ η Νευτώνεια Μηχανική είναι μια αιτιοκρατική θεωρία, η Κβαντομηχανική είναι μια πιθανοκρατική θεωρία. Τέλος, ένα χαρακτηριστικό της Κβαντομηχανικής είναι ότι τα συμπεράσματά της δίνονται και γίνονται αντιληπτά μέσα από τη "γλώσσα" των μαθηματικών.

Τα παραπάνω έχουν ως αποτέλεσμα να εμφανίζονται κάποιες δυσκολίες στο γράψιμο ενός εισαγωγικού βιβλίου ή σημειώσεων Κβαντομηχανικής επειδή κατά τη διατύπωση των διαφόρων φυσικών εννοιών και ιδιοτήτων πρέπει να ανοίγονται μεγάλες παρενθέσεις που αναφέρονται στις απαραίτητες μαθηματικές έννοιες που συνήθως δεν έχουν διδαχθεί σε προηγούμενα μαθήματα. Έγινε προσπάθεια να ξεπεραστεί αυτή η δυσκολία με τη βοήθεια τριών παραρτημάτων όπου υπάρχουν οι βασικότερες από τις μαθηματικές έννοιες που είναι απαραίτητες στην καταννόηση της Κβαντομηχανικής. Το κυρίως μέρος των σημειώσεων αποτελείται από τέσσερα κεφάλαια που καλύπτουν την ύλη του μαθήματος της Κβαντομηχανική Ι. Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια σύντομη ανασκόπηση της Παλαιάς Κβαντομηχανικής και των υλοκυμάτων. Η ύλη αυτή θεωρείται γνωστή από το μάθημα του 2ου εξαμήνου " Ατομική - Μοριακή Φυσική". Στο δεύτερο κεφάλαιο εισάγεται η εξίσωση του Schrödinger και διατυπώνονται τα αξιώματα της Κβαντομηχανικής. Στα δύο τελευταία κεφάλαια γίνεται εφαρμογή σε μονοδιάστατα και τρισδιάστατα προβλήματα της Κβαντομηχανικής.

Είναι σκόπιμο να σημειωθεί ότι οι παρούσες σημειώσεις δεν γράφηκαν για να αντικαταστήσουν ή να συμπληρώσουν την υπάρχουσα πλούσια διεθνή αλλά και Ελληνική βιβλιογραφία. Σκοπός των σημειώσεων είναι να βοηθήσουν του φοιτητές του Τ.Φ. στην προετοιμασία τους για τις εξετάσεις.

Κατά τη συγγραφή των σημειώσεων συμβουλεύτηκα αλλά και επηρεάστηκα κυρίως από δύο βιβλία. Το βιβλίο του Ομότιμου Καθηγητή του Τ.Φ. του Α.Π.Θ., κ. Μ. Γρυπαίου: "Μαθήματα Κβαντομηχανικής", Τόμος Α' (Θεσσαλονίκη 1972) και Τόμος Β' (Θεσσαλονίκη 1980), που επί σειρά ετών ήταν το βασικό σύγγραμμα Κβαντομηχανικής του Τμήματός μας και ένα από τα πρώτα βιβλία Κβαντομηχανικής της Ελληνικής βιβλιογραφίας. Επίσης το βιβλίο του Δρ. Σ. Τραχανά, Διευθυντή των Πανεπιστημιακών Εκδόσεων Κρήτης, "Κβαντομηχανική Ι" (Κρήτη 2005).

Σ.Η.Μ.
Θεσσαλονίκη 2011

Περιεχόμενα

.

Κεφάλαιο 1

Παλαιά Κβαντική Θεωρία – Υλοκύματα

Στα τέλη του 19ου αιώνα η Κλασική Φυσική είχε φτάσει σε τέτοιο σημείο ολοκλήρωσης ώστε σε πολλούς φυσικούς κυριαρχούσε η αντίληψη ότι ο οριακός στόχος της Φυσικής, να φτάσει σε μια τελική ερμηνεία του υλικού κόσμου, είχε πραγματοποιηθεί. Αυτή η αντίληψη ήταν δικαιολογημένη αφού η Κλασική Φυσική εξηγούσε έναν πολύ μεγάλο αριθμό πειραματικών δεδομένων, που θεμελίωναν την εγκυρότητά της. Ενώ επικρατούσε αυτή η αντίληψη άρχισαν να συγκεντρώνονται πειραματικά δεδομένα που δεν μπορούσαν να εξηγηθούν με τις τότε γνωστές Φυσικές θεωρίες: τη Μηχανική του Νεύτωνα, τη Θερμοδυναμική - Στατιστική Φυσική και την Ηλεκτρομαγνητική Θεωρία του Maxwell.

Τα πειραματικά δεδομένα που δημιουργούσαν ερωτηματικά προέρχονταν από έναν άγνωστο μέχρι τότε κόσμο, τον κόσμο του μικρόκοσμου ενώ η Κλασική Φυσική είχε θεμελιωθεί με τις παρατηρήσεις του μακρόκοσμου. Στους Φυσικούς της κλασικής γενιάς, η παραδοχή: Οι κλασικοί νόμοι ισχύουν εξ ίσου καλά και για τα φαινόμενα του μικρόκοσμου, θεωρούνταν λογική και αυτονόητη.

Επειδή οι θεωρίες της Κλασικής Φυσικής δεν μπορούσαν να θεωρηθούν λανθασμένες, αφού εξηγούσαν όλα σχεδόν τα μέχρι τότε δεδομένα, αυτό σήμαινε, ότι έπρεπε να βρεθεί μια νέα θεωρία που θα εξηγούσε τα νέα πειραματικά δεδομένα και δε θα έρχονταν σε αντίθεση με τις παλαιότερες θεωρίες. Η νέα αυτή θεωρία που ονομάζεται Κβαντική Θεωρία, στη σημερινή της μορφή είναι θεμελιωμένη σε μια σειρά πειραματικών δεδομένων που είναι:

- Δεδομένα που οδηγούν στο δυϊσμό της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.
- Δεδομένα που οδηγούν στο ασυνεχές των ενεργειακών καταστάσεων του ατόμου.
- Δεδομένα που καθιερώνουν το δυϊσμό της ύλης.

Κλείνοντας τη μικρή εισαγωγή αναφέρουμε ότι, η Κβαντική θεωρία είναι το αναγκαίο εργαλείο για τη μελέτη των φαινομένων του μικρόκοσμου. Συγκεκριμένα η Κβαντική θεωρία είναι απαραίτητη για τη μελέτη της Ατομικής και Μοριακής Φυσικής, της Πυρηνικής Φυσικής και της Φυσικής των Στοιχειωδών Σωματιδίων, της Στερεάς Κατάστασης της ύλης, αλλά και για τη μελέτη της Αστροφυσικής.

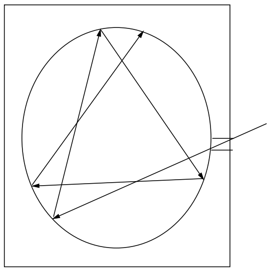
1.1 Η Ακτινοβολία του Μελανού σώματος.

Από τη Γενική Φυσική είναι γνωστό ότι τα διάφορα σώματα, σε αρκετά μεγάλη θερμοκρασία, εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική (Η.Μ.) ακτινοβολία. Το είδος της ακτινοβολίας εξαρτάται από τη θερμοκρασία, τη φύση και το σχήμα του σώματος. Ένα από τα βασικά μεγέθη που καθορίζουν την Η.Μ. ακτινοβολία σε δεδομένο χώρο είναι η ανά μονάδα όγκου ηλεκτρική και μαγνητική ενέργεια. Η ενεργειακή πυκνότητα της Η.Μ. ακτινοβολίας είναι: $\frac{dU}{dV} = |\mathcal{E}|^2 + |\mathcal{H}|^2$, όπου $\mathcal{E}$ = ένταση του ηλεκτρικού πεδίου, $\mathcal{H}$ = ένταση του μαγνητικού πεδίου.

Είναι λογικό να υποθέσει κανείς ότι η εκπεμπόμενη ακτινοβολία οφείλεται στη θερμική διέγερση των ηλεκτρικών φορτίων της ύλης, επειδή αυτά όταν επιταχύνονται εκπέμπουν Η.Μ. ακτινοβολία. Όλα τα σώματα εκπέμπουν Η.Μ. ακτινοβολία στο περιβάλλον τους αλλά συγχρόνως απορροφούν απ' αυτό. Όταν ο ρυθμός εκπομπής είναι ίσος με το ρυθμό απορρόφησης, τότε λέμε ότι έχει αποκατασταθεί θερμοδυναμική ισορροπία.

Θα εξετάσουμε την Η.Μ. ακτινοβολία μέσα σε μια κοιλότητα, υποθέτοντας ότι έχει αποκατασταθεί θερμοδυναμική ισορροπία. Δηλαδή η ενέργεια που εκπέμπεται από τα τοιχώματα της κοιλότητας είναι ίση με την ενέργεια που απορροφάται από αυτά. Το μέγεθος που ενδιαφερόμαστε να υπολογίσουμε και να συγκρίνουμε με τα πειραματικά δεδομένα είναι η **φασματική κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας**, $\mathbf{u}_\nu$. Δηλαδή η πυκνότητα της ενέργειας ανά μονάδα περιοχής συχνότητας. Το $u_\nu d\nu$ είναι η πυκνότητα της ενέργειας με συχνότητα μεταξύ ν και $\nu + d\nu$. Έχει βρεθεί ότι η u_ν μέσα στην κοιλότητα είναι ανεξάρτητη του σχήματος και του υλικού των τοιχωμάτων της, εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία.

Η φασματική κατανομή, u_ν, μελετάται πειραματικά αν ανοίξουμε μια μικρή οπή στο τοίχωμα της κοιλότητας (όπως μια πόρτα σ' ένα φούρνο). Η κοιλότητα αυτή (με τη μικρή τρύπα) ενεργεί ως μελανό σώμα. Δηλαδή κάθε ακτινοβολία που πέφτει σ' αυτήν απ' έξω απορροφάται τελείως.



Σχήμα 1.1:

Για τη φασματική κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας του μελανού σώματος βρέθηκε:

1. $u_\nu = u_\nu(\nu, T)$, δηλαδή η u_ν εξαρτάται από τη συχνότητα και τη θερμοκρασία.

2. Η ολική ενεργειακή πυκνότητα είναι (Νόμος του Stefan):

$$u = \int_0^\infty u_\nu d\nu = u(T) = \sigma T^4$$

όπου σ είναι η σταθερά του Stefan. Δηλαδή η ενεργειακή πυκνότητα είναι συνάρτηση μόνο της θερμοκρασίας.

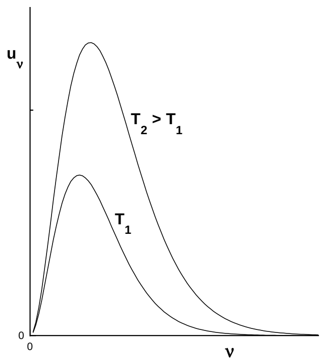
3. Η φασματική κατανομή, u_ν, είναι της μορφής του Σχ. 1.2.

Συγκεκριμένα για την u_ν ισχύουν τα εξής:

- $u_\nu \sim \nu^2 T$ για μικρά ν.
- Υπάρχει ένα μέγιστο.
- $u_\nu \to 0$ πολύ γρήγορα για μεγάλα ν.
- Για κάθε ν η u_ν είναι της μορφής:

$$u_\nu = \nu^3 f\Big(\frac{\nu}{T}\Big) \quad \text{ή} \quad \lambda_{max} T = \text{σταθερά}$$

(Νόμος μετατόπισης του Wien).



Σχήμα 1.2:

Με τη βοήθεια των νόμων της θερμοδυναμικής βρέθηκε η σχέση: $u_\nu = \nu^3 f(\nu/T)$, αλλά η μορφή της συνάρτησης $f(\nu/T)$ δεν ήταν δυνατό να βρεθεί για κάθε ν, ενώ για μεγάλα ν είναι της μορφής $f(\frac{\nu}{T}) = \mathrm{e}^{-\alpha\nu/T}$ όπου α μία σταθερά. Το πρόβλημα λοιπόν ήταν να βρεθεί η $u_\nu(\nu, T)$ που να εξηγεί τα παραπάνω δεδομένα.

Μέσα στην κοιλότητα υπάρχει σε ισορροπία Η.Μ. ακτινοβολία η οποία δημιουργεί στάσιμα κύματα. Η πυκνότητα της ενέργειας, $u_\nu d\nu$, με συχνότητα μεταξύ ν και $\nu + d\nu$ που εκπέμπεται προς τα έξω μέσω της μικρής οπής είναι ανάλογη με την (ολική) ενέργεια όλων των στάσιμων Η.Μ. κυμάτων που έχουν συχνότητα μεταξύ ν και $\nu + d\nu$. Επομένως η φασματική κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας, u_ν, ισούται με τον αριθμό των στάσιμων Η.Μ. κυμάτων που δημιουργούνται μέσα στην κοιλότητα με συχνότητα μεταξύ ν και $\nu + d\nu$ ανά μονάδα όγκου επί τη μέση τιμή της ενέργειας, $\langle E \rangle$, κάθε στάσιμου Η.Μ. κύματος. Δηλαδή

$$u_\nu = \frac{dZ_{\nu,\nu+d\nu}}{d\nu}\frac{1}{V}\langle E \rangle \tag{1.1}$$

Το $\frac{dZ_{\nu+d\nu}}{d\nu}\frac{1}{V}$ είναι ο αριθμός των στάσιμων Η.Μ. κυμάτων μέσα στην κοιλότητα με συχνότητες ν έως $\nu + d\nu$, ανά μονάδα περιοχής συχνότητας και ανά μονάδα όγκου. Μπορεί να δειχτεί ότι:

$$\frac{dZ_{\nu+d\nu}}{d\nu}\frac{1}{V} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \tag{1.2}$$

όπου c είναι η ταχύτητα του φωτός. Οπότε:

$$\boxed{u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\langle E \rangle} \tag{1.3}$$

1.1.1 Κλασική ερμηνεία

Ας εξετάσουμε σύντομα πως η Κλασική Φυσική προσπαθεί να εξηγήσει την ακτινοβολία του μελανού σώματος. Για να βρεθεί η u_ν θα πρέπει να βρεθεί η μέση τιμή της ενέργειας, $\langle E \rangle$, των στάσιμων κυμάτων.

Η $\langle E \rangle$ σύμφωνα με την κλασική φυσική μπορεί να βρεθεί αν δεχθούμε ότι η ακτινοβολία που είναι παγιδευμένη στην κοιλότητα ανταλλάσσει ενέργεια με τα τυχώματα της κοιλότητας **κατά συνεχή τρόπο** (δηλαδή για κάθε ν). Η $\langle E \rangle$ βρίσκεται υπολογίζοντας το ολοκλήρωμα

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty E\Pi(E)dE = \cdots = kT \tag{1.4}$$

όπου k η σταθερά του Boltzmann και $\Pi(E)dE$ η πιθανότητα ένα στάσιμο κύμα να έχει ενέργεια μεταξύ E και $E + dE$, που σύμφωνα με τα πορίσματα της Στατιστικής Μηχανικής είναι:

$$\Pi(E)dE = \frac{1}{kT}\,\mathrm{e}^{-\frac{E}{kT}}dE \tag{1.5}$$

Έτσι, η φασματική κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας του μελανού σώματος, σύμφωνα με την Κλασική Φυσική είναι:

$$u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT \tag{1.6}$$

Η σχέση αυτή είναι γνωστή ως νόμος των Rayleight-Jeans.

Παρατηρούμε ότι η u_ν που δίνεται από την (1.6) βρίσκεται σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα της ακτινοβολίας τους μελανού σώματος μόνο για μικρά ν, η u_ν είναι ανάλογη του ν^2. Για μεγάλες τιμές της συχνότητας η u_ν βρίσκεται σε ασυμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα αφού αυξάνει μονότονα για $0 \leq \nu < \infty$ και επομένως ούτε μέγιστο παρουσιάζει ούτε τείνει γρήγορα στο μηδέν για $\nu \to \infty$. Συνέπεια αυτών είναι ότι η ολική ενεργειακή πυκνότητα (δηλαδή η ενεργειακή πυκνότητα για όλο το φάσμα των συχνοτήτων) είναι άπειρη:

$$u = \int_0^\infty u_\nu d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3}\int_0^\infty \nu^2 d\nu \quad \to \infty \ \ ! \tag{1.7}$$

ενώ αυτή πρέπει να είναι πεπερασμένη.

Το συμπέρασμα που βγαίνει από τα παραπάνω είναι ότι η εφαρμογή της Κλασικής Φυσικής στη μελέτη του φάσματος του μελανού σώματος, οδηγεί σε συμπεράσματα που δε συμφωνούν με όλα τα πειραματικά δεδομένα. Αυτό σημαίνει ότι πρέπει να βρεθεί μια νέα θεωρία που να τα εξηγεί. Η θεωρία αυτή είναι η θεωρία των quanta που εισήχθηκε από τον Planck και με την οποία θα ασχοληθούμε στη συνέχεια.

1.1.2 Θεωρία των quanta του Planck

Αν θέλουμε η u_ν, που δίνεται από τη σχέση (1.3), να συμφωνεί με τα πειραματικά δεδομένα θα πρέπει η $\langle E\rangle$ να μην είναι ίση με kT αλλά αυτή να είναι συνάρτηση της συχνότητας, έτσι ώστε για μεγάλα ν η u_ν να είναι της μορφής $\mathrm{e}^{-\alpha\nu/T}$. Για το λόγο αυτόν ο Planck υπέθεσε ότι η Η.Μ. ακτινοβολία της κοιλότητας δεν ανταλλάσσει ενέργεια με το περιβάλλον κατά συνεχή τρόπο, αλλά **κατά διακεκριμένες ποσότητες** ε, τις οποίες ονόμασε **κβάντα** (quanta). Δέχτηκε δηλαδή ότι η ενέργεια ενός στάσιμου Η.Μ. κύματος μέσα στην κοιλότητα παίρνει ασυνεχείς τιμές ή όπως αλλιώς λέμε η ενέργεια είναι κβαντισμένη. Οι μόνες επιτρεπτές τιμές της ενέργειας είναι ακέραια πολλαπλάσια μιας στοιχειώδους ποσότητας της ενέργειας, δηλαδή:

$$\boxed{E \to E_n = n\varepsilon\ , \quad n = 0, 1, 2, \ldots} \tag{1.8}$$

Έτσι η μέση τιμή της ενέργειας ενός ταλαντωτή, εφόσον η κατανομή της ενέργειας είναι ασυνεχής, δεν υπολογίζεται με τη βοήθεια του ολοκληρώματος της σχέσης (1.4) αλλά με τη βοήθεια της σχέσεως:

$$\langle E\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \Pi(E_n) = \cdots = \frac{\varepsilon}{\mathrm{e}^{\varepsilon/kT} - 1} \tag{1.9}$$

όπου $\Pi(E_n) = \frac{\mathrm{e}^{-E_n/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-E_n/kT}}$ είναι η πιθανότητα ένα στάσιμο κύμα να έχει ενέργεια $E_n = n\varepsilon$.

Η αντικατάσταση της (1.9) στην (1.3) δίνει:

$$u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{\varepsilon}{\mathrm{e}^{\varepsilon/kT} - 1} \tag{1.10}$$

Από την έκφραση αυτήν της u_ν παρατηρούμε ότι αν θέλουμε αυτή να συμφωνεί με το νόμο μετατόπισης του Wien, $u_\nu = \nu^3 f(\nu/T)$, θα πρέπει το ε να είναι ανάλογο του ν. Δηλαδή

$$\varepsilon = h\nu \ \text{ και } \ E_n = nh\nu\ , \ \ n = 0, 1, 2, \ldots \tag{1.11}$$

όπου η σταθερά αναλογίας h λέγεται **σταθερά του Planck**.

Έτσι η φασματική κατανομή της ενεργειακής πυκνότητας γράφεται:

$$\boxed{u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}} \tag{1.12}$$

Εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι ο τύπος (1.12) ικανοποιεί όλα τα πειραματικά δεδομένα.

1.1.3 Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Ένα άλλο φαινόμενο που δεν εξηγείται με τις θεωρίες της Κλασικής Φυσικής είναι και το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο. Αυτό μαζί με την ακτινοβολία του μελανού σώματος ανήκουν στην κατηγορία των πειραματικών δεδομένων που μας οδηγούν στο δυϊσμό της Η.Μ. ακτινοβολίας.

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο είναι η εκπομπή ηλεκτρονίων από ένα μέταλλο που προκαλείται από την πρόσπτωση ορατής ή υπεριώδους ακτινοβολίας. Από τη μελέτη του προκύπτουν τα εξής:

1. Η ένταση του ρεύματος (φορτίο/χρόνος) είναι ανάλογη της φωτεινής ροής.

2. Η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων εξαρτάται από τη συχνότητα του φωτός και δεν εξαρτάται από την ένταση της φωτεινής ροής.

3. Η εκπομπή ηλεκτρονίων γίνεται μόνο όταν η συχνότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας είναι μεγαλύτερη κάποιας οριακής συχνότητας.

Οι θεωρίες της Κλασικής Φυσικής δίνουν εξήγηση μόνο στο 1. Η εξήγηση όλων των πειραματικών δεδομένων έγινε από τον Einstein ο οποίος επέκτεινε την ιδέα των κβάντα του Planck και δέχτηκε ότι: *Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία απορροφάται, εκπέμπεται αλλά και διαδίδεται στο χώρο με την ταχύτητα του φωτός κατά κβάντα.* Τα κβάντα αυτά ονομάστηκαν φωτόνια. Η ενέργεια κάθε φωτονίου είναι:

$$\boxed{E = h\nu} \tag{1.13}$$

όπου h είναι η σταθερά του Planck.

Με αυτήν την παραδοχή είναι δυνατό να εξηγηθούν όλα τα πειραματικά δεδομένα του φωτοηλεκτρικού φαινομένου και επιπλέον είναι δυνατό να βρεθεί πειραματικά η τιμή της σταθεράς h που συμπίπτει με την τιμή που βρίσκεται από τη θεωρία του Planck.

1.2 Γραμμικά φάσματα των ατόμων – Θεωρία του Bohr

Τα διάφορα σώματα (στερεά, υγρά, αέρια) εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Το φάσμα εκπομπής των στερεών και των υγρών είναι συνεχές, ενώ των αερίων είναι γραμμικό. Οι φασματικές γραμμές των αερίων κατατάσσονται σε διάφορες ομάδες πού λέγονται **φασματικές σειρές**. Οι γραμμές κάθε σειράς είναι πυκνότερες προς την πλευρά των μεγαλύτερων συχνοτήτων και σε μια ορισμένη θέση σχηματίζεται ένα σημείο συσσώρευσης.

Βρέθηκε εμπειρικά ότι τα μήκη κύματος των φασματικών γραμμών των διαφόρων σειρών του ατόμου του υδρογόνου δίνονται από τη σχέση:

$$\bar{\nu} \equiv \frac{1}{\lambda} = R(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}) \quad n' = 1, 2, 3, \dots \ , \quad n = n' + 1 \tag{1.14}$$

όπου R είναι μια εμπειρική σταθερά, που λέγεται σταθερά του Rydberg, με τιμή $R = 109677,6\,\mathrm{cm}^{-1}$.

Η έρευνα των γραμμικών φασμάτων και άλλων στοιχείων έδειξε ότι αυτά μπορούν να περιγραφούν με εμπειρικούς τύπους, πολυπλοκότερους αλλά παρόμοιας μορφής με τον τύπο (1.14). Βρέθηκε ότι ισχύει η εξής αρχή που είναι γνωστή ως **συνδυαστική αρχή του Ritz**: *Το φάσμα κάθε στοιχείου χαρακτηρίζεται πλήρως από μια ακολουθία φασματικών όρων, $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots$, τέτοιων ώστε:* **κάθε φασματική γραμμή μπορεί να γραφεί ως διαφορά δύο φασματικών όρων**.

Η εξήγηση των παραπάνω πειραματικών δεδομένων ήταν αδύνατη με την Κλασική Φυσική. Σύμφωνα με την Η.Μ. θεωρία ένα φορτισμένο σωματίδιο, που εκτελεί επιταχυνόμενη κίνηση, εκπέμπει ακτινοβολία. Το είδος της ακτινοβολίας εξαρτάται από το αν η κίνηση είναι περιοδική ή απεριοδική.

Αν η κίνηση είναι απεριοδική τότε εκπέμπεται ακτινοβολία το φάσμα της οποίας είναι συνεχές. Αν η κίνηση είναι περιοδική τότε εκπέμπεται ακτινοβολία της οποίας το φάσμα είναι διακεκριμένο (δηλαδή γραμμικό) και θα περιέχει μια συγκεκριμένη συχνότητα ν_0 καθώς και τις ανώτερες αρμονικές της ($\nu_n = n\nu_0$). Αυτό όμως δεν παρατηρείται.

Θα πρέπει πάντως να παρατηρηθεί ότι σύμφωνα με την Κλασική Φυσική μια περιοδική κίνηση ενός φορτισμένου σωματιδίου είναι αδύνατη, επειδή λόγω της εκπεμπομένης ακτινοβολίας το σωματίδιο θα χάνει συνεχώς ενέργεια οπότε το πλάτος της ταλάντωσης θα μικραίνει, με αποτέλεσμα η κίνηση να γίνεται απεριοδική και το φάσμα να είναι συνεχές. Οι δυσκολίες αυτές, στην εξήγηση των γραμμικών φασμάτων των ατόμων, ξεπεράστηκαν από τον Bohr που αντιμετώπισε το πρόβλημα με έναν ανορθόδοξο.

Για την εξήγηση των γραμμικών φασμάτων του ατόμου του υδρογόνου και των υδρογονοειδών ατόμων, ο Bohr δέχτηκε δύο αξιώματα που είναι γνωστά ως **συνθηκές του Bohr**.

• **Πρώτη συνθήκη του Bohr**

1α. Τα ηλεκτρόνια ενός ατόμου είναι δυνατό να κινούνται γύρω από τον πυρήνα σε κλειστές (κυκλικές) "τροχιές" χωρίς να εκπέμπουν ακτινοβολία, δηλαδή $E =$σταθερά.

1β. Όλες οι τροχιές δεν είναι επιτρεπτές, αλλά μόνο ένα διακεκριμένο σύνολο τροχιών που καθορίζεται από τη σχέση:

$$P_\phi = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{1.15}$$

Δηλαδή η στροφορμή P_ϕ πρέπει να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς $\hbar = h/2\pi$.

• **Δεύτερη συνθήκη του Bohr**

Ένα ηλεκτρόνιο μπορεί να κάνει μετάπτωση από μια ευσταθή τροχιά σε μια άλλη μικρότερης (ή μεγαλύτερης) ενέργειας με εκπομπή (ή απορρόφηση) ενός φωτονίου του οποίου η συχνότητα δίνεται από την σχέση:

$$h\nu = E_{\alpha\rho\chi} - E_{\tau\varepsilon\lambda} \tag{1.16}$$

Αν $E_{\alpha\rho\chi} > E_{\tau\varepsilon\lambda}$ έχουμε εκπομπή φωτονίου, ενώ για $E_{\alpha\rho\chi} < E_{\tau\varepsilon\lambda}$ έχουμε απορρόφηση φωτονίου.

Σημείωση. Η συνθήκη 1α τέθηκε για να δικαιολογηθεί η ευστάθεια των ατόμων, επειδή δέχτηκε το πλανητικό υπόδειγμα του Rutherford για τα άτομα. Το υπόδειγμα του Rutherford, που εξηγεί τα πειραματικά δεδομένα των Geiger-Marsden, δέχεται ότι τα ηλεκτρόνια των ατόμων περιφέρονται γύρω από τον πυρήνα όπως οι πλανήτες γύρω από τον ήλιο. Επειδή όμως αυτά εκτελούν επιταχυνόμενη κίνηση, πρέπει να εκπέμπουν ακτινοβολία, δηλαδή να χάνουν ενέργεια, οπότε τελικά θα έπεφταν στον πυρήνα. Κάτι τέτοιο όμως δεν παρατηρείται και τα άτομα κάτω από πολύ διαφορετικές συνθήκες παραμένουν σταθερά.

Με τη βοήθεια της πρώτης συνθήκης του Bohr, μπορεί να δειχτεί ότι για τα υδρογονοειδή άτομα η ακτίνα της κυκλικής τροχιάς και η ενέργεια του ηλεκτρονίου είναι αντίστοιχα:

$$a = a_n = \frac{\hbar^2}{me^2 Z}n^2 = a_0\frac{n^2}{Z}\,, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-8}\text{cm} = 0,529\,\text{Å} \tag{1.17α'}$$

$$E = E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \tag{1.17β'}$$

όπου m, e και Z είναι η μάζα και το φορτίο του ηλεκτρονίου και Z ο ατομικός αριθμός του υδρογονοειδούς ατόμου (Ze το φορτίο του πυρήνα). Η σταθερά a_0, που λέγεται **ακτίνα του Bohr**, είναι ένα χαρακτηριστικό μέγεθος των ατόμων.

Με τη βοήθεια της δεύτερης συνθήκης και της σχέσης (1.17β') βρίσκεται ότι:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = RZ^2(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}), \quad n = n' + 1, n' + 2, \ldots \tag{1.18}$$

όπου $R = 2\pi^2 m e^4 / ch^3$. Αν αντικαταστήσουμε τις γνωστές σταθερές των $m,\ e,\ c$ και h βρίσκεται ότι $R = 109737,3\,\mathrm{cm}^{-1}$. Η τιμή αυτή βρίσκεται σε πολύ καλή συμφωνία με την αντίστοιχη τιμή του R που βρέθηκε εμπειρικά.

Παρατηρούμε ότι η σχέση (1.18) συμφωνεί με τα εμπειρικά συμπεράσματα των φασματικών μετρήσεων. Έτσι βλέπουμε ότι ο κυματάριθμος $(\bar{\nu})$ εκφράζεται ως διαφορά δύο φασματικών όρων, όπως απαιτεί η συνδυαστική αρχή του Ritz. Οι διάφορες φασματικές γραμμές λαμβάνονται αν θέσουμε $n' = 1$ (σειρά Lyman για $Z = 1$), $n' = 2$ (σειρά Balmer για $Z = 1$) κ.λ.π. Σύμφωνα με τη θεωρία του Bohr οι γραμμές της σειράς Lyman αντιστοιχούν σε μεταπτώσεις των ηλεκτρονίων από τροχιές με $n = 2, 3, 4, \ldots$ στην τροχιά με $n' = 1$

Από τις σχέσεις (1.17β′) μπορούν να βρεθούν η ακτίνα του ατόμου του Υδρογόνου καθώς και οι δυνατές τιμές της ενέργειας, αν αντικαταστήσουμε τις γνωστές τιμές των σταθερών $h,\ m$ και e από πίνακα των σταθερών. Έτσι βρέθηκε ότι:

$$a_n = a_0 n^2\,\mathrm{cm} \quad \rightarrow \quad a_1 = a_0 = 0,529\mathrm{\mathring{A}}$$

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2}\,\mathrm{eV} \quad \rightarrow \quad \mathrm{E}_1 = -13,6\,\mathrm{eV}, \quad \mathrm{E}_2 = -3,4\,\mathrm{eV}$$

και

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 10,2\,\mathrm{eV}$$

Δηλαδή, για να διεγερθεί το άτομο του Υδρογόνου απαιτείται ενέργεια $10,2\,\mathrm{eV}$. Η τιμή αυτή της ενέργειας είναι πολύ μεγαλύτερη από την ενέργεια που ανταλλάσσουν τα άτομα κατά τις θερμικές κρούσεις και η οποία σε θερμοκρασία δωματίου ($T = 293^o\,\mathrm{K}$) είναι: $kT = \frac{1}{40}\,\mathrm{eV}$. Δηλαδή, για μια μεγάλη περιοχή θερμοκρασιών η πλειονότητα των ατόμων παραμένει στη βασική κατάσταση.

Τέλος μπορεί να δειχθεί ότι για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς n και n' και για $|n - n'| = 1$, η συχνότητα της φασματικής γραμμής συμπίπτει με τη συχνότητα που υπολογίζεται κλασικά. Η τελευταία παρατήρηση αποτελεί μια μερική περίπτωση μιας γενικότερης αρχής, της **αρχής της αντιστοιχίας** που διατυπώνεται ως εξής: *Για μεγάλες τιμές δύο κβαντικών αριθμών n και n', που χαρακτηρίζουν δύο κβαντικές καταστάσεις και για μικρές διαφορές $|n-n'|$ μεταξύ αυτών, τα κβαντικά αποτελέσματα τείνουν ασυμπτωτικά στα αντίστοιχα κλασικά.*

1.2.1 Επιτυχίες και δυσκολίες της παλαιάς Κβαντομηχανικής.

Η παλαιά Κβαντομηχανική που περιγράψαμε σύντομα γνώρισε αρχικά επιτυχία κυρίως στην κατανόηση των φασμάτων εκπομπής των υδογονοειδών ατόμων ($\mathrm{H}, \mathrm{He}^+, \mathrm{Li}^{++}, \ldots$). Εξήγησε επίσης αρκετά καλά τα φάσματα περιστροφής και δόνησης των διατομικών μορίων. Είχε όμως δύο βασικά μειονεκτήματα.

Πολλά πειραματικά δεδομένα, όπως η πρόβλεψη της έντασης των φασματικών γραμμών ή η μελέτη των μη περιοδικών κινήσεων, για παράδειγμα η σκέδαση ενός ηλεκτρονίου από ένα άτομο, δεν ήταν δυνατό να μελετηθούν με την παλαιά κβαντομηχανική.

Εκτός από τις δυσκολίες στην εξήγηση όλων των πειραματικών δεδομένων η θεωρία αυτή δεν στηρίζεται σε κάποιο θεωρητικό υπόβαθρο. Οι συνθήκες του Bohr καθώς και η γενίκευσή τους με τις συνθήκες των Wilson-Sommerfeld, είχαν εισαχθεί κατά τεχνητό τρόπο για να εξηγήσουν ορισμένα πειραματικά δεδομένα που δεν ήταν κατανοητά κλασικά. Δηλαδή από θεωρητικής σκοπιάς υπήρχε αρκετή αυθαιρεσία.

Παρά τις δυσκολίες, η Παλαιά Κβαντομηχανική βοήθησε σημαντικά στην κατανόηση των πειραματικών δεδομένων και κυρίως στο ότι φάνηκε ότι αυτή πρέπει να είναι ο πρόδρομος μια νέας θεωρίας την οποία οι φυσικοί της εποχής εκείνης άρχισαν να αναζητούν.

1.3 Υλοκύματα

Με την ερμηνεία της ακτινοβολίας του μελανού σώματος και του φωτοηλεκτρικού φαινομένου, ανατράπηκε η κλασική αντίληψη για την Η.Μ. ακτινοβολία και εισήχθηκε η υπόθεση του δυϊσμού του φωτός. Η ανατροπή αυτή έγινε σε δύο βήματα. Στο πρώτο βήμα ο Planck (1900) διατύπωσε την υπόθεση ότι οι ενεργειακές καταστάσεις του Η.Μ. πεδίου μέσα σε μια κοιλότητα είναι κβαντισμένες. Στο δεύτερο βήμα ο Einstein (1905), για την εξήγηση του φωτοηλεκτρικού φαινομένου, δέχτηκε το σωματιδιακό χαρακτήρα του Η.Μ. πεδίου. Δηλαδή ότι το φως εκπέμπεται, διαδίδεται και απορροφάται κατά κβάντα, τα οποία ονομάστηκαν φωτόνια.

Η ίδια πορεία ακολουθήθηκε και για τα σωματίδια, την άλλη οντότητα της Κλασικής Φυσικής. Έτσι, για να εξηγηθούν τα φασματοσκοπικά δεδομένα, ο Bohr (1913) υπέθεσε ότι οι ενεργειακές καταστάσεις των ηλεκτρονίων στα άτομα είναι κβαντισμένες. Στη συνέχεια ο de Broglie (1925) είδε ότι ο μόνος τρόπος για να εξηγηθεί η κβάντωση των ενεργειακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων, ήταν να τους αποδοθούν και κυματικές ιδιότητες μαζί με τις σωματιδιακές.

Ας δούμε ποια είναι η ορμή ενός φωτονίου ενέργειας E. Η ενέργεια του φωτονίου δίνεται, συναρτήσει της συχνότητας του Η.Μ. κύματος, από τη σχέση:

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = \hbar\omega \tag{1.19}$$

Από την ειδική θεωρία της σχετικότητας γνωρίζουμε ότι η ενέργεια, E και η ορμή, p, ενός σώματος με μάζα ηρεμίας m_0 συνδέονται με τη σχέση:

$$E^2 = c^2p^2 + m_0^2c^4 \tag{1.20}$$

όπου c η ταχύτητα του φωτός. Η ταχύτητα του σώματος είναι:

$$v = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{pc^2}{E} \tag{1.21}$$

Στην περίπτωση που το σώμα είναι φωτόνιο θα έχουμε $v = c$, οπότε από την (1.21) έχουμε:

$$E = pc \quad \text{και} \quad m_0 = 0 \tag{1.22}$$

Από τις σχέσεις (1.19) και (1.22) παίρνουμε:

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \tag{1.23}$$

Δηλαδή, ένα φωτόνιο ενέργειας $E = h\nu$ έχει ορμή που δίνεται από τη σχέση (1.23). Η σχέση αυτή συνδέει την ορμή του φωτονίου (σωματιδίου που χαρακτηρίζεται από τοπικότητα) με το μήκος κύματος της ακτινοβολίας (κύματος που είναι εκτεταμένο στο χώρο).

Ας θεωρήσουμε τώρα ένα υλικό σημείο (σωματίδιο) με μάζα ηρεμίας m_0, που κινείται με ορμή p. Η βασική ιδέα του de Broglie ήταν να αντιστοιχίσει στο υλικό σημείο ένα κύμα του οποίου το μήκος κύματος ικανοποιεί την ίδια σχέση:

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}} \tag{1.24}$$

Το κύμα αυτό ονομάζεται **υλικό κύμα** ή **υλοκύμα**. Ή διαφορετικά, η βασική ιδέα του de Broglie ήταν να επεκτείνει το δυϊσμό του φωτός και να δεχτεί ότι σε κάθε υλικό σημείο "προσάπτεται" (αντιστοιχεί) ένα είδος κύματος, το υλοκύμα. Δηλαδή πρότεινε το δυϊσμό σωματιδίου κύματος. Έτσι, τόσο το φως, όσο και τα διάφορα σωματίδια ήταν δυνατό να θεωρηθούν ως διαφορετικές μορφές ενός νέου είδους "συστήματος", το οποίο άλλοτε συμπεριφέρεται ως σωματίδιο και άλλοτε ως κύμα.

Αν η ιδέα του de Broglie αποδεικνύονταν ορθή, θα ήταν δυνατό να αποτελέσει τη βάση μιας νέας θεωρίας για τα φαινόμενα του μικρόκοσμου, εφόσον βέβαια μπορούσε να εξηγηθεί ο κβαντικός χαρακτήρας αυτών των φαινομένων. Έτσι, για παράδειγμα, οι διακεκριμένες τιμές της ενέργειας θα μπορούσαν να προκύψουν κατά ανάλογο τρόπο με την εμφάνιση διακεκριμένου συνόλου επιτρεπτών τιμών συχνοτήτων, για τα στάσιμα κύματα που δημιουργούνται μέσα σε μία κοιλότητα, εφόσον ισχύει παρόμοια σχέση με την $E = h\nu$ και για τα υλοκύματα. [1]

Η δυσκολία που υπήρχε για να γίνει αποδεκτή η υπόθεση του de Broglie, ήταν ότι δεν υπήρχαν, την εποχή εκείνη, άμεσες ενδείξεις για την ύπαρξη των υλοκυμάτων. Αυτό όμως μπορούσε να αιτιολογηθεί από το γεγονός ότι το μήκος κύματος των υλοκυμάτων ήταν τόσο μικρό, ώστε δεν ήταν δυνατό να φανεί ο κυματικός χαρακτήρας από τα υπάρχοντα (τότε) πειραματικά δεδομένα. Η πειραματική επαλήθευση της υπόθεσης του de Broglie έγινε από τους Davisson και Germer οι οποίοι υπολόγισαν το μήκος κύματος των ηλεκτρονίων από τα πειράματα περίθλασης δέσμης ηλεκτρονίων από επιφάνεια Νικελίου. Το υπολογιζόμενο μήκος κύματος του ηλεκτρονίου για την πειραματική του ταχύτητα συμφωνούσε ακριβώς με αυτό που λαμβάνεται από τη σχέση (1.24).

Η εξίσωση αυτή μπορεί να εφαρμοστεί και για άλλα σωματίδια εκτός του ηλεκτρονίου αν είναι γνωστή η μάζα και η ταχύτητά τους. Για παράδειγμα, αν η ταχύτητα του μορίου του υδρογόνου στους 200^oC είναι $10^5\,\frac{\rm cm}{\rm sec}$ ενώ η μάζα του είναι $3,3 \cdot 10^{-24}\,{\rm gr}$ το μήκος κύματός του σ' αυτήν τη θερμοκρασία είναι:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6,62 \cdot 10^{-27}\,{\rm gr \cdot cm^2 \cdot sec^{-1}}}{3,3 \cdot 10^{-24}{\rm gr}\;\cdot\;10^5{\rm cm \cdot sec^{-1}}} \approx 2 \cdot 10^{-8}\,{\rm cm} = 2\,\AA$$

Το μήκος κύματος που αντιστοιχεί σ' ένα αυτοκίνητο $1000\,{\rm Kgr}$ που κινείται με ταχύτητα $50\,{\rm Km}$ την ώρα είναι της τάξης: $10^{-34}{\rm cm} = 10^{-26}\,\AA$ (!). Αυτή είναι μια πολύ μικρή τιμή μήκους κύματος που δεν μπορεί να μετρηθεί με οποιαδήποτε γνωστή τεχνική. Από αυτά τα παραδείγματα γίνεται φανερό ότι το μήκος κύματος κατά de Broglie μπορεί να μετρηθεί πειραματικά μόνο για πολύ μικρά σώματα, όπως ηλεκτρόνια, πρωτόνια, άτομα κ.λ.π.

Σημείωση. Όταν χρησιμοποιείται η σχέση (1.24) για τα διάφορα σωματίδια (ηλεκτρόνια νουκλεόνια, άτομα κλπ.) κινητικής ενέργειας E, τη γράφουμε με την παρακάτω χρηστική μορφή:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 2\pi\frac{\hbar c}{\sqrt{2mc^2 E}} \tag{1.25}$$

Αν η ενέργεια είναι γνωστή σε eV, επειδή:

$$m_e c^2 \simeq 0,51 \cdot 10^6{\rm eV}, \;\; m_p \simeq m_n \simeq 1836\, m_e\,, \;\; \hbar c = 1973,3\,{\rm eV}\AA$$

[1] Η συνθήκη του Bohr, $P_\phi = n\hbar$, μπορεί να προκύψει ότι είναι ισοδύναμη με τη συνθήκη δημιουργίας στάσιμων κυμάτων γύρω από τον πυρήνα. Για να είναι δυνατός ο σχηματισμός στάσιμων κυμάτων πρέπει το μήκος της "τροχιάς" του ηλεκτρονίου να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματός του: $2\pi r = n\lambda$. Η αντικατάσταση του λ από τη σχέση του de Broglie ($\lambda = h/p$), δίνει:

$$2\pi r = n\,\frac{h}{p} \;\Rightarrow\; pr = n\,\frac{h}{2\pi} \;\Rightarrow\; P_\phi = n\hbar$$

το μήκος κύματος ενός ηλεκτρονίου (λ_e) και ενός νουκλεονίου (λ_N) ενέργειας $E = E[\mathrm{eV}]$ είναι, αντίστοιχα:

$$\lambda_e = 2\pi \frac{1973,3\,\mathrm{eV}\mathring{A}}{\sqrt{2\cdot 0,51\cdot 10^6\mathrm{eV}\cdot E[\mathrm{eV}]}} \simeq \frac{12,4}{\sqrt{E}}\,\mathring{A}\,,\quad \lambda_N \simeq \sqrt{\frac{m_e}{m_N}}\,\lambda_e = \frac{1}{\sqrt{1836}}\,\lambda_e \simeq \frac{1}{42,85}\,\lambda_e\,\mathring{A}$$

Δηλαδή το μήκος κύματος ενός νουκλεονίου είναι περίπου 43 φορές μικρότερο από αυτό του ηλεκτρονίου της ιδίας ενέργειας.

Το πρόβλημα που δημιουργήθηκε, από θεωρητικής πλευράς, ήταν η εισαγωγή παρόμοιων σχέσεων με τις σχέσεις (1.19) και (1.23) για τα υλοκύματα. Αυτό πέτυχε ο de Broglie χρησιμοποιώντας τη θεωρία της σχετικότητας. Πριν προχωρήσουμε όμως σ' αυτό, θα πρέπει να αναφέρουμε μερικούς ορισμούς και ιδιότητες των κυμάτων καθώς και τι είδους κύματα πρέπει να αντιστοιχίσουμε στα σωματίδια.

1.3.1 Επίπεδα κύματα – κυματοδέματα

Αν έχουμε μία χρονική και τοπική μεταβολή ενός φυσικού μεγέθους, $f(x,t)$, που είναι της μορφής: $f(x \pm vt)$, τότε λέμε ότι η συνάρτηση $f(x,t)$ παριστά ένα κύμα (σε μια διάσταση). Η $f(x,t)$ ικανοποιεί την εξίσωση κύματος:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \tag{1.26}$$

Οι συναρτήσεις:

$$f_1(x,t) = C_0 \sin(kx - \omega t)\,, \qquad f_2(x,t) = C_0 \cos(kx-\omega t) \tag{1.27}$$

παριστάνουν κύματα, η πρώτη ένα ημιτονοειδές (αρμονικό) κύμα, η δεύτερη ένα συνημιτονοειδές (αρμονικό) κύμα. Η σταθερά ω ($\omega = 2\pi\nu$) λέγεται **κυκλική συχνότητα**, όπου ν η **συχνότητα** και $1/\nu = T$ η **περίοδος**. Η ποσότητα:

$$\varphi = kx - \omega t \tag{1.28}$$

λέγεται **φάση του κύματος**. Η ταχύτητα με την οποία κινούνται τα σημεία σταθερής φάσης λέγεται **φασική ταχύτητα** του κύματος και είναι:

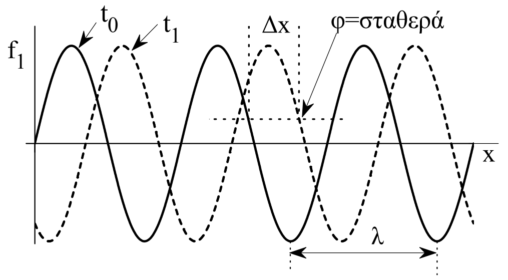
$$v_{ph} = \left(\frac{dx}{dt}\right)_{\varphi=\text{σταθ.}} = \frac{\omega}{k} \tag{1.29}$$

Από την (1.29) βλέπουμε ότι για $k>0$ ($v_{ph}>0$) το κύμα διαδίδεται προς τα δεξιά ενώ για $k<0$ ($v_{ph}<0$) το κύμα διαδίδεται προς τα αριστερά. Αν για μία χρονική στιγμή η διαφορά φάσης δύο σημείων (x_1 και x_2) είναι 2π ($\Delta\varphi = 2\pi$), η απόσταση αυτών των δύο σημείων λέγεται **μήκος κύματος**. Έτσι έχουμε:

$$|\varphi_2 - \varphi_1| = |kx_2 - \omega t - (kx_1 - \omega t)| = |k(x_2 - x_1)| \quad \text{ή} \quad 2\pi = |k|\lambda \quad \rightarrow \quad \boxed{\lambda = \frac{2\pi}{|k|}} \tag{1.30}$$

Από τις (1.29) και (1.30) και τη σχέση $\omega = 2\pi\nu$, έχουμε:

$$|v_{ph}| = \lambda\nu \tag{1.31}$$



Σχήμα 1.3: Δύο στιγμιότυπα ενός αρμονικού κύματος

Το $|k|$ λέγεται **κυματάριθμος** και δίνει τον αριθμό των μηκών κύματος μεταξύ δύο σημείων που έχουν διαφορά φάσης 2π. Το k (ή καλύτερα το $\mathbf{k}$) λέγεται **κυματοδιάνυσμα** και έχει τη διεύθυνση και φορά διάδοσης του κύματος.

Στο Σχήμα 1.3 φαίνονται τα στιγμιότυπα ενός ημιτονοειδούς κύματος τις χρονικές στιγμές $t = t_0$ και $t = t_1$. Τη χρονική στιγμή $t = t_0$ η συνάρτηση $f_1(x,t)$ έχει τη μορφή της συνεχούς γραμμής ενώ τη χρονική στιγμή $t = t_1 > t_0$ η συνάρτηση έχει όμοια μορφή αλλά είναι μετατοπισμένη προς τα δεξιά, εφόσον $k > 0$. Δηλαδή με την πάροδο του χρόνου το κύμα κινείται προς τα δεξιά.

Στην κυματική είναι πολύ χρήσιμη η μιγαδική παράσταση ενός κύματος:

$$f(x,t) = C_0 \mathrm{e}^{i(kx-\omega t)} \tag{1.32}$$

Η συνάρτηση αυτή περιγράφει επίσης ένα κύμα που κινείται με ταχύτητα $v_{ph} = \omega/k$. Το πραγματικό ή το φανταστικό μέρος της $f(x,t)$ παριστάνει το φυσικό μέγεθος για το οποίο ενδιαφερόμαστε. Στην περίπτωση που έχουμε μία μονοχρωματική ακτινοβολία μήκους κύματος λ, που διαδίδεται κατά τον άξονα των x, η $f(x,t)$ (ή $f_1(x,t)$, ή $f_2(x,t)$) μπορεί να παριστάνει την ένταση του ηλεκτρικού ή μαγνητικού πεδίου. Τα κύματα που παριστάνουν οι συναρτήσεις f_1, f_2 και f (σχέσεις 1.27 και 1.32) εκτείνονται απεριόριστα και λέγονται επίπεδα κύματα ή μονοχρωματικά κύματα, εφόσον αναφερόμαστε σε Η.Μ. ακτινοβολία.

Ας θεωρήσουμε τώρα μια ετεροχρωματική ακτινοβολία, δηλαδή μία επαλληλία μονοχρωματικών ακτινοβολιών:

$$f(x,t) = C_1 f_1(x,t) + C_2 f_2(x,t) + \cdots = \sum_n C_n \mathrm{e}^{i(k_n x - \omega_n t)} \tag{1.33}$$

Κάθε όρος της (1.33) παριστάνει μία μονοχρωματική συνιστώσα ή μία **φασματική γραμμή**. Στην περίπτωση που έχουμε συνεχές φάσμα αντί διακεκριμένου, η εταιροχρωματική ακτινοβολία παρίσταται υπό μορφή ολοκληρώματος:

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \mathrm{e}^{i(kx-\omega t)} dk \tag{1.34}$$

Η ολοκλήρωση εκτείνεται από το $-\infty$ έως $+\infty$ ώστε να περιλαμβάνονται στον ίδιο τύπο επίπεδα κύματα που διαδίδονται προς τα δεξιά και προς τα αριστερά. Η (1.34), επειδή $\omega = v_{ph} k$, γράφεται ακόμη:

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \mathrm{e}^{ik(x-v_{ph}t)} dk \tag{1.35}$$

Επομένως, σύμφωνα με τη θεωρία των μετασχηματισμών Fourier, ο όρος $C(k)$ είναι ο μετασχηματισμός Fourier της $f(x,t)$, δηλαδή

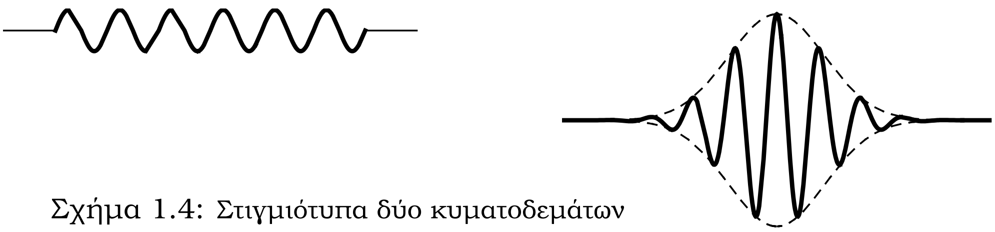
$$C(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,t) \mathrm{e}^{-ik(x-v_{ph}t)} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,t) \mathrm{e}^{-i(kx-\omega t)} dx \tag{1.36}$$

Αν είναι γνωστή η $f(x,0)$, η $C(k)$ μπορεί να βρεθεί από την (1.36) θέτοντας $t=0$, έτσι:

$$C(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,0) \mathrm{e}^{-ikx} dx \tag{1.37}$$

Αναφέρεται ότι η ποσότητα $|C(k)|^2 dk$ παριστάνει την ένταση της ακτινοβολίας στο διάστημα μεταξύ k και $k+dk$.

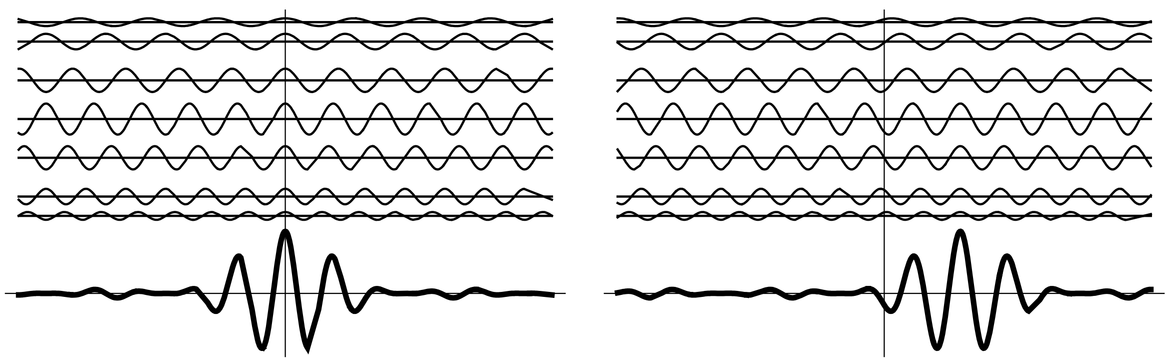
Από τη σχέση (1.33) ή καλύτερα από τις σχέσεις (1.34) και (1.36) βλέπουμε ότι, αν το $C(k)$ εκλεγεί κατάλληλα, είναι δυνατό το κύμα που παρίσταται από την $f(x,t)$ (σχέση 1.34) να έχει σημαντικές τιμές μόνο σ' ένα πεπερασμένο διάστημα του άξονα των x και να είναι μηδέν ή να έχει αμελητέες τιμές έξω από αυτό το διάστημα. Σ' αυτήν την περίπτωση λέμε ότι έχουμε μια **κυματοομάδα** ή ένα **κυματόδεμα**. Στιγμιότυπα τέτοιων κυματοδεμάτων φαίνονται στο Σχ. 1.4.



Σχήμα 1.4: Στιγμιότυπα δύο κυματοδεμάτων

Η μελέτη των κυματοδεμάτων παρουσιάζει ενδιαφέρον στην κυματομηχανική επειδή αποσκοπούμε στην αντιστοιχία σωματιδίου–κύματος. Για το λόγο αυτό θα πρέπει η μορφή του κύματος να είναι τέτοια ώστε να είναι δυνατό να αντιστοιχίσουμε στη διάδοσή του την κλασική κίνηση του σωματιδίου, που έχει καθορισμένη θέση και ορμή.

Ο σχηματισμός ενός κυματοδέματος οφείλεται στο γεγονός ότι τα μονοχρωματικά κύματα που αποτελούν το κυματόδεμα, συμβάλλουν θετικά μόνο σε μια περιοχή του άξονα των x, ενώ συμβάλλουν αρνητικά έξω απ' αυτήν. Στο Σχήμα 1.5 φαίνεται η δημιουργία ενός κυματοδέματος με τη συμβολή (επαλληλία) αρμονικών κυμάτων.



Σχήμα 1.5: Στιγμιότυπα κυματοδέματος, από επαλληλία επτά αρμονικών κυμάτων για τις χρονικές στιγμές $t=0$ και $t=t_1$ ($t_1>0$).

Ας υποθέσουμε τώρα ότι έχουμε συνεχή κατανομή μονοχρωματικών ακτινοβολιών που συμβάλλουν για το σχηματισμό του κυματοδέματος και ότι η συνάρτηση $C(k)$ είναι μια συνάρτηση Gauss της μορφής:

$$C(k) = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-a^2k^2/2} \tag{1.38}$$

Παρατηρούμε ότι για $|k| > 1/a$ η $C(k)$ είναι αμελητέα, δηλαδή η $C(k)$ είναι συγκεντρωμένη στην περιοχή $k=0$ με πλάτος τάξης $\Delta k \simeq 1/a$.

Η $f(x,t)$ (σχέση 1.34) για $t=0$ γράφεται:

$$f(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-a^2k^2/2}\,\mathrm{e}^{ikx}\,dk \tag{1.39}$$

Η έκφραση της $f(x,0)$ της (1.39) είναι ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier μιας συνάρτησης Gauss, που ως γνωστό είναι πάλι συνάρτηση Gauss της μορφής:

$$f(x,0) = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-x^2/(2a^2)} \tag{1.40}$$

Για τα παραπάνω βλέπε και το βιβλίο “ Μαθηματικές Μέθοδο Φυσικής”, σελ. 327.

Παρατηρούμε ότι η $f(x,0)$ είναι αμελητέα για $|x| > a$ και αυτή είναι συγκεντρωμένη στην περιοχή $x=0$ με πλάτος τάξης $\Delta x \simeq a$ (Σχ.46).

Άρα

$$(\Delta x)(\Delta k) \simeq 1$$

Η σχέση αυτή είναι η σχέση απροσδιοριστίας του Heisenberg για κυματοδέματα. Η ακριβής διατύπωση της σχέσης αυτής προϋποθέτει ακριβή ορισμό των Δx και Δk.

1.3.2 Ακριβής μορφή της σχέσης απροσδιοριστίας

Ας θεωρήσουμε το κυματόδεμα:

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C(k)\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}dk$$

Για τις συναρτήσεις $f(x,t)$ και $C(k)$ μπορεί να αποδειχτεί το θεώρημα του Parseval

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |C(k)|^2 dk = N$$

Ορίζουμε τα παρακάτω μεγέθη, σύμφωνα και με τους αντίστοιχους ορισμούς της Στατιστικής:

• Μέση τιμή του x ή κέντρο του κυματοδέματος:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} x|f(x,t)|^2 dx \tag{1.41}$$

• Τυπική απόκλιση ή ημιεύρος του κυματοδέματος: $\Delta x = +\sqrt{(\Delta x)^2}$, όπου:

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 |f(x,t)|^2 dx \tag{1.42}$$

• Μέση τιμή του k ή κέντρο της φασματικής γραμμής:

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} k|C(k)|^2 dk \tag{1.43}$$

• Τυπική απόκλιση ή ημιεύρος της φασματικής γραμμής: $\Delta k = +\sqrt{(\Delta k)^2}$, όπου:

$$(\Delta k)^2 = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} (k - \langle k \rangle)^2 |C(k)|^2 dk \tag{1.44}$$

Με τη βοήθεια των παραπάνω ορισμών μπορεί να δειχθεί ότι:

$$\boxed{(\Delta x)(\Delta k) \geq \frac{1}{2}} \tag{1.45}$$

Από τη σχέση αυτή είναι φανερό ότι είναι αδύνατο το ημιεύρος ενός κυματοδέματος και το ημιεύρος της αντίστοιχης φασματικής γραμμής να είναι ταυτόχρονα μηδέν. Τέλος μπορεί να δειχθεί ότι στην περίπτωση που το $C(k)$ είναι μια συνάρτηση Gauss τότε έχουμε το ελάχιστο γινόμενο αβεβαιοτήτων.

Άσκηση. Να βρεθεί το γινόμενο των αβεβαιοτήτων για το κυματόδεμα της σχέσης (1.40). Διαπιστώσετε ότι σε αυτήν την περίπτωση έχετε το ελάχιστο γινόμενο αβεβαιοτήτων.

1.3.3 Διάδοση κυματοδέματος

Στο προηγούμενο εδάφιο είδαμε πως σχηματίζεται ένα κυματόδεμα. Στη συνέχεια θα δούμε πως διαδίδεται αυτό με διασκεδασμό, που συμβαίνει όταν το κυματόδεμα διαδίδεται σ' ένα μέσο με δείκτη διάθλασης $\eta \neq 1$ ($\eta = c/v$), οπότε η φασική ταχύτητα κάθε μονοχρωματικού κύματος έχει διαφορετική τιμή. Δηλαδή η φασική ταχύτητα είναι συνάρτηση του k:

$$v_{ph} = v_{ph}(k) \qquad \text{και} \qquad \omega = k v_{ph}(k) = \omega(k) \tag{1.46}$$

Σ' αυτήν την περίπτωση περιμένουμε ότι το σχήμα του κυματοδέματος θα αλλάζει κατά την κίνησή του. Θα εξετάσουμε την κίνηση του κυματοδέματος υποθέτοντας τα εξής:

1. Η συνάρτηση $C(k)$ είναι αμελητέα εκτός από μία μικρή περιοχή Δk γύρω από την τιμή k_0. Δηλαδή το κυματόδεμα είναι σχεδόν μονοχρωματικό.

2. Η $\omega(k)$ είναι μια βραδέως μεταβαλλόμενη συνάρτηση του k. Δηλαδή, στο κατά Taylor ανάπτυγμα της $\omega(k)$ ως προς το σημείο k_0 μπορούμε να παραλείψουμε τους όρους δεύτερης και ανώτερης τάξης και να γράψουμε:

$$\omega(k) \simeq \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} (k - k_0) \tag{1.47}$$

Με τη βοήθεια της (1.47) ο εκθέτης της ολοκληρωτέας συνάρτησης του κυματοδέματος της (1.34) γράφεται:

$$kx - \omega t \simeq (k_0 x - \omega_0 t) + \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} t\right](k - k_0) \tag{1.48}$$

Η αντικατάσταση του $kx - \omega t$ από τη (1.48) στο ολοκλήρωμα της (1.34), μετά από μια αναδιάταξη των όρων που προκύπτουν, οδηγεί στην παρακάτω μορφή του κυματοδέματος:

$$\boxed{f_0(x,t) = A\big(x - (\frac{d\omega}{dk})_{k=k_0} t\big)\, \mathrm{e}^{i(k_0 x - \omega_0 t)}} \tag{1.49}$$

όπου:

$$A\big(x - (\frac{d\omega}{dk})_{k=k_0} t\big) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C(k)\, \mathrm{e}^{\;i\;\; x - (\frac{d\omega}{dk})_{k=k_0} t\;\; (k-k_0)}\, dk \tag{1.50}$$

Η σχέση (1.49) παριστάνει ένα κύμα μήκους κύματος $\lambda_0 = 2\pi/|k_0|$ και φασικής ταχύτητας $v_{ph} = \omega_0/k_0$. Η συνάρτηση $A\big(x - (\frac{d\omega}{dk})_{k=k_0} t\big)$, που μπορεί να θεωρηθεί ως το πλάτος του κύματος $f_0(x,t)$, κινείται χωρίς μεταβολή του σχήματός του με ταχύτητα:

$$v_{gr} = \left(\frac{dx}{dt}\right)_{\text{A=σταθ.}} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} \tag{1.51}$$

Την ταχύτητα αυτήν την καλούμε **ομαδική ταχύτητα** και είναι η ταχύτητα μετατόπισης ενός σημείου σταθερής τιμής πλάτους, A, δηλαδή η ταχύτητα με την οποία μετατοπίζεται το κυματόδεμα $f_0(x,t)$ "ως όλον". Η ταχύτητα αυτή παριστάνει συνήθως την ταχύτητα διάδοσης της ενέργειας. Η σχέση μεταξύ της v_{gr} και v_{ph} βρίσκεται από τη σχέση (1.51) και την $v_{ph} = \omega/k$:

$$v_{gr} = v_{ph}(k_0) + k_0 \left(\frac{dv_{ph}}{dk}\right)_{k=k_0} = v_{ph}(\lambda_0) - \lambda_0 \left(\frac{dv_{ph}}{d\lambda}\right)_{\lambda=\lambda_0} \tag{1.52}$$

Αν συμβαίνει $v_{gr} < v_{ph}$ τότε έχουμε ομαλό διασκεδασμό, ενώ στην περίπτωση του ανώμαλου διασκεδασμού ισχύει $v_{gr} > v_{ph}$. Τέλος στην περίπτωση που το υλοκυματόδεμα διαδίδεται χωρίς διασκεδασμό έχουμε $v_{gr} = v_{ph}$. Το σχήμα του κυματοδέματος παραμένει σταθερό με την πάροδο του χρόνου μόνο στην περίπτωση που $v_{gr} = v_{ph}$.

Θα πρέπει να αναφέρουμε ότι τα πιο πάνω ισχύουν για μικρά χρονικά διαστήματα και αυτό επειδή για μεγάλα χρονικά διαστήματα οι όροι που παραλείφθηκαν στο κατά Taylor ανάπτυγμα της $\omega(k)$ δεν είναι αμελητέοι πολλαπλασιαζόμενοι με το χρόνο. Αυτό έχει ως συνέπεια το πλάτος A του διαμορφωμένου κύματος $f_0(x,t)$ να μην έχει την απλή μορφή $A(x - v_{gr}t)$ αλλά πολυπλοκότερη.

1.3.4 Κύματα σε τρεις διαστάσεις.

Η μορφή ενός αρμονικού κύματος σε τρεις διαστάσεις είναι:

$$f(\mathbf{r},t) = C_0 \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\,\mathbf{r}-\omega t)} = C_0 \mathrm{e}^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} \tag{1.53}$$

όπου $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ ένα διάνυσμα που καλείται κυματοδιάνυσμα ή διάνυσμα διάδοσης με μέτρο $|\mathbf{k}| = k = 2\pi/\lambda$ και που έχει τη διεύθυνση και φορά διάδοσης του κύματος.

Με επαλληλία τέτοιων επιπέδων κυμάτων, όλων των δυνατών κατευθύνσεων και τιμών του $\mathbf{k}$ έχουμε σχηματισμό κύματος της μορφής:

$$f(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int C(\mathbf{k}) \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\,\mathbf{r}-\omega t)} d\mathbf{k} \tag{1.54}$$

όπου η ολοκλήρωση εκτείνεται σ' όλον τον χώρο των $\mathbf{k}$. Από τη σχέση αυτή, σύμφωνα με όσα εκτέθηκαν για μία διάσταση, έχουμε:

$$C(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int f(\mathbf{r},t) \mathrm{e}^{-i(\mathbf{k}\,\mathbf{r}-\omega t)} d\mathbf{r} \tag{1.55}$$

Αν η $f(\mathbf{r},t)$ έχει σημαντικές τιμές σ' ένα τμήμα του χώρου και αμελητέες έξω απ' αυτό τότε η $f(\mathbf{r},t)$ παριστάνει ένα κυματόδεμα. Η ομαδική ταχύτητα ενός κυματοδέματος που διαδίδεται στο χώρο δίνεται από τη σχέση:

$$\mathbf{v}_{gr} = \mathrm{grad}_{\mathbf{k}} \omega = \frac{\partial \omega}{\partial k_x} \mathbf{x}_0 + \frac{\partial \omega}{\partial k_y} \mathbf{y}_0 + \frac{\partial \omega}{\partial k_z} \mathbf{z}_0 \tag{1.56}$$

Το κέντρο του κυματοδέματος ορίζεται ως το σημείο που έχει συντεταγμένες $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$, $\langle z \rangle$, όπου:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \int x|f|^2 d\mathbf{r}, \quad \langle y \rangle = \frac{1}{N} \int y|f|^2 d\mathbf{r}, \quad \langle z \rangle = \frac{1}{N} \int z|f|^2 d\mathbf{r} \tag{1.57}$$

Το μέσον κυματοδιάνυσμα ορίζεται ως αυτό που έχει συντεταγμένες $\langle k_x \rangle$, $\langle k_y \rangle$, $\langle k_z \rangle$, όπου:

$$\langle k_x \rangle = \frac{1}{N} \int k_x |C|^2 d\mathbf{k}, \quad \langle k_y \rangle = \frac{1}{N} \int k_y |C|^2 d\mathbf{k}, \quad \langle k_z \rangle = \frac{1}{N} \int k_z |C|^2 d\mathbf{k} \tag{1.58}$$

Ανάλογα με τη μία διάσταση ορίζονται και τα ημιεύρη Δx, Δy, Δz, Δk_x, Δk_y, Δk_z. Στις σχέσεις (1.57) έως και (1.58) το N είναι:

$$N = \int |f|^2 d\mathbf{r} = \int |C|^2 d\mathbf{k} \tag{1.59}$$

Τέλος, οι σχέσεις αβεβαιότητας γράφονται:

$$\Delta x \, \Delta k_x \geq \frac{1}{2}, \quad \Delta y \, \Delta k_y \geq \frac{1}{2}, \quad \Delta z \, \Delta k_z \geq \frac{1}{2} \tag{1.60}$$

1.3.5 Σχέση του De Broglie

Όπως αναφέραμε στο εδάφιο 1.3 η βασική υπόθεση του de Broglie ήταν να αντιστοιχίσει σ' ένα σωματίδιο ορμής p, ένα κύμα, μήκους κύματος λ. Στην περίπτωση που το σωματίδιο είναι εντοπισμένο σε μια περιοχή του χώρου είναι λογικό να αντιστοιχίσουμε σ' αυτό όχι ένα επίπεδο κύμα αλλά ένα κυματόδεμα αρκετά μικρού εύρους.

Στη συνέχεια θα αναφέρουμε πως είναι δυνατό να οδηγηθούμε στη σχέση του de Broglie, $p = \hbar k = h/\lambda$ για ένα ελεύθερο σωματίδιο. Για την απόδειξη της σχέσης αυτής θα κάνουμε τις εξής υποθέσεις:

1. Η κλασική τροχιά ενός σωματιδίου ενέργειας E είναι η ίδια με την ακτίνα του κύματος που αντιστοιχεί σε συχνότητα $\nu = E/h$ ($\omega = E/\hbar$), δηλαδή δεχόμαστε τη σχέση:

$$E = h\nu \quad \Rightarrow E = \hbar\omega$$

2. Η ταχύτητα του σωματιδίου ισούται με την ομαδική ταχύτητα του κυματοδέματος που αντιστοιχεί σ' αυτό, δηλαδή $v = v_{gr}$.

Η ενέργεια και η ορμή ενός ελεύθερου σωματιδίου είναι αντίστοιχα:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{και} \quad v = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{p}{m} \tag{1.61}$$

ενώ η ομαδική ταχύτητα μπορεί να γραφεί:

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dp}\frac{dp}{dk} \tag{1.62}$$

Επειδή όμως δεχτήκαμε ότι $v = v_{gr}$ και $v = dE/dp$ η (1.62) γράφεται:

$$\frac{dE}{dp} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dp}\frac{dp}{dk} \quad \Rightarrow \quad dp = \hbar dk$$

Με ολοκλήρωση και λαμβάνοντας τη σταθερά ολοκλήρωσης ίση με το μηδέν, έχουμε:

$$p = \hbar k \quad \text{ή} \quad p = \frac{h}{\lambda} \tag{1.63}$$

Στην περίπτωση των τριών διαστάσεων, αν χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις:

$$\mathbf{v} = \mathrm{grad}_{\mathbf{p}} E \quad \text{και} \quad \mathbf{v}_{gr} = \mathrm{grad}_{\mathbf{k}} \omega \tag{1.64}$$

έχουμε:

$$\boxed{\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}} \tag{1.65}$$

Κλείνοντας το εδάφιο αυτή, φαίνεται αμέσως ότι οι σχέσεις αβεβαιότητας (1.60) με τη βοήθεια της (1.65) γράφονται:

$$\boxed{\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}} \tag{1.66}$$

1.4 Κυματοσυνάρτηση ελευθέρου σωματιδίου

Το κύμα που αντιστοιχεί στην κίνηση ενός σωματιδίου το ονομάζουμε υλοκύμα και τη συνάρτηση που περιγράφει την κίνησή του την ονομάζουμε **κυματοσυνάρτηση** και τη συμβολίζουμε με $\Psi(x,t)$ (ή $\Psi(\mathbf{r},t)$ για κίνηση στο χώρο). Έτσι όπως ένα επίπεδο κύμα παριστάνεται από την συνάρτηση:

$$f(x,t) = C(k)\mathrm{e}^{i(k\,x - \omega t)} \tag{1.67}$$

ένα επίπεδο υλοκύμα που περιγράφει την κίνηση ενός ελεύθερου σωματιδίου ενέργειας $E = p^2/2m$, αφού $\omega = E/\hbar$ και $p = \hbar k$ παριστάνεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\Psi_p(x,t) = a(p) \exp\big[\frac{i}{\hbar}\,(p\,x - Et)\big] = a(p) \exp\big[\frac{i}{\hbar}\,\big(p\,x - \frac{p^2}{2m}\,t\big)\big] \tag{1.68}$$

Με κατάλληλη επαλληλία τέτοιων επιπέδων κυμάτων μπορεί να κατασκευαστεί ένα κυματόδεμα του οποίου η κυματοσυνάρτηση είναι:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int a(p) \exp\big[\frac{i}{\hbar}\,(p\,x - Et)\big]\,dp \tag{1.69}$$

όπου το πλάτος της συνιστώσας με ορμή p δίνεται (σε αντιστοιχία με τη (1.36)) από τη σχέση:

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x,t) \exp\big[-\frac{i}{\hbar}\,(p\,x - Et)\big]\,dx \tag{1.70}$$

Η ισότητα του Parseval στην περίπτωση αυτή γράφεται:

$$\int |\Psi(x,t)|^2 dx = \int |a(p)|^2 dp \tag{1.71}$$

Αν έχουμε κίνηση στο χώρο, οι σχέσεις (1.69) και (1.70) γράφονται:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int a(\mathbf{p}) \exp\big[\frac{i}{\hbar}\,(\mathbf{p}\,\mathbf{r} - Et)\big]\,d\mathbf{p} \tag{1.72}$$

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi(\mathbf{r},t) \exp\big[-\frac{i}{\hbar}\,(\mathbf{p}\,\mathbf{r} - Et)\big]\,d\mathbf{r} \tag{1.73}$$

Σημείωση. Είναι ενδιαφέρον να εξετάσουμε αν υπάρχει κάποια σχέση μεταξύ της φασικής και της ομαδικής ταχύτητας, για ένα υλοκυματόδεμα που περιγράφει την κίνηση ενός ελεύθερου σωματιδίου ($E = \frac{p^2}{2m}$).

Για τη φασική ταχύτητα και την ομαδική ταχύτητα έχουμε αντίστοιχα:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} \quad \text{και} \quad v_{gr} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} \tag{1.74}$$

Από τις σχέσεις αυτές βλέπουμε ότι για ένα υλοκυματόδεμα ισχύει:

$$v_{ph} = \frac{v_{gr}}{2} \tag{1.75}$$

Παρατηρούμε ότι αν και το σωμάτιο κινείται ελεύθερα η φασική ταχύτητα του υλοκυματοδέματος είναι διαφορετική από την ομαδική του ταχύτητα. Αυτό σημαίνει ότι τα υλοκυματοδέματα υφίστανται διασκεδασμό και όταν ακόμη διαδίδονται στον κενό χώρο. Αυτό γίνεται φανερό και από τη σχέση (1.74) η οποία, αφού $p = \hbar k$ γράφεται:

$$v_{ph} = \frac{\hbar}{2m} k \tag{1.76}$$

Επομένως, σύμφωνα μ' αυτά που αναφέραμε στο εδάφιο 1.3.3, θα έχουμε διασκεδασμό του υλοκυματοδέματος (άπλωμα του υλοκυματοδέματος) αφού η φασική ταχύτητα είναι συνάρτηση του k.

Κεφάλαιο 2

Η εξίσωση του Schrödinger

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε ότι τα πειραματικά δεδομένα του μικρόκοσμου υποδεικνύουν ότι σε κάθε σωματίδιο αντιστοιχεί ένα υλοκύμα που στην περίπτωση του ελεύθερου σωματιδίου ενέργειας $E = \frac{p^2}{2m}$ είναι της μορφής:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int a(\mathbf{p}) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)} d\mathbf{p} \tag{2.1α'}$$

όπου

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi(\mathbf{r},t) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)} d\mathbf{r} \tag{2.1β'}$$

Από την κυματική γνωρίζουμε ότι ένα κυματόδεμα είναι λύση της κυματικής εξίσωσης. Τίθεται τώρα το ερώτημα, τα υλοκύματα και γενικά τα υλοκυματοδέματα της μορφής (2.1α') ποια διαφορική εξίσωση (Δ.Ε.) ικανοποιούν; Εκτός από αυτό το ερώτημα υπάρχει και το πιο γενικό ερώτημα: Στην περίπτωση που το σωματίδιο κινείται υπό την επίδραση δυνάμεων, τα αντίστοιχα υλοκυματοδέματα ποια Δ.Ε. ικανοποιούν; Τέλος, ποια είναι η φυσική σημασία της κυματοσυνάρτησης $\Psi(\mathbf{r},t)$;

Η απάντηση στα δύο πρώτα ερωτήματα δόθηκε από το Schrödinger ενώ στο τρίτο από το Born.

2.1 Η εξίσωση του Schrödinger

2.1.1 Ελεύθερο σωματίδιο

Η Δ.Ε. που θέλουμε να βρούμε ώστε να έχει ως λύση την κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$ της σχέσης (2.1α'), δηλαδή την κυματοσυνάρτηση ενός ελεύθερου σωματιδίου, θα πρέπει να είναι συμβιβαστή με τα παρακάτω:

1. Να ισχύουν οι σχέσεις:

$$E = \frac{p^2}{2m}\,, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}\,, \quad E = \hbar\omega \quad (\text{ή } \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega) \tag{2.2}$$

2. Να είναι γραμμική και ομογενής, ώστε να ισχύει η αρχή της επαλληλίας. Δηλαδή, αν Ψ_1 και Ψ_2 είναι δύο λύσεις της ζητούμενης Δ.Ε. και ο γραμμικός συνδυασμός:

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

να είναι επίσης λύση της Δ.Ε.

Αν δεν ισχύει η αρχή της επαλληλίας δε θα μπορούμε να εξηγήσουμε τα φαινόμενα συμβολής που παρατηρούνται στο πείραμα.

Επομένως η διαφορική εξίσωση που ζητάμε μπορεί να περιέχει τις εκφράσεις:

$$\Psi\,,\quad \frac{\partial\Psi}{\partial t}\,,\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}\,,\ \ldots,\quad \frac{\partial\Psi}{\partial x}\,,\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\,,\ \ldots\ \text{κλπ}$$

όχι όμως δυνάμεις ή γινόμενα αυτών.

3. Να έχει σταθερούς συντελεστές, ώστε για $V = 0$ όλα τα σημεία του χώρου και του χρόνου να είναι ισοδύναμα. Επίσης οι συντελεστές πρέπει να είναι ανεξάρτητοι από τα μεταβαλλόμενα χαρακτηριστικά του σωματιδίου (θέση και ορμή) και να εξαρτάται μόνο από τις αμετάβλητες παραμέτρους και από τις αναγκαίες φυσικές σταθερές.

Θα μπορούσε βέβαια να υποθέσει κανείς ότι η ζητούμενη Δ.Ε. μπορεί να προκύψει από την κυματική εξίσωση:

$$\nabla^2 f = \frac{1}{v_{ph}^2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \tag{2.3}$$

Θέτοντας $f \to \Psi$ και $\frac{1}{v_{ph}^2} = \frac{k^2}{\omega^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{\hbar^2\omega^2} = \frac{p^2}{E^2}$, η (2.3) γράφεται:

$$\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{p^2}{E^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} \tag{2.4}$$

Μπορούμε όμως να επαληθεύσουμε ότι ενώ τα επίπεδα υλοκύματα:

$$\Psi_p(\mathbf{r},t) = a(\mathbf{p})\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}$$

ικανοποιούν την (2.4) η $\psi(\mathbf{r},t)$ που δίνεται από την (2.1α΄) και είναι μια επαλληλία επιπέδων υλοκυμάτων, επαληθεύουν την (2.4) εφόσον $E^2 = p^2$. Αυτό όμως είναι ασυμβίβαστο με την πρώτη σχέση των (2.2). Επομένως η ζητούμενη Δ.Ε. πρέπει να είναι διαφορετικής μορφής από την (2.4).

Θα δοκιμάσουμε τώρα αν η ζητούμενη Δ.Ε. είναι της μορφής:

$$\nabla^2\Psi = \alpha\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{2.5}$$

Θα υπολογίσουμε πρώτα το $\nabla^2\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$. Για τις μερικές παραγώγους έχουμε:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int a(\mathbf{p})(\frac{i}{\hbar}p_x)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}d\mathbf{p},\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int a(\mathbf{p})(-\frac{p_x^2}{\hbar^2})\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}d\mathbf{p} \tag{2.6}$$

Οι μερικές παράγωγοι $\partial^2\Psi/\partial y^2$ και $\partial^2\Psi/\partial z^2$ είναι της ίδιας μορφής με την (2.6), με τη διαφορά όπου p_x^2 θα υπάρχει p_y^2 και p_z^2, αντίστοιχα. Έτσι έχουμε:

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}(-\frac{1}{\hbar^2})\int a(\mathbf{p})\mathbf{p}^2\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}d\mathbf{p} \tag{2.7}$$

Η παραγώγιση της $\Psi(\mathbf{r},t)$ ως προς το χρόνο, δίνει:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int a(\mathbf{p})(-\frac{iE}{\hbar})\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}d\mathbf{p}$$

και επειδή $E = \frac{p^2}{2m}$ έχουμε:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}(-\frac{i}{\hbar 2m})\int a(\mathbf{p})\mathbf{p}^2 \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}d\mathbf{p} \tag{2.8}$$

Η αντικατάσταση των (2.7) και (2.8) στην (2.5) δίνει

$$-\frac{1}{\hbar^2} = -\frac{i}{\hbar 2m}\alpha \quad \text{ή} \quad \boxed{\alpha = (-\frac{2m}{\hbar^2})(i\hbar)}$$

Έτσι η (2.5) γράφεται:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}} \tag{2.9}$$

Η εξίσωση αυτή είναι **η εξαρτημένη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger για ελεύθερο σωματίδιο**. Εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι και τα επίπεδα κύματα $a(\mathbf{p})\mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)/\hbar}$ την επαληθεύουν.

Η εξίσωση (2.9) έχει περίπου την ίδια μορφή με την κυματική εξίσωση, (2.3), οι λύσεις της οποίας είναι τα κύματα της Κλασικής Φυσικής. Οι δύο εξισώσεις όμως παρουσιάζουν τις εξής διαφορές:

1. Η εξίσωση (2.9) περιέχει την πρώτη μερική παράγωγο ως προς τον χρόνο, $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$, ενώ η (2.3) τη δεύτερη μερική παράγωγο ως προς το χρόνο, $\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα ενώ τα επίπεδα κύματα:

$$\cos(\mathbf{kr}-\omega t), \quad \sin(\mathbf{kr}-\omega t) \qquad \text{και} \qquad \mathrm{e}^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} \tag{2.10}$$

είναι λύσεις της (2.3) μόνο η $\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$ είναι λύση της (2.9). Ή διαφορετικά, ενώ οι συναρτήσεις της (2.10) είναι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ και $\frac{1}{v_{ph}^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}$, *μόνο η εκθετική συνάρτηση είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή*: $i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}$

Το γεγονός ότι η εξίσωση (2.9) είναι πρώτης τάξης ως προς το χρόνο έχει ως συνέπεια η τιμή της κυματοσυνάρτησης $\Psi(\mathbf{r},t)$ σε μια χρονική στιγμή $t=0$, να είναι επαρκής για να καθορίσουμε τη χρονική εξέλιξη του συστήματος, όπως συμβαίνει και στην Κλασική Φυσική. Αν η εξίσωση ήταν δευτέρας τάξης ως προς το χρόνο θα χρειάζονταν επιπλέον να δοθεί και η τιμή της $\partial/\partial t$ για $t=0$.

2. Οι συντελεστές των $\nabla^2 f$ και $\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$ στην (2.3) είναι πραγματικοί αριθμοί ενώ στην (2.9) εμφανίζεται η φανταστική μονάδα i. Επομένως **οι λύσεις της (2.9) είναι μιγαδικές συναρτήσεις**. Αυτό, εκ πρώτης όψεως, είναι ενοχλητικό επειδή η λύση της (2.9) φαίνεται ότι δεν μπορεί να περιγράφει μια μετρήσιμη ποσότητα. Στο ερώτημα, τι μπορεί να περιγράφει, θα δοθεί απάντηση στο επόμενο εδάφιο. Μπορούμε επομένως να συμπεράνουμε ότι *στην Κβαντική Μηχανική η χρήση των μιγαδικών συναρτήσεων είναι αναπόφευκτη ενώ στην Κλασική Φυσική η χρήση αυτών είναι προαιρετική και αποσκοπεί στην απλπούστευση των μαθηματικών πράξεων.*

Σε σχέση με την εξίσωση (2.9) παρατηρούμε ότι εμφανίζεται η σταθερά $\hbar$ που σημαίνει ότι αυτή παίζει καθοριστικό ρόλο όπου εμφανίζονται κβαντικά φαινόμενα.

2.1.2 Αντιστοιχία δυναμικών μεταβλητών με τελεστές

Παρατηρώντας την εξίσωση (2.9) φαίνεται ότι δεν εξαρτάται άμεσα από κάποια δυναμική μεταβλητή. Πως μπορεί επομένως να είναι το μηχανικό ισοδύναμο της κλασικής εξίσωσης της κίνησης;

Μια απάντηση μπορούμε να δώσουμε αν συγκρίνουμε την (2.9), γράφοντάς την λίγο διαφορετικά:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \frac{(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})^2}{2m}\Psi \tag{2.11}$$

με την κλασική εξίσωση της κίνησης ενός ελεύθερου σωματιδίου, που είναι:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{2.12}$$

Οι δύο αυτές εξισώσεις παρουσιάζουν μια τυπική ομοιότητα (!) που οδήγησε το Schrödinger να εισαγάγει αξιωματικά την κυματική εξίσωση για ένα σωματίδιο που κινείται σ' ένα δυναμικό.

Συγκρίνοντας τις εξισώσεις (2.11) και (2.12) μπορούμε να συμπεράνουμε ότι *η κβαντομηχανική περιγραφή της κίνησης ενός ελεύθερου σωματιδίου μπορεί να επιτευχθεί αν στην ενέργεια και στην ορμή του σωματιδίου που εμφανίζονται στην κλασική έκφραση, σχέση (2.12), αντιστοιχίσουμε* **τους ερμιτιανούς τελεστές**:

$$\boxed{E \;\rightarrow\; \widehat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \text{και} \quad \mathbf{p} \;\rightarrow\; \widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}} \tag{2.13}$$

Με βάση αυτήν την αντιστοιχία μεταξύ των παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών E και $\mathbf{p}$ με τελεστές και της αντιστοιχίας:

$$\boxed{\mathbf{r} \;\rightarrow\; \widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \quad \text{και} \quad t \;\rightarrow\; \widehat{t} = t} \tag{2.14}$$

μπορούν να δοθούν οι εκφράσεις και άλλων τελεστών όπως του τελεστή της στροφορμής:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p} \;\;\rightarrow\;\; \boxed{\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{r}}\times\widehat{\mathbf{p}} = \mathbf{r}\times(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})} \tag{2.15}$$

και του τελεστού του Hamilton:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r},t) \;\;\rightarrow\;\; \boxed{\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)} \tag{2.16}$$

Για ένα σωματίδιο που κινείται σε περιοχή όπου εξασκείται σ' αυτό δύναμη $\mathbf{F}$ που προέρχεται από τη δυναμική συνάρτηση $V(\mathbf{r},t)$, δηλαδή $\mathbf{F} = -\boldsymbol{\nabla}V(\mathbf{r},t)$, η κλασική εξίσωση της κίνησης είναι:

$$E = H \quad \text{ή} \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r},t) \tag{2.17}$$

Σημείωση 1. Το σύμβολο E χρησιμοποιείται όταν αναφερόμαστε σε μια συγκεκριμένη σταθερή τιμή της ενέργειας του σωματιδίου ενώ το σύμβολο H και το όνομα συνάρτηση του Hamilton ή Χαμιλτονιανή όταν εξετάζουμε την ολική ενέργεια ως μια συνάρτηση των $\mathbf{p}$ και $\mathbf{r}$.

Η εξίσωση τελεστών που αντιστοιχεί στην (2.17) είναι:

$$\widehat{E} = \widehat{H} \quad \text{ή} \quad \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)} \tag{2.18}$$

Η κβαντομηχανική κυματική εξίσωση προκύπτει από την (2.18) αν οι τελεστές της εξίσωσης επιδράσουν στην κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)} \tag{2.19}$$

ή

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \widehat{H}\Psi(\mathbf{r},t)} \tag{2.20}$$

Η εξίσωση αυτή είναι η **εξαρτημένη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger** για ένα σωματίδιο που κινείται σε δυναμικό $V(\mathbf{r},t)$. Η εξαρτημένη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger συσχετίζει το ρυθμό μεταβολής της κυματοσυνάρτησης (ενός κβαντικού συστήματος) με την ολική του ενέργεια ή ακριβέστερα, με τον τελεστή του Hamilton.

Στην περίπτωση που έχουμε σύστημα N σωματιδίων η συνάρτηση του Hamilton είναι:

$$H_N = \sum_{n=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_n^2}{2m_n} + V(\mathbf{r},t) \tag{2.21}$$

και η εξίσωση του Schrödinger είναι:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_n,t)}{\partial t} = \widehat{H}_N\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N,t) \tag{2.22}$$

όπου

$$\widehat{H}_N = \sum_{n=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_n}\nabla_n^2 + V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N,t)$$

Σημείωση 2. Αν δεν έγινε κατανοητό με όσα αναφέρθηκαν έως τώρα τονίζεται ότι τα παραπάνω δεν αποτελούν απόδειξη της εξίσωσης του Schrödinger, η οποία όπως και κάθε θεμελιώδης φυσικός νόμος δεν αποδεικνύεται. Ο σκοπός των αναφερθέντων σ' αυτό το εδάφιο ήταν να δείξει ότι η εξίσωση αυτή αποτελεί μια λογική εκλογή που μπορεί να γίνει με βάση τα πειραματικά δεδομένα. Η συμφωνία των πειραματικών δεδομένων (σε όλων των ειδών των μοριακών, ατομικών και πυρηνικών συστημάτων) με τις θεωρητικές προβλέψεις της εξίσωσης του Schrödinger μαρτυρούν την ορθότητά της. Θα πρέπει να αναφερθεί ότι η παραπάνω εκλογή δεν είναι ο μόνος τρόπος που μας οδηγεί από την Κλασική Μηχανική στην Κβαντική Μηχανική. Υπάρχουν και άλλοι τρόποι που στηρίζονται σε εξ ίσου "προφανείς" ομοιότητες.

Παρατήρηση. Εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι τα επίπεδα κύματα $\mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)/\hbar}$ είναι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών: $\widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$, $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ και $\widehat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$ και E, αντίστοιχα. Δηλαδή

$$\widehat{\mathbf{r}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)} = \mathbf{r}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}, \quad \widehat{\mathbf{p}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)} = \mathbf{p}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}, \quad \widehat{E}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)} = E\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}$$

Άσκηση. Η σύγκριση των σχέσεων (2.11) και (2.12) μπορεί να μας οδηγήσει, είτε στην αντιστοιχία

$$\mathbf{p} \;\rightarrow\; \widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

είτε στην αντιστοιχία

$$\mathbf{p} \;\rightarrow\; \widehat{\mathbf{p}} = +i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

Μπορείτε να δώσετε μια εξήγηση γιατί προτιμάται η πρώτη;

2.2 Φυσική σημασία της κυματοσυνάρτησης

Μέχρι τώρα δεν έχουμε αναφέρει τι μπορεί να παριστά η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$ που αντιστοιχεί σ' ένα σωματίδιο και είναι λύση της εξίσωσης του Schrödinger. Όπως αναφέρθηκε στη εδάφιο 2.1.1 η $\Psi(\mathbf{r},t)$ είναι μια μιγαδική συνάρτηση και επομένως δεν είναι δυνατό να δοθεί σε αυτήν άμεση φυσική ερμηνεία αφού τα φυσικά μεγέθη που μετρώνται είναι πραγματικοί αριθμοί. Έτσι αν θέλουμε να δοθεί φυσική ερμηνεία, αυτή θα πρέπει να δοθεί σε παράγωγο μέγεθος της. Μια υπόδειξη για την πιθανή ερμηνεία που μπορεί να δοθεί στο παράγωγο μέγεθος της $\Psi(\mathbf{r}, t)$ δίνεται πάλι από την κλασική κυματική θεωρία.

Είναι γνωστό ότι η πυκνότητα της ενέργειας ενός Η.Μ. κύματος είναι ανάλογη του μέτρου της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου, $\mathcal{E}^2$ και μαγνητικού πεδίου, $\mathcal{H}^2$. Το ολοκλήρωμα της πυκνότητας της ενέργειας σε όλο το χώρο δίνει την ολική ενέργεια του κύματος που είναι ανεξάρτητη του χρόνου.

Στα υλοκύματα η κυμαινόμενη ποσότητα είναι η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ που είναι μιγαδική συνάρτηση. Το μέτρο της όμως ή καλύτερα το τετράγωνο του μέτρου της, $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, είναι πραγματική συνάρτηση και επομένως θα μπορούσε να δοθεί φυσική ερμηνεία σε αυτό. Είναι λογικό να υποθέσουμε ότι, όπου το $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ παίρνει μεγάλη τιμή εκεί είναι πιθανότερο να βρίσκεται το σωματίδιο παρά όπου αυτό παίρνει μικρές τιμές. Έτσι, η φυσική ερμηνεία που δίνεται στο $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ είναι αυτή της **πυκνότητας πιθανότητας**. Δηλαδή, αν σε ένα σωματίδιο αντιστοιχεί η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, t)$ τότε κατά μια μέτρηση της θέσης του σωματιδίου, η πιθανότητα να βρίσκεται αυτό τη χρονική στιγμή t στον όγκο $d\mathbf{r} = dxdydz$ στο σημείο $\mathbf{r}$ είναι ανάλογη του $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$:

$$d\Pi = c|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$$

Η σταθερά αναλογίας c μπορεί να προκύψει από την απαίτηση η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε όλο το χώρο είναι μονάδα:

$$\Pi = c \int_{\mathcal{V}\to\infty} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1$$

Έτσι

$$c = \frac{1}{\int_{\mathcal{V}\to\infty} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}}$$

οπότε η πυκνότητα πιθανότητας είναι:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{\Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)}{\int_{\mathcal{V}\to\infty} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}} \tag{2.23}$$

Αν οι κυματοσυναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες, η $\rho(\mathbf{r}, t)$ γράφεται:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) \tag{2.24}$$

Πάντως για να είναι δυνατό να ερμηνευτεί η $\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^*\Psi$ ως πυκνότητα πιθανότητας, θα πρέπει:

$$\int_{\mathcal{V}\to\infty} \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 1 \tag{2.25}$$

για κάθε χρονική στιγμή.

Αυτό σημαίνει ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi(\mathbf{r}, t)$ πρέπει να είναι τέτοιες ώστε: α) Το ολοκλήρωμα της (2.25) **να είναι ανεξάρτητο του χρόνου**. β) Το ολοκλήρωμα της (2.25) **να συγκλίνει**. Αυτό σημαίνει ότι κατά την επίλυση ενός κβαντομηχανικού προβλήματος πρέπει να εξασφαλίζεται ότι η κυματοσυνάρτηση έχει τέτοια συμπεριφορά ώστε το ολοκλήρωμα (2.25) να υπάρχει, ή διαφορετικά η $\Psi(\mathbf{r}, t)$ πρέπει να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

Σημείωση. Στα πειράματα σκέδασης γίνονται αποδεκτές και κυματοσυναρτήσεις που δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, όπως για παράδειγμα τα επίπεδα κύματα: $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = a(\mathbf{p})\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)}$. Σε αυτήν την περίπτωση ορίζεται η σχετική πυκνότητα πιθανότητας.

Το ολοκλήρωμα της $\rho(\mathbf{r},t)$ σ' όλον το χώρο είναι ανεξάρτητο του χρόνου, εφόσον ισχύουν κατάλληλες συνθήκες ώστε ο τελεστής το Hamilton να είναι ερμιτιανός, όπως προκύπτει από την επόμενη πρόταση.

Πρόταση. Αν $\Psi_1(\mathbf{r},t)$ και $\Psi_2(\mathbf{r},t)$ είναι δύο λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger, τότε το ολοκλήρωμα (εσωτερικό γινόμενο):

$$(\Psi_1,\Psi_2) = \int_{V\to\infty} \Psi_1^*(\mathbf{r},t)\Psi_2(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} \tag{2.26}$$

είναι ανεξάρτητο του χρόνου (εφόσον ο τελεστής του Hamilton είναι ερμιτιανός).

Απόδειξη. Για να είναι το $\Psi_1,\Psi_2)$ ανεξάρτητο του χρόνου, αρκεί να δειχθεί ότι:

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Psi_1,\Psi_2) = 0} \tag{2.27}$$

Το αριστερό μέρος της (2.27) γράφεται:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\big(\Psi_1,\Psi_2\big) = \big(\frac{\partial\Psi_1}{\partial t},\Psi_2\big) + \big(\Psi_1,\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\big)$$

Η αντικατάσταση των $\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}$ και $\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}$ από την εξίσωση του Schrödinger δίνει:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\Psi_1,\Psi_2) &= (\frac{1}{i\hbar}\widehat{H}\Psi_1,\Psi_2) + (\Psi_1,\frac{1}{i\hbar}\widehat{H}\Psi_2) = \frac{1}{-i\hbar}(\widehat{H}\Psi_1,\Psi_2) + \frac{1}{i\hbar}(\Psi_1,\widehat{H}\Psi_2)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\big[-(\widehat{H}\Psi_1,\Psi_2) + (\Psi_1,\widehat{H}\Psi_2)\big] = 0\end{aligned}$$

Αφού $(\widehat{H}\Psi_1,\Psi_2) = (\Psi_1,\widehat{H}\Psi_2)$, εφόσον ο τελεστής $\widehat{H}$ είναι ερμιτιανός.

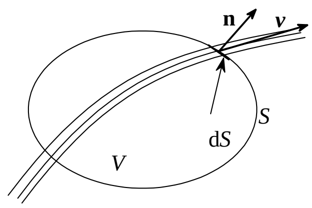
2.2.1 Εξίσωση συνέχειας. Πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας.

Σε διάφορους κλάδους της φυσικής, όπως για παράδειγμα στην Υδροδυναμική και στην Ηλεκτροδυναμική, ισχύει μια βασική εξίσωση που λέγεται **εξίσωση συνέχειας**. Στην υδροδυναμική η εξίσωση αυτή εκφράζει τη διατήρηση της μάζας κινούμενου ρευστού, ενώ στην ηλεκτροδυναμική εκφράζει τη διατήρηση του ηλεκτρικού φορτίου. Μια τέτοια εξίσωση συνέχειας μπορεί να γραφεί για κάθε (μονόμετρο) φυσικό μέγεθος που διατηρείται. Στην Κβαντομηχανική ένα μονόμετρο μέγεθος είναι η πιθανότητα $\int_{\mathcal{V}\to\infty}\Psi^*\Psi d\mathbf{r}$. Περιμένουμε επομένως να ισχύει μια εξίσωση συνέχειας και στην Κβαντομηχανική.

Θα εξετάσουμε πως οδηγούμαστε στην εξίσωση συνέχειας πρώτα στην Υδροδυναμική και στη συνέχεια στην Κβαντομηχανική.

Ο όγκος $\mathcal{V}$ του σχήματος 2.1 που περικλείεται από την επιφάνεια $\mathcal{S}$ είναι τμήμα μιας περιοχής μέσα στην οποία κινείται ρευστό πυκνότητας $\rho = \rho(\mathbf{r},t)$ με ταχύτητα $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r},t)$.

Το γινόμενο της πυκνότητας επί την ταχύτητα $\mathbf{j} = \rho\mathbf{v}$ λέγεται **πυκνότητα ρεύματος**. Η πυκνότητα ρεύματος του ρευστού είναι η μάζα του ρευστού που διέρχεται ανά μονάδα χρόνου, δια της μονάδας επιφάνειας κάθετα προς την ταχύτητα του ρευστού. Η μάζα του ρευστού που περνά από τη στοιχειώδη επιφάνεια $d\mathcal{S}$ ανά μονάδα χρόνου είναι:



Σχήμα 2.1:

$$\rho(\mathbf{r},t)\mathbf{v}(\mathbf{r},t)d\mathcal{S} = \mathbf{j}(\mathbf{r},t)d\mathcal{S} \tag{2.28}$$

Η συνολική μάζα του ρευστού που περνά απ' όλη την επιφάνεια $\mathcal{S}$ ανά μονάδα χρόνου είναι:

$$\int_{\mathcal{S}} \rho(\mathbf{r},t)\mathbf{v}(\mathbf{r},t)d\mathbf{S} = \int_{\mathcal{S}} \mathbf{j}(\mathbf{r},t)d\mathbf{S} \tag{2.29}$$

Το ολοκλήρωμα αυτό παριστά τη μεταβολή της μάζας του ρευστού, που υπάρχει μέσα στον όγκο $\mathcal{V}$, ανά μονάδα χρόνου. Αλλά η μεταβολή της μάζας του ρευστού που περιέχεται στον όγκο $\mathcal{V}$ παρίσταται με το ολοκλήρωμα:

$$-\frac{d}{dt}\int_{\mathcal{V}} \rho\, d\mathbf{r}$$

Επομένως, έχουμε:

$$\int_{\mathcal{S}} \mathbf{j}d\mathbf{S} = -\frac{d}{dt}\int_{\mathcal{V}} \rho\, d\mathbf{r} \tag{2.30}$$

Αν ο όγκος $\mathcal{V}$ είναι ανεξάρτητος του χρόνου η (2.30) γράφεται:

$$\int_{\mathcal{S}} \mathbf{j}\, d\mathcal{S} = -\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial\rho}{\partial t}\, d\mathbf{r} \tag{2.31}$$

Το πρώτο ολοκλήρωμα της (2.31), με εφαρμογή του θεωρήματος του Gauss γράφεται:

$$\int\int_{\mathcal{S}} \mathbf{j}d\mathcal{S} = \int\int\int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\nabla}\,\mathbf{j}\, d\mathbf{r}$$

Έτσι, η (2.31) παίρνει τη μορφή:

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{j} + \frac{\partial\rho}{\partial t}\right] d\mathbf{r} = 0 \tag{2.32}$$

Επειδή η σχέση αυτή ισχύει για κάθε όγκο $\mathcal{V}$, θα έχουμε, εφόσον οι ολοκληρωτέες ποσότητες είναι συνεχείς:

$$\boxed{\boldsymbol{\nabla}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) + \frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} = 0} \tag{2.33}$$

Η σχέση αυτή λέγεται **εξίσωση συνέχειας** και εκφράζει τον εξής νόμο διατήρησης: Η μεταβολή της συνολικής μάζας του ρευστού που περιέχεται σ' έναν όγκο $\mathcal{V}$ είναι ίση με τη ροή της πυκνότητας ρεύματος του ρευστού, $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$, που διέρχεται δια της επιφάνειας που περικλείει τον όγκο $\mathcal{V}$.

Οι εξισώσεις (2.30) και (2.33) εκφράζουν τον ίδιο νόμο διατήρησης, η πρώτη υπό ολοκληρωτική μορφή και η δεύτερη υπό διαφορική μορφή. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η παραπάνω εξίσωση συνέχειας ισχύει εφόσον δεν υπάρχουν στον όγκο $\mathcal{V}$ σημεία από όπου πηγάζει ή απορροφάται ρευστό.

Στην περίπτωση της Κβαντομηχανικής, εφόσον ο τελεστής του Hamilton είναι ερμιτιανός, δηλαδή εφόσον το δυναμικό είναι πραγματικό, μπορούμε να βρούμε μια εξίσωση συνέχειας. Όπως είναι φανερό στην πυκνότητα ρεύματος θα αντιστοιχεί τώρα η **πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας**, $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, την μορφή της οποίας θα βρούμε παρακάτω.

Αν έχουμε ένα χρονικά σταθερό όγκο $\mathcal{V}$ και $\Psi(\mathbf{r}, t)$ είναι η λύση της εξίσωσης Schrödinger, θα ισχύει:

$$\frac{d}{dt}\int_{\mathcal{V}} \rho d\mathbf{r} = \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\mathbf{r} = \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t} d\mathbf{r} = \int_{\mathcal{V}} \Big(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t}\Big) d\mathbf{r} \tag{2.34}$$

Επίσης εφόσον ο τελεστής του Hamilton είναι ερμιτιανός, οπότε το δυναμικό $V(\mathbf{r}, t)$ είναι πραγματική συνάρτηση, θα ισχύει:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi \qquad \text{και} \qquad -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + V\Psi^* \tag{2.35}$$

Η αντικατάσταση των σχέσεων της (2.35) στην (2.34) δίνει:

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho}{\partial t}\, d\mathbf{r} &= \int_{\mathcal{V}} \Big[\big(\frac{-i\hbar}{2m}\nabla^2\Psi^* + \frac{iV}{\hbar}\Psi^*\big)\Psi + \Psi^*\big(\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\Psi - \frac{iV}{\hbar}\Psi\big)\Big] d\mathbf{r} \\ &= \frac{i\hbar}{2m}\int_{\mathcal{V}} (\Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^*) d\mathbf{r} \end{aligned} \tag{2.36}$$

Επειδή όμως:

$$\boldsymbol{\nabla}\big(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\big) = \Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^*$$

η (2.36) γράφεται:

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho}{\partial t}\, d\mathbf{r} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\nabla}\big(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\big) d\mathbf{r} \tag{2.37}$$

Αν ορίσουμε ως **ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας** την ποσότητα:

$$\boxed{\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m}\big(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\big)} \tag{2.38}$$

καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho}{\partial t}\, d\mathbf{r} + \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\nabla}\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 0 \tag{2.39}$$

και επειδή αυτή ισχύει για κάθε όγκο $\mathcal{V}$ καταλήγουμε στην εξίσωση συνέχειας υπό διαφορική μορφή:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{2.40}$$

Η σχέση αυτή που είναι συνέπεια της εξίσωσης του Schrödinger, εκφράζει τον εξής νόμο διατήρησης: *Αν η πιθανότητα εύρεσης ενός σωματιδίου σ' έναν όγκο V μικραίνει με την πάροδο του χρόνου, τότε η πιθανότητα εύρεσης αυτού εκτός του όγκου $\mathcal{V}$ μεγαλώνει κατά το ποσό αυτό.* Η φυσική σημασία της εξίσωσης συνέχειας είναι ανάλογη με αυτήν της Υδροδυναμικής. Δηλαδή το ολοκλήρωμα της $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ σε μια επιφάνεια είναι η πιθανότητα να περάσει το σωματίδιο μέσα από την επιφάνεια στη μονάδα του χρόνου.

Ας δούμε τώρα την αναλογία της σχέσης (2.28) της Υδροδυναμικής με τη σχέση (2.38) της Κβαντομηχανικής. Λόγω της αντιστοιχίας:

$$\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla} \quad \rightarrow \quad \mathbf{p}$$

θα έχουμε:

$$-i\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{\nabla} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m} = \widehat{\mathbf{v}} \quad \rightarrow \quad \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v}$$

οπότε η $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ γράφεται:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{-i\hbar}{2m}\big(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\big) = \frac{1}{2}\big[\Psi^*\big(-\frac{i\hbar}{m}\boldsymbol{\nabla}\Psi\big) + \Psi\big(-\frac{i\hbar}{m}\boldsymbol{\nabla}\Psi\big)^*\big]$$

Δηλαδή

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \mathbf{Re}\big[\Psi^*\big(-\frac{i\hbar}{m}\boldsymbol{\nabla}\Psi\big)\big] = \mathbf{Re}\big[\Psi^*\,\frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m}\,\Psi\big] = \mathbf{Re}\big[\Psi^*\widehat{\mathbf{v}}\Psi\big] \tag{2.41}$$

Επομένως το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας είναι πάλι της μορφής:

(πυκνότητα) $\times$ (ταχύτητα)

Από τη σχέση (2.41) συμπεραίνουμε ότι το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας δεν υπόκειται σε άμεση μέτρηση, όπως συμβαίνει με την πυκνότητα πιθανότητας, επειδή αυτό προϋποθέτει ταυτόχρονη μέτρηση της θέσης και της ορμής, που έρχεται σε αντίθεση με τις σχέσεις της αβεβαιότητας.

2.3 Παράσταση της εξίσωσης του Schrödinger στο χώρο των ορμών

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$ που είναι λύση της εξίσωσης του Schrödinger λέγεται και κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων. Αυτή όπως έχουμε αναφέρει είναι εν γένει ένα υλοκυματόδεμα της μορφής:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int a(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\,\mathbf{r}-Et)\mathbf{r}}d\mathbf{p} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \phi(\mathbf{p},t)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\,\mathbf{r}}d\mathbf{p} \tag{2.42α΄}$$

Η $\phi(\mathbf{p},t) = a(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, που είναι ο μετασχηματισμός Fourier της $\Psi(\mathbf{r},t)$:

$$\phi(\mathbf{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\,\mathbf{r}}d\mathbf{r} \tag{2.42β΄}$$

λέγεται **κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών**.

Είναι ενδιαφέρον να δούμε ποια είναι η εξαρτημένη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger στο χώρο των ορμών, δηλαδή η Δ.Ε που έχει ως λύση την κυματοσυνάρτηση $\phi(\mathbf{p},t)$. Αυτή βρίσκεται παραγωγίζοντας την (2.42β΄) μερικώς ως προς το χρόνο και αντικαθιστώντας τη $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ που προκύπτει από τη σχέση (2.19). Η εξίσωση που καταλήγουμε είναι:

$$i\hbar\,\frac{\partial\phi(\mathbf{p},t)}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\,\mathbf{r}}\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\Big]\Psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} \tag{2.43}$$

Ο πρώτος όρος στο ολοκλήρωμα αυτής της σχέσης μπορεί να απλοποιηθεί, με παραγοντική ολοκλήρωση, υποθέτοντας ότι ισχύουν κατάλληλες οριακές συνθήκες ώστε να μηδενίζονται οι συνοριακοί όροι που προκύπτουν. Αν γίνει η παραγοντική ολοκλήρωση του πρώτου όρου και αντικαταστήσουμε την $\Psi(\mathbf{r},t)$ από τη σχέση (2.42α΄) παίρνουμε την εξίσωση:

$$i\hbar\,\frac{\partial\phi(\mathbf{p},t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m}\,\phi(\mathbf{p},t) + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\,\mathbf{r}}\,V(\mathbf{r},t)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\,\mathbf{r}}\,\phi(\mathbf{p}',t)d\mathbf{r}d\mathbf{p}' \tag{2.44}$$

Η εξίσωση αυτή, που είναι μια ολοκληροδιαφορική εξίσωση με άγνωστη συνάρτηση τη $\phi(\mathbf{p},t)$ μπορεί να γίνει διαφορική εξίσωση αν το δυναμικό είναι αναλυτική συνάρτηση του $\mathbf{r}$. Πράγματι για το ανάδελτα: $\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p} = \mathbf{x_0}\frac{\partial}{\partial p_x} + \mathbf{y_0}\frac{\partial}{\partial p_y} + \mathbf{z_0}\frac{\partial}{\partial p_z}$ έχουμε:

$$i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{p}\,\mathbf{r}} = \mathbf{r}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{p}\,\mathbf{r}}$$

και σύμφωνα με γνωστή πρόταση της θεωρίας των τελεστών θα ισχύει και η σχέση:

$$\widehat{V}(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p},t)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{p}\,\mathbf{r}} = V(\mathbf{r},t)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{p}\,\mathbf{r}} \tag{2.45}$$

Αν αντικαταστήσουμε το δεύτερο μέλος της σχέσης αυτής με το πρώτο στη σχέση (2.44), προκύπτει:

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{\partial\phi(\mathbf{p},t)}{\partial t} &= \frac{p^2}{2m}\,\phi(\mathbf{p},t) + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\,\widehat{V}(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p},t)\int \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{p}\,\mathbf{r}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{p}'\,\mathbf{r}}\phi(\mathbf{p}',t)d\mathbf{r}d\mathbf{p}' \\ &= \frac{p^2}{2m}\,\phi(\mathbf{p},t) + \widehat{V}(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p},t)\int\phi(\mathbf{p}',t)d\mathbf{p}'\,\underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{r}}\,d\mathbf{r}}_{\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p})} \end{aligned} \tag{2.46}$$

Με τη βοήθεια της ολοκληρωτικής παράστασης της συνάρτησης δ στις τρεις διαστάσεις η σχέση (2.46) γράφεται:

$$\boxed{i\hbar\,\frac{\partial\phi(\mathbf{p},t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m}\,\phi(\mathbf{p},t) + \widehat{V}(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p},t)\,\phi(\mathbf{p},t)} \tag{2.47}$$

Η εξίσωση αυτή είναι η εξαρτημένη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger για την κυματοσυνάρτηση $\phi(\mathbf{p},t)$, δηλαδή στο χώρο των ορμών. Μερικές φορές λύνεται ευκολότερα η (2.47) παρά η εξίσωση του Schrödinger στο χώρο των θέσεων. Η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$ βρίσκεται στη συνέχεια από τη σχέση (2.42α΄).

Από τα παραπάνω γίνεται φανερό ότι όταν εργαζόμαστε στο χώρο των ορμών, η αντιστοιχία δυναμικών μεταβλητών με τους τελεστές επιτυγχάνεται με τη βοήθεια του κανόνα:

$$\boxed{\mathbf{p}\;\rightarrow\;\widehat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}, \quad \mathbf{r}\;\rightarrow\;\widehat{\mathbf{r}} = i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p}} \tag{2.48}$$

Τέλος, η φυσική σημασία που δίνεται στην $\phi(\mathbf{p},t)$ είναι αντίστοιχη με αυτήν της $\Psi(\mathbf{r},t)$. Το μέγεθος $|\phi(\mathbf{p},t)|^2 d\mathbf{p}$ εκφράζει την πιθανότητα εύρεσης της ορμής ενός σωματιδίου στο στοιχειώδη όγκο $d\mathbf{p} = dp_x dp_y dp_z$ στην περιοχή του $\mathbf{p}$, τη χρονική στιγμή t. Δηλαδή το $|\phi(\mathbf{p},t)|^2$ είναι η πυκνότητα πιθανότητας στο χώρο των ορμών, εφόσον η $\phi(\mathbf{p},t)$ είναι κανονικοποιημένη.

Για να ισχύουν τα παραπάνω, πρέπει το ολοκλήρωμα $\int|\phi(\mathbf{p},t)|^2 d\mathbf{p}$ να συγκλίνει και να είναι ανεξάρτητο το χρόνου. Αυτό πράγματι συμβαίνει και η $\phi(\mathbf{p},t)$ είναι κανονικοποιημένη, εφόσον η $\Psi(\mathbf{r},t)$ είναι (λόγω της ισότητας του Parseval) και οι αντίστοιχες ιδιότητες έχουν αποδειχθεί σε προηγούμενο εδάφιο.

Είναι φανερό ότι η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων και η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των ορμών αποτελούν δύο ισοδύναμες περιγραφές της ίδιας κατάστασης ενός φυσικού συστήματος και αναφερόμαστε σε αυτές ως **αναπαραστάσεις της κατάστασης του συστήματος**.

2.4 Αναμενόμενη τιμή δυναμικής μεταβλητής

Η ερμηνεία της $\rho(\mathbf{r},t)$, ως πυκνότητας πιθανότητας της θέσης, δίνει τη δυνατότητα υπολογισμού της μέσης τιμής της θέσης ενός σωματιδίου ή ενός φυσικού μεγέθους που είναι συνάρτηση των συντεταγμένων του σωματιδίου: $F(\mathbf{r}) = F(x,y,z)$. Σύμφωνα με αυτά που αναφέρονται στο Παράρτημα Γ', για μια συνεχή κατανομή πιθανοτήτων, έχουμε:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r}\ \rho(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} = \int \mathbf{r}|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} \tag{2.49α'}$$

$$\langle F(\mathbf{r}) \rangle = \int F(\mathbf{r})\ \rho(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} = \int F(\mathbf{r})|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} \tag{2.49β'}$$

Με όμοιο τρόπο ορίζουμε τη μέση τιμή της ορμής, ή φυσικού μεγέθους που είναι συνάρτηση της ορμής του σωματιδίου: $G(\mathbf{p}) = G(p_x, p_y, p_z)$:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \mathbf{p}|\phi(\mathbf{p},t)|^2 d\mathbf{p} \qquad \text{και} \qquad \langle G(\mathbf{p}) \rangle = \int G(\mathbf{p})|\phi(\mathbf{p},t)|^2 d\mathbf{p} \tag{2.50}$$

Η μέση τιμή της ορμής γράφεται και με τη μορφή:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r},t)(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\Psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} \tag{2.51}$$

Η σχέση αυτή αποδεικνύεται αν ξεκινήσουμε από το δεύτερο μέλος της και αντικαταστήσουμε την $\Psi(\mathbf{r},t)$ από τη σχέση (2.42α'). Έτσι έχουμε:

$$\begin{aligned}
\int \Psi^*(\mathbf{r},t)(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\Psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \phi^*(\mathbf{p},t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}}(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\phi(\mathbf{p}',t)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}}d\mathbf{p}\,d\mathbf{p}'\,d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \phi^*(\mathbf{p},t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}}\phi(\mathbf{p}',t)\mathbf{p}'\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}}d\mathbf{p}d\mathbf{p}'d\mathbf{r} \\
&= \int \phi^*(\mathbf{p},t)\phi^*(\mathbf{p}',t)\mathbf{p}'\,d\mathbf{p}\,d\mathbf{p}'\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{r}}d\mathbf{r} \\
&= \int \phi^*(\mathbf{p},t)d\mathbf{p}\int \phi^*(\mathbf{p}',t)\mathbf{p}'\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p})d\mathbf{p}' \\
&= \int \phi^*(\mathbf{p},t)\phi(\mathbf{p},t)\mathbf{p}d\mathbf{p} = \int \mathbf{p}|\phi(\mathbf{p},t)|^2 d\mathbf{p} = \langle \mathbf{p} \rangle
\end{aligned} \tag{2.52}$$

Με όμοιο τρόπο μπορεί να δειχθεί ότι αν η $G(\mathbf{p})$ είναι αναλυτική συνάρτηση της ορμής, ισχύει:

$$\langle G(\mathbf{p}) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r},t)G(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\Psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} \tag{2.53}$$

Αντίστοιχες εκφράσεις ισχύουν για τα $\langle \mathbf{r} \rangle$ και $\langle F(\mathbf{r}) \rangle$ αν εργαστούμε στο χώρο των ορμών:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \phi^*(\mathbf{p},t)(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p})\phi(\mathbf{p},t)d\mathbf{p}, \qquad \langle F(\mathbf{r}) \rangle = \int \phi^*(\mathbf{p},t)F(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p})\phi(\mathbf{p},t)d\mathbf{p} \tag{2.54}$$

Από τα παραπάνω οδηγούμαστε να ορίσουμε τη μέση τιμή ενός φυσικού μεγέθους, που είναι συνάρτηση της θέσης και της ορμής. Η έκφραση εξαρτάται από την παράσταση στην οποία εργαζόμαστε:

$$\boxed{\langle F(\mathbf{r},\mathbf{p}) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r},t)F(\mathbf{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\Psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}} \tag{2.55}$$

$$\boxed{\langle F(\mathbf{r},\mathbf{p}) \rangle = \int \phi^*(\mathbf{p},t)F(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{p},\mathbf{p})\phi(\mathbf{p},t)d\mathbf{p}} \tag{2.56}$$

2.5 Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger

Σε μια μεγάλη κατηγορία προβλημάτων, η δυναμική ενέργεια $V(\mathbf{r},t)$ δεν εξαρτάται από το χρόνο, δηλαδή $V(\mathbf{r},t)=V(\mathbf{r})$. Στην περίπτωση αυτή η εξίσωση (2.20) έχει ένα σύνολο λύσεων που μπορούν να αναλυθούν και να δώσουν πληροφορίες για το σύστημα που εξετάζεται. Οι λύσεις αυτές έχουν τα ίδια χαρακτηριστικά με τα στάσιμα κύματα ενός μουσικού οργάνου. Δηλαδή, δεν αντιστοιχούν σε οδεύοντα κύματα αλλά σε δονήσεις κατά τις οποίες το πλάτος ενός δοσμένου χωρικά σχήματος αυξομειώνεται με το χρόνο.

Όταν $V(\mathbf{r},t)=V(\mathbf{r})$, οπότε ο τελεστής του Hamilton δεν εξαρτάται από το χρόνο, οι λύσεις της (2.20) μπορούν να βρεθούν χρησιμοποιώντας τη **μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών** κατά την οποία ζητάμε λύσεις της μορφής:

$$\Psi(\mathbf{r},t)=T(t)u(\mathbf{r}) \tag{2.57}$$

Η αντικατάσταση της (2.57) στην εξίσωση (2.20) δίνει:

$$i\hbar u(\mathbf{r})\,\frac{dT(t)}{dt}=T(t)\widehat{H}u(\mathbf{r}) \tag{2.58}$$

Διαιρούμε και τα δύο μέλη της (2.58) με το γινόμενο $T(t)u(\mathbf{r})$ και οδηγούμαστε στην εξίσωση:

$$i\hbar\,\frac{\frac{dT(t)}{dt}}{T(t)}=\frac{\widehat{H}u(\mathbf{r})}{u(\mathbf{r})}$$

Παρατηρούμε ότι στην εξίσωση αυτή το αριστερό μέλος εξαρτάται μόνο από το χρόνο και το δεξιό μόνο από τη θέση. Επειδή τα t και $\mathbf{r}$ είναι ανεξάρτητες μεταβλητές πρέπει και τα δύο μέλη να είναι ίσα με μια σταθερά, τη σταθερά διαχωρισμού:

$$i\hbar\,\frac{\frac{dT(t)}{dt}}{T(t)}=\frac{\widehat{H}u(\mathbf{r})}{u(\mathbf{r})}=E \tag{2.59}$$

Από την (2.59) προκύπτει:

$$\frac{dT(t)}{T(t)}=-\frac{i}{\hbar}E\,dt \quad\Rightarrow\quad \boxed{\boxed{T_E(t)=c\,\mathrm{e}^{-i\,\frac{E}{\hbar}\,t}}} \tag{2.60}$$

όπου c είναι αυθαίρετη σταθερά.

Από την (2.59) προκύπτει επίσης:

$$\boxed{\boxed{\widehat{H}u_E(\mathbf{r})=Eu_E(\mathbf{r})}} \tag{2.61}$$

Η αντικατάσταση της $T_E(t)$ από τη (2.60) και της $u_E(\mathbf{r})$ στην (2.57) μας οδηγεί σε λύσεις της μορφής:

$$\boxed{\boxed{\Psi_E(\mathbf{r},t)=\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}u_E(\mathbf{r})}} \tag{2.62}$$

Η παράμετρος E είναι η σταθερά διαχωρισμού και έχει διαστάσεις ενέργειας, όπως προκύπτει από τη μορφή της (2.60). Αυτή είναι ιδιοτιμή του τελεστή του Hamilton και αντιπροσωπεύει την ολική ενέργεια του συστήματος. Οι λύσεις της εξίσωσης (2.61) που προκύπτουν από συγκεκριμένες τιμές την ενέργειας λέγονται **κυματοσυναρτήσεις καθορισμένης τιμής ενέργειας**. Η εξίσωση (2.61) λέγεται **ανεξάρτητη από το χρόνο** ή στάσιμη **εξίσωση του**

Schrödinger και είναι γραμμική και ομογενής εξίσωση δεύτερης τάξης με μερικές παραγώγους. Αυτή γράφεται και ως εξής, χρησιμοποιώντας την έκφραση του τελεστή του Hamilton (στο χώρο των θέσεων):

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_E(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u_E(\mathbf{r}) = Eu_E(\mathbf{r})} \tag{2.63}$$

Λόγω της μορφής της εξίσωσης (2.20) και της μορφής της λύσης (2.62), οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι τα στάσιμα κύματα ταλαντώνονται αρμονικά με το χρόνο με συχνότητα που σχετίζεται με την ολική ενέργεια του συστήματος:

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\frac{E}{\hbar}$$

Σημείωση. Η αντίστοιχη εξίσωση της (2.63) στο χώρο των ορμών, βρίσκεται με χωρισμό των μεταβλητών της (2.47), θέτοντας $\phi(\mathbf{p},t) = X(\mathbf{p})T(t)$. Η εξίσωση στην οποία καταλήγουμε είναι:

$$\frac{p^2}{2m}X_E(\mathbf{p}) + V(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{p}})X_E(\mathbf{p}) = EX_E(\mathbf{p}) \tag{2.64}$$

Η εξίσωση αυτή χρησιμοποιείται σπανιότερα.

Η ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger είναι μια εξίσωση ιδιοτιμών. Η εξίσωση αυτή μαζί με τις συνθήκες που επιβάλουμε στις λύσεις της, ώστε ο $\widehat{H}$ να είναι ερμιτιανός τελεστής, έχει λύσεις για ορισμένες τιμές της παραμέτρου E, που δεχόμαστε ότι είναι οι δυνατές τιμές της ενέργειας που μπορεί να έχει το σωματίδιο που βρίσκεται υπό την επίδραση του δυναμικού $V(\mathbf{r})$. Δηλαδή, δεχόμαστε ότι:

α) *Οι λύσεις της ανεξάρτητης από το χρόνο εξίσωσης του Schrödinger αντιπροσωπεύουν φυσικές καταστάσεις με απόλυτα καθορισμένη ενέργεια, ίση με την ιδιοτιμή E του $\widehat{H}$.*

β) *Οι μόνες δυνατές τιμές που μπορούν να προκύψουν από μετρήσεις της ενέργειας είναι οι ιδιοτιμές E του τελεστή του Hamilton.*

Αν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi_E(\mathbf{r},t) = u_E(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$, όπου $u_E : \widehat{H}u_{E_n}(\mathbf{r}) = Eu_E(\mathbf{r})$, για τη μέση τιμή της ενέργειας θα έχουμε:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle_{\Psi_E} &= \langle\widehat{H}\rangle_{\Psi_E} = \big(u_E(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}, \widehat{H}u_E(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\big) = (\mathrm{e}^{-iEt/\hbar})^*\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\big(u_E(\mathbf{r}), \widehat{H}u_E(\mathbf{r})\big)\\ &= \big(u_E(\mathbf{r}), Eu_E(\mathbf{r})\big) = E\big(u_E(\mathbf{r}), u_E(\mathbf{r})\big) = E\end{aligned}$$

Επομένως, μπορούμε να πούμε ότι *αν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi_E(\mathbf{r},t) = u_E(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$, τότε η μέτρηση της ενέργειας του συστήματος θα δώσει με βεβαιότητα ως αποτέλεσμα την ιδιοτιμή E του $\widehat{H}$.* Στην περρίπτωση αυτή η αβεβαιότητα $\Delta E = \Delta\widehat{H}$ είναι μηδέν σύμφωνα με τη σχέση (Γ΄.25γ΄).

Λόγω της γραμμικότητας και ομογένειας της εξαρτημένης από το χρόνο εξίσωσης του Schrödinger, η γενική λύση της, $\Psi(\mathbf{r},t)$, μπορεί να προκύψει με επαλληλία των κυματοσυναρτήσεων $\Psi_E(\mathbf{r},t)$.

Για διακεκριμένο φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας η $\Psi(\mathbf{r},t)$ είναι:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n\Psi_n(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}u_n(\mathbf{r}) \tag{2.65α΄}$$

Αν γνωρίζουμε την $\Psi(\mathbf{r},t)$ τη χρονική στιγμή $t = 0$, τότε ο υπολογισμός των συντελεστών c_n από τη σχέση $c_n = \big(u_n(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r},0)\big)$ και η αντικατάστασή τους στην (2.65α΄) δίνει τη χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης.

Για συνεχές φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας η $\Psi(\mathbf{r},t)$ είναι:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \int_{E_A}^{E_B} c(E)\Psi_E(\mathbf{r},t)dE = \int_{E_A}^{E_B} c(E)\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}u_E(\mathbf{r})dE \tag{2.65΄}$$

Αν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$, τότε η μέση τιμή της ενέργειας, ως προς αυτήν την κυματοσυνάρτηση, θα είναι (βλέπε και εδάφιο Γ΄.2.1):

$$\begin{aligned}\langle E\rangle_\Psi &= \big(\Psi,\widehat{H}\Psi\big) = \Big(\sum_n c_n \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}u_n,\ \widehat{H}\sum_m c_m\mathrm{e}^{-iE_mt/\hbar}u_m\Big)\\ &= \sum_n\sum_m (c_n)^*(\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar})^* c_m \mathrm{e}^{-iE_mt/\hbar}E_m\underbrace{\big(u_n,u_m\big)}_{\delta_{nm}}\end{aligned}$$

Επομένως

$$\boxed{\langle E\rangle_\Psi = \sum_n |c_n|^2 E_n} \tag{2.66}$$

Η σύγκριση αυτής της σχέσης με τον ορισμό της μέσης τιμής μιας διακριτής τυχαίας μεταβλητής (βλέπε σχέση (Β΄.5)) μας οδηγεί να δεχτούμε ότι: *όταν η κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται από την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$, η πιθανότητα κατά μία μέτρηση της ενέργειας του συστήματος να πάρουμε ως αποτέλεσμα την ιδιοτιμή E_n είναι:*

$$\boxed{\Pi(E_n) = |c_n|^2 = |\big(u_n,\Psi\big)|^2} \tag{2.67}$$

Το άθροισμα των πιθανοτήτων $|c_n|^2$ πρέπει να είναι ίσο με 1. Αυτό πράγματι συμβαίνει εφόσον η Ψ είναι κανπονικοποιημένη, όπως μπορεί εύκολα να δειχθεί.

2.5.1 Ιδιότητες των στασίμων καταστάσεων

Η επίλυση ενός κβαντομηχανικού προβλήματος, όταν η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται από το χρόνο, ανάγεται στην επίλυση της εξίσωσης (2.63) με οριακές και λοιπές συνθήκες που προκύπτουν από τις γενικές συνθήκες, που πρέπει να ικανοποιεί η κυματοσυνάρτηση και που θα αναφερθούν στο επόμενο εδάφιο. Ο προσδιορισμός της $u_E(\mathbf{r})$ σε συνδυασμό με τη σχέση (2.62) μας δίνει τις κυματοσυναρτήσεις (καταστάσεις) καθορισμένης τιμής ενέργειας $\Psi_E(\mathbf{r},t)$. Για τις καταστάσεις καθορισμένης τιμής ενέργειας παρατηρούμε ότι:

$$\rho(\mathbf{r},t) = |\Psi_E(\mathbf{r},t)|^2 = |\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}|^2|u_E(\mathbf{r})|^2 = |u_E(\mathbf{r})|^2 = \rho(\mathbf{r})$$

Δηλαδή, όταν η κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση καθορισμένης τιμής της ενέργεια, η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα σε μια περιοχή του χώρου είναι ανεξάρτητη του χρόνου. Ο καταστάσεις αυτές λέγονται **στάσιμες**.

Οι καταστάσεις καθορισμένης τιμής ενέργειας, $\Psi_E(\mathbf{r},t)$, έχουν ορισμένες χαρακτηριστικές ιδιότητες που αναφέρουμε παρακάτω.

1. Σύμφωνα με τη σχέση (2.62), η εξάρτηση από το χρόνο των $\Psi_E(\mathbf{r},t)$ καθορίζεται μονοσήμαντα από την τιμή της ενέργειας.

2. Είναι ορθογώνιες μεταξύ τους, εφόσον υπάρχουν κατάλληλες συνθήκες ώστε ο τελεστής του Hamilton να είναι ερμιτιανός. Δηλαδή:

$$\big(\Psi_{E_\alpha},\Psi_{E_\beta}\big) = \int \mathrm{e}^{iE_\alpha t/\hbar}u^*_{E_\alpha}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-iE_\beta t/\hbar}u_{E_\beta}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \mathrm{e}^{i(E_\alpha-E_\beta)t/\hbar}\big(u_{E_\alpha},u_{E_\beta}\big) = 0$$

εφόσον $E_\alpha \neq E_\beta$.

3. Αν a_n και y_n είναι οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{A}$, $\widehat{A}y_n = a_n y_n$, που αντιστοιχεί στο φυσικό μέγεθος A, τότε η μέση τιμή των αποτελεσμάτων των μετρήσεων του μεγέθους A όταν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση Ψ είναι:

$$\langle\widehat{A}\rangle_\Psi = (\Psi, \hat{A}\Psi) = \int \Psi^* \widehat{A}\Psi \mathrm{d}\mathbf{r} \tag{2.68α΄}$$

Στην κατάσταση $\Psi = \sum_n c_n y_n$, η πιθανότητα να εμφανιστεί (μετρηθεί) η ιδιοτιμή a_n που αντιστοιχεί στην ιδιοσυνάρτηση y_n του $\widehat{A}$ είναι:

$$\boxed{\Pi(a_n) = |c_n|^2 = |(y_n, \Psi)|^2} \tag{2.68β΄}$$

3α. Η αναμενόμενη τιμή ενός φυσικού μεγέθους, ο τελεστής του οποίου δεν εξαρτάται κατά άμεσο τρόπο από το χρόνο, ως προς μια κυματοσυνάρτηση καθορισμένης τιμής ενέργειας είναι σταθερά:

$$\langle\widehat{A}\rangle_{\Psi_E} = \int \Psi_E^*(\mathbf{r},t)\widehat{A}\Psi_E(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} = \int u_E^*(\mathbf{r})\widehat{A}u_E(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \langle\widehat{A}\rangle_{u_E} = \text{σταθ.}$$

3β. Η πιθανότητα $\Pi(a_n)$ εύρεσης μιας ορισμένης τιμής a_n, του παραπάνω φυσικού, είναι ανεξάρτητη του χρόνου. Πράγματι, σύμφωνα με τη σχέση (2.68β΄) έχουμε:

$$\Pi(a_n) = |(y_n, \Psi_E)|^2 = |\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}|^2 \big|\big(y_n(\mathbf{r}), u_E(\mathbf{r})\big)\big|^2 = \big|\big(y_n(\mathbf{r}), u_E(\mathbf{r})\big)\big|^2 = \text{σταθ.}$$

Στα παραπάνω υποθέσαμε ότι ο τελεστής $\widehat{A}$ έχει διακεκριμένο φάσμα ιδιοτιμών. Ανάλογα ισχύουν και για συνεχές φάσμα ιδιοτιμών.

3γ. Αν η κυματοσυνάρτηση Ψ δεν είναι καθορισμένης τιμής ενέργειας, τότε η μέση τιμή ενός τελεστή $\widehat{G}$ ως προς την Ψ εξαρτάται από το χρόνο. Αν επιπλέον ο τελεστής $\widehat{G}$ δεν εξαρτάται από το χρόνο, ο ρυθμός μεταβολής της μέσης τιμής του τελεστή είναι:

$$\boxed{\frac{d\langle\widehat{G}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\big\langle\big[\widehat{G}, \widehat{H}\big]\big\rangle} \tag{2.69}$$

Η σχέση αυτή μας λέει ότι, αν ένας τελεστή που δεν εξαρτάται από το χρόνο, αντιμετατίθεται με τον τελεστή του Hamilton, η μέση τιμή του είναι ένα διατηρούμενο μέγεθος, δηλαδή μια σταθερά της κίνησης. Για παράδειγμα οι μέσες τιμές του τελεστή της στροφορμής, $\widehat{\mathbf{l}}$, και η προβολής της επάνω σ' έναν άξονα, σε κεντρικά πεδία δυνάμεων είναι σταθερές της κίνησης, αφού $\big[\widehat{\mathbf{l}}, \widehat{H}\big] = \big[\widehat{l}_i, \widehat{H}\big] = 0$, $i = x, y, z$, σύμφωνα με τη σχέση (Γ΄.58).

Για την απόδειξη της (2.69) ξεκινάμε από τον ορισμό της μέσης τιμής, αντικαθιστούμε τον παράγοντα $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ που προκύπτει από την εξίσωση του Schrödinger, $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\widehat{H}\Psi$ και λαμβάνουμε υπόψη ότι ο τελεστής του Hamilton είναι ερμιτιανός. Έτσι έχουμε: :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\widehat{G}\rangle &= \frac{d}{dt}\big(\Psi, \,\widehat{G}\Psi\big) = \big(\frac{\partial\Psi}{dt}, \,\widehat{G}\Psi\big) + \big(\Psi, \,\widehat{G}\frac{\partial\Psi}{dt}\big) \\
&= \big(\frac{1}{i\hbar}\widehat{H}\Psi, \,\widehat{G}\Psi\big) + \big(\Psi, \,\widehat{G}\frac{1}{i\hbar}\widehat{H}\Psi\big) = -\frac{1}{i\hbar}\big(\Psi, \,\widehat{H}\widehat{G}\Psi\big) + \frac{1}{i\hbar}\big(\Psi, \,\widehat{G}\widehat{H}\Psi\big) \\
&= \frac{1}{i\hbar}\big(\Psi, \,(\widehat{G}\widehat{H} - \widehat{H}\widehat{G})\Psi\big) = \frac{1}{i\hbar}\big(\Psi, \,\big[\widehat{G}, \,\widehat{H}\big]\Psi\big) = \frac{1}{i\hbar}\big\langle\big[\widehat{G}, \,\widehat{H}\big]\big\rangle
\end{aligned}$$

2.6 Συνθήκες για την κυματοσυνάρτηση

Η λύση μιας Δ.Ε. εξαρτάται από τη μορφή της Δ.Ε., αλλά και από τις συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί η λύση της. Έτσι, για τη λύση της εξίσωσης του Schrödinger ενός κβαντομηχανικού προβλήματος πρέπει να γνωρίζουμε τις συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$. Οι συνθήκες αυτές πρέπει να εξασφαλίζουν ότι τα μεγέθη $\rho(\mathbf{r},t) = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ και $\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{i\hbar}{2m}\big(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\big)$ να έχουν συμπεριφορά που υπαγορεύεται από τη φυσική ερμηνεία τους ως πυκνότητας πιθανότητας και ως ρεύματος πυκνότητας πιθανότητας. Αυτό συνδέεται με τη συνθήκη ο τελεστής του Hamilton να είναι ερμιτιανός. Έτσι:

1. Η Ψ πρέπει να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη:

$$\int |\Psi|^2 d\mathbf{r} = \text{πεπερασμένο}. \tag{2.70}$$

Η συνθήκη αυτή εφαρμόζεται στα προβλήματα δεσμίων καταστάσεων, δηλαδή, όταν η κίνηση του σωματιδίου, λόγω των δυνάμεων που εξασκούνται σ' αυτό, περιορίζεται σ' ένα ορισμένο τμήμα του χώρου. Επίσης, αν το σωματίδιο είναι ελεύθερο, όταν κατά την κίνησή η θέση του είναι αρχικά καλά καθορισμένη, οπότε η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου είναι ένα κυματόδεμα. Συνέπεια της (2.70) είναι ο καθορισμός της **οριακής συνθήκης στις μεγάλες αποστάσεις**. Για να ικανοποιείται η (2.70), πρέπει το μέτρο της κυματοσυνάρτησης, να τείνει στο μηδέν για μεγάλες αποστάσεις γρηγορότερα του $r^{-3/2}$. Από τη συνθήκη (2.70) έπεται, ότι η $|\Psi|$ μπορεί να απειρίζεται για $r = 0$ όχι όμως γρηγορότερα από $r^{-3/2}$.

Σημείωση. Σε ορισμένα προβλήματα, όπως στη σκέδαση, χρησιμοποιούμε μερικές φορές και μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες κυματοσυναρτήσεις.

2. Η Ψ και οι πρώτες μερικές παράγωγοι της πρέπει να είναι συνεχείς και μονότιμες.

Η συνθήκη αυτή ισχύει μόνο όταν το δυναμικό είναι πεπερασμένο (συνεχές ή ασυνεχές). Αν υπάρχει βαθμίδα δυναμικού άπειρου ύψους σε μια επιφάνεια. η κυματοσυνάρτηση είναι μηδέν σε αυτή, η συνιστώσα όμως του $\boldsymbol{\nabla}\Psi$ κατά μήκος της κάθετης προς την επιφάνεια είναι ακαθόριστη.

Οι παραπάνω γενικές συνθήκες για την κυματοσυνάρτηση συνεπάγονται αντίστοιχες συνθήκες, προκειμένου για δυναμικό $V = V(\mathbf{r})$, για την κυματοσυνάρτηση $u_E(\mathbf{r})$ και την $\boldsymbol{\nabla}u_E(\mathbf{r})$ της ανεξάρτητης από το χρόνο εξίσωσης του Schrödinger. Από τις συνθήκες αυτές προκύπτουν, ανάλογα με το πρόβλημα, οι οριακές συνθήκες των $u_E(\mathbf{r})$ καθώς και επιπρόσθετες συνθήκες κανονικότητας (συνέχειας και μονοτίμου) των $u_E(\mathbf{r})$ και της $\boldsymbol{\nabla}u_E(\mathbf{r})$. Έτσι, έχουμε να επιλύσουμε πρόβλημα οριακών τιμών, στο οποίο η παράμετρος που υπάρχει σχετίζεται με την ενέργεια. Από την επίλυση του προβλήματος ιδιοτιμών προκύπτει το ενεργειακό φάσμα το οποίο μπορεί να είναι διακεκριμένο, συνεχές ή μικτό.

2.7 Οι βασικές αρχές της Κβαντομηχανικής

Η έως τώρα συζήτηση, πιστεύω ότι ήταν αρκετή ώστε να μπορέσουμε να συνοψίσουμε τις βασικές αρχές της Κβαντομηχανικής με μια λιτή αλλά περιεκτική διατύπωση υπό μορφή μερικών αξιωμάτων.

Αξίωμα 1. Σε κάθε κατάσταση ενός φυσικού συστήματος αντιστοιχεί μια κυματοσυνάρτηση, δηλαδή ένα διάνυσμα του χώρου Hilbert. Η κυματοσυνάρτηση περιέχει όλες τις πειραματικά ελέγξιμες πληροφορίες για την κατάσταση του φυσικού συστήματος.

Αξίωμα 2. Σε κάθε φυσικό μέγεθος A αντιστοιχεί ένας ερμιτιανός τελεστής $\hat{A}$, οι ιδιοσυναρτήσεις του οποίου αποτελούν ένα πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων:

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n, \quad a_n \in \mathbb{R}$$

Οι μόνες δυνατές τιμές που προκύπτουν κατά τη μέτρηση του μεγέθους A είναι οι ιδιοτιμές του τελεστή $\hat{A}$.
Σημείωση. Αν το φυσικό μέγεθος εξαρτάται από τις δυναμικές μεταβλητές της θέσης και της ορμής, η κατασκευή του τελεστή $\hat{A}$ μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας την αναπαράσταση στο χώρο των θέσεων, δηλαδή με τις αντικαταστάσεις:

$$\mathbf{r} \;\rightarrow\; \widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}, \qquad \mathbf{p} \;\rightarrow\; \widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}, \qquad E \;\rightarrow\; \widehat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad t \;\rightarrow\; \widehat{t} = t$$

Μπορεί όμως να γίνει και με τη χρησιμοποίηση της αναπαράστασης στο χώρο των ορμών:

$$\mathbf{p} \;\rightarrow\; \widehat{\mathbf{p}} = \mathbf{p} \qquad \mathbf{r} \;\rightarrow\; \hat{\mathbf{p}} = i\hbar\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}}, \qquad E \;\rightarrow\; \widehat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad t \;\rightarrow\; \widehat{t} = t$$

Αξίωμα 3. Η μέση τιμή των αποτελεσμάτων των μετρήσεων του μεγέθους A όταν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση Ψ είναι:

$$\langle A\rangle = \langle \hat{A}\rangle = (\Psi, \hat{A}\Psi) = \int \Psi^*\hat{A}\Psi \mathrm{d}\mathbf{r}$$

Στην κατάσταση $\Psi = \sum_n c_n\psi_n$ η πιθανότητα να εμφανιστεί (μετρηθεί) η ιδιοτιμή a_n που αντιστοιχεί στην ιδιοσυνάρτηση ψ_n του $\hat{A}$ είναι:

$$\Pi(a_n) = |c_n|^2 = |(\psi_n, \Psi)|^2$$

Αξίωμα 4. Η κατάσταση του φυσικού συστήματος μετά από μια μέτρηση δίνεται από την ιδιοσυνάρτηση της ιδιοτιμής που μετρήθηκε.

Αξίωμα 5. Η χρονική εξέλιξη της κατάστασης ενός κβαντομηχανικού συστήματος διέπεται από την εξίσωση του Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi$$

όπου $\hat{H}$ ο τελεστής της Χαμιλτονιανής του συστήματος.

Σημείωση. Σύμφωνα με το αξίωμα 4, η μέτρηση του παρατηρήσιμου μεγέθους A επιφέρει δραστική και μη ελεγχόμενη αλλαγή στην κυματοσυνάρτηση (διάνυσμα) που περιγράφει την κατάσταση του συστήματος πριν από τη μέτρηση. Ανεξάρτητα με ποιά είναι αυτή η κατάσταση πριν από τη μέτρηση, αμέσως μετά από τη μέτρηση το σύστημα θα περιγράφεται από την ιδιοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή (του $\widehat{A}$) που μετρήθηκε. Δηλαδή, η μέτρηση του μεγέθους A "εξαναγκάζει" το σύστημα να μεταπέσει από την αρχική κατάσταση σε μια από τις ιδιοκαταστάσεις του τελεστή $\widehat{A}$. Δηλαδή:

$$\boxed{\Psi \quad \xrightarrow{\text{μέτρηση του } A} \quad \psi_n}$$

όπου Ψ η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει το σύστημα πριν από τη μέτρηση και ψ_n η ιδιοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή a_n ($\widehat{A}\psi_n = a_n\psi_n$) που μετρήθηκε.

Επειδή, γενικά δεν είναι δυνατό να προβλέψουμε με βεβαιότητα ποια ιδιοτιμή θα πάρουμε κατά τη μέτρηση, δεν είναι δυνατό να γνωρίζουμε με βεβαιότητα σε ποια ιδιοσυνάρτηση θα βρεθεί το σύστημα μετά τη μέτρηση. Αυτό που γνωρίζουμε είναι η πιθανότητα μετάπτωσης του συστήματος σε κάποια από τις δυνατές ιδιοκαταστάσεις του $\widehat{A}$. Δηλαδή η μέτρηση δίνει περισσότερες πληροφορίες για το σύστημα αμέσως μετά τη μέτρηση παρά λίγο πριν τη μέτρηση. Η μόνη εξαίρεση είναι όταν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από την ιδιοσυνάρτηση του μεγέθους που μετράμε. Δηλαδή:

$$\boxed{\psi_n \quad \xrightarrow{\text{μέτρηση του } A} \quad \psi_n}$$

2.8 Ανακεφαλαίωση

Στην Κβαντομηχανική κάθε δυναμική μεταβλητή μπορεί να παρασταθεί με έναν ερμιτιανό τελεστή. Σε κάθε τέτοιο τελεστή προσεταιρίζεται μια γραμμική εξίσωση που έχει λύσεις μόνο για ορισμένες ιδιοτιμές του τελεστή. Οι αντίστοιχες λύσεις της γραμμικής εξίσωσης λέγονται ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή. Οι ιδιοτιμές του ερμιτιανού τελεστή είναι πραγματικοί αριθμοί, ορίζουν τις πιθανές τιμές της φυσικής μεταβλητής και χαρακτηρίζονται από ορισμένους κβαντικούς αριθμούς. Οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις ορίζουν τις πιθανές καταστάσεις του φυσικού συστήματος και ικανοποιούν τις συνθήκες της ορθοκανονικότητας και της πληρότητας.

Στη γενική περίπτωση που το φυσικό σύστημα χαρακτηρίζεται από έναν αριθμό δυναμικών μεταβλητών, η κατάστασή του περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση (διάνυσμα της κατάστασης) $\psi_\alpha(x)$. Το α είναι ο δείκτης της κατάστασης, δηλαδή ένα σύνολο ιδιοτιμών της φυσικής ποσότητας ή ένα σύνολο αντίστοιχων κβαντικών αριθμών που καθορίζει την κατάσταση του συστήματος. Το x είναι ο δείκτης της αναπαράστασης, δηλαδή το σύνολο των μεταβλητών από τις οποίες εξαρτάται η κυματοσυνάρτηση, που μπορεί να είναι οι συντεταγμένες της θέσης, της ορμής, οι δυνατοί προσανατολισμοί του σπιν σε μαγνητικό πεδίο κλπ. Το τετράγωνο του μέτρου της κυματοσυνάρτησης καθορίζει την πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στο συγκεκριμένο "σημείο" x για ένα δοσμένο α.

Αν q και $\phi_q(x)$ είναι οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του ερμιτιανού τελεστή $\hat{Q}$, $\hat{Q}\phi_q(x) = q\phi_q(x)$ και οι $\phi_q(x)$ αποτελούν ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα:

$$\int \phi^*_{q'}(x)\phi_q(x)dx = \langle\phi_{q'}|\phi_q\rangle = \langle q'|q\rangle = \delta_{q'q}$$

η κυματοσυνάρτηση $\psi_\alpha(x)$ μπορεί να αναπτυχθεί ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\hat{Q}$:

$$\psi_\alpha(x) = \sum_q c_{a,q}\phi_q(x), \quad c_{a,q} = (\phi_q(x), \psi_\alpha(x)) \tag{2.71}$$

Το μέτρο στο τετράγωνο των συντελεστών $c_{a,q}$ χαρακτηρίζει την πιθανότητα το φυσικό μέγεθος να έχει την τιμή q όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση α. Επομένως μπορούμε να θεωρήσουμε το σύνολο των συντελεστών $c_{a,q}$ του αναπτύγματος (2.71) ως την κυματοσυνάρτηση της κατάστασης α στην $q-$αναπαράσταση.

Τα παραπάνω γίνονται περισσότερο διαφανή με το συμβολισμό του Dirac και γράφοντας τις κυματοσυναρτήσεις $\psi_\alpha(x)$ και $\phi_q(x)$ καθώς και τους συντελεστές $c_{a,q}$ με τη μορφή:

$$\boxed{\psi_\alpha(x) \equiv \langle x|\alpha\rangle, \quad \phi_q(x) \equiv \langle x|q\rangle, \quad c_{a,q} \equiv \langle q|\alpha\rangle} \tag{2.72}$$

Με τη βοήθεια αυτών, η σχέση (2.71), που περιγράφει το μετασχηματισμό της κατάστασης α από τη $q-$αναπαράσταση (συνάρτηση $c_{\alpha,q}$) στη $x-$αναπαράσταση (συνάρτηση $\psi_\alpha(x)$), μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\langle x|\alpha\rangle = \sum_q \langle x|q\rangle\langle q|\alpha\rangle \tag{2.73}$$

Από τη σχέση αυτή συμπεραίνουμε ότι η ιδιοσυνάρτηση $\langle x|q\rangle \equiv \phi_q(x)$ του τελεστή $\hat{Q}$ στη $x-$αναπαράσταση μετασχηματίζει μια κατάσταση από τη $q-$αναπαράσταση στη $x-$αναπαράσταση. Γράφοντας το μετασχηματισμό αυτό με τη μορφή $\langle x|q\rangle$ δίνεται έμφαση στη συμμετρία μεταξύ του δείκτη x της αναπαράστασης και του δείκτη q της κατάστασης. Ο αντίστροφος μετασχηματισμός $\langle q|x\rangle$ συμπίπτει με το $\langle x|q\rangle^*$.

Εύκολα βρίσκεται η έκφραση του πίνακα ενός τελεστή από τη μια αναπαράσταση στην άλλη:

$$\langle x'|\hat{O}|x\rangle = \langle x'|\hat{I}\hat{O}\hat{I}|x\rangle = \sum_{q'q}\langle x'|q'\rangle\langle q'|\hat{O}|q\rangle\langle q|x\rangle$$

Η αλλαγή από τη μια αναπαράσταση στην άλλη, δηλαδή η αλλαγή από ορισμένες ανεξάρτητες μεταβλητές σε άλλες, λέγεται κανονικός μετασχηματισμός και περιγράφεται με ένα **μοναδιαίο τελεστή** (unitary operator) ή μετασχηματισμό. Οι φυσικές ιδιότητες του συστήματος μένουν αμετάβλητες υπό την επίδραση ενός μοναδιαίου τελεστή.

2.9 Ασκήσεις Κεφαλαίου 2

Η κατανόησης όσων αναφέρθηκαν στα προηγούμενα εδάφια στηρίζεται κατά ένα μεγάλο μέρος στην εφαρμογή των εννοιών και της θεωρίας σε ορισμένες ασκήσεις. Οι παρακάτω ασκήσεις εξυπηρετούν αυτόν τον σκοπό αλλά υπάρχουν και ορισμένες που μπορούν να θεωρηθούν ως συμπλήρωμα της θεωρίας. Οι ασκήσεις που είναι συμπλήρωμα της θεωρίας σημειώνονται με ένα *.

1. Η συνάρτηση $\psi(x,t) = f(x)\cos\omega t$, όπου $f(x)$ τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση, είναι δυνατό να περιγράφει την κατάσταση ενός σωματιδίου;

2. Η κατάσταση ενός σωματιδίου, τη χρονική στιγμή $t = 0$, περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1(x) + u_2(x)) \tag{2.74α΄}$$

όπου $u_1(x)$ και $u_2(x)$ κανονικοποιημένες πραγματικές κυματοσυναρτήσεις καθορισμένης τιμής ενέργειας E_1 και E_2, αντίστοιχα. Επιπλέον η $u_1(x)$ είναι άρτια συνάρτηση και η $u_2(x)$ περιττή συνάρτηση. Να δειχθεί ότι:
α) Η μέση τιμή της ενέργειας του σωματιδίου και η αβεβαιότητά της είναι, αντίστοιχα:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{2}(E_1 + E_2), \qquad \Delta E = \frac{1}{2}|E_1 - E_2| \tag{2.74β΄}$$

β) Αν $\langle x\rangle_0$ είναι η μέση τιμή της θέσης τη χρονική στιγμή $t = 0$, τότε η μέση τιμή της θέσης οποιαδήποτε χρονική στιγμή είναι:

$$\langle x\rangle_t = \langle x\rangle_0 \cos\omega t, \quad \text{όπου} \quad \omega = (E_2 - E_1)/\hbar \tag{2.74γ΄}$$

3. Η κατάσταση ενός σωματιδίου περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$u(x) = N\big(u_1(x) + 2u_2(x) + u_3(x)\big)$$

όπου $u_1(x)$, $u_2(x)$ και $u_3(x)$ κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{A}$, που αντιστοιχεί στο παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος A, με αντίστοιχες ιδιοτιμές: $a_1 = -1$, $a_2 = 0$ και $a_3 = 1$. Να δειχθεί ότι ο παράγοντας κανονικοποίησης N, η μέση τιμή $\langle\widehat{A}\rangle$ και η αβεβαιότητα $\Delta\widehat{A}$ του μεγέθους A είναι:

$$N = \frac{1}{\sqrt{6}}\,, \quad \langle\widehat{A}\rangle = 0, \quad \Delta\widehat{A} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

4. Η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση που περιγράφει την κίνηση του ηλεκτρονίου του ατόμου του υδρογόνου στη βασική κατάσταση είναι:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\,\mathrm{e}^{-r/a_0}, \quad 0 \le r < \infty \tag{2.75α'}$$

όπου $a_0 = \frac{\hbar^2}{me}$ είναι η ακτίνα του Bohr, m είναι η μάζα και e το φορτίο του ηλεκτρονίου. Ο πυρήνας θεωρείται ακίνητος στην αρχή των αξόνων. Να δειχθεί ότι:
α) Η μέση τιμή της απόστασης του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα είναι:

$$\langle r\rangle = 4\pi\int_0^\infty r^3 u^2(r)dr = \cdots = \frac{3}{2}\,a_0 \tag{2.75β'}$$

β) Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας (πιθανότητα ανά μονάδα ακτινικού διαστήματος), $\rho(r) = 4\pi r^2|u(r)|^2$, γίνεται μέγιστη στην απόσταση $r = a_0$ από τον πυρήνα.

5. Να δειχθεί ότι, αν το δυναμικό $V(\mathbf{r})$ αυξηθεί κατά τη σταθερή ποσότητα V_0, για κάθε $\mathbf{r}$, τότε οι κυματοσυναρτήσεις της ανεξάρτητης από το χρόνο εξίσωσης του Schrödinger δεν μεταβάλλονται. Ποιά μεταβολή γίνεται στις ιδιοτιμές της ενέργειας;

6. Ξεκινώντας από τα αντίστοιχα ρεύματα πυκνότητας πιθανότητας, να δείξετε ότι οι κυματοσυναρτήσεις :

$$u_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}\,\mathrm{e}^{ikr} \quad \text{και} \quad u_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}\,\mathrm{e}^{-ikr}$$

παριστάνουν σφαιρικά εξερχόμενο και εισερχόμενο κύμα, αντίστοιχα.

7*. Να δειχθεί ότι ο τελεστής της ορμής μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\boxed{\widehat{\mathbf{p}} = \frac{im}{\hbar}\,[\widehat{H},\mathbf{r}]} \tag{2.76}$$

Υπόδειξη. Ξεκινήστε από το δεξιό μέλος της (2.76) κάντε την αντικατάσταση $\widehat{H} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{p}_x^2 + \widehat{p}_y^2 + \widehat{p}_z^2\right) + V(\mathbf{r})$ και αναπτύξτε τον αντιμεταθέτη.

8*. Να δειχθεί ότι:

$$\boxed{\langle\widehat{\mathbf{p}}\rangle_{u_E} = 0} \tag{2.77}$$

όπου u_E ιδιοσυνάρτηση του τελεστή του Hamilton.
Υπόδειξη. Ξεκινήστε από τον ορισμό της μέσης τιμής και αντικαταστήστε τον τελεστή της ορμής από τη σχέση (2.76).

9*. Να δειχθεί ότι για τις μέσες τιμές των τελεστών $\widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ και $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$, ως προς την κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r},t)$, ισχύουν οι σχέσεις:

$$\boxed{\frac{d\langle\mathbf{r}\rangle}{dt} = \frac{\langle\widehat{\mathbf{p}}\rangle}{m}} \quad \text{και} \quad \boxed{\frac{d\langle\widehat{\mathbf{p}}\rangle}{dt} = \langle-\boldsymbol{\nabla}V\rangle} \tag{2.78}$$

Υπόδειξη. Χρησιμοποιείστε τις σχέσεις (2.69) και (2.76).

Σημείωση. Οι σχέσεις αυτές λέγονται συνήθως **θεώρημα του Ehrenfest**. Από αυτές γίνεται φανερό ότι οι σχέσεις της Νευτώνειας Μηχανικής : $\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}$ και $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla}V$, ισχύουν στην Κβαντομηχανική για τις αντίστοιχες μέσες τιμές των τελεστών $\widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ και $\widehat{\mathbf{p}}$ ως προς τις λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger.

10. Για σωματίδιο που κινείται σε δυναμικό $V(x)$ να δειχθεί ότι ισχύει:

$$\frac{d}{dt}\langle x^2\rangle = \frac{1}{m}\langle \widehat{x}\widehat{p}_x + \widehat{p}_x\widehat{x}\rangle$$

11. Ελεύθερο σωματίδιο κινείται στον $x-$άξονα.
α) Να δειχθεί ότι η μέση τιμή της ορμής είναι χρονικά αναλλοίωτη και ότι η μέση τιμή της θέσης είναι γραμμική συνάρτηση του χρόνου.
β) Να βρεθεί η χρονική εξάρτηση των μέσων τιμών του $\langle x^2\rangle$ και $\langle \widehat{x}\widehat{p}_x + \widehat{p}_x\widehat{x}\rangle$.
γ) Να δειχθεί ότι μπορούμε να εκλέξουμε μια χρονική στιγμή $t = t_0$ έτσι ώστε:

$$(\Delta x)_t^2 = \frac{(\Delta x)_0^2}{m^2}\,(t-t_0)^2 + (\Delta x)_0^2$$

12. Σωματίδιο κινείται στο $x-$ άξονα υπό την επίδραση δυναμικού της μορφής: $V(x) = -kx$ (π.χ. ομογενές ηλεκτρικό πεδίο ή πεδίο βαρύτητας).
α) Να βρεθεί χρονική εξέλιξη της μέσης τιμής της θέσης και της ορμής.
β) Να δειχθεί ότι η αβεβαιότητα της ορμής είναι χρονικά αναλλοίωτη.

13. Σωματίδιο κινείται σε μια διάσταση υπό την επίδραση δυναμικού αρμονικού ταλαντωτή: $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, $k =$ σταθερά του "ελατηρίου". Αν η κατάσταση του σωματιδίου περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$u_\lambda(x) = N\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2/2}$$

Να δειχθεί ότι:
α) Το σωματίδιο έχει καθορισμένη τιμή της ενέργειας μόνον όταν η παράμετρος λ έχει την τιμή $\lambda = \sqrt{km}/\hbar$ και για αυτήν την τιμή του λ η ενέργεια του σωματιδίου είναι $E = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$, όπου $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ είναι η συχνότητα της κλασικής κίνησης.
β) Η μέση τιμή του τελεστή του Hamilton (μέση ενέργεια) ως προς την κυματοσυνάρτηση $u_\lambda(x)$ είναι:

$$\langle E\rangle = \langle \widehat{H}\rangle = \frac{1}{2m}\langle \widehat{p}^2\rangle + \frac{k}{2}\langle x^2\rangle = \cdots = \frac{1}{2m}\,\frac{\hbar^2\lambda}{2} + \frac{k}{4\lambda}$$

γ) Να γίνει η γραφική παράσταση της μέσης ενέργειας ως συνάρτηση της παραμέτρου λ και να διαπιστώσετε ότι υπάρχει ένα ελάχιστο για $\lambda = \lambda_0 = \sqrt{km}/\hbar$ με ελάχιστη τιμή: $E_{min} = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

14. Ο τελεστής του Hamilton ενός σωματιδίου που κινείται υπό την επίδραση δυναμικού αρμονικού ταλαντωτή είναι: $\widehat{H} = \frac{1}{2m}\widehat{p}^2 + \frac{k}{2}\widehat{x}^2$. Να δειχθεί ότι ισχύει η σχέση:

$$\widehat{x} = \frac{1}{i\hbar}\big[\widehat{H}, \widehat{p}\big]$$

και ότι η μέση τιμή του τελεστή της θέσης ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του $\widehat{H}$ είναι μηδέν.

15. Η κυματοσυνάρτηση ενός ελεύθερου σωματιδίου, τη χρονική στιγμή $t = 0$ είναι:

$$\psi(x,0) = N\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{|k|/k_0 + ikx}dk$$

α) Να υπολογιστεί το γινόμενο $(\Delta x)(\Delta p)$ τη χρονική στιγμή $t = 0$.
β) Ποια είναι η πιθανότητα $\Pi(p_1, t)$ ώστε η ορμή του σωματιδίου τη χρονική στιγμή $t \neq 0$ να βρίσκεται μεταξύ $-p_1$ και p_1;

16. Οι τελεστές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ αντιστοιχούν στα παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη A και B. Οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις των $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ είναι αντίστοιχα $\alpha_1,\ \alpha_2,\ |\psi_1\rangle,\ |\psi_2\rangle$ και $\beta_1,\ \beta_2,\ |\varphi_1\rangle,\ |\varphi_2\rangle$. Οι ιδιοκαταστάσεις των $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ συνδέονται μεταξύ τους με τις σχέσεις:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{5}\left(3|\varphi_1\rangle + 4|\varphi_2\rangle\right), \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{5}\left(4|\varphi_1\rangle - 3|\varphi_2\rangle\right)$$

α) Αν κατά τη μέτρηση του μεγέθους A πάρουμε ως αποτέλεσμα την τιμή α_1, ποια είναι η κατάσταση του συστήματος αμέσως μετά τη μέτρηση;
β) Αν στη συνέχεια γίνει μια μέτρηση του μεγέθους B ποιες είναι οι δυνατές τιμές που θα πάρουμε και με ποια πιθανότητα;
γ) Αμέσως μετά τη μέτρηση του B μετράμε το μέγεθος A ξανά. Ποια είναι η πιθανότητα να έχουμε ως αποτέλεσμα την τιμή α_1;

17. Η κατάσταση ενός σωματιδίου, που βρίσκεται σε συμμετρικό δυναμικό ($V(x) = V(-x)$), τη χρονική στιγμή $t = 0$, περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x,0) = N\big[3u_0(x) + u_2(x) + 2u_3(x)\big]$$

όπου $u_i(x)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{H}$: $\widehat{H}u_i(x) = E_i u_i(x)$.

α) Να βρεθεί η τιμή του παράγοντα κανονικοποίησης N για $t = 0$ και $t > 0$.

β) Η $\psi(x,0)$ έχει καθορισμένη πάριτυ;

γ) Τη χρονική στιγμή $t > 0$ μετριέται η πάριτυ της κατάστασης $\psi(x,t)$.

γ$_1$) Ποια είναι η πιθανότητα το αποτέλεσμα της μέτρησης να είναι $+1$ και ποια να είναι -1;

γ$_2$) Ποια είναι η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει το σύστημα αμέσως μετά τη μέτρηση, όταν η μέτρηση δώσει $+1$ και ποια όταν δώσει -1;

γ$_3$) Είναι η πάριτυ σταθερά της κίνησης;

γ$_4$) Ποια είναι η μέση τιμή της ενέργειας πριν από τη μέτρηση και αμέσως μετά τη μέτρηση;

18*. Η εξίσωση του Schrödinger δυο αλληλεπιδρώντων σωματιδίων μάζας m_1 και m_2 είναι:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t) = \Big[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\Big]\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t) \tag{2.79α'}$$

όπου $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ τα διανύσματα θέσης των δύο σωματιδίων και $\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\,,\ \ i = 1,2.$

Να δειχθεί ότι με την εισαγωγή των διανυσμάτων του κέντρου μάζας και της σχετικής απόστασης:

$$R = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M} = \mu\Big(\frac{\mathbf{r}_1}{m_1} + \frac{\mathbf{r}_2}{m_2}\Big), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad M = m_1 + m_2, \qquad \mu = \frac{m_1 + m_2}{M}$$

η εξίσωση του Schrödinger διαχωρίζεται στις δύο εξισώσεις:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{cm}(\mathbf{R},t) = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Psi_{cm}(\mathbf{R},t) \tag{2.79β'}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_r(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\Psi_r(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t) \tag{2.79γ'}$$

Η εξίσωση (2.79β') είναι η εξίσωση του Schrödinger ελευθέρου σωματιδίου μάζας M που περιγράφει τη μεταφορική κίνηση του κέντρου μάζας. Η εξίσωση (2.79γ') είναι η εξίσωση του Schrödinger σωματιδίου μάζας μ που περιγράφει τη σχετική κίνηση των δύο σωματιδίων.

Υπόδειξη. Δείξτε ότι:

$$\boldsymbol{\nabla}_1 = \frac{m_1}{M}\boldsymbol{\nabla}_R + \boldsymbol{\nabla}_r, \quad \boldsymbol{\nabla}_2 = \frac{m_2}{M}\boldsymbol{\nabla}_R - \boldsymbol{\nabla}_r, \quad \text{και} \quad \frac{1}{m_1}\nabla_1^2 + \frac{1}{m_2}\nabla_2^2 = \frac{1}{M}\nabla_R^2 + \frac{1}{\mu}\nabla_r^2$$

Αντικαταστήστε στην εξίσωση (2.79α΄) και εφαρμόστε τη μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών, ζητώντας λύσεις της μορφής:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \Psi_{cm}(\mathbf{R}, t)\Psi_r(\mathbf{r}, t)$$

19*. Να δειχθεί ότι αν x_0 είναι ένα σημείο πεπερασμένης ασυνέχειας του δυναμικού $V(x)$ τότε η κυματοσυνάρτηση $u(x)$ είναι συνεχής στην περιοχή αυτού του σημείου.

Υπόδειξη. Ολοκληρώστε και τα δύο μέλη της ανεξάρτητης από το χρόνο εξίσωσης του Schrödinger από $x_0 - \varepsilon_1$ έως $x_0 + \varepsilon_2$ για να οδηγηθείτε στη σχέση:

$$\lim_{\substack{\varepsilon_1 \to 0 \\ \varepsilon_2 \to 0}} \left[\frac{du(x)}{dx}\bigg|_{x_0+\varepsilon_2} - \frac{du(x)}{dx}\bigg|_{x_0-\varepsilon_1} \right] = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{du(x)}{dx}\bigg|_{x_0+0} = \frac{du(x)}{dx}\bigg|_{x_0-0}$$

20*. Να δειχθεί ότι οι ιδιοτιμές τις ενέργειας ενός δέσμιου μονοδιάστατου προβλήματος, οπότε $\lim\limits_{x\to\pm\infty} u(x) = 0$, δεν είναι εκφυλισμένες.

Υπόδειξη. Υποθέσετε ότι στην ιδιοτιμή E αντιστοιχούν οι ιδιοσυναρτήσεις $u_1(x)$ και $u_2(x)$. Γράψτε την εξίσωση του Schrödinger για τις $u_1(x)$ και $u_2(x)$ και βρείτε μια σχέση μεταξύ αυτών. Από τη σχέση αυτή και επειδή $\lim\limits_{x\to\pm\infty} u_i(x) = 0, \quad i = 1, 2$, συμπεράνατε ότι οι $u_1(x)$ και $u_2(x)$ είναι γραμμικά εξαρτημένες.

Κεφάλαιο 3

Προβλήματα μιας διάστασης

Αν και τα πραγματικά κβαντικά συστήματα είναι τριών διαστάσεων, υπάρχουν ορισμένες περιπτώσεις όπου αυτά συμπεριφέρονται προσεγγιστικά σαν να έχουμε κίνηση σε μια διάσταση. Επίσης μπορούμε να βγάλουμε χρήσιμα συμπεράσματα αν κάνουμε την απλοποιημένη υπόθεση ότι όλα συμβαίνουν σε μια διάσταση. Η μελέτη των προβλημάτων μιας διάστασης, λόγω της σχετικής απλότητας έναντι των τρισδιάστατων προβλημάτων, βοηθάει επίσης στην κατανόηση όσων αναφέρθηκαν στο Κεφάλαιο 2. Θα ασχοληθούμε με προβλήματα ενός σωματιδίου υπό την επίδραση δυναμικού που δεν εξαρτάται από το χρόνο, με έμφαση στις στάσιμες ιδιοκαταστάσεις. Οι καταστάσεις αυτές παρουσιάζουν μεγάλο ενδιαφέρον επειδή: α) Η κάθε κατάσταση αντιστοιχεί σε μια χαρακτηριστική ενέργεια. β) Αν το σύστημα βρίσκεται αρχικά σε μια τέτοια κατάσταση, παραμένει σε αυτήν συνέχεια. γ) Η εύρεση των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή του Hamilton βοηθούν στην εύρεση της χρονικής εξέλιξης της κυματοσυνάρτησης που περιγράφει μια οποιαδήποτε κατάσταση.

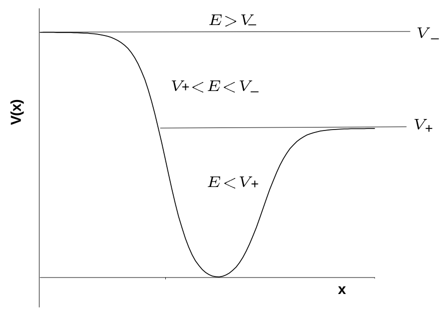
3.1 Δέσμιες και μη δέσμιες καταστάσεις

Στην περίπτωση που ένα σωματίδιο κινείται κατά τον άξονα των x η εξίσωση του Schrödinger γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \tag{3.1}$$

Το είδος της κατάστασης του σωματιδίου εξαρτάται από το δυναμικό $V(x)$ και από τις τιμές της ενέργειας E του σωματιδίου. Αν η μορφή του $V(x)$ είναι τέτοια ώστε $\lim\limits_{x\to\pm\infty} V(x) = V_\pm$ (χωρίς να περιορίζεται η γενικότητα του προβλήματος θεωρούμε ότι $V_- > V_+$) τότε ανάλογα με τις τιμές της ενέργειας του σωματιδίου διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

• Για $E > V_-$: οι καταστάσεις δεν είναι δέσμιες, το ενεργειακό φάσμα είναι συνεχές και διπλά εκφυλισμένο.
• Για $V_+ < E < V_-$: οι καταστάσεις δεν είναι δέσμιες, το ενεργειακό φάσμα είναι συνεχές και δεν είναι εκφυλισμένο.
• Για $E < V_+$: οι καταστάσεις είναι δέσμιες, το ενεργειακό φάσμα είναι διακεκριμένο και δεν είναι εκφυλισμένο.



Σχήμα 3.1:

3.1.1 Ελεύθερο σωματίδιο

Η απλούστερη περίπτωση που μπορούμε να λύσουμε την εξίσωση του Schrödinger είναι αυτή του ελεύθερου σωματιδίου, όταν το σωματίδιο κινείται χωρίς την επίδραση εξωτερικών δυνάμεων και επομένως το δυναμικό είναι μηδέν. Για $V(x) = 0$, η εξίσωση του Schrödinger είναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} = Eu(x), \qquad x \in (-\infty, \infty) \tag{3.2α΄}$$

Για ευκολία έχει παραληφθεί ο δείκτης της ιδιοτιμής από την κυματοσυνάρτηση. Η (3.2α΄) γράφεται ακόμη:

$$u''(x) + k^2u(x) = 0, \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{3.2β΄}$$

Η γενική λύση αυτής είναι:[1]

$$u(x) = A_+\mathrm{e}^{ikx} + A_-\mathrm{e}^{-ikx} \tag{3.2γ΄}$$

Οι συναρτήσεις $u(x)$ και $u'(x)$ είναι συνεχείς συναρτήσεις στο διάστημα $x \in (-\infty, \infty)$ για κάθε τιμή των αυθαίρετων σταθερών $A_\pm$ και φραγμένες για $x \to \pm\infty$ για κάθε πραγματική τιμή k, δηλαδή για $E \geq 0$. Αν το k δεν είναι πραγματικός αριθμός, η $u(x)$ θα απειρίζεται είτε για $x = +\infty$ είτε για $x = -\infty$. Επειδή δεν υπάρχουν άλλοι περιορισμοί το φάσμα των ιδιοτιμών της ενέργειας είναι συνεχές και σε κάθε τιμή της ενέργειας αντιστοιχούν οι δύο γραμμικά ανεξάρτητες κυματοσυναρτήσεις:

$$u_+(x) = A_+\mathrm{e}^{ikx} \qquad \text{και} \qquad u_-(x) = A_-\mathrm{e}^{-ikx} \tag{3.2δ΄}$$

αφού οι σταθερές $A_\pm$ παραμένουν αυθαίρετες. Δηλαδή, το φάσμα των ιδιοτιμών της ενέργειας είναι διπλά εκφυλισμένο.

Οι λύσεις $u_\pm(x)$ είναι συγχρόνως και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ορμής $\widehat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$:

$$\widehat{p}u_\pm(x) = -i\hbar A_\pm\frac{d}{dx}\,\mathrm{e}^{\pm ikx} = \pm\hbar k u_\pm(x) \tag{3.2ε΄}$$

Οι ιδιοτιμές του $\widehat{p}$ είναι $p_\pm = \pm\hbar k$. Επομένως η $u_+(x) = A_+\mathrm{e}^{ikx}$ παριστάνει κίνηση προς τα δεξιά και η $u_-(x) = A_-\mathrm{e}^{-ikx}$ κίνηση προς τα αριστερά, εφόσον $k > 0$. Συχνά λέμε ότι η κυματοσυνάρτηση e^{ikx} παριστάνει ένα κύμα που οδεύει προς τα δεξιά και η e^{-ikx} ένα κύμα που οδεύει προς τα αριστερά.

Το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας που αντιστοιχεί στις καταστάσεις $u_\pm(x)$, σύμφωνα με τις σχέσεις (2.38) και (2.41) είναι:

$$\begin{aligned} j_\pm &= \mathbf{Re}\big[u_\pm^*(x)\frac{1}{m}\,\underbrace{\widehat{p}\,u_\pm(x)}_{\pm\hbar k u_\pm}\big] = \mathbf{Re}\big[A_\pm^*\,\mathrm{e}^{-i(\pm k)x}\,\frac{1}{m}\,(\pm\hbar k)\,A_\pm\mathrm{e}^{i(\pm k)x}\big] = \pm\,|A_\pm|^2\frac{\hbar k}{m} \\ &= \pm|A_\pm|^2\,\frac{p}{m} = \pm|A_\pm|^2 v \end{aligned} \tag{3.2ϛ΄}$$

Δηλαδή, η αριθμητική τιμή του ρεύματος πυκνότητας πιθανότητας, που δίνει τη ροή των σωματιδίων (αριθμός σωματιδίων ανά μονάδα χρόνου που διασχίζουν μια μοναδιαία επιφάνεια κάθετη στην κατεύθυνση της δέσμης των σωματιδίων), είναι ανάλογη της ταχύτητας

[1] Ανάλογα με το πρόβλημα που εξετάζουμε η λύση της (3.2β΄) γράφεται και με τις παρακάτω ισοδύναμες γραφές:

$$u(x) = A\sin kx + B\cos kx = C\cos(kx - \varphi)$$

των σωματιδίων με κατεύθυνση προς τα δεξιά για την $u_+(x)$ και προς τα αριστερά για την $u_-(x)$.

Σημειώνεται ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\mathrm{e}^{\pm ikx}$ είναι παντού φραγμένες, δεν μηδενίζονται στο άπειρο και επομένως δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Η φυσική τους σημασία βρίσκεται στο γεγονός ότι είναι κατάλληλες στην περιγραφή του προβλήματος της σκέδασης.

3.1.2 Μη ελεύθερο σωματίδιο

Όταν το σωματίδιο βρίσκεται σε δυναμικό που είναι παντού μηδέν, εκτός από μια πεπερασμένη περιοχή όπου είναι διάφορο του μηδενός, τότε η λύση της εξίσωσης του Schrödinger δεν είναι το ίδιο απλή όπως και προηγουμένως. Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

α) Όταν το δυναμικό είναι παντού μηδέν εκτός από μια πεπερασμένη περιοχή όπου αυτό είναι θετικό, η ασυμπτωτική συμπεριφορά της $u(x)$ (για $x \to \pm\infty$) δίνεται από τη συνάρτηση της (3.2γ΄), Για μεγάλα $|x|$ $(x \to \pm\infty)$, η κυματοσυνάρτηση συμπεριφέρεται όπως οι συναρτήσεις:

$$u(x) = A_-\mathrm{e}^{-ikx}, \qquad \text{για κίνηση προς τα αριστερα} \tag{3.3α΄}$$

$$u(x) = A_+\mathrm{e}^{ikx}, \qquad \text{για κίνηση προς τα δεξιά} \tag{3.3β΄}$$

και επομένως θα έχουμε ένα συνεχές φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας, διπλά εκφυλισμένο. Αυτές οι καταστάσεις λέγονται **καταστάσεις σκέδασης** (scattering states).

β) Όταν το δυναμικό είναι παντού μηδέν, εκτός από μια πεπερασμένη περιοχή όπου είναι αρνητικό, ενδέχεται να υπάρχουν λύσεις της εξίσωσης (3.1) με αρνητικές τιμές της ενέργειας. Για αυτές τις τιμές της ενέργειας το σωματίδιο βρίσκεται εντοπισμένο κυρίως σε αυτήν την περιοχή. Αυτές οι καταστάσεις λέγονται **δέσμιες καταστάσεις** (bound states). Για τις δέσμιες καταστάσεις, η $u(x)$ είναι **τετραγωνικά ολοκληρώσιμη**.

Στην περίπτωση των δεσμίων καταστάσεων η ασυμπτωτική συμπεριφορά των κυματοσυναρτήσεων παίζει βασικό ρόλο στην αναζήτηση της λύσης της εξίσωσης (3.1). Έτσι, αν το δυναμικό είναι αρνητικό σε μια μικρή περιοχή του άξονα των x και μηδέν εκτός αυτής, η λύση της εξίσωσης (3.1) έξω από αυτήν την περιοχή (για $E < 0$) είναι της μορφής:

$$u(x) = A\,\mathrm{e}^{kx} + B\,\mathrm{e}^{-kx}, \qquad k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \tag{3.4α΄}$$

Επειδή η κυματοσυνάρτηση δεν πρέπει να απειρίζεται σε μεγάλες αποστάσεις, η $u(x)$ πρέπει να έχει τη μορφή:

$$u(x) = A\mathrm{e}^{kx}, \qquad \text{για} \quad x \to -\infty \tag{3.4β΄}$$

$$u(x) = B\mathrm{e}^{-kx}, \qquad \text{για} \quad x \to +\infty \tag{3.4γ΄}$$

Αυτές οι οριακές συνθήκες είναι πολύ περιοριστικές. Στη γενική περίπτωση υπάρχει μόνο ένας περιορισμένος αριθμός διακεκριμένων τιμών της ενέργειας E για τις οποίες οι λύσεις της Δ.Ε. (3.1) τις ικανοποιεί. Το φυσικό σύστημα έχει πλέον ένα διακεκριμένο φάσμα δεσμίων ενεργειακών καταστάσεων. Τα συστήματα αυτά έχουν επίσης λύσεις που αντιστοιχούν σε θετικές τιμές της ενέργειας. Δηλαδή το ολικό ενεργειακό φάσμα μπορεί να αποτελείται από ένα συνεχές μέρος και ένα ασυνεχές.

3.2 Ορθογώνιο φράγμα δυναμικού - Φαινόμενο σύραγγος

Ένα μεγάλο μέρος των γνώσεών μας για τις πυρηνικές δυνάμεις, σχεδόν όλες οι γνώσεις μας της Φυσικής Υψηλών Ενεργειών και σημαντικές γνώσεις για τη δομή των ατόμων και μορίων, προέρχονται από πειράματα σκέδασης. Σε ένα τέτοιο πείραμα, μια δέσμη σωματιδίων κατευθύνεται προς ένα στόχο και με έναν ή περισσότερους ανιχνευτές ανιχνεύονται η διεύθυνση ή και το είδος των σκεδαζόμενων σωματιδίων. Οι παρατηρήσεις αυτές δίνουν πληροφορίες για τη φύση της αλληλεπίδρασης των σωματιδίων του στόχου με τα σωματίδια της δέσμης καθώς και για τη δομή αυτών, αν υπάρχει.

Θα εξετάσουμε την απλούστερη περίπτωση σκέδασης, όταν τα σωματίδια θεωρούνται χωρίς δομή, κινούνται κατά μήκος μιας ευθείας γραμμής και η αλληλεπίδραση του στόχου με τα σωματίδια της δέσμης προέρχεται από ένα πραγματικό δυναμικό (συνάρτηση δυναμικής ενέργειας). Επομένως, κατά τη διαδικασία της σκέδασης διατηρείται η ολική ενέργεια. Επειδή η κίνηση γίνεται σε μια διάσταση μπορούμε να εξετάσουμε αν το σωματίδιο της δέσμης ανακλάται από το στόχο προς τα πίσω ή το διαπερνά.

Η όλη ανάλυση γίνεται με τη βοήθεια των καταστάσεων καθορισμένης τιμής ενέργειας. Επειδή όμως τα σωματίδια της δέσμης δεν είναι δυνατό να έχουν όλα την ίδια ακριβώς ενέργεια, αν οι προβλέψεις για τις πιθανότητες ανάκλασης ή διέλευσης των σωματιδίων γίνουν ως συναρτήσεις της ενέργειας τότε η αβεβαιότητα της ενέργειας των σωματιδίων της δέσμης μπορεί να περιληφθεί στο τελικό στάδιο της ανάλυσης.

Τα βασικά μεγέθη, που μελετάμε σε αυτού του είδους τα προβλήματα, είναι **ο συντελεστής διέλευσης T**, που *είναι ο λόγος της πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας των διερχομένων σωματιδίων προς την πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας των προσπιπτόντων σωματιδίων* και ο **συντελεστής ανάκλασης R**, που *είναι η απόλυτη τιμή της πυκνότητας ρεύματος πιθανότητας των ανακλωμένων σωματιδίων προς την πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας των προσπιπτόντων σωματιδίων*

$$T = \frac{j_T}{j_I}, \qquad R = \left|\frac{j_R}{j_I}\right| \tag{3.5}$$

Για ελαστική σκέδαση ισχύει η σχέση

$$T + R = 1$$

Υπενθυμίζουμε ότι αν η στάσιμη κατάσταση περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση καθορισμένης τιμής ενέργειας $u(x)$, τότε η πυκνότητα ρεύματος πιθανότητας δίνεται από τη σχέση

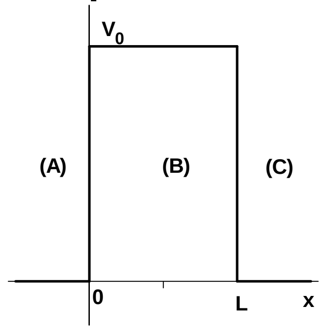
$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(u^*\frac{du}{dx} - \frac{du^*}{dx}u\right) = \mathcal{R}e[u^*\widehat{v}u] \tag{3.6}$$

όπου $\widehat{v}$ είναι ο τελεστής της ταχύτητας, $\widehat{v} = \widehat{p}/m$. Η τελευταία έκφραση του $j(x)$ βρίσκεται σε πλήρη αντιστοιχία με την κλασική πυκνότητα ρεύματος $j_{cl} = \rho v$, η οποία παριστάνει τον αριθμό των σωματιδίων που διέρχονται από μια επιφάνεια κάθετη προς την κίνηση των σωματιδίων, ανά μονάδα επιφάνειας και ανά μονάδα χρόνου.

3.2.1 Σκέδαση από ορθογώνιο φράγμα δυναμικού

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε τη σκέδαση από ορθογώνιο φράγμα δυναμικού. Δηλαδή, την περίπτωση κατά την οποία τα σωματίδια της δέσμης κινούμενα από αριστερά προς τα δεξιά προσπίπτουν στο δυναμικό:

$$V(x) = \begin{cases} 0\,, & x < 0 \\ V_0\,, & 0 \le x \le L\,, \quad V_0 > 0 \\ 0\,, & x > L \end{cases} \tag{3.7}$$



Σχήμα 3.2:

Η λύση της εξίσωσης του Schrödinger εξαρτάται από την τιμή της ενέργειας E του σωματιδίου. Θα εξετάσουμε πρώτα την περίπτωση $E > V_0$ και στη συνέχεια την $E < V_0$. Η πορεία που θα ακολουθήσουμε και στις δύο περιπτώσεις είναι να γράψουμε και να λύσουμε την εξίσωση του Schrödinger στις τρεις περιοχές που το δυναμικό χωρίζει τον $x-$ άξονα. Στη συνέχεια θα εφαρμόσουμε τις συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της στα κοινά σημεία των διαφόρων περιοχών.

Περίπτωση $E > V_0$

Η εξίσωση του Schrödinger στις τρεις περιοχές $A,\ B$ και C γράφεται:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_A}{dx^2} = Eu_A \qquad \Rightarrow \quad u_A'' + k_0^2 u_A = 0, \quad k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{3.8α΄}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_B}{dx^2} + V_0 u_B = Eu_B \quad \Rightarrow \quad u_B'' + k^2 u_B = 0, \quad k^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \tag{3.8β΄}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_C}{dx^2} = Eu_C \qquad \Rightarrow \quad u_C'' + k_0^2 u_C = 0, \quad k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{3.8γ΄}$$

Οι λύσεις των τριών Δ.Ε δίνει την κυματοσυνάρτηση που είναι της μορφής:

$$u(x) = \begin{cases} u_A(x) = A_+ e^{ik_0x} + A_- e^{-ik_0x}, & x \le 0 \\ u_B(x) = B_+ e^{ikx} + B_- e^{-ikx}, & 0 \le x \le L \\ u_C(x) = C_+ e^{ik_0x} + C_- e^{-ik_0x}, & x \ge L \end{cases} \tag{3.9α΄}$$

Επειδή η εξίσωση του Schrödinger είναι γραμμική και ομογενής, αν πολλαπλασιάσουμε την ιδιοσυνάρτηση $u(x)$ με μια σταθερά, η συνάρτηση που προκύπτει είναι πάλι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή του Hamilton που ανήκει στην ίδια ιδιοτιμή. Αυτήν τη σταθερά μπορούμε να τη διαλέξουμε έτσι ώστε η αυθαίρετη σταθερά A_+ να είναι μονάδα. Διαφορετικά, η συνάρτηση $A_+ e^{ik_0x}$ που σχετίζεται με τη ροή των σωματιδίων της προσπίπτουσας δέσμης, μπορεί πάντα να εκλεγεί σ' ένα πείραμα έτσι ώστε $A_+ = 1$. Επίσης, επειδή δεχόμαστε ότι δεν υπάρχουν σωματίδια προσπίπτοντα στο φράγμα από δεξιά, θα έχουμε $C_- = 0$. Έτσι η κυματοσυνάρτηση (3.9α΄), θέτοντας $A_- = A$ και $C_+ = C$, γράφεται:

$$u(x) = \begin{cases} u_A(x) = e^{ik_0x} + A\, e^{-ik_0x}, & x \le 0 \\ u_B(x) = B_+ e^{ikx} + B_- e^{-ikx}, & 0 \le x \le L \\ u_C(x) = C\, e^{ik_0x}, & x \ge L \end{cases} \tag{3.9β΄}$$

Οι κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν στα προσπίπτοντα σωματίδια $u_I(x)$, στα ανακλώμενα σωματίδια $u_R(x)$, στα διερχόμενα σωματίδια $u_T(x)$ και τα αντίστοιχα ρεύματα πυκνότητας πιθανότητας είναι:

$$u_I(x) = e^{ik_0x}, \qquad u_R(x) = A\, e^{-ik_0x}, \qquad u_T(x) = C\, e^{ik_0x}$$

$$j_I = \frac{\hbar k_0}{m}, \qquad j_R = -\frac{\hbar k_0}{m}\,|A|^2, \qquad j_T = \frac{\hbar k_0}{m}\,|C|^2$$

Επομένως οι συντελεστές T και R των σχέσεων της (3.5) γράφονται:

$$T = |C|^2\,, \qquad R = |A|^2 \tag{3.10}$$

Ο προσδιορισμός των συντελεστών A και C γίνεται εφαρμόζοντας τις συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της πρώτης παραγώγου της, στα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού ($x = 0$ και $x = L$).

$$x = 0: \quad \begin{array}{lcl} u_A(0) = u_B(0) & \Rightarrow & 1 + A = B_+ + B_- \\ u'_A(0) = u'_B(0) & \Rightarrow & k_0(1 - A) = k\big(B_+ - B_-\big) \end{array} \tag{3.11α'}$$

$$x = L: \quad \begin{array}{lcl} u_B(L) = u_C(0) & \Rightarrow & B_+ \mathrm{e}^{ikL} + B_- \mathrm{e}^{-ikL} = C\, \mathrm{e}^{ik_0 L} \\ u'_B(0) = u'_C(0) & \Rightarrow & k\big(B_+ \mathrm{e}^{ikL} - B_- \mathrm{e}^{-ikL}\big) = k_0 C\, \mathrm{e}^{ik_0 L} \end{array} \tag{3.11β'}$$

Αν απαλείψουμε τους αγνώστους (συντελεστές) B_+ και B_- από τις παραπάνω εξισώσεις οδηγούμαστε σε σύστημα δύο εξισώσεων ως προς A και C. Η λύση αυτών δίνει:

$$A = \frac{(k_0^2 - k^2)(1 - \mathrm{e}^{i2kL})}{(k_0 + k)^2 - (k_0 - k)^2\, \mathrm{e}^{i2kL}}\,, \qquad C = \frac{4k_0 k\, \mathrm{e}^{i(k-k_0)L}}{(k_0 + k)^2 - (k_0 - k)^2\, \mathrm{e}^{i2kL}}$$

Λόγω της (3.10) οι συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης, μετά από λίγες πράξεις, βρίσκεται ότι είναι:

$$T = \frac{j_T}{j_I} = |C|^2 = \frac{4k_0^2 k^2}{4k_0^2 k^2 + \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2 kL} \tag{3.12α'}$$

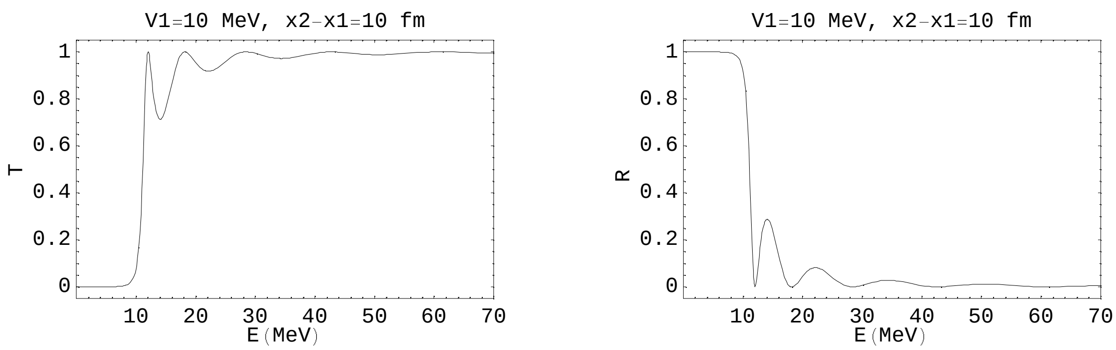
$$R = \left|\frac{j_R}{j_I}\right| = |A|^2 = \frac{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2 kL}{4k_0^2 k^2 + \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2 kL} \tag{3.12β'}$$

Από τις σχέσεις αυτές βλέπουμε αμέσως ότι: $T + R = 1$.

Αντίθετα με ότι περιμένουμε κλασικά, ο συντελεστής ανάκλασης R, είναι εν γένει διάφορος του μηδενός και επομένως υπάρχει εν γένει πιθανότητα διαφορετική του μηδενός το σωματίδιο να ανακλαστεί. Οι συντελεστές R και T παίρνουν τις τιμές $R = 0$ και $T = 1$, δηλαδή το φράγμα γίνεται τελείως διαφανές, όταν ισχύει:

$$kL = n\pi,\ \ n = 1, 2, 3, \ldots \quad \Rightarrow \quad \frac{p}{\hbar} L = n\pi \quad \Rightarrow \quad \frac{h/\lambda}{h/2\pi}\, L = n\pi \quad \Rightarrow \quad L = n\,\frac{\lambda}{2}$$

Δηλαδή έχουμε ένα είδος συντονισμού (δημιουργία στάσιμων κυμάτων) όταν το εύρος του φράγματος είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μισού μήκους κύματος κατά de Broglie. Η δίοδος των σωματιδίων μέσω του ορθογωνίου φράγματος δυναμικού, οδηγεί σε φαινόμενα συντονισμού, αγνώστου τύπου στην Κλασική Φυσική. Στο Σχ. 3.3 φαίνεται πως μεταβάλλεται οι συντελεστές T με και R με την ενέργεια.



Σχήμα 3.3: Οι συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης ως συναρτήσεις της ενέργειας, κατά τη σκέδαση ενός νουκλεονίου από ορθογώνιο φράγμα δυναμικού ύψους 10 MeV και εύρους 10 fm.

Περίπτωση $E < V_0$

Ο υπολογισμός των T και R σε αυτήν την περίπτωση γίνεται όπως και στην προηγούμενη. Η μόνη διαφορά είναι ότι στην εξίσωση του Schrödinger στην περιοχή B, σχέση (3.8β'), για τη σταθερά k ισχύει: $k^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} < 0$ και επομένως $k =$ φανταστικός αριθμός. Αν θέσουμε:

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = ik$$

η εξίσωση του Schrödinger και η αντίστοιχη λύση της στην περιοχή B του δυναμικού είναι:

$$u_B'' - k'^2 u_B = 0, \qquad u_B(x) = B_+ \mathrm{e}^{k'x} + B_- \mathrm{e}^{-k'x}$$

Οι σχέσεις (3.12α') και (3.12β') των συντελεστών T και R θα ισχύουν και στην περίπτωση που εξετάζεται εφόσον θέσουμε σε αυτές όπου $k = ik'$. Αυτό σημαίνει ότι στις σχέσεις (3.12α') και (3.12β') πρέπει όπου $(E - V_0)$ να θέσουμε $(V_0 - E)$ και όπου $\sin kL$ να θέσουμε $\sin(ik'L) = i \sinh k'L$. Έτσι οι σχέσεις (3.12α') και (3.12β') των συντελεστών T και R γράφονται:

$$T = \frac{j_T}{j_I} = |C|^2 = \frac{4k_0^2 k'^2}{4k_0^2 k'^2 + \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \sinh^2 k'L} \tag{3.13α'}$$

$$R = \left|\frac{j_R}{j_I}\right| = |A|^2 = \frac{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \sinh^2 k'L}{4k_0^2 k'^2 + \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \sinh^2 k'L} \tag{3.13β'}$$

Από τη σχέση (3.13α') παρατηρούμε ότι, $T \neq 0$ και επομένως υπάρχει ορισμένη πιθανότητα το σωματίδιο να διέλθει δια του φράγματος, αν και κλασικά μια τέτοια διέλευση είναι αδύνατη. Το φαινόμενο αυτό λέγεται **φαινόμενο σύραγγος**. Αυτό είναι σημαντικό εφόσον $k'L < 1$. Για αυτές τις τιμές του του $k'L$ ισχύει $\sinh^2 k'L \approx 0$ και επομένως $T \approx 1$.

Τέλος, μια προσεγγιστική έκφραση του συντελεστή διέλευσης μπορεί να βρεθεί όταν το εύρος L του φράγματος είναι μεγάλο και το ύψος του πολύ μεγαλύτερο της ενέργειας του σωματιδίου, $V_0 \gg E$. Σ' αυτήν την περίπτωση η μεταβλητή $k'L = L\sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ του υπερβολικού ημιτόνου είναι: $k'L \gg 1$, οπότε μπορούμε να γράψουμε:

$$\sinh k'L \simeq \frac{1}{2} \mathrm{e}^{k'L}$$

και ο συντελεστής διέλευσης παίρνει την προσεγγιστική μορφή:

$$T \approx 16 \, \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} \, \mathrm{e}^{-2k'L}$$

Παρατηρούμε ότι ο συντελεστής διέλευσης εξαρτάται εκθετικά από τις μεταβολές της ενέργειας του σωματιδίου και του εύρους του φράγματος. Αυτό σημαίνει ότι μικρές μεταβολές στην ενέργεια του σωματιδίου ή του εύρους του φράγματος έχουν ως αποτέλεσμα μεγάλες μεταβολές στο συντελεστή διέλευσης. Αυτή η χαρακτηριστική συμπεριφορά του συντελεστή διέλευσης παρατηρείται στην α διάσπαση των ραδιενεργών πυρήνων, όπου ο χρόνος ζωής (που σχετίζεται με την πιθανότητα διάσπασης) εξαρτάται εκθετικά από την ενέργεια του εκπεμπόμενου σωματιδίου α. Ενώ οι ενέργειες των εκπεμπομένων σωματιδίων μεταβάλλονται στην στενή περιοχή μερικών MeV (4 MeV έως 9 MeV) οι χρόνοι ζωής των ραδιενεργών πυρήνων εκτείνονται από 10^{-7} sec μέχρι 10^{10} έτη.

Στην περίπτωση ενός τυχαίου φράγματος δυναμικού, με $V(x) \neq 0$ στο διάστημα $[x_1, x_2]$, μπορεί να δειχθεί ότι η προσεγγιστική έκφραση του συντελεστή διέλευσης είναι:

$$T \approx \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{8m(V(x) - E)}\, dx \right]$$

που εμφανίζεται στη θεωρία της $\alpha-$διάσπασης.

3.3 Το φρέαρ δυναμικού απείρου βάθους

Σε αυτό το πρόβλημα θεωρούμε ένα σωματίδιο μάζας m μέσα στο δυναμικό (δυναμική ενέργεια) της μορφής:

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

Στις περιοχές $x < 0$ και $x > L$, όπου το δυναμικό είναι άπειρο, η κυματοσυνάρτηση είναι μηδέν. Στην περιοχή $0 < x < L$ η κυματοσυνάρτηση είναι λύση της εξίσωσης του Schrödinger:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}u(x) = 0, \qquad u''(x) + k_0^2 u(x) = 0, \quad k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{3.14α΄}$$

και ικανοποιεί τη συνθήκη συνέχειας της κυματοσυνάρτησης στα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού:

$$u(0) = 0, \qquad u(L) = 0 \tag{3.14β΄}$$

Η λύση της Δ.Ε. (3.14α΄) μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$u(x) = A\cos k_0 x + B\sin k_0 x \tag{3.14γ΄}$$

Λόγω της μορφής της λύσης και της πρώτης από τις οριακές συνθήκες έχουμε:

$$u(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A\cdot 1 + B\cdot 0 = 0 \quad \Rightarrow \quad A = 0$$

οπότε η λύση γράφεται:

$$u(x) = B\sin k_0 x$$

Λόγω της δεύτερης οριακής συνθήκης έχουμε:

$$u(L) = 0 \quad \Rightarrow \quad B\sin k_0 L = 0$$

Επειδή δεν μπορεί να ισχύει $B = 0$, γιατί τότε η λύση της Δ.Ε. θα ήταν μηδέν για κάθε x, πρέπει να ισχύει:

$$\sin k_0 L = 0 \quad \Rightarrow \quad k_0 L = n\pi, \ \ n = 0, \pm1, \pm2, \pm3\ldots \tag{3.15α΄}$$

Η σχέση στην οποία καταλήξαμε, επειδή $k_0^2 = 2mE/\hbar^2$, δίνει τις δυνατές τιμές της ενέργειας που μπορεί να έχει ένα σωματίδιο που βρίσκεται υπό την επίδραση του δυναμικού που εξετάζουμε. Οι δυνατές τιμές της ενέργειας είναι:

$$\boxed{E = E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots} \tag{3.15β΄}$$

Οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις είναι:

$$u_n(x) = B\sin\frac{n\pi x}{L}, \quad 0 \le x \le L$$

Η αυθαίρετη σταθερά B προσδιορίζεται με κανονικοποίηση της $u_n(x)$:

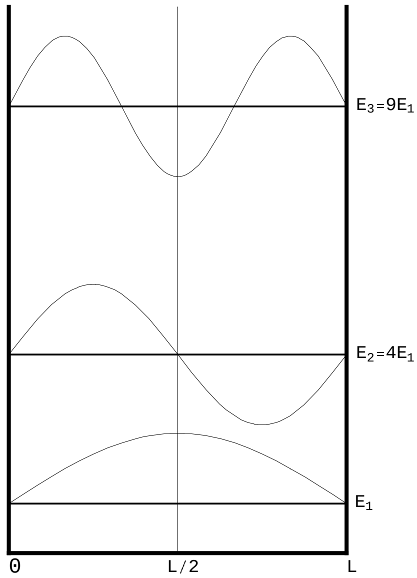
$$\int_0^L |u_n(x)|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad |B|^2\int_0^L \sin^2\frac{n\pi x}{L}dx = 1 \quad \Rightarrow \quad |B|^2 L/2 = 1 \quad \Rightarrow \quad B = \sqrt{2/L}$$

Επομένως οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις είναι:

$$u_n(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \quad x \geq L \\ \sqrt{\dfrac{2}{L}}\,\sin\left(\dfrac{n\pi x}{L}\right), & 0 \leq x \leq L \end{cases} \qquad n = 1, 2, 3 \ldots \tag{3.16}$$

Λόγω της απλότητας του προβλήματος που εξετάζεται μπορούμε να δούμε εύκολα κάποια βασικά χαρακτηριστικά που ισχύουν όχι μόνο στη συγκεκριμένη περίπτωση αλλά (ενδεχομένως με κάποιες τροποποιήσεις) και σε άλλα γενικότερα προβλήματα της Κβαντομηχανικής.

1. Η γραφική παράσταση των κυματοσυναρτήσεων των τριών πρώτων καταστάσεων φαίνεται στο Σχήμα 3.4. Είναι ενδιαφέρον να παρατηρήσουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές είναι εναλλάξ άρτιες ή περιττές συναρτήσεις ως προς το κέντρο του φρέατος. Αυτό είναι ένα γενικό συμπέρασμα όλων των δυναμικών $V(x)$ που είναι συμμετρικά ως προς κάποιο σημείο. Το συμπέρασμα αυτό στηρίζεται στην άσκηση 11 του εδαφίου Γ'.8, που λέει ότι όταν το δυναμικό είναι συμμετρικό ως προς την αρχή (εδώ είναι συμμετρικό ως προς το σημείο $x = L/2$), ο τελεστής του Hamilton αντιμετατίθεται με τον τελεστή της πάριτυ και επομένως έχουν ένα κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων. Επειδή οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της πάριτυ είναι άρτιες ή περιττές συναρτήσεις, θα πρέπει οι κυματοσυναρτήσεις (3.16) να είναι άρτιες ή περιττές συναρτήσεις ως προς το σημείο $x' = 0$, όπου $x' = x - L/2$. Από φυσική σκοπιά είναι λογικό να περιμένουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις θα είναι άρτιες ή περιττές ως προς το σημείο $x = L/2$, γιατί μόνο τότε η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο δεξιά ή αριστερά από αυτό το σημείο θα είναι ίδια, όπως επιβάλλει η κατοπτρική συμμετρία του δυναμικού.



Σχήμα 3.4: Το ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού απείρου ύψους, οι τρεις πρώτες ενεργειακές καταστάσεις και οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις. $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$.

2. Μια άλλη ενδιαφέρουσα παρατήρηση είναι ότι η κυματοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης δεν έχει κανέναν κόμβο (καμία ρίζα μέσα στο φρέαρ), της πρώτης διεγερμένης έχει έναν κόμβο, της δεύτερης δύο κλπ. Αυτό είναι ένα γενικό συμπέρασμα και συνδέεται με το **θεώρημα των κόμβων**, που λέει ότι *ο αριθμός των κόμβων (ριζών) αυξάνει κατά μονάδα καθώς προχωράμε από τη βασική κατάσταση (κανένας κόμβος) στις ανώτερες.* Το θεώρημα αυτό είναι πολύ χρήσιμο όταν λύνουμε αριθμητικά την εξίσωση του Schrödinger και δεν έχουμε κάποια σχέση για τις ιδιοτιμές της ενέργειας. Σ' αυτήν την περίπτωση μπορούμε να διαπιστώσουμε αν έχουν βρεθεί όλες οι ιδιοτιμές παρατηρώντας τον αριθμό των κόμβων των κυματοσυναρτήσεων.

3. Η ενέργεια της βασικής κατάστασης ($n = 1$) είναι:

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

Στην τιμή αυτής της ενέργειας μπορούμε να οδηγηθούμε χρησιμοποιώντας τη σχέση απροσδιοριστίας του Heisenberg, $\Delta x \Delta p \geqq \frac{\hbar}{2}$.

Η μέση τιμή της ενέργειας ενός σωματίδιο στο δυναμικό που εξετάζουμε είναι:

$$E = \langle \widehat{H} \rangle = \frac{\langle \widehat{p}^2 \rangle}{2m} + \underbrace{\langle V \rangle}_{=0} = \frac{\langle \widehat{p}^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \tag{3.17}$$

Χρησιμοποιήσαμε τη σχέση $(\Delta p)^2 = \langle \widehat{p}^2 \rangle - \langle \widehat{p} \rangle^2 = \langle \widehat{p}^2 \rangle$, επειδή για τις κυματοσυναρτήσεις καθορισμένης τιμής της ενέργειας ισχύει $\langle \widehat{p} \rangle = 0$ (βλέπε άσκηση 8 του εδαφίου 2.9).

Σύμφωνα με τη σχέση (3.17), η ενέργεια γίνεται ελάχιστη όταν το (Δp) γίνει ελάχιστο. Στο ελάχιστο Δp αντιστοιχεί το μέγιστο Δx, που δεν μπορεί να είναι μεγαλύτερο από το εύρος του δυναμικού, δηλαδή $\Delta x \simeq L$. Η αντικατάσταση αυτής της τιμής του Δx στην προσεγγιστική έκφραση της σχέσης της απροσδιοριστίας δίνει:

$$\Delta x \Delta p \simeq \hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta p \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{L}$$

Η αντικατάσταση της τιμής του Δp στη σχέση (3.17) δίνει:

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

Η τιμή του E_{min} είναι ίδια με την E_1 χωρίς τον παράγοντα π^2. Η παραπάνω διαδικασία είναι πολύ συνηθισμένη και μας δίνει μια προσεγγιστική τιμή της ενέργειας της βασικής κατάστασης στις περιπτώσεις που η λύση της εξίσωσης του Schrödinger είναι πολύπλοκη ή αδύνατη.

4. Ο νόμος κβάντωσης των ενεργειακών καταστάσεων είναι:

$$E_n = E_1 \cdot n^2 \quad (n = 1, 2, 3, , \ldots), \qquad E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

Δηλαδή, οι ενεργειακές στάθμες απομακρύνονται η μια από την άλλη καθώς προχωράμε από τη θεμελιώδη ($n = 1$) στις ανώτερες διεγερμένες καταστάσεις. Η κβάντωση των ενεργειακών καταστάσεων είναι εντονότερη όσο μικρότερη είναι η μάζα του σωματιδίου και όσο μικρότερη είναι η διάσταση μέσα στην οποία είναι εγκλωβισμένο το σωματίδιο. Επομένως δεν είναι σωστό να λέμε ότι η κβαντική συμπεριφορά της ύλης εμφανίζεται στα σωματίδια του μικρόκοσμου, αλλά πρέπει να λέμε ότι, η κβαντική συμπεριφορά της ύλης εμφανίζεται στα σωματίδια του μικρόκοσμου που είναι εγκλωβισμένα σε μικρές περιοχές του χώρου.

5. Η απόσταση δύο διαδοχικών ενεργειακών σταθμών και η αντίστοιχη σχετική ενεργειακή απόσταση είναι:

$$\begin{aligned} \Delta E_n &= E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}[(n+1)^2 - n^2] = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(2n+1) \\ &\simeq \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^2} n \qquad (\text{για μεγάλα } n) \qquad (3.18) \\ \frac{\Delta E_n}{E_n} &= \frac{2n+1}{n^2} \simeq \frac{2}{n} \qquad (\text{για μεγάλα } n) \qquad (3.19) \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι οι σχετικές αποστάσεις των διαδοχικών ενεργειακών σταθμών μικραίνουν (το ενεργειακό φάσμα γίνεται συνεχές) όταν $L \to \infty$ ή $m \to \infty$ ή $h \to 0$. Επίσης παρατηρούμε ότι $\lim\limits_{n \to \infty} \Delta E_n / E_n = 0$. Δηλαδή έχουμε την κλασική συμπεριφορά του σωματιδίου όχι μόνο όταν $L \to \infty$ ή $m \to \infty$ ή $h \to 0$, αλλά και για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς, σύμφωνα με την αρχή της αντιστοιχίας.

Ας δούμε πως μπορούν να χρησιμοποιηθούν αυτά σε ένα φυσικό πρόβλημα, στην αγωγιμότητα ορισμένων στερεών.

Όταν ένα ηλεκτρόνιο κινείται σε όλο το κρυσταλλικό δυναμικό ενός στερεού, η πιο χαρακτηριστική ιδιότητα του δυναμικού που αυτό "αντιλαμβάνεται", είναι η επιφάνεια του στερεού που το κρατά εγκλωβισμένο. Σε αυτήν την περίπτωση τα φρέατα δυναμικού των ατόμων του στερεού μπορούν να θεωρηθούν δευτερεύουσας σημασίας. Έτσι, σε μια πρώτη προσέγγιση, φαίνεται λογικό να αγνοήσουμε τα ατομικά φρέατα και να θεωρήσουμε ότι το ηλεκτρόνιο κινείται μέσα σε ένα άδειο κουτί. Οι υποθέσεις αυτές οδηγούν στο **πρότυπο του ελεύθερου ηλεκτρονίου** που, παρά την απλότητά του, παίζει έναν κεντρικό ρόλο στην περιγραφή της ηλεκτρονικής κίνησης σ' ένα στερεό.

Σύμφωνα με τη σχέση (3.18), οι ενεργειακές καταστάσεις του ελεύθερου ηλεκτρονίου σ' ένα στερεό είναι πολύ κοντά η μια με την άλλη με διαφορές ενεργειών της τάξης $\Delta E \approx nh^2/(mL^2) \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$, όπου L είναι ένα τυπικό μήκος του πλέγματος. Στην πράξη το L είναι μερικά εκατοστά και το n περίπου ίσο με τον αριθμό των ατόμων κατά μήκος μιας διάστασης του πλέγματος, τάξης 10^6. Έτσι, οι γειτονικές ενεργειακές καταστάσεις διαφέρουν μεταξύ τους κατά 10^{-11} eV. Επειδή η διαφορά αυτή είναι πολύ μικρότερη από μια τυπική θερμική ενέργεια (κατά τις θερμικές κρούσεις, σε θερμοκρασία δωματίου, ανταλλάσσεται ενέργεια τάξης $kT \approx 1/40$ eV) μπορούμε να θεωρήσουμε ότι αυτές αποτελούν ένα συνεχές φάσμα ενεργειών. Αν και η περαιτέρω μελέτη πρέπει να γίνει χρησιμοποιώντας τη στατιστική Fermi-Dirac, είναι εύκολο να συμπεράνουμε ότι, επειδή οι διαφορές των ενεργειών των γειτονικών καταστάσεων είναι πολύ μικρές, οι μεταπτώσεις μεταξύ των καταστάσεων γίνονται πολύ εύκολα με την επίδραση ενός εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου. Δηλαδή, σύμφωνα με το πρότυπο αυτό ένα στερεό είναι αγωγός του ηλεκτρισμού.

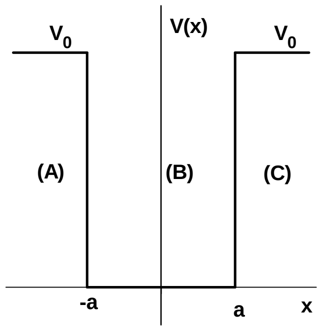
Η κύρια ανεπάρκεια αυτού του απλού προτύπου βρίσκεται στο γεγονός ότι όλα τα στερεά δεν είναι αγωγοί. Κάποια είναι μονωτές ή ημιαγωγοί. Η διαφορά αυτή θα πρέπει να οφείλεται στα φρέατα δυναμικού των ατόμων τα οποία αγνοήθηκαν στην παραπάνω μελέτη. Ένα βελτιωμένο πρότυπο της ηλεκτρονικής κίνησης στα στερεά, που περιλαμβάνει την περιοδικότητα των ατομικών δυναμικών, οδηγεί στις ενεργειακές ζώνες των στερεών.

3.4 Το φρέαρ δυναμικού πεπερασμένου βάθους

Θα εξετάσουμε την κίνηση σωματιδίου σε πηγάδι δυναμικού εύρους $2a$ και βάθους $V_0 > 0$ του Σχ. 3.5. Δηλαδή, της μορφής:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < -a \\ 0, & -a < x < a \\ V_0, & x > a \end{cases}$$

Η αρχή των αξόνων έχει παρθεί στο κέντρο του πυθμένα του δυναμικού για την αξιοποίηση της κατοπτρικής συμμετρίας του δυναμικού.



Σχήμα 3.5:

Όπως και στην περίπτωση του φράγματος δυναμικού, γράφουμε την εξίσωση του Schrödinger για τις περιοχές που το δυναμικό χωρίζει τον $x-$άξονα.

Η εξίσωση του Schrödinger στις τρεις περιοχές $A,\ B$ και C γράφεται:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_A(x)}{dx^2}+V_0u_A(x)=Eu_A(x)\quad\Rightarrow\quad u_A''-\gamma^2u_A=0,\quad \gamma^2=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\tag{3.20α΄}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_B(x)}{dx^2}=Eu_B(x)\quad\Rightarrow\quad u_B''+k_0^2u_B=0,\quad k_0^2=\frac{2mE}{\hbar^2}\tag{3.20β΄}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_C(x)}{dx^2}+V_0u_C(x)=Eu_C(x)\quad\Rightarrow\quad u_C''-\gamma^2u_C=0\tag{3.20γ΄}$$

Οι λύσεις των τριών Δ.Ε δίνει την κυματοσυνάρτηση που είναι της μορφής:

$$u(x)=\begin{cases}u_A(x)=A_+\mathrm{e}^{\gamma x}+A_-\mathrm{e}^{-\gamma x}, & x\leq -a\\ u_B(x)=B_+\cos k_0x+B_-\sin k_0x, & -a\leq x\leq a\\ u_C(x)=C_+\mathrm{e}^{\gamma x}+C_-\mathrm{e}^{-\gamma x}, & x\geq a\end{cases}\tag{3.21α΄}$$

Επειδή η $u_A(x)$ δεν είναι φραγμένη για $x\to-\infty$ (λόγω του όρου $\mathrm{e}^{-\gamma x}$), πρέπει να θέσουμε $A_-=0$ και επειδή η $u_C(x)$ δεν είναι φραγμένη για $x\to+\infty$ (λόγω του όρου $\mathrm{e}^{\gamma x}$) πρέπει να θέσουμε $C_+=0$. Τέλος, επειδή στις περιοχές A και C εμφανίζονται μόνο οι συναρτήσεις $\mathrm{e}^{\gamma x}$ και $\mathrm{e}^{-\gamma x}$, αντίστοιχα, αν θέσουμε $A_+=A$ και $C_-=C$, η κυματοσυνάρτηση (3.21α΄) γράφεται:

$$u(x)=\begin{cases}u_A(x)=A\mathrm{e}^{\gamma x}, & x\leq -a\\ u_B(x)=B_+\cos k_0x+B_-\sin k_0x, & -a\leq x\leq a\\ u_C(x)=C\mathrm{e}^{-\gamma x}, & x\geq a\end{cases}\tag{3.21β΄}$$

Λόγω της συμμετρίας του δυναμικού $V(x)=V(-x)$ θα εξετάσουμε πρώτα την περίπτωση των αρτίων κυματοσυναρτήσεων και στη συνέχεια των περιττών.

Άρτιες καταστάσεις

Για να είναι η κυματοσυνάρτηση άρτια πρέπει να θέσουμε $B_-=0$ και $C=A$. Έτσι οι άρτιες κυματοσυναρτήσεις είναι:

$$u(x)=\begin{cases}u_A(x)=A\mathrm{e}^{\gamma x}, & x\leq -a\\ u_B(x)=B\cos k_0x, & -a\leq x\leq a\\ u_C(x)=A\mathrm{e}^{-\gamma x}, & x\geq a\end{cases}\tag{3.22}$$

Επειδή η κυματοσυνάρτηση και η παράγωγός της είναι παντού συνεχείς συναρτήσεις, πρέπει να εξετάσουμε τις συνθήκες συνέχειας εκεί που αλλάζει μορφή η κυματοσυνάρτηση, δηλαδή στα σημεία ασυνέχειας του δυναμικού $x=-a$ και $x=a$. Λόγω της συμμετρίας του δυναμικού οι συνθήκες αυτές είναι ταυτόσημες στα δύο σημεία, οπότε αρκεί να εξεταστούν σε ένα μόνο από τα δύο σημεία ασυνέχειας, έστω το $x=a$. Στο σημείο αυτό πρέπει να ισχύει:

$$u_B(a)=u_C(a)\quad\Rightarrow\quad B\cos k_0a=A\mathrm{e}^{-\gamma a}\tag{3.23α΄}$$

$$u_B'(a)=u_C'(a)\quad\Rightarrow\quad -Bk_0\sin k_0a=-A\gamma\mathrm{e}^{-\gamma a}\tag{3.23β΄}$$

Η διαίρεση κατά μέλη των δύο εξισώσεων δίνει:

$$\boxed{\tan k_0a=\frac{\gamma}{k_0}}\tag{3.24}$$

Επειδή $\gamma=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ και $k_0=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, συμπεραίνουμε ότι οι δυνατές τιμές της ενέργειας των δεσμίων αρτίων καταστάσεων του σωματιδίου προκύπτουν από τη λύση της εξίσωσης (3.24). Η εξίσωση αυτή, που είναι υπερβατική, μπορεί να λυθεί είτε αριθμητικά είτε γραφικά.

Περιττές καταστάσεις

Για να είναι η κυματοσυνάρτηση (4.49β΄) περιττή, πρέπει να θέσουμε $B_+ = 0$ και $C = -A$. Έτσι οι περιττές κυματοσυναρτήσεις είναι:

$$u(x) = \begin{cases} u_A(x) = A\mathrm{e}^{\gamma x}, & x \leq -a \\ u_B(x) = B\sin k_0 x, & -a \leq x \leq a \\ u_C(x) = -A\mathrm{e}^{-\gamma x}, & x \geq a \end{cases} \tag{3.25}$$

Οι συνθήκες συνέχειας στο σημείο $x = a$ δίνουν:

$$u_B(a) = u_C(a) \qquad \Rightarrow \qquad B\sin k_0 a = -A\mathrm{e}^{-\gamma a} \tag{3.26α΄}$$

$$u'_B(a) = u'_C(a) \qquad \Rightarrow \qquad Bk_0\cos k_0 a = A\gamma\mathrm{e}^{-\gamma a} \tag{3.26β΄}$$

Η διαίρεση κατά μέλη των δύο εξισώσεων δίνει:

$$\boxed{\cot k_0 a = -\frac{\gamma}{k_0}} \tag{3.27}$$

Η εξίσωση αυτή δίνει τις δυνατές τιμές της ενέργειας των δεσμίων περιττών καταστάσεων. Αυτή έχει λύσεις (αν έχει) μόνο για διακεκριμένες τιμές της ενέργειας. Η (3.27), όπως και η αντίστοιχη εξίσωση των αρτίων καταστάσεων, λύνεται αριθμητικά είτε γραφικά.

Σημείωση 1. Οι δυνατές τιμές της ενέργειας που βρίσκονται από τη λύση των υπερβατικών εξισώσεων αντικαθίστανται στην εξίσωση (3.23α΄) των αρτίων καταστάσεων ή στην εξίσωση (4.50α΄) των περιττών καταστάσεων και προσδιορίζεται η αυθαίρετη σταθερά B ως συνάρτηση της σταθεράς A. Έτσι οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις έχουν μια μόνο αυθαίρετη σταθερά, την A, που προσδιορίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης της κυματοσυνάρτησης.

Σημείωση 2. Στην αριθμητική ή γραφική λύση ενός προβλήματος είναι αναγκαίο να χρησιμοποιούνται οι "φυσικές" μονάδες μέτρησης της ενέργειας και του μήκους, έτσι ώστε τα διάφορα μεγέθη να μην παριστάνονται ούτε με πολύ μεγάλους ούτε με πολύ μικρούς αριθμούς. Διαφορετικά θα έχουμε ανακρίβειες στους αριθμητικούς υπολογισμούς. Αν οι αποστάσεις και οι ενέργειες μετρούνται με τις αυθαίρετες μονάδες L_0 και E_0, αντίστοιχα, δηλαδή $x = \tilde{x}L_0$ και $E = \tilde{E}E_0$ τότε η εξίσωση του Schrödinger) γράφεται:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\big[E - V(x)\big]u(x) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{1}{L_0^2}\frac{d^2u}{d\tilde{x}^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_0\big[\tilde{E} - \tilde{V}(\tilde{x})\big]u(\tilde{x}) = 0$$

Η τελευταία εξίσωση, θέτοντας $\tilde{x} \to x$, $\tilde{E} \to E$ και $\tilde{V} \to V$, γράφεται:

$$\frac{d^2u}{\mathrm{d}x^2} + C\big[E - V(x)\big]u(x) = 0 \tag{3.28α΄}$$

όπου τώρα τα x, E και $V(x)$ είναι αδιάστατα και η σταθερά C είναι:

$$C = \frac{2mE_0L_0^2}{\hbar^2} = \frac{2(mc^2)E_0L_0^2}{(\hbar c)^2} \tag{3.28β΄}$$

Στην Ατομική Φυσική χρησιμοποιούνται οι μονάδες **nm** και **Å** για το μήκος και **eV** για την ενέργεια. Οι αντίστοιχες μονάδες στην Πυρηνική Φυσική είναι **fm** και **MeV**

$$1\ \mathrm{nm} = 10\ \text{Å} = 10^{-9}\ \mathrm{m} = 10^{-7}\ \mathrm{cm}, \quad 1\ \mathrm{fm} = 10^{-15}\ \mathrm{m} = 10^{-13}\ \mathrm{cm}$$

$$1\ \mathrm{eV} = 1,602177 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{J}, \quad 1\ \mathrm{MeV} = 10^6\ \mathrm{eV}$$

Επειδή

$$m_e c^2 \simeq 0,511\,\mathrm{MeV} = 5,11 \cdot 10^5\,\mathrm{eV}, \qquad \hbar c = 197,33\,\mathrm{MeV\,fm} = 1973,3\,\mathrm{eV\,Å}$$

η σταθερά C, ανάλογα με το φυσικό σύστημα, παίρνει τις τιμές:

$$\begin{array}{llllll}
\text{Για} & m = m_e, & [L_0] = \text{Å}, & [E] = \mathrm{eV} & \text{τότε} & C = 0,26246 \\
\text{Για} & m = m_e, & [L_0] = \mathrm{nm}, & [E] = \mathrm{eV} & \text{τότε} & C = 26,246 \\
\text{Για} & m = m_p \simeq m, & [L_0] = \mathrm{fm}, & [E] = \mathrm{MeV} & \text{τότε} & C = 0,0482
\end{array}$$

Γραφική μέθοδος

Η γραφική λύση των εξισώσεων ιδιοτιμών (3.24) και (3.27) μπορεί να γίνει ως εξής: Τα δύο μέλη της εξίσωσης (3.24), για παράδειγμα, είναι συναρτήσεις της ενέργειας. Τα κοινά σημεία των γραφικών παραστάσεων των δύο συναρτήσεων αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές της ενέργειας των αρτίων καταστάσεων. Η γραφική μέθοδος γίνεται απλούστερη αν χρησιμοποιηθούν οι νέες συναρτήσεις:

$$\eta = a\sqrt{C(V_0 - E)} \qquad \text{και} \qquad \xi = a\sqrt{CE} \quad (\xi \geq 0,\ \eta \geq 0) \tag{3.29}$$

Για τις οποίες ισχύει η σχέση:

$$\xi^2 + \eta^2 = R^2 \quad \text{όπου} \quad R^2 = Ca^2 V_0 \tag{3.30}$$

Με τη βοήθεια των ξ και η οι εξισώσεις ιδιοτιμών (3.24) και (3.27) γράφονται, αντίστοιχα:

$$\eta_{even} = \xi \tan\xi \qquad \text{και} \qquad \eta_{odd} = -\xi\cot\xi \tag{3.31}$$

Οι λύσεις ως προς E των εξισώσεων (3.31) είναι εκείνες οι τιμές των $\xi = \xi(E)$ και $\eta = \eta(E)$ των σχέσεων (3.29) που ικανοποιούν τις εξισώσεις (3.31). Οι ιδιοτιμές της ενέργειας μπορούν να βρεθούν από τα σημεία τομής των γραφικών παραστάσεων των συναρτήσεων:

$$\eta(\xi) = \sqrt{R^2 - \xi^2} \qquad \text{και} \qquad \eta_{even}(\xi) = \xi\tan\xi \qquad \text{για τις άρτιες καταστάσεις} \tag{3.32}$$

$$\eta(\xi) = \sqrt{R^2 - \xi^2} \qquad \text{και} \qquad \eta_{odd}(\xi) = -\xi\cot\xi \qquad \text{για τις περιττές καταστάσεις} \tag{3.33}$$

Παράδειγμα. Οι γραφικές παραστάσεις των παραπάνω συναρτήσεων μπορούν να γίνουν σχετικά εύκολα αν χρησιμοποιήσουμε κάποιο πρόγραμμα συμβολικού προγραμματισμού όπως η *Mathematica*. Αν ένα ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε ορθογωνίου φρέατος δυναμικού με παραμέτρους $a = 0,2\,\mathrm{nm}$ και $V_0 = 300\,\mathrm{eV}$, οι εντολές που θα μας οδηγήσουν στις γραφικές παραστάσεις είναι:

α) Ορίζουμε τις σταθερές του προβλήματος

```
c = 26.247; v0 = 300; L = 0.2; radius = Sqrt[c * v0 * L^2];
```

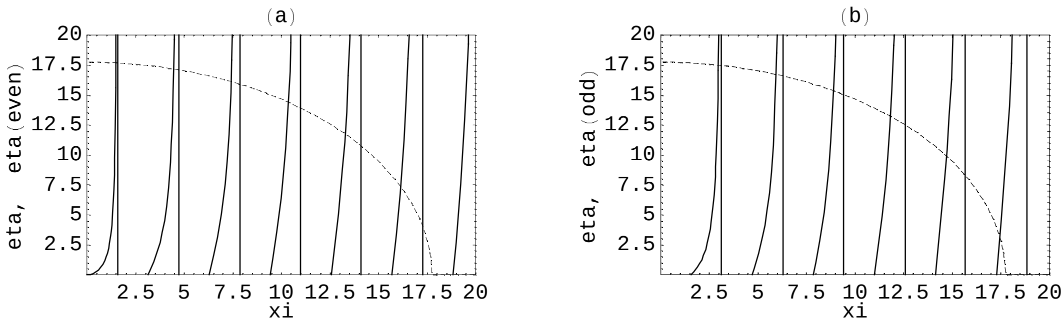
β) Με τη βοήθεια των σχέσεων (3.32) και (3.33) ορίζουμε τις συναρτήσεις $\eta(\xi)$, $\eta_{even}(\xi)$ και $\eta_{odd}(\xi)$

```
eta[xi_] := Sqrt[radius^2 - xi^2]/; xi <= radius;
eta[xi_] := 0/; xi > radius;
etaEven[xi_] := xi * Tan[xi];
etaOdd[xi_] := -xi * Cot[xi];
```

γ) Χρησιμοποιούμε τις κατάλληλες επιλογές της εσωτερικής εντολής Plot για να πάρουμε τις γραφικές παραστάσεις των ζευγών των συναρτήσεων $\eta(\xi)$, $\eta_{even}(\xi)$ και $\eta(\xi)$, $\eta_{odd}(\xi)$.

```
EvenState = Plot[ {eta[xi], etaEven[xi]}, {xi, 0, 20},
                  PlotRange → {{0,20}, {0,20}}, Frame → True,
                  PlotStyle → {{Dashing[{0.02}]}, {Thickness[0.004]}},
                  FrameLabel → {"xi", "eta, eta(even)" },
                  PlotLabel →" (a)"  ];
OddState = Plot[ {eta[xi], etaOdd[xi]}, {xi, 0, 20},
                 PlotRange → {{0,20}, {0,20}}, Frame → True,
                 PlotStyle → {{Dashing[{0.02}]}, {Thickness[0.004]}},
                 FrameLabel → {"xi", "eta, eta(odd)" },
                 PlotLabel →" (b)"  ];
Show[ GraphicsArray[{EvenState, OddState}] ]
```

Η τελευταία εντολή, που περιέχει τις εσωτερικές εντολές Show και GraphicsArray δίνουν τη μια γραφική παράσταση δίπλα στην άλλη όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.6.



Σχήμα 3.6: Γραφική λύση των εξισώσεων (3.32) (Σχήμα a) και (3.33) (Σχήμα b) για τις επιτρεπτές τιμές της ενέργειας του ηλεκτρονίου στο ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού με παραμέτρους $V_0 = 300$ eV και $2L = 0.4$ nm. Οι συνεχείς καμπύλες είναι οι γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων $\eta_{even}(\xi) = \xi \tan\xi$ και $\eta_{odd}(\xi) = -\xi\cot\xi$, ενώ οι διακεκομμένες είναι της συνάρτησης $\eta(\xi) = \sqrt{R^2 - \xi^2}$.

Παρατηρούμε ότι υπάρχουν 6 σημεία τομής στο Σχήμα 3.6(a) και άλλα τόσα στο 3.6(b). Δηλαδή, όταν $V_0 = 300$ eV και $L = 0.2$ nm υπάρχουν 12 δέσμιες καταστάσεις του ηλεκτρονίου, 6 άρτιες και 6 περιττές.

3.5 Ο αρμονικός ταλαντωτής

Ο αρμονικός ταλαντωτής είναι ένα υλικό σημείο μάζας m που υπόκειται σε δύναμη ανάλογη της απομάκρυνσής του από ένα ελκτικό κέντρο:

$$F = -kx = m\frac{d^2x}{dt^2}\,, \quad k = \text{σταθερά} \qquad (3.34α')$$

με δυναμική ενέργεια που είναι μια παραβολή:

$$V(x) = \frac{1}{2}\,kx^2 \qquad (3.34β')$$

Το υλικό σημείο εκτελεί αρμονική ταλάντωση:

$$x(t) = A\sin\omega t + B\cos\omega t = C\sin(\omega t + \varphi), \quad \omega = 2\pi\nu = \sqrt{k/m} \tag{3.34γ΄}$$

Ο αρμονικός ταλαντωτής παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον, αν και είναι μια ιδεατή κατάσταση, επειδή αποτελεί την πρώτη προσέγγιση τυχαίου δυναμικού στην περιοχή ενός σημείου ευσταθούς ισορροπίας. Πράγματι, αν το σημείο x_0 είναι σημείο ευσταθούς ισορροπία και αναπτύξουμε τη συνάρτηση του δυναμικού κατά Taylor, στην περιοχή του σημείου x_0, θα έχουμε:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots \tag{3.34δ΄}$$

Επειδή στο x_0 η $V(x)$ έχει ελάχιστο, ισχύει: $V'(x_0) = 0$ και $V''(x_0) > 0$. Έτσι, αν το x_0 εκλεγεί ως αρχή των συντεταγμένων και το $V(x_0)$ ως αρχή της κλίμακας του δυναμικού, η (3.34δ΄) γράφεται:

$$V(x) \approx \frac{1}{2}V''(x_0)x^2 \tag{3.34ε΄}$$

Εν δυνάμει, κάθε ταλαντούμενη κίνηση, με μικρό πλάτος ταλάντωσης, μπορεί να προσεγγιστεί με αρμονική ταλάντωση. Η προσέγγιση αυτή βρίσκει μεγάλη εφαρμογή στη Μοριακή Φυσική (ταλαντώσεις ατόμων σε διατομικό μόριο), στην Πυρηνική Φυσική (υπόδειγμα φλοιών αρμονικού ταλαντωτή). Επίσης η συμπεριφορά πολλών συνεχών συστημάτων, όπως του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου σε κοιλότητα και των δονήσεων ελαστικού μέσου μπορούν να περιγραφούν με επαλληλία απείρων στο πλήθος αρμονικών ταλαντωτών. Η κβάντωση αυτών των συστημάτων, ανάγεται στη κβάντωση πολλών αρμονικών ταλαντωτών διαφόρων συχνοτήτων. Έτσι τα αποτελέσματα της Κβαντομηχανικής μελέτης του αρμονικού ταλαντωτή χρησιμοποιούνται στη Θεωρία πεδίων, στη Φυσική της Στερεάς Κατάστασης κλπ.

Λόγω της σπουδαιότητας του προβλήματος του αρμονικού ταλαντωτή θα βρούμε τις ιδιοτιμές και της ιδιοσυναρτήσεις του με δύο τρόπους. Ο ένας είναι αναλυτικός και ο άλλος αλγεβρικός.

3.5.1 Λύση της εξίσωσης του Schrödinger

Για την εύρεση των ενεργειακών ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του αρμονικού ταλαντωτή ξεκινάμε από την εξίσωση του Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{du^2(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2u(x) = Eu(x) \tag{3.35α΄}$$

με οριακές συνθήκες:

$$u(-\infty) = 0, \qquad u(+\infty) = 0 \tag{3.35β΄}$$

Πριν ξεκινήσουμε τη λύση της Δ.Ε. (3.35α΄) είναι χρήσιμο να γίνουν οι παρακάτω παρατηρήσεις: Ο τελεστής $\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$ παραμένει αναλλοίωτος σε αντιστροφή των συντεταγμένων $(x \to -x)$, οπότε (βλέπε άσκηση 11 του εδαφίου Γ΄.8) ισχύει $\left[\widehat{H}, \widehat{\Pi}\right] = 0$. Επομένως, επειδή σε δέσμια μονοδιάστατα προβλήματα οι ιδιοτιμές του $\widehat{H}$ δεν είναι εκφυλισμένες, οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις έχουν καθορισμένη ισοτιμία (parity), δηλαδή είναι ή άρτιες ή περιττές συναρτήσεις. Επίσης, οι συντελεστές της Δ.Ε. (3.35α΄) είναι συναρτήσεις και επομένως δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος που εφαρμόζεται όταν οι συντελεστές είναι σταθερές. Μια γενική μέθοδος που χρησιμοποιείται σε τέτοιες Δ.Ε. είναι η αναζήτηση λύσης υπό μορφή δυναμοσειράς (ή γενικευμένης δυναμοσειράς). Η μέθοδος αυτή γίνεται πιο διαφανής αν απλοποιήσουμε την έκφραση της Δ.Ε. (3.35α΄) χρησιμοποιώντας αδιάστατες μεταβλητές για την απόσταση και την ενέργεια. Γι' αυτόν το σκοπό εισάγουμε την αδιάστατη μεταβλητή:

$$\xi = \alpha x$$

οπότε η Δ.Ε. γράφεται (3.35α΄)

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \Big(\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{1}{\alpha^2} - \frac{mk}{\hbar^2}\frac{1}{\alpha^4}\xi^2\Big)u(\xi) = 0 \tag{3.36}$$

Αν διαλέξουμε την παράμετρο α ώστε:

$$\frac{mk}{\hbar^2}\frac{1}{\alpha^4} = 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha = \Big(\frac{mk}{\hbar^2}\Big)^{1/4} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\alpha = \Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{1/2}} \tag{3.37α΄}$$

και θέσουμε:

$$\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{1}{\alpha^2} = \varepsilon \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar}\Big(\frac{m}{k}\Big)^{1/2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega/2}} \tag{3.37β΄}$$

η Δ.Ε. (3.36) και οι αντίστοιχες οριακές συνθήκες γράφονται:

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \big(\varepsilon - \xi^2\big)u(\xi) = 0, \qquad u(-\infty) = u(\infty) = 0 \tag{3.38}$$

όπου τώρα η παράμετρος ε μετρά την ενέργεια σε μονάδες $\frac{\hbar\omega}{2}$ και η μεταβλητή ξ μετρά τις αποστάσεις σε μονάδες $1/\alpha$, όπου $\alpha = \big(m\omega/\hbar\big)^{1/2}$.

Στη συνέχεια θα προσπαθήσουμε να λύσουμε τη Δ.Ε. (3.38) σε δύο βήματα. Στο πρώτο βήμα θα βρούμε ένα μετασχηματισμό που ανάγει τη Δ.Ε. (3.38) σε μια άλλη που μπορεί να λυθεί με τη μέθοδο των δυναμοσειρών και στο δεύτερο βήμα θα λύσουμε τη Δ.Ε. που θα προκύψει.

1ο βήμα

Μια μέθοδος λύσης των Δ.Ε. 2ης τάξης με μη σταθερούς συντελεστές, κάτω από ορισμένες προϋποθέσεις, είναι η αναζήτηση λύσης υπό μορφή δυναμοσειράς:

$$u(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \xi^n, \qquad |\xi| < R \tag{3.39}$$

Η αντικατάσταση της (3.39) στη Δ.Ε. (3.38) οδηγεί σε μια σχέση μεταξύ των συντελεστών C_n της δυναμοσειράς που λέγεται αναδρομική σχέση. Επειδή η αναδρομική σχέση που προκύπτει στην παρούσα περίπτωση, δεν οδηγεί σε "αναλυτική έκφραση" της $u(\xi)$, προσπαθούμε να βρούμε ένα μετασχηματισμό που ανάγει τη Δ.Ε. (3.38) σε μια άλλη που οδηγεί σε πιο εύχρηστη αναδρομική σχέση των συντελεστών. Συχνά, ο μετασχηματισμός αυτός βρίσκεται εξετάζοντας τη συμπεριφορά της λύσης σε κάποιο ή κάποια ιδιάζοντα σημεία της Δ.Ε. Στην περίπτωση που εξετάζουμε, ένα ιδιάζον σημείο είναι το $\xi = \infty$. Έτσι, εξετάζουμε τη συμπεριφορά της λύσης της Δ.Ε. (3.38) για $\xi \to \infty$. Επειδή για $\xi \gg 1$ η παράμετρος ε είναι αμελητέα σε σχέση με το ξ^2, η Δ.Ε. (3.38) στην περιοχή του σημείου $\xi = \infty$ γράφεται:

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 u(\xi) = 0, \qquad u(-\infty) = 0, \quad u(\infty) = 0 \tag{3.40}$$

Εύκολα μπορούμε να ελέγξουμε ότι η συνάρτηση $\mathrm{e}^{\lambda\xi^2}$ ικανοποιεί προσεγγιστικά (για πολύ μεγάλα ξ) τη Δ.Ε., εφόσον $\lambda = \pm\frac{1}{2}$. Μόνο όμως η τιμή $\lambda = -\frac{1}{2}$ δίνει προσεγγιστική λύση που μηδενίζεται στο σημείο $\xi = \infty$.

Τα παραπάνω μας οδηγούν να εξετάσουμε λύσεις της Δ.Ε. (3.38) της μορφής:

$$u(\xi) = H(\xi)\, \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{3.41α'}$$

όπου $H(\xi)$ μια αναλυτική συνάρτηση:

$$H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k, \qquad |\xi| < R \tag{3.41β'}$$

Η ακτίνα σύγκλισης R μπορεί να βρεθεί με το κριτήριο του d' Alembert, αφού πρώτα μπορέσουμε να βρούμε τους συντελεστές a_k.

Άσκηση. Να δειχθεί ότι η αντικατάσταση της $u(\xi)$ από τη σχέση (3.41α') στη Δ.Ε. (3.38) δίνει:

$$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\varepsilon - 1)H(\xi) = 0 \tag{3.42}$$

Σύμφωνα με την παραπάνω άσκηση, με το μετασχηματισμό (3.41α') η Δ.Ε.(3.38) μετασχηματίζεται στη Δ.Ε. (3.42) που λέγεται **Δ.Ε. του Hermite**.

2ο βήμα

Η Δ.Ε. του Hermite λύνεται με αντικατάσταση στη Δ.Ε. (3.42) της $H(\xi)$ από τη δυναμοσειρά της (3.41β'). Η αντικατάσταση αυτή, επειδή:

$$H'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} \quad \text{και} \quad H''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2}$$

δίνει:

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2k a_k \xi^k + \sum_{k=0}^{\infty} (\varepsilon - 1) a_k \xi^k = 0 \tag{3.43α'}$$

Επειδή η πρώτη δυναμοσειρά μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2} = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2} \underbrace{=}_{k-2=k'} \sum_{k'=0}^{\infty} (k'+2)(k'+1) a_{k'+2} \xi^{k'}$$

η εξίσωση (3.43α') γράφεται:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \Big[(k+1)(k+2) a_{k+2} + (\varepsilon - 1 - 2k) a_k \Big] \xi^k = 0 \tag{3.43β'}$$

Επειδή η δυναμοσειρά (3.43β') είναι μηδέν για κάθε ξ, πρέπει οι συντελεστές όλων των δυνάμεων του ξ να είναι μηδέν. Δηλαδή:

$$\boxed{a_{k+2} = \frac{-\varepsilon + 2k + 1}{(k+1)(k+2)}\, a_k, \qquad k = 0, 1, 2, 3, \ldots} \tag{3.44}$$

Η αναδρομική σχέση στην οποία καταλήξαμε συνδέει τους συντελεστές με άρτιο δείκτη $(k = 2m)$ μεταξύ τους και τους συντελεστές με περιττό δείκτη $(k = 2m + 1)$ μεταξύ τους. Δηλαδή μπορούμε να γράψουμε:

$$a_{2m+2} = \frac{-\varepsilon + 4m + 1}{(2m+1)(2m+2)}\, a_{2m}, \quad a_{2m+3} = \frac{-\varepsilon + 4m + 3}{(2m+2)(2m+3)}\, a_{2m+1}, \quad m = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{3.45}$$

Από την αναδρομική σχέση με τους άρτιους δείκτες βλέπουμε ότι αν ορίσουμε αυθαίρετα το συντελεστή a_0, όλοι οι άλλοι συντελεστές με άρτιο δείκτη μπορούν να βρεθούν:

$$a_2 = \frac{-\varepsilon+1}{1\cdot 2}\,a_0, \qquad a_4 = \frac{-\varepsilon+5}{3\cdot 4}\,a_2 = \frac{(-\varepsilon+5)(-\varepsilon+1)}{1\cdot 2\cdot 3\cdot 4}\,a_0 \quad \text{κλπ}$$

Όμοια, αν ορίσουμε αυθαίρετα το συντελεστή a_1, όλοι οι άλλοι συντελεστές με περιττό δείκτη μπορούν να προσδιοριστούν.

Γενικά, η δυναμοσειρά με την οποία παριστάνεται η λύση $H(\xi)$ της Δ.Ε. (3.42) γράφεται:

$$H(\xi) = a_0 H_{even}(\xi) + a_1 H_{odd}(\xi) \tag{3.46α'}$$

όπου a_0 και a_1 αυθαίρετες σταθερές και

$$H_{even}(\xi) = \sum_{m=0} \tilde{a}_{2m}\xi^{2m} \quad \text{και} \quad H_{odd}(\xi) = \sum_{m=0} \tilde{a}_{2m+1}\xi^{2m+1} \tag{3.46β'}$$

Οι συντελεστές $\tilde{a}_{2m}$ και $\tilde{a}_{2m+1}$ είναι οι συντελεστές a_{2m} και a_{2m+1} χωρίς τις αυθαίρετες σταθερές a_0 και a_1. Η συνάρτηση της σχέσης (3.46α') είναι η γενική λύση της Δ.Ε. (3.42) αφού έχει δύο αυθαίρετες σταθερές όπως συμβαίνει στις Δ.Ε. 2ης τάξης. Οι συναρτήσεις $H_{even}(\xi)$ και $H_{odd}(\xi)$ είναι οι δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις της Δ.Ε. (3.42).

Επειδή ενδιαφερόμαστε για τις λύσεις $u(\xi) = H(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ της Δ.Ε. (3.38) πρέπει να βρούμε πως συμπεριφέρονται οι σειρές της (3.46β') για $\xi \to \infty$. Για $\xi \to \infty$ η συμπεριφορά των δυναμοσειρών καθορίζεται από τους συντελεστές με μεγάλες τιμές του βωβού δείκτη των δυναμοσειρών ή διαφορετικά από το λόγο δύο διαδοχικών όρων των δυναμοσειρών για μεγάλες τιμές του βωβού δείκτη. Επειδή οι συντελεστές και των δύο δυναμοσειρών προκύπτουν από την ίδια αναδρομική σχέση (3.44), ο λόγος δύο διαδοχικών όρων είναι:

$$\frac{a_{k+2}\xi^{k+2}}{a_k\xi^k} = \frac{-\varepsilon+2k+1}{(k+1)(k+2)}\,\xi^2 \approx \frac{2}{k}\,\xi^2 \approx \frac{1}{k}\,\xi^2 \qquad \text{για} \quad k \gg 1$$

Αλλά $\frac{1}{k}\,\xi^2$ είναι ο λόγος δύο διαδοχικών όρων της συνάρτησης e^{ξ^2}. Δηλαδή, οι συναρτήσεις $H_{even}(\xi)$ και $H_{odd}(\xi)$ συμπεριφέρονται προσεγγιστικά για πολύ μεγάλες τιμές του $|\xi|$ όπως η συνάρτηση e^{ξ^2}. Επομένως, η συνάρτηση $u(\xi) = H(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \approx \mathrm{e}^{+\xi^2/2}$ για $\xi \to \pm\infty$, δεν μηδενίζεται για $\xi \to \pm\infty$.

Υπάρχει μόνο ένας τρόπους να έχουμε την επιθυμητή συμπεριφορά της $u(\xi)$, η δυναμοσειρά της $H(\xi)$ να τερματίζεται και να γίνεται πολυώνυμο. Αυτό συμβαίνει όταν υπάρχει κάποια μέγιστη τιμή του k, έστω $k = n$ για την οποία ισχύει $a_{n+2} = 0$. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα **ή** η σειρά $H_{even}(\xi)$ **ή** η σειρά $H_{odd}(\xi)$ να τερματίζεται. Για την άλλη σειρά πρέπει να δεχθούμε ότι η αντίστοιχη αυθαίρετη σταθερά είναι μηδέν. Δηλαδή:

$$\begin{aligned}
&\text{ή} \quad a_1 = 0 \quad \text{όταν} \quad n = \text{ άρτιος θετικός ακέραιος, οπότε} \quad H(\xi) = a_0 H_n(\xi)\\
&\text{ή} \quad a_0 = 0 \quad \text{όταν} \quad n = \text{ περιττός θετικός αριθμός, οπότε} \quad H(\xi) = a_1 H_n(\xi)
\end{aligned}$$

Για να έχουμε λοιπόν φυσικά παραδεκτές λύσεις πρέπει ο αριθμητής $(-\varepsilon + 2k + 1)$, της αναδρομικής σχέσης (3.44) να μηδενίζεται για κάποιον μη αρνητικό ακέραιο αριθμό. Πρέπει να ισχύει λοιπόν:

$$-\varepsilon + 2n + 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = 2n+1 \quad \underbrace{\Rightarrow}_{\varepsilon = 2E/\hbar\omega} \quad \boxed{E = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega, \;\; n = 0, 1, 2, \ldots} \tag{3.47}$$

Παρατηρούμε, ότι στον αρμονικό ταλαντωτή, οι επιτρεπτές τιμές της ενέργειας είναι ισαπέχουσες:

$$\boxed{E_{n+1} - E_n = \hbar\omega} \tag{3.48}$$

Επίσης η ελάχιστη τιμή της ενέργειας δεν είναι μηδέν, αλλά υπάρχει η λεγόμενη ενέργεια του μηδενός:

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega} \tag{3.49}$$

Στην ελάχιστη τιμή E_0 μπορούμε να οδηγηθούμε χρησιμοποιώντας τη σχέση απροσδιοριστίας:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{3.50}$$

Αυτό μπορεί να φανεί αν ξεκινήσουμε από την έκφραση της ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \tag{3.51α΄}$$

Επειδή η E είναι το άθροισμα δύο θετικών ποσοτήτων, γίνεται ελάχιστη όταν τα x^2 και p^2 παίρνουν τις μικρότερες τιμές. Αυτές όμως δεν μπορούν να είναι μικρότερες των διασπορών $(\Delta x)^2$ και $(\Delta p)^2$, αντίστοιχα. Δηλαδή:

$$x^2 \simeq (\Delta x)^2, \qquad p^2 \simeq (\Delta p)^2$$

Λόγω αυτών των σχέσεων η σχέση (3.50) γράφεται:

$$x^2 \cdot p^2 \simeq \frac{\hbar^2}{4} \qquad \Rightarrow \qquad p^2 \simeq \frac{\hbar^2}{4x^2}$$

Η αντικατάσταση του p^2 στη σχέση (3.51α΄) δίνει:

$$E \simeq \frac{\hbar^2 + 4mkx^4}{8mx^2} \tag{3.51β΄}$$

Η ελάχιστη τιμή της ενέργειας θα βρεθεί από τη σχέση:

$$\frac{dE}{dx} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{8 \cdot 16m^2kx^5 - (\hbar^2 + 4mkx^4)16mx}{8^2m^2x^4} = 0$$

Από την οποία βρίσκουμε:

$$x^4 = \frac{\hbar^2}{4mk} \tag{3.51γ΄}$$

Για αυτήν την τιμή του x μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι $\frac{d^E}{dx^2} > 0$ και επομένως πρόκειται περί ελαχίστου.

Τέλος η αντικατάσταση το x^4 από την (3.51γ΄) στη σχέση (3.51β΄) δίνει:

$$E_{min} \simeq \frac{\hbar}{2}\sqrt{k/m} = \frac{1}{2}\,\hbar\omega$$

Για τις επιτρεπτές τιμές της ενέργειας: $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $(\varepsilon = 2n + 1)$, η αναδρομική σχέση (3.44) γράφεται:

$$a_{k+2} = \frac{-2(n-k)}{(k+1)(k+2)}\,a_k, \qquad k = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{3.52}$$

Για $n = 0$, πρέπει να θέσουμε $a_1 = 0$ ώστε η σειρά $H_{odd}(\xi)$ να μην εμφανίζεται στη λύση, ενώ η σειρά της $H_{even}(\xi)$ έχει μόνο έναν όρο, τον όρο a_0, αφού η (3.52) δίνει $a_2 = a_4 = \cdots = 0$. Έτσι για $n = 0$ η λύση της Δ.Ε. (3.42) είναι:

$$H_0(\xi) = a_0$$

και επομένως η λύση της (3.38) είναι:

$$u_0(\xi) = a_0\, \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

Για $n = 1$ πρέπει να θέσουμε $a_0 = 0$, ενώ η αναδρομική σχέση (3.52) δίνει: $a_3 = a_5 = \cdots = 0$. Έτσι έχουμε:

$$H_1(\xi) = a_1\, \xi \qquad \text{και} \qquad u_1(\xi) = a_1 \xi\, \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

Συνεχίζοντας με άλλες ακέραιες τιμές του n έχουμε:

$$H_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2) \qquad \text{και} \qquad u_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)\, \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \quad \text{κλπ}$$

Γενικά, οι συναρτήσεις $H_n(\xi)$ είναι πολυώνυμα του ξ, βαθμού n, που έχουν μόνο άρτιες δυνάμεις του ξ όταν n είναι άρτιος ακέραιος και περιττές δυνάμεις του ξ όταν n είναι περιττός ακέραιος αριθμός.

Τα πολυώνυμα $H_n(\xi)$ χωρίς τις σταθερές a_0 και a_1 λέγονται **πολυώνυμα Hermite**. Επομένως οι ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή είναι:

$$\boxed{u_n(x) = N_n\, H_n(\alpha x)\, \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}} \tag{3.53α'}$$

όπου ο παράγοντας N_n προσδιορίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\, 2^n\, n!}\right)^{1/2}}, \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \tag{3.53β'}$$

Το ολοκλήρωμα της σχέσης (3.53β') μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες των πολυωνύμων Hermite που μελετώνται στα περισσότερα βιβλία Μαθηματικών Μεθόδων Φυσικής. Τα πολυώνυμα Hermite που είναι λύσεις της εξίσωσης του Hermite:

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0, \qquad n = \text{ακέραιος}$$

ικανοποιούν τις παρακάτω ιδιότητες:

α) Γεννήτρια συνάρτηση: $\mathrm{e}^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi)\, t^n$

β) Τύπος του Rodriques: $H_n(\xi) = (-1)^n \mathrm{e}^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\, \mathrm{e}^{-\xi^2}$

γ) Αναδρομικές σχέσεις: $H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0$, $H_n'(\xi) = 2H_{n-1}(\xi)$

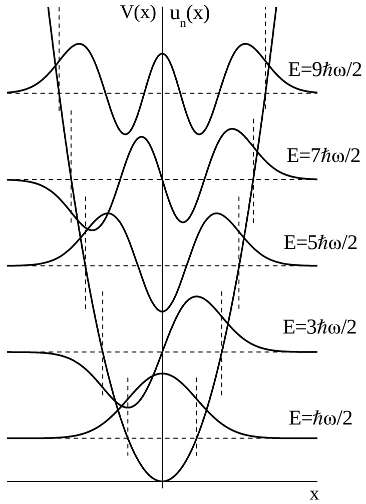
ε) Συμμετρία: $H_n(\xi) = (-1)^n H_n(-\xi)$.

δ) Ορογωνιότητα: $\big(H_n(\xi), \mathrm{e}^{-\xi^2} H_k(\xi)\big) = 0$ για $n \neq k$.

Οι ιδιότητες α) και β) είναι δύο ισοδύναμοι ορισμοί των πολυωνύμων Hermite. Οι παραπάνω ιδιότητες χρησιμοποιούνται συχνά στον υπολογισμό ολοκληρωμάτων. Τέλος, στον πίνακα 3.1 φαίνονται οι εκφράσεις των πρώτων πολυωνύμων Hermite.

Πίνακας 3.1: Τα πρώτα πολυώνυμα Hermite.

$H_0(\xi) = 1$
$H_1(\xi) = 2\xi$
$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$
$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$
$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$
$H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$
$H_6(\xi) = 64\xi^6 - 480\xi^4 + 720\xi^2 - 120$

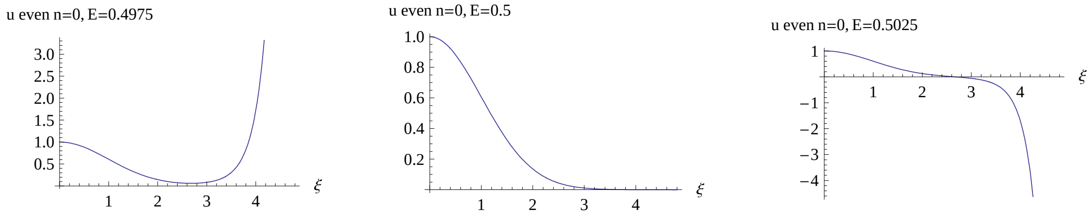


Σχήμα 3.7: Οι ενεργειακές καταστάσεις και οι κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή για $n = 0, 1, 2, 3, 4$. Οι κάθετες διακεκομένες γραμμές ορίζουν τις επιτρεπόμενες περιοχές του κλασικού ταλαντωτή.

Οι πέντε πρώτες κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή φαίνονται στο Σχ. (3.7).

Τα χαρακτηριστικά των κυματοσυναρτήσεων $u_n(x)$ που βρέθηκαν από τη λύση της εξίσωσης του Schrödinger και φαίνονται εν μέρη στο Σχ. (3.7) για τις πρώτες από αυτές, θα αναφερθούν διεξοδικά στο επόμενο εδάφιο.

Σημείωση 1. Η κβάντωση των ενεργειακών καταστάσεων προέκυψε από τις τεχνικές των δυναμοσειρών της λύσης της Δ.Ε. (3.38) με την απαίτηση αυτές να μηδενίζονται για $\xi \to \pm\infty$. Η εξίσωση (3.38) έχει δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις για κάθε τιμή της ενέργειας. Όμως, σχεδόν όλες οι λύσεις αποκλίνουν εκθετικά για μεγάλες τιμές του ξ και επομένως δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Τετραγωνικά ολοκληρώσιμες είναι μόνο οι λύσεις που αντιστοιχούν σε τιμές της ενέργειας που προκύπτουν από τη σχέση (3.47). Για παράδειγμα οι άρτιες λύσεις $u_{even}(\xi) = H_{even}(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ για τιμές της ενέργειας $E = 0,4975\,\hbar\omega$ και $E = 0,5025\,\hbar\omega$, που διαφέρουν στο τρίτο δεκαδικό ψηφίο από την τιμή της ενέργειας $E = 0,5\,\hbar\omega$, αποκλίνουν είτε θετικά είτε αρνητικά για μεγάλες τιμές του ξ, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.8. Μόνο για την τιμή $E = 0,5\,\hbar\omega$ έχουμε λύση που είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.



Σχήμα 3.8: Οι λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger για τιμές της ενέργειας (σε μονάδες $\hbar\omega$) $E = 0.4975$, $E = 0,5$ και $E = 0.5025$.

Σημείωση 2. Στα προηγούμενα είδαμε ότι η αδιάστατη εξίσωση του Schrödinger:

$$u''(\xi) + (\varepsilon - \xi^2)u(\xi) = 0, \qquad u(-\infty) = u(\infty) = 0 \tag{3.54α'}$$

όπου $\xi = \alpha x$, $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$, και $\varepsilon = 2E/\hbar\omega$, έχει λύσεις της μορφής:

$$u(\xi) = H(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{3.54β'}$$

στην οποία, ο παράγοντας $\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ εξασφαλίζει ότι η $u(\xi)$ μηδενίζεται στα σημεία $\xi = \pm\infty$.

Η συνάρτηση $H(\xi)$ που είναι λύση της Δ.Ε.:

$$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\varepsilon - 1)H(\xi) = 0 \tag{3.54γ'}$$

πρέπει να έχει τέτοια χαρακτηριστικά ώστε η $u(\xi)$ να ταιριάζει σε δέσμιες καταστάσεις. Δηλαδή: α) να είναι ταλαντούμενης μορφής, ώστε ο αριθμός των ταλαντώσεων (ή διαφορετικά των στάσιμων κυμάτων) να αντιστοιχεί στις διάφορες καταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή. Σύμφωνα με το θεώρημα των κόμβων, η βασική κατάσταση, που αντιστοιχεί σε ένα στάσιμο κύμα δεν έχει κανέναν κόμβο για $\xi \in (-\infty, \infty)$, η πρώτη διεγερμένη κατάσταση έχει έναν κόμβο κλπ. Επιπλέον η $H(\xi)$ **δεν πρέπει** να αυξάνει στο άπειρο πιο γρήγορα από ό,τι φθίνει ο παράγοντας $\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$, ώστε η $u(\xi)$ να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη. Μια προφανής περίπτωση που έχει τα παραπάνω χαρακτηριστικά είναι ένα πολυώνυμο $n-$βαθμού που έχει $n-$ρίζες.

Δηλαδή, υποθέτουμε ότι η συνάρτηση $H(\xi) = H_n(\xi)$ είναι ένα πολυώνυμο $n-$βαθμού, $n = 0, 1, 2, \ldots$, επειδή λόγω της μορφής του δυναμικού περιμένουμε το πρόβλημα να έχει άπειρο πλήθος δεσμίων καταστάσεων. Τα πολυώνυμα $H_n(\xi)$ πρέπει να είναι λύσεις της Δ.Ε.:

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + (\varepsilon - 1)H_n(\xi) = 0 \tag{3.54δ'}$$

Αν οι παραπάνω υποθέσεις είναι σωστές, θα πρέπει η αντικατάσταση ενός πολυωνύμου στην (3.54δ') να προσδιορίζει τόσο τους συντελεστές του πολυωνύμου, όσο και την παράμετρο ε. Επίσης λόγω της ομογένειας της Δ.Ε. (3.54δ') ο συντελεστής της μεγαλύτερης δύναμης μπορεί να εκλεγεί ίσος με 1.

Για $n = 0$ δοκιμάζουμε τη λύση:

$$H_0(\xi) = 1 \quad \Rightarrow \quad H_0'(\xi) = 0 \quad \Rightarrow \quad H_0''(\xi) = 0$$

και αντικαθιστούμε στη Δ.Ε. (3.54δ'), οπότε έχουμε:

$$(\varepsilon - 1)\cdot 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

Η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση $u_0(x)$ είναι:

$$u_0(\xi) = N\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \qquad \Rightarrow \qquad u_0(x) = N\,\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}$$

Η κανονικοποίηση αυτής δίνει:

$$|N|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha^2x^2} dx}_{\sqrt{\pi}/\alpha} = 1 \quad \Rightarrow \quad N = (\alpha/\sqrt{\pi})^{1/2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{u_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}}$$

Για $n = 1$ δοκιμάζουμε τη λύση:

$$H_1(\xi) = \xi + a \qquad \Rightarrow \qquad H_1'(\xi) = 1 \qquad \Rightarrow \qquad H_1''(\xi) = 0$$

και αντικαθιστούμε στη Δ.Ε. (3.54δ΄), οπότε έχουμε:

$$-2\xi + (\varepsilon - 1)(\xi + a) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad (\varepsilon - 1)a + (\varepsilon - 3)\,\xi = 0$$

Η τελευταία σχέση δίνει:

$$(\varepsilon - 1)a = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \alpha = 0$$

$$(\varepsilon - 3) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \varepsilon = 3 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega}$$

Η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση $u_1(x)$ είναι:

$$u_1(\xi) = N\,\xi\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \qquad \Rightarrow \qquad u_1(x) = N\,\alpha x\,\mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}$$

Η κανονικοποίηση αυτής δίνει:

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\alpha x)^2 \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2} dx = 1 \quad \Rightarrow \quad |N|^2 \frac{1}{\alpha} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \mathrm{e}^{-\xi^2} d\xi}_{\sqrt{\pi}/2} = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \left(\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$$

και επομένως

$$u_1(x) = \left(\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \alpha x\,\mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}$$

Η διαδικασία αυτή μπορεί να συνεχιστεί για τις ανώτερες καταστάσεις θεωρώντας τα αντίστοιχα πολυώνυμα. Για την κατάσταση n, δοκιμάζουμε τη λύση:

$$H_n(\xi) = \xi^n + c_{n-1}\,\xi^{n-1} + \cdots + c_0$$

Για πολύ μεγάλες τιμές του ξ, η συμπεριφορά της $H_n(\xi)$ καθορίζεται από τη μεγαλύτερη δύναμη του ξ. Δηλαδή:

$$H_n(\xi) \approx \xi^n \quad \text{για} \quad |\xi| \gg 1$$

Επειδή:

$$H'_n(\xi) \approx n\xi^{n-1}, \qquad H''_n(\xi) \approx n(n-1)\xi^{n-2}$$

Αν αντικαταστήσουμε στη Δ.Ε. (3.54δ΄) τα $H_n(\xi)$, $H'_n(\xi)$ και $H''_n(\xi)$ από τις προηγούμενες σχέσεις, κρατώντας μόνο τη μεγαλύτερη δύναμη, έχουμε:

$$-2n\xi^n + (\varepsilon - 1)\xi^n = 0 \quad \Rightarrow \quad \big[\varepsilon - (2n+1)\big]\xi^n = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = 2n+1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{E_n = (n + 1/2)\hbar\omega}$$

όπως ακριβώς δείξαμε ακολουθώντας τη μέθοδο των δυναμοσειρών.

Η προσέγγιση της μεγαλύτερης δύναμης μπορεί να εφαρμοστεί για τα πολυώνυμα $H_n(\xi)$ οποιοδήποτε βαθμού. Η παραπάνω διαδικασία δίνει αρκετά απλά τις ιδιοτιμές της ενέργειας οποιασδήποτε κατάστασης. Για την εύρεση όμως οποιασδήποτε κυματοσυνάρτηση πρέπει να ακολουθήσουμε τη μέθοδο των δυναμοσειρών.

3.5.2 Χαρακτηριστικές ιδιότητες του αρμονικού ταλαντωτή

Στο παρόν εδάφιο θα συνοψίσουμε τα βασικά χαρακτηριστικά των ιδιοσυναρτήσεων και των ιδιοτιμών ενός σωματιδίου σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή που βρέθηκαν από τη λύση της εξίσωσης του Schrödinger.

• Οι $u_n(x)$ είναι άρτιες ή περιττές συναρτήσεις όταν το n είναι άρτιος ή περιττός αριθμός. Επίσης ισχύει το θεώρημα των κόμβων. Στο διάστημα $x \in (-\infty, \infty)$, η βασική κατάσταση δεν έχει καμία ρίζα. Η κατάσταση $u_1(x)$ έχει μια ρίζα κλπ. Η συμμετρία των κυματοσυναρτήσεων ήταν αναμενόμενη λόγω της συμμετρίας του δυναμικού $\left(V(x) = V(-x)\right)$ και επομένως ισχύει $\left[\widehat{\Pi}, \widehat{H}\right] = 0$, οπότε οι τελετές $\widehat{H}$ και $\widehat{\Pi}$ έχουν κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων. Τα παραπάνω χαρακτηριστικά φαίνονται καθαρά στο Σχ. (3.7) για τις πρώτες καταστάσεις.

• Ο κλασικός αρμονικός ταλαντωτής, για δοσμένη ενέργεια E, έχει μέγιστη απομάκρυνση από τη θέση ισορροπίας, που αντιστοιχεί σε ορμή $p = 0$: $x_{max}^2 = \frac{2E}{m\omega^2}$. Η σχέση αυτή, για $E = E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, δίνει: $x_{max}^2 = \frac{\hbar}{m\omega}(2n + 1)$.

Από τα Σχ. (3.7) και (3.9) παρατηρούμε ότι στις περιοχές των σημείων αντιστροφής της κλασικής κίνησης, οι κυματοσυναρτήσεις των διαφόρων καταστάσεων, όσο μεγαλώνει το n, γίνονται ευρύτερες και τα πλάτη τους μεγαλύτερα. Αυτό σημαίνει ότι σ' αυτές τις περιοχές υπάρχει μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε σύγκριση με τις άλλες περιοχές. Αλλά και κλασικά περιμένουμε όμοια συμπεριφορά. Επειδή στα σημεία αντιστροφής της κίνησης η ταχύτητα είναι μηδέν, ο ταλαντωτής βρίσκεται μεγαλύτερο χρονικό διάστημα στις περιοχές αυτών των σημείων και επομένως έχει μεγαλύτερη πιθανότητα να βρίσκεται σ' αυτές τις περιοχές παρά σε κάποιες άλλες.

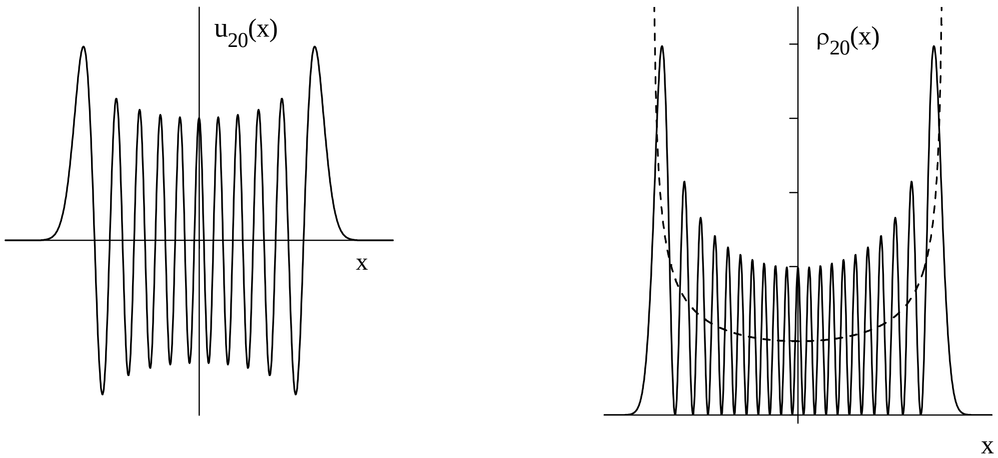
Τα παραπάνω γίνονται αρκετά εμφανή αν συγκρίνουμε την πυκνότητα πιθανότητας $\rho_n(x) = |u_n(x)|^2$, για αρκετά μεγάλο n (π.χ. $n = 20$), με την αντίστοιχη κλασική ποσότητα. Αν και η κλασική κίνηση είναι αιτιοκρατική, μπορούμε να ορίσουμε μια πιθανότητα σε σχέση με το χρονικό διάστημα που παραμένει ο ταλαντωτής στις διάφορες περιοχές της κίνησης σε διάστημα μισής περιόδου. Η κλασική πιθανότητα είναι:

$$\rho_{cl}(x)dx = \frac{dt}{T/2} = 2\frac{dx/v(x)}{T} \quad \Rightarrow \quad \rho_{cl} = \frac{2}{Tv(x)}$$

Επειδή $T = 2\pi/\omega$ και $v(x) = \left(\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2\right)^{1/2}$, η προηγούμενη σχέση δίνει:

$$\rho_{cl}(x) = \frac{\omega}{\pi\left(\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2\right)^{1/2}}\,, \qquad x \in \left(-\frac{2E}{m\omega^2}, \frac{2E}{m\omega^2}\right)$$

Η σύγκριση της $\rho_{cl}(x)$ με τη $\rho_{20}(x)$ γίνεται στη Σχ. 3.9. Παρατηρούμε ότι η $\rho_{20}(x)$ πλησιάζει κατά "μέσο όρο" την κατανομή $\rho_{cl}(x)$.



Σχήμα 3.9: Η κυματοσυνάρτηση $u_{20}(x)$ και η αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας $\rho_{20}(x)$ του αρμονικού ταλαντωτή. Η διακεκομένη γραμμή αντιστοιχεί στην κλασική πυκνότητα πιθανότητας.

• Η σχέση $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ οδηγεί στην ιδιότητα ότι οι ιδιοτιμές της ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή είναι ισαπέχουσες, $E_n - E_{n-1} = \hbar\omega$. Αυτό είναι ένα χαρακτηριστικό του παραβολικού δυναμικού και αποτελεί το κβαντικό ανάλογο της ιδιότητας του αντίστοιχου κλασικού ταλαντωτή, ότι η συχνότητα της ταλάντωσης είναι ανεξάρτητη του πλάτους της ταλάντωσης ή της ενέργειας του σωματιδίου. Συνέπεια αυτής της ιδιότητας είναι ότι αν ο κλασικός ταλαντωτής είναι φορτισμένος, εκπέμπει ακτινοβολία της ίδιας πάντα συχνότητας με τη σταθερή συχνότητα της ταλάντωσης:

$$\nu_{cl} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \quad \Rightarrow \quad \omega_{cl} = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Σύμφωνα με την Κβαντομηχανική ο φορτισμένος ταλαντωτής δεν ακτινοβολεί όταν βρίσκεται σε μια στάσιμη κατάσταση (κατάσταση καθορισμένης τιμής της ενέργειας) $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$. Ακτινοβολία (εκπομπή ή απορρόφηση) έχουμε όταν γίνει κβαντική μετάπτωση από μια αρχική κατάσταση E_n σε μια τελική κατάσταση $E_{n'}$.

Η κβαντική συχνότητα, ν_{qu} μπορεί να προκύψει από τη συνθήκη:

$$[h\nu_{qu} = \hbar\omega_{qu} = |E_n - E_{n'}| \quad \Rightarrow \quad \nu_{qu} = \frac{1}{h}|E_n - E_{n'}| \quad \Rightarrow \quad \nu_{qu} = \frac{1}{h}|n - n'|\hbar\omega$$
$$\Rightarrow \quad \nu_{qu} = |\Delta n|\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \quad \Rightarrow \quad \nu_{qu} = |\Delta n|\nu_{cl}$$

Ο αριθμός των φασματικών γραμμών (αριθμός διαφορετικών συχνοτήτων ν_{qu}) περιορίζεται σημαντικά από τον **κανόνα επιλογής** που προκύπτει από την αρχή της αντιστοιχίας. Σύμφωνα με αυτήν την αρχή θα πρέπει για μεγάλα n και n' και μικρά $|\Delta n| = |n - n'|$, η ν_{qu} να συμπίπτει με τη ν_{cl}. Για να ισχύει αυτό, σύμφωνα με την προηγούμενη σχέση πρέπει να ισχύει:

$$\boxed{\Delta n = n - n' = \pm 1}$$

Επομένως, στον αρμονικό ταλαντωτή, από τις διάφορες κβαντικές μεταπτώσεις, μόνο αυτές που γίνονται μεταξύ γειτονικών ενεργειακών καταστάσεων είναι επιτρεπτές. Αυτό σημαίνει ότι το φάσμα εκπομπής του φορτισμένου αρμονικού ταλαντωτή αποτελείται από μια μόνο φασματική γραμμή.

Ο παραπάνω κανόνας επιλογής που βρέθηκε για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς ισχύει και για τους μικρούς κβαντικούς αριθμούς, όπως προκύπτει από την ακριβή θεωρία των κβαντικών μεταπτώσεων που εν γένει εξαρτώνται από το χρόνο.

3.5.3 Αλγεβρική επίλυση του προβλήματος του αρμονικού ταλαντωτή

Η εξίσωση του Schrödinger ή διαφορετικά, η κυματο-μηχανική είναι μια από τις πολλές αναπαραστάσεις (εικόνες) της Κβαντομηχανικής. Η αναπαράσταση που χρησιμοποιούμε στην πράξη εξαρτάται από το είδος του προβλήματος. Η ειδική μορφή του τελεστή του Hamilton στο πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή, που είναι το άθροισμα δύο "τετραγώνων", επιτρέπει την εφαρμογή μιας μεθόδου παραγοντοποίησης και τη χρησιμοποίηση μιας αναπαράστασης που είναι γνωστή ως **αναπαράσταση αριθμού κβάντα** (number of quanta representation ή occupation number reperesentation). Η αναπαράσταση αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση του φάσματος των ιδιοτιμών του $\widehat{H}$ μόνο από την εξάρτηση του από τους τελεστές $\widehat{x}$ και $\widehat{p}$ και τη σχέση αντιμετάθεσής τους.

Ξεκινάμε από την εξίσωση ιδιοτιμών του $\widehat{H}$:

$$\widehat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \qquad \widehat{H} = \frac{1}{2m}\widehat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\widehat{x}^2 \tag{3.55}$$

και τη σχέση αντιμετάθεσης των $\widehat{x}$ και $\widehat{p}$: $\big[\widehat{x},\widehat{p}\big] = i\hbar$. Για τα ιδιοδιανύσματα του $\widehat{H}$ θα χρησιμοποιήσουμε το συμβολισμό του Dirac: $u_n = |n\rangle$.

Εισάγουμε τους τελεστές:

$$\boxed{\widehat{\xi} = \Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{1/2}\widehat{x}} \qquad \text{και} \qquad \boxed{\widehat{p}_\xi = \Big(\frac{1}{m\hbar\omega}\Big)^{1/2}\widehat{p}} \tag{3.56α'}$$

για τους οποίους ισχύει:

$$\big[\widehat{\xi},\widehat{p}_\xi\big] = \Big[\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{1/2}\widehat{x}, \Big(\frac{1}{m\hbar\omega}\Big)^{1/2}\widehat{p}\Big] = \Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{1/2}\Big(\frac{1}{m\hbar\omega}\Big)^{1/2}\underbrace{\big[\widehat{x},\widehat{p}\big]}_{i\hbar} \quad\Rightarrow\quad \boxed{\big[\widehat{\xi},\widehat{p}_\xi\big] = i} \tag{3.56β'}$$

Με τη βοήθεια των τελεστών $\widehat{\xi}$ και $\widehat{p}_\xi$ ο τελεστής του Hamilton γράφεται:

$$\begin{aligned}\widehat{H} &= \frac{1}{2}\,\hbar\omega\big(\widehat{\xi}^2 + \widehat{p}_\xi^2\big) = \frac{1}{2}\,\hbar\omega\Big[\big(\widehat{\xi} - i\widehat{p}_\xi\big)\big(\widehat{\xi} + i\widehat{p}_\xi\big) - i\big[\widehat{\xi},\widehat{p}_\xi\big]\Big] \\ &= \hbar\omega\Big[\frac{1}{\sqrt{2}}\big(\widehat{\xi} - i\widehat{p}_\xi\big)\frac{1}{\sqrt{2}}\big(\widehat{\xi} + i\widehat{p}_\xi\big) + \frac{1}{2}\Big]\end{aligned} \tag{3.57}$$

Εισάγουμε τους τελεστές:

$$\boxed{\widehat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\widehat{\xi} + i\widehat{p}_\xi\big)} \qquad \text{και} \qquad \boxed{\widehat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\widehat{\xi} - i\widehat{p}_\xi\big)} \tag{3.58α'}$$

Ο $\widehat{a}$ λέγεται **τελεστής υποβιβασμού** ή **καταστροφής** (lowering ή annihilation operator) και ο $\widehat{a}^\dagger$ λέγεται **τελεστής αναβίβασης** ή **δημιουργίας** (raising ή creation operator). Σημειώνεται ότι ο $\widehat{a}^\dagger$ είναι ερμιτιανός συζυγής $\widehat{a}$ και επειδή $\widehat{a} \neq \widehat{a}^\dagger$ αυτοί δεν είναι ερμιτιανοί και επομένως δεν αντιστοιχούν σε παρατηρήσιμα μεγέθη. Παρ' όλα αυτά μας βοηθούν στην εύρεση των ιδιοτιμών της ενέργειας.

Από τον ορισμό των $\widehat{\xi}$ και $\widehat{p}_\xi$ και τη σχέση αντιμετάθεσής τους βρίσκεται εύκολα ότι:

$$\boxed{\big[\widehat{a},\widehat{a}^\dagger\big] = 1} \tag{3.58β'}$$

Με τη βοήθεια των τελεστών $\widehat{a}$ και $\widehat{a}^\dagger$ η σχέση (3.57) γράφεται:

$$\boxed{\widehat{H} = \hbar\omega\big(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\big)} \qquad \text{και} \qquad \boxed{\widehat{H} = \hbar\omega\big(\widehat{N} + \tfrac{1}{2}\big)} \tag{3.59α'}$$

όπου:

$$\boxed{\widehat{N} = \widehat{a}^\dagger\widehat{a}} \tag{3.59β'}$$

Ο τελεστής $\widehat{N}$ λέγεται **τελεστής αριθμού** (κβάντα) (number operator) και είναι ερμιτιανός, αφού:

$$\widehat{N}^\dagger = \big(\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\big)^\dagger = \widehat{a}^\dagger(\widehat{a}^\dagger)^\dagger = \widehat{a}^\dagger\widehat{a} = N$$

Είναι φανερό ότι οι τελεστές $\widehat{H}$ και $\widehat{N}$ αντιμετατίθενται και επομένως έχουν ένα κοινό πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων. Αν $|n\rangle$ είναι ένα κοινό ιδιοδιάνυσμα των $\widehat{H}$ και $\widehat{N}$ θα έχουμε:

$$\widehat{N}|n\rangle = N_n|n\rangle \qquad \text{και} \qquad \widehat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{3.60}$$

οπότε αν N_n είναι οι ιδιοτιμές του $\widehat{N}$, τότε οι ιδιοτιμές του $\widehat{H}$ θα είναι:

$$E_n = \hbar\omega\big(N_n + \tfrac{1}{2}\big) \tag{3.61}$$

Μένει να βρούμε τις ιδιοτιμές N_n του $\widehat{N} = \widehat{a}\widehat{a}^\dagger$ που θα μας δώσουν και τις ιδιοτιμές του $\widehat{H}$ από τη σχέση (3.61). Για το σκοπό αυτόν πολλαπλασιάζουμε και τα δύο μέλη της εξίσωσης ιδιοτιμών του $\widehat{N}$ με το τελεστή $\widehat{a}$ και παίρνουμε:

$$\widehat{a}\widehat{N}|n\rangle = N_n\widehat{a}|n\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \widehat{a}\widehat{a}^\dagger\widehat{a}|n\rangle = N_n\widehat{a}|n\rangle \tag{3.62α΄}$$

Επειδή όμως (βλέπε σχέση (3.58β΄)) ισχύει:

$$\widehat{a}\widehat{a}^\dagger = 1 + \widehat{a}^\dagger\widehat{a} = 1 + \widehat{N}$$

η σχέση (3.62α΄) γράφεται:

$$(1+\widehat{N})\widehat{a}|n\rangle = N_n\widehat{a}|n\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \widehat{N}\big(\widehat{a}|n\rangle\big) = \big(N_n - 1\big)\big(\widehat{a}|n\rangle\big) \tag{3.62β΄}$$

Η σχέση (3.62β΄) μας λέγει ότι οι διαδοχικές ιδιοτιμές του τελεστή $\widehat{N}$ διαφέρουν μεταξύ τους κατά μονάδα. Επίσης, αν συμβολίσουμε το κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα του $\widehat{N}$, που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $(N_n - 1)$ με $|n-1\rangle$, αυτό διαφέρει από το $\widehat{a}|n\rangle$ κατά έναν πολλαπλασιαστικό παράγοντα. Δηλαδή:

$$\widehat{a}|n\rangle = C_n^-|n-1\rangle \tag{3.63α΄}$$

Όμοια βρίσκεται ότι:

$$\widehat{a}^\dagger|n\rangle = C_n^+|n+1\rangle \tag{3.63β΄}$$

Επειδή:

$$\big(\widehat{a}|n\rangle\big)^\dagger = \langle n|\widehat{a}^\dagger \qquad \text{και} \qquad \big(C_n^-|n-1\rangle\big)^\dagger = (C_n^-)^*\langle n-1|$$

από τη σχέση (3.63α΄) έχουμε:

$$\langle n|\widehat{a}^\dagger\widehat{a}|n\rangle = |C_n^-|^2\langle n-1|n-1\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle n|\widehat{N}|n\rangle = |C_n^-|^2 \quad \Rightarrow \quad N_n = |C_n^-|^2$$

Από την τελευταία σχέση προκύπτει:

$$\boxed{N_n \geq 0} \qquad \text{και} \qquad C_n^- = \sqrt{N_n} \tag{3.64}$$

Δηλαδή, όλες οι ιδιοτιμές του $\widehat{N}$ είναι μη αρνητικοί αριθμοί. Έτσι η σχέση (3.63α΄) γράφεται:

$$\widehat{a}|n\rangle = \sqrt{N_n}\,|n-1\rangle \tag{3.65α΄}$$

Όμοια βρίσκεται ότι:

$$\widehat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{N_n+1}\,|n+1\rangle \tag{3.65β΄}$$

Επειδή οι ιδιοτιμές του $\widehat{N}$ δεν είναι αρνητικοί αριθμοί, πρέπει να υπάρχει μια ιδιοτιμή $N_{n_{min}}$, που η δράση του τελεστή $\widehat{a}$ στην αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση $|n_{min}\rangle$, να δίνει:

$$\widehat{a}|n_{min}\rangle = C_{n_{min}}^-|n_{min}-1\rangle = 0$$

και επειδή $C_{n_{min}^-} = \sqrt{N_{n_{min}}}$, η σχέση (3.65α΄) γράφεται:

$$\widehat{a}|n_{min}\rangle = (N_{n_{min}})^{1/2}|n_{min}-1\rangle = 0$$

Η σχέση αυτή μπορεί να ισχύει μόνο όταν:

$$N_{n_{min}} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad n_{min} = 0$$

Επομένως πρέπει να υπάρχει μια κατάσταση $|0\rangle$ που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $N_{n_{min}} = 0$, που η δράση του $\widehat{a}$ δίνει:

$$\widehat{a}|0\rangle = 0$$

Επειδή η ελάχιστη ιδιοτιμή του $\widehat{N}$ είναι 0 και οι διαδοχικές ιδιοτιμές του διαφέρουν κατά μονάδα, το φάσμα των ιδιοτιμών του $\widehat{N}$ είναι οι διαδοχικοί ακέραιο αριθμοί $n = 0, 1, 2, \ldots$. Επομένως το φάσμα των ιδιοτιμών του $\widehat{H}$, σύμφωνα με τη σχέση (3.61) είναι:

$$E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{3.67}$$

όπως είχε βρεθεί από τη λύση της εξίσωσης του Schröedinger.

Οι διαδοχικές επιδράσεις του τελεστή $\widehat{a}^\dagger$ στην κατάσταση $|0\rangle$, σύμφωνα με τη σχέση (3.65β΄), δίνει:

$$\begin{aligned}
\widehat{a}^\dagger|0\rangle &= \sqrt{0+1}\,|0+1\rangle = \sqrt{1}\,|1\rangle \\
\widehat{a}^\dagger\big(\widehat{a}^\dagger|0\rangle\big) &= \sqrt{1}\big(\widehat{a}^\dagger|1\rangle\big) = \sqrt{1\cdot 2}\,|2\rangle \\
&\vdots \\
\big(\widehat{a}^\dagger\big)^n|0\rangle &= \sqrt{n!}\,|n+1\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,\big(\widehat{a}^\dagger\big)^n|0\rangle}
\end{aligned} \tag{3.68}$$

Τέλος οι σχέσεις (3.65α΄) και (3.65β΄) γράφονται:

$$\boxed{|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\,\widehat{a}\,|n\rangle} \qquad \text{και} \qquad \boxed{|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\,\widehat{a}^\dagger|n\rangle} \tag{3.69}$$

Δηλαδή οι καταστάσεις $|n-1\rangle$ και $|n+1\rangle$ δημιουργούνται με τη δράση των τελεστών $\widehat{a}$, και $\widehat{a}^\dagger$ στην κατάσταση $|n\rangle$, αντίστοιχα. Οι αντίστοιχες ιδιοτιμές της ενέργειας είναι $E_{n-1} = E_n - \hbar\omega$ και $E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$. Δηλαδή η δράση των τελεστών $\widehat{a}$, και $\widehat{a}^\dagger$ στην κατάσταση $|n\rangle$ καταστρέφει και δημιουργεί ένα κβάντο της ενέργειας ίσο με $\hbar\omega$.

Είναι ενδιαφέρον ότι, ενώ το μόνο που γνωρίζουμε για τα ιδιοδιανύσματα $|n\rangle$ των τελεστών $\widehat{H}$ και $\widehat{N}$ είναι το αποτέλεσμα της δράσης των τελεστών $\widehat{a}$ και $\widehat{a}^\dagger$ σ' αυτά, είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε όχι μόνο τις μέσες τιμές των τελεστών $\widehat{H}$ και $\widehat{N}$, αλλά και τις μέσες τιμές και γενικά τα στοιχεία πίνακα και άλλων τελεστών, όπως των $\widehat{x}$, $\widehat{p}$, $\widehat{a}$ και $\widehat{a}^\dagger$.

Οι πίνακες των τελεστών $\widehat{x}$, $\widehat{p}$, $\widehat{a}$, $\widehat{a}^\dagger$, $\widehat{H}$ και $\widehat{N}$.

Χρησιμοποιούμε πρώτα τις σχέσεις (3.56α΄) και (3.58α΄) για να εκφράσουμε τους τελεστές $\widehat{x}$ και $\widehat{p}$ με τη βοήθεια των τελεστών $\widehat{a}$ και $\widehat{a}^\dagger$:

$$\widehat{x} = \Big(\frac{\hbar}{m\omega}\Big)^{1/2}\widehat{\xi} = \Big(\frac{\hbar}{2m\omega}\Big)^{1/2}\big(\widehat{a} + \widehat{a}^\dagger\big) \tag{3.70α΄}$$

$$\widehat{p} = \big(m\hbar\omega\big)^{1/2}\widehat{p}_\xi = -i\Big(\frac{m\hbar\omega}{2}\Big)^{1/2}\big(\widehat{a} - \widehat{a}^\dagger\big) \tag{3.70β΄}$$

Τα στοιχεία πίνακα του τελεστή $\widehat{x}$ ως προς τα $|n\rangle$, χρησιμοποιώντας τη σχέση (3.69), είναι:

$$\begin{aligned}
\langle m|\widehat{x}|n\rangle &= \Big(\frac{\hbar}{2m\omega}\Big)^{1/2}\big[\langle m|\widehat{a}|n\rangle + \langle m|\widehat{a}^\dagger|n\rangle\big] = \Big(\frac{\hbar}{2m\omega}\Big)^{1/2}\big[\langle m|\sqrt{n}|n-1\rangle + \langle m|\sqrt{n+1}|n+1\rangle\big] \\
&= \Big(\frac{\hbar}{2m\omega}\Big)^{1/2}\big[\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\big]
\end{aligned}$$

Το αποτέλεσμα που βρέθηκε, γράφεται ακόμη:

$$\langle m|\widehat{x}|n\rangle = \begin{cases} \langle n+1|\widehat{x}|n\rangle = \Big(\dfrac{(n+1)\hbar}{2m\omega}\Big)^{1/2} & \text{για } m=n+1 \\ 0 & \text{για } m \neq n\pm 1 \\ \langle n-1|\widehat{x}|n\rangle = \Big(\dfrac{n\hbar}{2m\omega}\Big)^{1/2} & \text{για } m=n-1 \end{cases} \tag{3.71}$$

Τα στοιχεία πίνακα του τελεστή $\widehat{p}$ ως προς τα $|n\rangle$ είναι:

$$\langle m|\widehat{p}|n\rangle = -i\Big(\frac{m\hbar\omega}{2}\Big)^{1/2}\big[\langle m|\widehat{a}|n\rangle - \langle m|\widehat{a}^\dagger|n\rangle\big] = -i\Big(\frac{m\hbar\omega}{2}\Big)^{1/2}\big[\langle m|\sqrt{n}|n-1\rangle - \langle m|\sqrt{n+1}|n+1\rangle\big]$$
$$= -i\Big(\frac{m\hbar\omega}{2}\Big)^{1/2}\big[\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\big]$$

Η σχέση αυτή γράφεται ακόμη:

$$\langle m|\widehat{p}|n\rangle = \begin{cases} \langle n+1|\widehat{p}|n\rangle = i\Big(\dfrac{(n+1)m\hbar\omega}{2}\Big)^{1/2} & \text{για } m=n+1 \\ 0 & \text{για } m \neq n\pm 1 \\ \langle n-1|\widehat{p}|n\rangle = -i\Big(\dfrac{nm\hbar\omega}{2}\Big)^{1/2} & \text{για } m=n-1 \end{cases} \tag{3.72}$$

Εύκολα βρίσκεται ότι οι πίνακες των τελεστών $\widehat{H}$, $\widehat{N}$, $\widehat{a}$ και $\widehat{a}^\dagger$,

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}, \qquad N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{3.73}$$

(3.74)

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}, \quad a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{3.75}$$

Οι κυματοσυναρτήσεις στο χώρο των θέσεων

Στη συνέχεια θα δούμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή του Hamilton στο χώρο των θέσεων, $u_n(x)$, μπορούν να βρεθούν με τη βοήθεια των τελεστών καταστροφής και δημιουργίας. Για το σκοπό αυτόν θέτουμε:

$$|n\rangle \;\rightarrow\; u_n(x) = \langle x|n\rangle, \qquad \widehat{x} \;\rightarrow\; x, \qquad \widehat{p} \;\rightarrow\; -i\hbar\frac{d}{dx}$$

οπότε οι σχέσεις της (3.69) γράφονται:

$$\widehat{a}u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{1/2}x + i\Big(\frac{1}{m\hbar\omega}\Big)^{1/2}(-i\hbar)\frac{d}{dx}\Big]u_n(x) = n^{1/2}u_{n-1}(x) \tag{3.76α'}$$

$$\widehat{a}^\dagger u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{1/2}x - i\Big(\frac{1}{m\hbar\omega}\Big)^{1/2}(-i\hbar)\frac{d}{dx}\Big]u_n(x) = (n+1)^{1/2}u_{n+1}(x) \tag{3.76β'}$$

Αν θέσουμε στην (3.76α') $n=0$, παίρνουμε τη Δ.Ε. για τη βασική κατάσταση:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{1/2}x + i\Big(\frac{1}{m\hbar\omega}\Big)^{1/2}(-i\hbar)\frac{d}{dx}\Big]u_0(x) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{du_0}{dx} = -\alpha^2 x u_0(x)$$

όπου $\alpha^2 = m\omega/\hbar$. Η λύση της Δ.Ε. που προκύπτει είναι:

$$u_0(x) = N_0\, \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}$$

Η κανονικοποίηση της οποίας δίνει:

$$u_0(x) = \Big(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\Big)^{1/2} \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}$$

όπως βρέθηκε και από τη λύση της εξίσωσης του Schrödinger.

Η πρώτη διεγερμένη κατάσταση μπορεί να προκύψει θέτοντας $n = 0$ στην εξίσωση (3.76β'), οπότε έχουμε:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{1/2} x - i\Big(\frac{1}{m\hbar\omega}\Big)^{1/2}(-i\hbar)\frac{d}{dx}\Big]u_0(x) = (1)^{1/2} u_1(x)$$

Χρησιμοποιώντας την έκφραση της $u_0(x)$ που βρέθηκε προηγουμένως, παίρνουμε:

$$u_1(x) = \Big(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\Big)^{1/2}\Big[\alpha x - \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}\Big]\mathrm{e}^{\alpha^2 x^2/2}$$

Η εκτέλεση των πράξεων δίνει:

$$u_1(x) = \Big(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\Big)^{1/2}\big(\alpha x + \alpha x\big)\, \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} = \Big(\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\Big)^{1/2} \alpha x\, \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}$$

που συμφωνεί με την $u_1(x)$ που βρέθηκε από την εξίσωση του Schrödinger. Το σύνολο των ιδιοσυναρτήσεων προκύπτει με διαδοχική εφαρμογή του τελεστή $\widehat{a}^{\dagger}$.

Οι τελεστές καταστροφής και δημιουργίας βρίσκουν μεγάλη εφαρμογή στην Φυσική της Στερεάς Κατάστασης και στην Κβαντική Θεωρία Πεδίων.

3.6 Ασκήσεις Κεφαλαίου 3

1. Οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις σωματιδίου μάζας m που κινείται σε ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού απείρου ύψους και εύρους L είναι:

$$u_n(x) = \Big(\frac{2}{L}\Big)^{1/2} \sin\frac{n\pi x}{L}, \quad x \in [0, L], \quad \text{και} \quad u_n(x) = 0, \quad x \leq 0, \ \ x \geq L$$

α) Να βρεθούν οι αβεβαιότητες Δx και Δp.

β) Να δειχθεί ότι για $n \to \infty$ η διασπορά της θέσης του σωματιδίου συμπίπτει με αυτήν που υπολογίζεται κλασικά.

Υπόδειξη. Η πιθανότητα ενός σωματιδίου που εκτελεί περιοδική κίνηση, με ορμή $|p|$ =σταθερά για $0 < x < L$, μπορεί να οριστεί κλασικά ως ο λόγος του χρονικού διαστήματος dt, που το σωματίδιο βρίσκεται σε μια περιοχή του x, εύρους dx, ως προς το μισό της περιόδου T:

$$\rho_{clas.}(x)dx = \frac{dt}{T/2} = 2\frac{dx/v(x)}{T} \quad \Rightarrow \quad \rho_{clas.}(x) = \frac{2}{v(x)T}$$

2. Σωματίδιο μάζας m βρίσκεται σε φρέαρ δυναμικού απείρου ύψους εύρους L. Τη χρονική στιγμή $t = 0$ η κατάσταση του σωματιδίου περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x, 0) = A\, x(L - x), \quad x \in [0, L], \quad \text{και} \quad u_n(x) = 0, \quad x \leq 0, \ \ x \geq L$$

Να δειχθεί ότι:

α) Η $\psi(x,0)$ είναι κανονικοποιημένη όταν $A=\sqrt{\frac{30}{L^5}}$.

β) Από τη γραφική παράσταση της $\psi(x,0)$ μπορείτε να εκτιμήσετε (χωρίς πράξεις) την πιο πιθανή τιμή που θα σας δώσει η μέτρηση της ενέργειας του σωματιδίου;

γ) Να βρεθούν οι μέσες τιμές των $\langle\widehat{x}\rangle$, $\langle\widehat{p}\rangle$ και $\langle\widehat{H}\rangle$ ως προς την $\psi(x,0)$.

δ) Να δειχθεί ότι η χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης δίνεται από τη σχέση:

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{30}{L}}\Big(\frac{2}{\pi}\Big)^3\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)^3}\,\sin\frac{(2k+1)\pi x}{L}\,\exp\Big[-i\frac{\pi^2\hbar n^2}{2mL^2}\,t\Big]$$

Αν κάποια χρονική στιγμή μετρηθεί η ενέργεια του σωματιδίου, ποιά είναι η πιθανότητα να έχουμε ως αποτέλεσμα την τιμή $E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$;

3. Σωματίδιο μάζας m βρίσκεται σε φρέαρ δυναμικού απείρου ύψους εύρους L. Τη χρονική στιγμή $t=0$ η κατάσταση του σωματιδίου περιγράφεται από μια ισοπίθανη επαλληλία των δύο πρώτων στάσιμων καταστάσεων:

$$\psi(x,0)=A\big[u_1(x)+u_2(x)\big]$$

α) Να κανονικοποιηθεί η $\psi(x,0)$.

β) Να βρεθεί η έκφραση της $\rho(x,t)=|\psi(x,t)|^2$.

γ) Να δεχθεί ότι: $\langle x\rangle_t=\frac{L}{2}\big[1-\frac{16}{9\pi^2}\,\cos 3\omega t\big]$ και $\langle p\rangle_t=\frac{8L}{3\pi^2 m}\,\omega\sin 3\omega t$, όπου $\omega=\frac{\pi^2\hbar}{2mL^2}$.

4. Σωματίδιο μάζας m βρίσκεται σε φρέαρ δυναμικού απείρου ύψους εύρους L. Να βρεθεί η χρονική εξέλιξη της μέσης τιμής της θέσης του σωματιδίου, όταν τη χρονική στιγμή $t=0$ η κατάσταση του σωματιδίου περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x,0)=A\sin^3\frac{\pi x}{L}$$

Υπόδειξη. $\sin 3\theta=3\sin\theta-4\sin^3\theta$.

5. Σωματίδιο μάζας m βρίσκεται σε φρέαρ δυναμικού της μορφής: $V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ 0, & 0<x<a\\ V_0>0, & x>a\end{cases}$

α) Να δειχθεί ότι οι δέσμιες καταστάσεις $(E<V_0)$ δίνονται από τη σχέση:

$$\tan\frac{\sqrt{2mE}\,a}{\hbar}=-\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}$$

β) Να γίνει η γραφική παράσταση του φρέατος και της "μορφής" της κυματοσυνάρτησης της βασικής κατάστασης.

γ) Ποιά συνθήκη πρέπει να ισχύει για το V_0 ώστε να έχουμε μια μόνο δέσμια κατάσταση;

6. Σωματίδιο μάζας m ενέργειας $E>V_0$ πέφτει από τα δεξιά σε βαθμίδα δυναμικού της μορφής: $V(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ V_0>0, & x>0\end{cases}$. Να βρεθούν οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης. Ποιά είναι η πιθανότητα να ανακλαστεί το σωματίδιο όταν $E=\frac{4}{3}V_0$;

7. Να δειχθεί ότι σε δυναμικά της μορφής: $\lambda\delta(x)$, αντί της συνθήκης συνέχειας της παραγώγου στο σημείο $x=0$, ισχύει η σχέση:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\big[u'(0+)-u'(-0-)\big]+\lambda u(0)=0$$

8. Σωματίδιο κινείται σε δυναμικό της μορφής: $V(x) = -\lambda\delta(x), \qquad \lambda > 0.$
α) Να δειχθεί ότι υπάρχει μια δέσμια κατάσταση με ιδιοτιμή της ενέργειας και με αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση:

$$E = -\frac{m\lambda}{2\hbar^2}, \qquad u(x) = \left(\frac{m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\frac{m\lambda}{\hbar^2}|x|}$$

β) Ποιά είναι η μέση τιμή της θέσης του σωματιδίου ως προς αυτήν την κυματοσυνάρτηση;

9. Ποιά συνθήκη πρέπει να ισχύει για την ενέργεια E σωματιδίου, ώστε η πιθανότητα να βρεθεί αυτό μέσα σε ορθογώνιο φρέαρ δυναμικού ύψους $V_0 > E$ και εύρους $2a$ να είναι ίση με την πιθανότητα να βρεθεί έξω από το δυναμικό.

10. Να βρεθούν οι ιδιοτιμές της ενέργειας και οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις ενός σωματιδίου που κινείται στο δυναμικό: $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0 \end{cases}$

11. Σωματίδιο κινείται σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή. Ποιά είναι η πιθανότητα να βρεθεί αυτό εκτός των κλασικών ορίων κίνησης όταν βρίσκεται στη βασική κατάσταση;

Υπόδειξη: $\displaystyle\int_1^\infty \mathrm{e}^{-\xi^2} d\xi = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\xi^2} d\xi - \int_0^1 \mathrm{e}^{-\xi^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^1 \xi^{2k} d\xi \simeq \frac{\sqrt{\pi}}{2} - 0,748$

12. Να δειχθεί ότι οι μέσες τιμές των τελεστών $\widehat{p}$ και $\widehat{x}$ ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή είναι μηδέν.

Υπόδειξη. Χρησιμοποιήστε την άσκηση 7 του 2ου κεφαλαίου και ότι η πυκνότητα πιθανότητας $\rho_n(x) = |u_n(x)|^2$ για οποιαδήποτε ιδιοκατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή είναι άρτια συνάρτηση.

13. Ξεκινώντας από την έκφραση του τελεστή του Hamilton του αρμονικού ταλαντωτή : $\widehat{H} = \frac{1}{2m}\widehat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\widehat{x}^2$ και τη γνωστή ανισότητα: $a^2 + b^2 \geq 2ab$, να δειχθεί ότι ισχύει η σχέση:

$$E \equiv \langle \widehat{H} \rangle \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

Υπόδειξη. Για τον αρμονικό ταλαντωτή ισχύει: $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ και επομένως $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle$ και $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle$.

14. Να βρεθούν οι ιδιοτιμές κι οι ιδιοσυναρτήσεις σωματιδίου μάζας m στο δυναμικό: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \beta x$.

Υπόδειξη. Δείξτε πρώτα ότι ισχύει η σχέση: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\left[x + \frac{\beta}{m\omega^2}\right]^2 - \frac{\beta}{2m\omega^2}$.

Κεφάλαιο 4

Προβλήματα τριών διαστάσεων

Στο παρόν κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με προβλήματα τριών διαστάσεων που είναι αυτά που συναντάμε κυρίως στην πράξη. Ο τρόπος μελέτης αυτών των προβλημάτων δεν διαφέρει κατ' αρχήν από τον τρόπο μελέτης των μονοδιάστατων προβλημάτων. Όμως, είναι σχετικά δυσκολότερα αφού πρέπει να λυθεί μια Δ.Ε. με μερικές παραγώγους. Επιπλέον, παρουσιάζονται νέα χαρακτηριστικά, όπως η στροφορμή του σωματιδίου που ενδέχεται να έχει μη μηδενικές τιμές. Ως γενικός κανόνας, ο αριθμός των δεικτών (κβαντικών αριθμών) που απαιτείται για να χαρακτηριστεί πλήρως μια κατάσταση, είναι ίσος με τον αριθμό των βαθμών ελευθερίας του αντίστοιχου κλασικού προβλήματος. Στα μονοδιάστατα προβλήματα ένας μόνο δείκτης είναι αρκετός για την περιγραφή μιας κατάστασης, ενώ στα τρισδιάστατα προβλήματα απαιτούνται τρεις δείκτες.

Επίσης, εμφανίζεται το φαινόμενο του **πολλαπλού εκφυλισμού** των ενεργειακών καταστάσεων ακόμη και στις δέσμιες καταστάσεις, σε αντίθεση με τα μονοδιάστατα προβλήματα στα οποία ο εκφυλισμός μπορεί να είναι το πολύ διπλός και μόνο σε μη δέσμιες καταστάσεις. Ο εκφυλισμός των τρισδιάστατων προβλημάτων προκύπτει από κάποια ειδική συμμετρία (π.χ. σφαιρική ή αξονική) του φυσικού προβλήματος. Ως αποτέλεσμα το σύνολο των ιδιοσυναρτήσεων που ανήκουν στην ίδια ιδιοτιμή της ενέργειας δεν είναι μοναδικό και οι ιδιοσυναρτήσεις του συνόλου αυτού δεν είναι απαραίτητα ορθογώνιες μεταξύ τους. Έτσι, πρέπει να ελεγχθεί η ορθογωνιότητά τους. Επιπλέον, μπορούν να δημιουργηθούν νέα σύνολα ιδιοσυναρτήσεων που ανήκουν στην ίδια ιδιοτιμή της ενέργειας όταν έχει βρεθεί κάποιο "αρχικό" σύνολο.

Όπως και στο προηγούμενο κεφάλαιο θα ασχοληθούμε πρώτα με απλά προβλήματα τριών διαστάσεων και στη συνέχεια με κάπως πιο πολύπλοκα στα οποία το σωματίδιο βρίσκεται σε κεντρικό δυναμικό, $V(\mathbf{r}) = V(r)$. Ένα τέτοιο πρόβλημα είναι το άτομο του Υδρογόνου.

Η επίλυση των προβλημάτων τριών διαστάσεων, αλλά και η μελέτη συστήματος πολλών σωματιδίων διευκολύνεται σημαντικά με τη μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών την οποία θα διατυπώσουμε και θα αποδείξουμε με τη μορφή μιας βασικής πρότασης. Σημειώνεται ότι η μέθοδος χωρισμού των μεταβλητών μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε πιο γενικές περιπτώσεις.

Βασική Πρόταση. Αν ο τελεστής του Hamilton ενός κβαντομηχανικού προβλήματος είναι άθροισμα τελεστών $\widehat{h}_i$:

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N} \widehat{h}_i \tag{4.1α'}$$

και ο κάθε τελεστής $\widehat{h}_i$ εξαρτάται από μια μόνο συντεταγμένη, με εξίσωση ιδιοτιμών:

$$\widehat{h}_i u_i(x_i) = E_i u_i(x_i) \tag{4.1β'}$$

τότε η λύση της ανεξάρτητης από το χρόνο εξίσωσης του Schrödinger:

$$\widehat{H} U(x_1, x_2, \ldots, x_N) = E U(x_1, x_2, \ldots, x_N) \tag{4.1γ'}$$

είναι το γινόμενο των λύσεων των εξισώσεων (4.1ϐ'):

$$\boxed{U(x_1, x_2, \ldots, x_N) = u_1(x_1)u_2(x_2)\cdots u_N(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \prod_{i=1}^{N} u_i(x_i)} \tag{4.1δ'}$$

και η ενέργεια του συστήματος ισούται με το άθροισμα των E_i:

$$\boxed{E = \sum_{i=1}^{N} E_i} \tag{4.1ε'}$$

Απόδειξη. Η αντικατάσταση στη σχέσης (4.1γ') της συνάρτησης U από την (4.1δ') και του $\widehat{H}$ από (4.1α') δίνει:

$$\sum_{i=1}^{N} \widehat{h}_i \prod_{j=1}^{N} u_j(x_j) = E \prod_{j=1}^{N} u_j(x_j) \qquad \Rightarrow \qquad \sum_{i=1}^{N} \Big(\prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} u_j(x_j) \Big) \widehat{h}_i u_i(x_i) = E \prod_{j=1}^{N} u_j(x_j)$$

Διαιρούμε και τα δύο μέλη της τελευταίας εξίσωσης με το γινόμενο $\prod_{j=1}^{N} u_j$, οπότε έχουμε:

$$\frac{\displaystyle\sum_{i=1}^{N} \Big(\prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} u_j(x_j) \Big) \widehat{h}_i u_i(x_i)}{\displaystyle\prod_{j=1}^{N} u_j(x_j)} = E \qquad \Rightarrow \qquad \sum_{i=1}^{N} \frac{\widehat{h}_i u_i(x_i)}{u_i(x_i)} = E$$

Το αριστερό μέλος της εξίσωσης που καταλήξαμε είναι άθροισμα N όρων, ο κάθε ένας από τους οποίους εξαρτάται από μια μόνο συντεταγμένη και αυτές είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους. Για να ισχύει η σχέση αυτή πρέπει κάθε όρος του αθροίσματος να είναι μια σταθερά, το άθροισμα των οποίων πρέπει να ισούται με E. Δηλαδή:

$$\widehat{h}_i u_i(x_i) = E_i u_i(x_i), \quad i = 1, 2, \ldots, N \qquad \text{και} \qquad \sum_{i} E_i = E$$

Επομένως η U της σχέσης (4.1δ') είναι λύση της (4.1γ'), εφόσον οι u_i είναι λύσεις της (4.1ϐ').

Σημείωση. Σε ορισμένες περιπτώσεις η εφαρμογή της πρότασης μετατρέπει το τρισδιάστατο πρόβλημα σε γνωστά μονοδιάστατα προβλήματα. Σε πολλές περιπτώσεις για να γίνει ο τελεστή του Hamilton “διαχωρίσιμος” είναι απαραίτητο να γίνει μετασχηματισμός σε κατάλληλο σύστημα συντεταγμένων, ανάλογα με τη συμμετρία του προβλήματος. Μερικές φορές το ίδιο πρόβλημα είναι δυνατό να επιλύεται χρησιμοποιώντας διάφορα συστήματα συντεταγμένων, όπως για παράδειγμα στην περίπτωση του δυναμικού Coulomb ή του τρισδιάστατου ισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή.

4.1 Απλά προβλήματα τριών διαστάσεων

4.1.1 Σωματίδιο σε κυβικό κουτί

Θα εξετάσουμε μια γενίκευση του ορθογωνίου φρέατος δυναμικού απείρου βάθους θεωρώντας ένα σωματίδιο που κινείται ελεύθερα σε κυβικό κουτί ακμής L με τελείως ανακλαστικά τοιχώματα. Επειδή δεν ενεργούν δυνάμεις στο σωματίδιο μέσα στο κουτί, το δυναμικό μπορεί να θεωρηθεί μηδέν στο εσωτερικό του και άπειρο στο εξωτερικό του:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{για} \quad 0 < x < L, \;\; 0 < y < L, \;\; 0 < z < L \\ \infty & \text{αλλού} \end{cases}$$

Στην περιοχή που το δυναμικό είναι άπειρο (έξω από το κουτί) η κυματοσυνάρτηση είναι $u(x) = 0$, ενώ στο εσωτερικό του είναι η λύση της εξίσωσης του Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(x,y,z) = Eu(x,y,z), \quad 0 < x < L, \;\; 0 < y < L, \;\; 0 < z < L \tag{4.2α΄}$$

με οριακές συνθήκες:

$$u(0,y,z) = u(L,y,z) = 0, \quad u(x,0,z) = u(x,L,z) = 0, \quad u(x,y,0) = u(x,y,L) = 0 \tag{4.2β΄}$$

που επιβάλλονται ώστε η λύση της Δ.Ε. (4.2α΄) να είναι συνεχής στα τοιχώματα του κουτιού.

Επειδή ο τελεστής του Hamilton είναι άθροισμα τριών τελεστών:

$$\widehat{H} = \widehat{h}_1 + \widehat{h}_2 + \widehat{h}_3, \qquad \widehat{h}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{κλπ}$$

αν εφαρμόσουμε τη βασική πρόταση, το πρόβλημα ανάγεται στην επίλυση των εξισώσεων:

$$\begin{array}{ccc} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2u_1(x)}{dx^2} = E_1u_1(x), & -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2u_2(y)}{dy^2} = E_2u_2(y), & -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2u_3(z)}{dz^2} = E_3u_3(z) \\ 0 < x < L, & 0 < y < L, & 0 < z < L \end{array}$$

Οι τρεις εξισώσεις στις οποίες καταλήξαμε είναι ίδιες με την εξίσωση του Schrödinger του προβλήματος του φρέατος δυναμικού απείρου βάθους και εύρους L, που μελετήθηκε στο εδάφιο 3.3 για το οποίο οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις είναι:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2, \qquad u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Επομένως σύμφωνα με τη βασική πρόταση, οι ιδιοτιμές της εξίσωσης του Schrödinger και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις του σωματιδίου σε κυβικό κουτί με τελείως ανακλαστικά τοιχώματα είναι:

$$\boxed{E_{n_xn_yn_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \qquad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots} \tag{4.3α΄}$$

$$\boxed{u_{n_xn_yn_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}} \tag{4.3β΄}$$

Δηλαδή οι κανονικοποίηση των κυματοσυναρτήσεων είναι αντιστρόφως ανάλογη της τετραγωνικής ρίζας του όγκου του κουτιού.

Παρατηρούμε ότι δεν είναι οι τιμές των κβαντικών αριθμών n_x, n_y, n_z που καθορίζουν την ενέργεια του σωματιδίου, αλλά το άθροισμα των τετραγώνων αυτών των αριθμών:

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2, \qquad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots$$

Αυτό έχει ως αποτέλεσμα οι ιδιοσυναρτήσεις που αναφέρονται στους ακέραιους n_x, n_y, n_z να εξαρτώνται όχι μόνο από τις τιμές τους αλλά και από τη διάταξή τους. Δηλαδή, αυτές είναι γραμμικά ανεξάρτητες και ανήκουν στην ίδια ιδιοτιμή $E_{n_xn_yn_z}$. Αυτή η ιδιοτιμή της ενέργειας είναι εκφυλισμένη. Ο βαθμός εκφυλισμού κάθε ενεργειακής κατάστασης είναι τουλάχιστον ίσος με τις δυνατές διατάξεις των τριών θετικών ακέραιων αριθμών. Μπορεί όμως να είναι και μεγαλύτερος αν υπάρχουν περισσότερες της μιας τριάδες αριθμών που το άθροισμα των τετραγώνων τους ισούται με το ίδιο n^2. Για παράδειγμα ενώ η βασική ενεργειακή κατάσταση, $E_{111} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\,3$, δεν είναι εκφυλισμένη, η πρώτη διεγερμένη ενεργειακή κατάσταση, $E_{112} = E_{121} = E_{211} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\,6$, είναι τρεις φορές εκφυλισμένη, αφού οι ιδιοσυναρτήσεις u_{112}, u_{121} και u_{211} που είναι γραμμικά ανεξάρτητες ανήκουν στην ίδια ιδιοτιμή της ενέργειας. Λόγω του εκφυλισμού ο γραμμικός συνδυασμός $u = \alpha u_{112} + \beta u_{121} + \gamma u_{211}$ είναι επίσης μια ιδιοσυνάρτηση που ανήκει στην πρώτη διεγερμένη ενεργειακή κατάσταση.

Ο εκφυλισμός στην περίπτωση που εξετάζουμε οφείλεται στην κυβική συμμετρία του προβλήματος. Αν όμως το σωματίδιο είναι ελεύθερο να κινείται όχι σε κυβικό κουτί, αλλά σε ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο ακμών L_1, L_2 και L_3, οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι εν γένει μη εκφυλισμένες.

4.1.2 Σωματίδιο σε τρισδιάστατο ισοτροπικό αρμονικό ταλαντωτή

Ο τρισδιάστατος ισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής είναι ένα υλικό σημείο που έλκεται από σταθερό κέντρο με δύναμη ανάλογη της απόστασης, οπότε η δυναμική του ενέργεια είναι: $V(\mathbf{r}) = \dfrac{1}{2}\,k\,r^2 = \dfrac{1}{2}\,k(x^2+y^2+z^2)$.

Επειδή ο τελεστής του Hamilton γράφεται:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}\,k(x^2+y^2+z^2) = \widehat{h}_1 + \widehat{h}_2 + \widehat{h}_3, \qquad \widehat{h}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\,kx^2 \quad \text{κλπ}$$

αν εφαρμόσουμε τη βασική πρόταση, το πρόβλημα ανάγεται στην επίλυση των εξισώσεων:

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}\,kx^2u_1(x) &= E_1u_1(x), \qquad u_1(-\infty) = u_1(\infty) = 0\\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_2(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}\,ky^2u_2(y) &= E_2u_2(y), \qquad u_2(-\infty) = u_2(\infty) = 0\\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_3(z)}{dz^2} + \frac{1}{2}\,kz^2u_3(z) &= E_3u_3(z), \qquad u_3(-\infty) = u_3(\infty) = 0
\end{aligned}$$

Οι τρεις εξισώσεις στις οποίες καταλήξαμε είναι ίδιες με την εξίσωση του Schrödinger του μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή με σταθερά $\alpha = (m\omega/\hbar)^{1/2}$ $(\omega = \sqrt{k/m})$ που μελετήθηκε στο εδάφιο 3.5.1 για τον οποίο οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις είναι:

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega, \qquad u_n(x) = N_nH_n(\alpha x)\,\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}, \quad n = 0,1,2,3,\ldots$$

Επομένως σύμφωνα με τη βασική πρόταση, οι ιδιοτιμές της εξίσωσης του Schrödinger και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις του τρισδιάστατου ισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή είναι:

$$\boxed{E_{n_xn_yn_z} = \big(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\big)\hbar\omega, \qquad n_x,\,n_y,\,n_z = 0,1,2,3,\ldots} \tag{4.4α΄}$$

$$\boxed{u_{n_xn_yn_z}(x,y,z) = N_{n_xn_yn_z}H_{n_x}(\alpha x)H_{n_y}(\alpha y)H_{n_z}(\alpha z)\,\mathrm{e}^{-\alpha^2(x^2+y^2+z^2)/2}} \tag{4.4β΄}$$

όπου: $N_{n_xn_yn_z} = \left(\frac{(\alpha/\sqrt{\pi})^3}{2^{n_x+n_y+n_z}\,n_x!\,n_y!\,n_z!}\right)^{1/2}$.

Παρατηρούμε ότι η ενέργεια εξαρτάται από το άθροισμα των μη αρνητικών ακέραιων αριθμών n_x, n_y, n_z και κάθε τριάδα κβαντικών αριθμών που έχει το ίδιο άθροισμα αντιστοιχούν σε καταστάσεις με την ίδια ενέργεια. Έτσι, ενώ η ενεργειακή κατάσταση $E_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$ είναι μη εκφυλισμένη, η ενεργειακή κατάσταση $E_{100} = E_{010} = E_{001} = \frac{5}{2}\hbar\omega$ είναι τρεις φορές εκφυλισμένη και αντιστοιχούν σε αυτήν οι γραμμικά ανεξάρτητες ιδιοσυναρτήσεις u_{100}, u_{010}, u_{001}. Ο βαθμός εκφυλισμού της ενεργειακής κατάστασης E_n όπου $n = n_x + n_y + n_z$ είναι ίσος με το πλήθος των τρόπων που τρεις μη αρνητικοί αριθμοί μπορούν να εκλεγούν για να δώσουν τον ίδιο άθροισμα. Μπορεί να δειχθεί (βλέπε άσκηση 3 του εδαφίου 4.5) ότι ο βαθμός εκφυλισμού της ενεργειακής κατάστασης E_n είναι:

$$g = \tfrac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

Ο εκφυλισμός των ενεργειακών καταστάσεων του ισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή οφείλεται στη σφαιρική συμμετρία του προβλήματος. Στην περίπτωση που ο αρμονικός ταλαντωτής δεν είναι ισοτροπικός βρίσκεται ότι οι ενεργειακές ιδιοτιμές είναι εν γένει μη εκφυλισμένες.

Ο ισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\,k\,r^2$ είναι ένα παράδειγμα κεντρικού δυναμικού και επομένως ο τελεστής του Hamilton μπορεί να διαχωριστεί και σε σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων. Σε αυτό το σύστημα οι ιδιοτιμές της ενέργειας και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις του $\widehat{H}$ είναι:

$$E_{nl} = \big(2n+l+\frac{3}{2}\big)\hbar\omega, \quad u_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi), \quad n,\, l = 0,1,2,\ldots, \quad m = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l$$

όπου $Y_l^m(\theta,\phi)$ οι σφαιρικές αρμονικές και $R_{nl}(r)$ η ακτινική κυματοσυνάρτηση που εκφράζεται με τη βοήθεια των πολυωνύμων Laquerre:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r^l\, L_n^{l+1/2}(\alpha^2 r^2)\, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2}$$

Σημειώνεται ότι ενώ το ενεργειακό φάσμα δεν εξαρτάται από το σύστημα συντεταγμένων, οι σφαιρικές συντεταγμένες οδηγούν σε διαφορετικό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων που ανήκουν στην ίδια εκφυλισμένη ιδιοτιμή, από ότι το σύνολο που βρίσκεται όταν χρησιμοποιούνται καρτεσιανές συντεταγμένες.

4.2 Προβλήματα κεντρικών δυναμικών

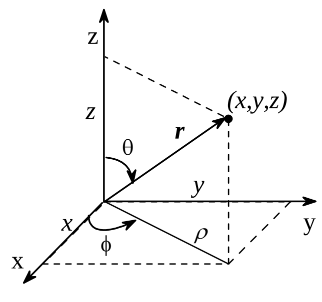
Υπάρχουν πολλά φυσικά προβλήματα στα οποία ο τελεστής του Hamilton δεν είναι διαχωρίσιμος σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Ένα τέτοιο βασικό πρόβλημα είναι η περίπτωση του δυναμικού Coulomb που σχετίζεται με τα υδρογονοειδή άτομα για το οποίο ο τελεστής του Hamilton είναι διαχωρίσιμος σε σφαιρικές - πολικές συντεταγμένες, αλλά και σε παραβολικές συντεταγμένες. Επειδή στη συνέχεια θα ασχοληθούμε με κεντρικά δυναμικά, δηλαδή με δυναμικά για τα οποία ισχύει $V(\mathbf{r}) = V(r)$ θα αναφέρουμε μερικά βασικά χαρακτηριστικά του συστήματος των σφαιρικών συντεταγμένων.

Οι σχέσεις μεταξύ καρτεσιανών και σφαιρικών συντεταγμένων, όπως προκύπτει από το Σχ. 4.1, είναι:

$$x = r\sin\theta\cos\phi\,, \quad y = r\sin\theta\sin\phi\,, \quad z = r\cos\theta$$

$$r = (x^2+y^2+z^2)^{1/2}, \quad \cos\theta = z/(x^2+y^2+z^2)^{1/2}, \quad \tan\phi = y/x$$

όπου οι συντεταγμένες r, θ, ϕ μπορεί να παίρνουν τιμές στα διαστήματα: $r \in [0,\infty)$, $\theta \in [0,\pi]$ και $\phi \in [0,2\pi]$.



Σχήμα 4.1:.

Με τη βοήθεια των παραπάνω σχέσεων ο τελεστής του Laplace γράφεται:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{4.5}$$

Σημειώνεται ότι το γωνιακό μέρος του ∇^2 σχετίζεται με τον τελεστή της στροφορμής, που ορίσαμε στο εδάφιο Γ΄.7, όπως θα φανεί παρακάτω.

Η τροχιακή στροφορμή ορίζεται από τη σχέση:

$$\widehat{\mathbf{l}} = \widehat{\mathbf{r}} \times \widehat{\mathbf{p}} = \widehat{\mathbf{r}} \times (-i\hbar\boldsymbol{\nabla}) = \widehat{l}_x\mathbf{x_0} + \widehat{l}_y\mathbf{y_0} + \widehat{l}_z\mathbf{z_0} \tag{4.6}$$

όπου οι συνιστώσες $\widehat{l}_x$, $\widehat{l}_y$ και $\widehat{l}_z$ του τελεστή της στροφορμής, σε καρτεσιανές συντεταγμένες, είναι:

$$\widehat{l}_x = y\widehat{p}_z - z\widehat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{4.7α΄}$$

$$\widehat{l}_y = z\widehat{p}_x - x\widehat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{4.7β΄}$$

$$\widehat{l}_z = x\widehat{p}_y - y\widehat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{4.7γ΄}$$

Οι προβολές του τελεστή της στροφορμής μπορούν να εκφραστούν και σε σφαιρικές συντεταγμένες αν χρησιμοποιηθούν οι σχέσεις που συνδέουν τις καρτεσιανές με τις σφαιρικές συντεταγμένες. Οι εκφράσεις αυτές είναι:

$$\widehat{l}_x = i\hbar\Big(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\,\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Big) \tag{4.8α΄}$$

$$\widehat{l}_y = i\hbar\Big(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\,\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Big) \tag{4.8β΄}$$

$$\widehat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{4.8γ΄}$$

Με τη βοήθεια αυτών των εκφράσεων μπορεί να δειχθεί μετά από λίγες πράξεις, ότι:

$$\widehat{\mathbf{l}}^2 = \widehat{l}_x^2 + \widehat{l}_y^2 + \widehat{l}_z^2 \quad\Rightarrow\quad \boxed{\widehat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big]} \tag{4.9}$$

Δηλαδή, το γωνιακό μέρος του τελεστή του Laplace συνδέεται άμεσα με τον τελεστή της στροφορμής, που μπορεί να γραφεί και με τη μορφή:

$$\boxed{\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) - \frac{\widehat{\mathbf{l}}^2}{\hbar^2 r^2}} \tag{4.10}$$

Επομένως, ο τελεστής του Hamilton για ένα κεντρικό δυναμικό $V(\mathbf{r}) = V(r)$ γράφεται:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) \quad\Rightarrow\quad \boxed{\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + \frac{\widehat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(r)} \tag{4.11}$$

Για τη μάζα του σωματιδίου θα χρησιμοποιούμε στο εξής το γράμμα μ για να αποφύγουμε τυχών σύγχυση με τον κβαντικό αριθμό m με τον οποίο συνηθίζεται να χαρακτηρίζονται οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{l}_z$.

Η έκφραση (4.11) του τελεστή του Hamilton είναι πολύ χρήσιμη επειδή φαίνεται αμέσως ότι ισχύει:

$$\big[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{l}}\big] = \big[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{l}}^2\big] = \big[\widehat{H}, \widehat{l_i}\big] = 0, \quad i = x, y, z$$

όπως αναφέρθηκε στην ιδιότητα 4 του εδαφίου Γ΄.7. Επομένως, σύμφωνα με τη γνωστή πρόταση (σχέση (2.69)):

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\widehat{A}\rangle = \langle\big[\widehat{A}, \widehat{H}\big]\rangle$$

προκύπτει ότι, η μέση τιμή της στροφορμής και των συνιστωσών της είναι σταθερές της κίνησης. Δηλαδή, σε προβλήματα σφαιρικής συμμετρίας υπάρχει διατήρηση των παρατηρήσιμων μεγεθών του μέτρου της στροφορμής και της προβολής της επάνω σε οποιοδήποτε άξονα.

Από τις σχέσεις:

$$\big[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{l}}^2\big] = \big[\widehat{H}, \widehat{l_i}\big] = 0, \quad i = x, y, z$$

και τις σχέσεις αντιμετάθεσης:

$$\big[\widehat{l_x}, \widehat{l_y}\big] = i\hbar\widehat{l_z}, \qquad \big[\widehat{l_y}, \widehat{l_z}\big] = i\hbar\widehat{l_x}, \qquad \big[\widehat{l_z}, \widehat{l_x}\big] = i\hbar\widehat{l_y}$$

προκύπτει επίσης ότι, σε κεντρικά πεδία δυνάμεων, τα φυσικά μεγέθη H, $\mathbf{l}^2$ και μια από τις συνιστώσες της στροφορμής είναι συμβιβαστά μεγέθη και οι αντίστοιχοι τελεστές $\widehat{H}$, $\widehat{\mathbf{l}}^2$ **και ένας** από τους τελεστές $\widehat{l_x}$, $\widehat{l_y}$ και $\widehat{l_z}$ έχουν ένα κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων. Για λόγους απλότητας, οι κοινές ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών $\widehat{H}$ και $\widehat{\mathbf{l}}^2$ διαλέγονται να είναι και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{l_z}$.

Τέλος, η εξίσωση του Schödinger για ένα σωματίδιο σε κεντρικό δυναμικό γράφεται:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big)u(\mathbf{r}) + \Big[\frac{\widehat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(r)\Big]u(\mathbf{r}) = Eu(\mathbf{r}) \tag{4.12}$$

Η εξίσωση αυτή μπορεί να λυθεί με τη μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών, ζητώντας λύσεις της μορφής:

$$u(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \tag{4.13}$$

Η αντικατάσταση της $u(r, \theta, \phi)$ από την (4.13) στη Δ.Ε. (4.12) και η διαίρεση της σχέσης που προκύπτει με το γινόμενο $R(r)Y(\theta, \phi)$, μετά από μια αναδιάταξη των όρων, δίνει:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\Big(r^2\frac{dR(r)}{dr}\Big) + \big[V(r) - E\big]r^2 = -\frac{1}{2\mu}\frac{1}{Y(\theta, \phi)}\widehat{\mathbf{l}}^2 Y(\theta, \phi) \tag{4.14}$$

Επειδή το αριστερό μέλος της Δ.Ε. (4.14) είναι συνάρτηση μόνο της ανεξάρτητης μεταβλητής r και το δεξί μέλος είναι συνάρτηση μόνο των ανεξάρτητων μεταβλητών θ και ϕ, η εξίσωση ικανοποιείται όταν κάθε μέλος της είναι μια σταθερά. Τη σταθερά αυτήν την ονομάζουμε $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\lambda_1$. Έτσι, οδηγούμαστε σε δύο εξισώσεις:

α) Τη "γωνιακή" εξίσωση:

$$\boxed{\widehat{\mathbf{l}}^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2\lambda_1 Y(\theta, \phi)} \tag{4.15α΄}$$

Δηλαδή:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial\phi^2} = -\lambda_1 Y(\theta, \phi) \tag{4.15β΄}$$

β) Την "ακτινική" εξίσωση:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\Big(r^2\frac{dR(r)}{dr}\Big) + \Big(V(r) + \lambda_1\frac{\hbar^2}{2\mu\, r^2}\Big)R(r) = ER(r)} \tag{4.16}$$

Θα μελετήσουμε τις δύο Δ.Ε. ξεχωριστά. Πρώτα τη Δ.Ε. (4.15β΄) και στη συνέχεια τη Δ.Ε. (4.16). Είναι χρήσιμο να σημειωθεί ότι η γωνιακή εξίσωση (4.15β΄) δεν εξαρτάται από τη μορφή του κεντρικού δυναμικού και επομένως οι λύσεις της ισχύουν για οποιοδήποτε κεντρικό δυναμικό.

4.2.1 Μελέτη της γωνιακής εξίσωσης

Η εξίσωση (4.15β΄) λύνεται με τη μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών, ζητώντας λύση της μορφής:

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Ακολουθώντας τη γνωστή διαδικασία, βρίσκουμε ότι:

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\Big(\sin\theta\,\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\Big)+\lambda_1\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\,\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \tag{4.17}$$

Επειδή οι μεταβλητές θ και ϕ είναι ανεξάρτητες, πρέπει και τα δύο μέλη της (4.17) να είναι ίσα με μια σταθερά, τη λ_2. Έτσι, η Δ.Ε. (4.17) χωρίζεται στις δύο εξισώσεις:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\lambda_2\Phi=0 \tag{4.18α΄}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{d}{d\theta}\Big(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\Big)+\Big(\lambda_1-\frac{\lambda_2}{\sin^2\theta}\Big)\Theta=0 \tag{4.18β΄}$$

Η Δ.Ε. (4.18α΄) λύνεται αμέσως. Η γενική της λύση είναι:

$$\Phi(\phi)=A\,\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}\phi}+B\,\mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}\phi}$$

Η συνάρτηση $\Phi(\phi)$ πρέπει να είναι συνεχής και περιοδική με περίοδο 2π. Διαφορετικά η $u(r,\theta,\phi)$ δεν θα ήταν μονότιμη σε κάθε σημείο του χώρου. Πρέπει δηλαδή να ισχύουν οι οριακές συνθήκες:

$$\Phi(\phi_0)=\Phi(\phi_0+2\pi),\quad \text{και}\quad \Phi'(\phi_0)=\Phi'(\phi_0+2\pi),\quad \phi_0\in[0,2\pi]$$

Οι συνθήκες αυτές για $\phi_0=0$ δίνουν:

$$A+B=A\,\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}2\pi}+B\,\mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\;\Rightarrow\;\big(1-\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\big)A+\big(1-\mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\big)B=0 \tag{4.19α΄}$$

$$i\sqrt{\lambda_2}\big(A-B\big)=i\sqrt{\lambda_2}\big(A\,\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}2\pi}-B\mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\big)\Rightarrow\;\big(1-\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\big)A-\big(1-\mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\big)B=0 \tag{4.19β΄}$$

Το ομογενές σύστημα στο οποίο καταλήξαμε έχει μια προφανή λύση: $A=B=0$, που δεν παρουσιάζει ενδιαφέρον. Για να υπάρχει λύση ως προς A και B διαφορετική του μηδενός πρέπει η ορίζουσα των συντελεστών των αγνώστων να είναι μηδέν:

$$\begin{vmatrix} 1-\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}2\pi} & 1-\mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\\ 1-\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}2\pi} & -\big(1-\mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\big)\end{vmatrix}\quad\Rightarrow\quad 2\big(1-\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\big)\big(1-\mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}2\pi}\big)=0$$

Η τελευταία εξίσωση ισχύει όταν:

$$\mathrm{e}^{i\sqrt{\lambda_2}2\pi}=1\quad\text{και}\quad \mathrm{e}^{-i\sqrt{\lambda_2}2\pi}=1$$

Οι δύο αυτές εξισώσεις ισχύουν όταν:

$$i\sqrt{\lambda_2}2\pi = \ln 1 \quad \Rightarrow \quad i\sqrt{\lambda_2}2\pi = 0 + im2\pi, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \quad \Rightarrow \quad \boxed{\boxed{\lambda_2 = m^2}} \tag{4.20}$$

Γι' αυτές τις τιμές του $\sqrt{\lambda_2}$ οι εξισώσεις (4.19α') και (4.19β') γράφονται:

$$0 \cdot A + 0 \cdot B = 0 \quad \text{και} \quad 0 \cdot A - 0 \cdot B = 0$$

Δηλαδή, οι δύο σταθερές A και B παραμένουν αυθαίρετες. Αυτό σημαίνει ότι σε κάθε ιδιοτιμή λ_2 αντιστοιχούν δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις. Εξαίρεση αποτελεί η ιδιοτιμή $\lambda_2 = 0$, στην οποία αντιστοιχεί η ιδιοσυνάρτηση $\Phi_0(\phi) = A + B =$σταθερά. Οι δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις είναι:

$$\Phi_{\lambda_2}(\phi) = \text{σταθ.}\, \mathrm{e}^{\pm i\sqrt{\lambda_2}\,\phi} \quad \Rightarrow \quad \Phi_{\pm m}(\phi) = \text{σταθ.}\, \mathrm{e}^{\pm im\,\phi}$$

Με κανονικοποίηση αυτής έχουμε:

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\phi)|^2 d\phi = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\boxed{\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{im\,\phi}, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots}} \tag{4.21}$$

Στη συνάρτηση αυτή ο εκθέτης έχει γραφεί χωρίς το διπλό σημείο, επειδή νοείται ότι ο ακέραιος αριθμός m μπορεί να είναι θετικός, μηδέν ή αρνητικός αριθμός. Ο ακέραιος m λέγεται **μαγνητικός κβαντικός αριθμός** της στροφορμής.

Σημείωση. Στις ιδιοτιμές $\lambda_2 = m^2$ και στις κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις $\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{m\,\phi}$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ μπορούμε να οδηγηθούμε αμέσως αν χρησιμοποιήσουμε το παράδειγμα 2 του εδαφίου Γ'.1.1. Στο παράδειγμα αυτό είδαμε ότι οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{l}_z = -i\hbar\frac{d}{d\phi}$ είναι:

$$\widehat{l}_z\Phi_m(\phi) = \hbar m\Phi_m(\phi) \qquad \Rightarrow \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \quad \text{και} \quad \Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{im\,\phi} \tag{4.22}$$

Η επίδραση του τελεστή $\widehat{l}_z$ από τα αριστερά και στα δύο μέλη της πρώτης από τις εξισώσεις της (4.22), επειδή $\widehat{l}_z^2 = -\hbar^2\,\frac{d^2}{d\phi^2}$, δίνει:

$$\widehat{l}_z^2\Phi = \hbar m\widehat{l}_z\Phi \quad \Rightarrow \quad -\hbar^2\,\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = \hbar^2 m^2\Phi \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0$$

Η σύγκριση της τελευταίας εξίσωσης με την εξίσωση (4.18α') δίνει τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις που βρέθηκαν προηγουμένως.

Το επόμενο βήμα είναι η λύση της Δ.Ε. (4.18β'). Επειδή η όλη διαδικασία απαιτεί κάποιον χρόνο και χώρο, θα δώσουμε μόνο τα πιο βασικά βήματα που οδηγούν στη λύση της (4.18β'), χωρίς να δοθούν όλες οι λεπτομέρειες.

Θέτουμε στη Δ.Ε. (4.18β') $\lambda_2 = m^2$ και κάνουμε αλλαγή της μεταβλητής:

$$\xi = \cos\theta, \quad \theta \in [0, \pi] \quad \Rightarrow \quad \xi \in [-1, 1]$$

οπότε:

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = -\sin\theta\,\frac{d\Theta}{d\xi}\,, \qquad \frac{d}{d\theta} = -\sin\theta\,\frac{d}{d\xi}$$

και

$$\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{d}{d\theta}\Big(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\Big) = \frac{d}{d\xi}\Big(\sin^2\theta\,\frac{d\Theta}{d\xi}\Big) = \frac{d}{d\xi}\Big[(1-\xi^2)\,\frac{d\Theta}{d\xi}\Big]$$

Η αντικατάσταση των παραπάνω στη Δ.Ε. (4.18б́) δίνει:

$$\frac{d}{d\xi}\Big[(1-\xi^2)\,\frac{d\Theta}{d\xi}\Big] + \Big(\lambda_1 - \frac{m^2}{1-\xi^2}\Big)\Theta = 0 \tag{4.23}$$

Η Δ.Ε. (4.23) είναι η προσηρτημένη Δ.Ε. του Legendre και μπορεί να λυθεί αν ακολουθήσουμε παρόμοια διαδικασία με αυτήν της Δ.Ε. του μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή. Όμως, η όλη διαδικασία δεν είναι απλή. Μπορεί να δειχθεί ότι για να υπάρχει φραγμένη λύση της Δ.Ε. για $\xi = \pm 1$ πρέπει να ισχύει:

$$\boxed{\lambda_1 = l(l+1), \quad l = 0,1,2,\ldots \quad \text{και} \quad |m| \le l} \tag{4.24}$$

Η λύση αυτή έχει τη μορφή:

$$\boxed{\Theta(\xi) = P_l^m(\xi) = \big(1-\xi^2\big)^{|m|/2}\,\frac{d^{|m|}P_l(\xi)}{d\xi^{|m|}}, \qquad \xi = \cos\theta} \tag{4.25}$$

Οι συναρτήσεις $P_l^m(\xi)$ λέγονται **προσηρτημένες συναρτήσεις Legendre**. Οι συναρτήσεις $P_l(\xi)$ είναι τα **πολυώνυμα Legendre** που είναι λύσεις της Δ.Ε. του Legendre:

$$\frac{d}{d\xi}\Big[(1-\xi^2)\,P_l'(\xi)\Big] + l(l+1)P_l(\xi) = 0, \quad l = 0,1,2,\ldots, \quad \xi \in [-1,1] \tag{4.26}$$

Η εξίσωση αυτή προκύπτει από την Δ.Ε. (4.23) για $m = 0$.

Η δεύτερη γραμμικά ανεξάρτητη λύση της Δ.Ε. (4.23) δεν είναι φραγμένη στα σημεία $\xi = \pm 1$ και επομένως για την αντίστοιχη αυθαίρετη σταθερά πρέπει να τεθεί 0.

Επειδή οι προσηρτημένες συναρτήσεις Legendre εκφράζονται με τη βοήθεια των παραγώγων των πολυωνύμων Legendre αναφέρουμε μερικές ιδιότητες αυτών, εκτός της Δ.Ε. (4.26):

α) Γεννήτρια συνάρτηση: $\dfrac{1}{1+t^2-2\xi t} = \displaystyle\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\xi)\,t^l, \quad |t|<1, \quad |\xi| \le 1$

β) Τύπος του Rodriques: $P_l(\xi) = \dfrac{(-1)^l}{2^l l!}\dfrac{d^l}{d\xi^l}\left[(1-\xi^2)^l\right], \qquad \xi \in [-1,1]$

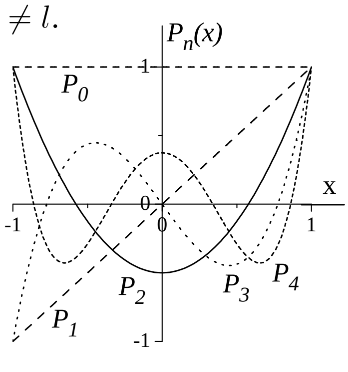
γ) Αναδρομικές σχέσεις:
$(2l+1)\xi P_l(\xi) = (l+1)P_{l+1}(\xi) + lP_{l-1}(\xi), \qquad l = 1,2,3,\ldots$
$P_l(\xi) = P_{l+1}'(\xi) + P_{l-1}'(\xi) - 2\xi P_l(\xi), \qquad l = 1,2,3,\ldots$

ε) Συμμετρία: $P_l(\xi) = (-1)^l P_l(-\xi), \; P_l(1) = 0, \; P_l(-1) = (-1)^l$

δ)Ορογωνιότητα: $\big(P_l(\xi), P_m(\xi)\big) = 0 \quad \text{για} \quad m \neq l.$

Πίνακας 4.1: Οι εκφράσεις των πρώτων πολυωνύμων Legendre.

$P_0(\xi) = 1$
$P_1(\xi) = x$
$P_2(\xi) = \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1)$
$P_3(\xi) = \frac{1}{2}(5\xi^3 - 3\xi)$
$P_4(\xi) = \frac{1}{8}(35\xi^4 - 30\xi^2 + 3)$
$P_5(\xi) = \frac{1}{8}(63\xi^5 - 70\xi^3 + 15\xi)$



Σχήμα 4.2: Γραφική παράσταση των πρώτων πολυωνύμων Legendre

Με τη βοήθεια των σχέσεων (4.21) και (4.25) οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις της γωνιακής εξίσωσης είναι:

$$\boxed{Y(\theta,\phi) = Y_l^m(\theta,\phi) = N_{lm}(1-\cos^2\theta)^{|m|/2}\,\frac{d^{|m|}P_l(\cos\theta)}{d\cos^{|m|}\theta}\,\mathrm{e}^{im\phi}} \qquad (4.27α΄)$$

Ο παράγοντας N_{lm} προκύπτει ότι είναι:

$$N_{lm} = (-1)^{m\,\delta_{m,|m|}}\left(\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}\right)^{1/2} \qquad (4.27β΄)$$

Ο παράγοντας φάσης $(-1)^m$ δεν είναι απαραίτητος για την ιδιότητα της ορθοκανονικότητας, μπορεί όμως να τεθεί λόγω της ομογένειας της Δ.Ε. (4.15β΄). Μερικές φορές ο παράγοντας αυτός εκλέγεται διαφορετικά.

Οι συναρτήσεις $Y_l^m(\theta,\phi)$, που εμφανίζονται σε προβλήματα σφαιρικής συμμετρίας και προήλθαν από την εξάρτηση του τελεστή του Laplace από τις γωνίες θ και ϕ λέγονται **σφαιρικές αρμονικές**. Αυτές αποτελούν ορθοκανονικό σύστημα συναρτήσεων. Δηλαδή ισχύει:

$$\boxed{\left(Y_l^m, Y_{l'}^{m'}\right) = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}(Y_l^m(\theta,\phi))^* Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega = \delta_{ll'}\delta_{mm'}, \quad d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi} \qquad (4.28)$$

Οι πρώτες σφαιρικές αρμονικές (για $l = 0, 1, 2$) είναι της μορφής:

$$\begin{aligned}
Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\\
Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}P_1(\cos\theta)\\
Y_1^{\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\phi} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm iy}{r}\\
Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{2z^2-x^2-y^2}{r^2} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}P_2(\cos\theta)\\
Y_2^{\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\phi} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x\pm iy)z}{r^2}\\
Y_2^{\pm2} &= \mp\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\,\mathrm{e}^{\pm i2\phi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\frac{(x\pm iy)^2}{r^2}
\end{aligned} \qquad (4.29)$$

Για της σφαιρικές αρμονικές ισχύουν οι σχέσεις:

$$\left(Y_l^m(\theta,\phi)\right)^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\phi) \qquad (4.30α΄)$$

$$Y_l^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta), \quad Y_l^m(0,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\delta_{m0} \qquad (4.30β΄)$$

καθώς και το **θεώρημα πρόσθεσης** (addition theorem):

$$\boxed{P_l(\cos\omega_{\mathbf{rr}'}) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}^*(\Omega)Y_{lm}(\Omega')} \qquad (4.30γ΄)$$

όπου $\Omega = (\theta,\phi)$ και $\Omega' = (\theta',\phi')$ οι κατευθύνσεις των διανυσμάτων $\mathbf{r}$ και $\mathbf{r}'$ και $\omega_{\mathbf{rr}'}$ η μεταξύ τους γωνία. Ισχύει: $\cos\omega_{\mathbf{rr}'} = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\phi-\phi')$.

Η σχέση (4.30γ΄) για $\Omega = \Omega'$, δηλαδή $\omega_{\mathbf{rr'}} = 0$, οπότε $P_l(1) = 1$, γράφεται:

$$\boxed{\sum_{m=-l}^{l} |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}} \tag{4.30δ΄}$$

Στην Ατομική και στην Πυρηνική Φυσική, η σχέση αυτή μπορεί να ερμηνευτεί και ως εξής: όταν όλες οι $m-$καταστάσεις που αντιστοιχούν σε ένα δοσμένο l είναι κατειλημμένες (δηλαδή υπάρχει κλειστός φλοιός), τότε το σύστημα έχει σφαιρική συμμετρία (δεν εξαρτάται από την κατεύθυνση στο χώρο).

Από τη σχέση (4.30β΄) παρατηρούμε ότι οι σφαιρικές αρμονικές με $m = 0$ δεν εξαρτώνται από τη γωνία ϕ και επομένως έχουν κυλινδρική συμμετρία.

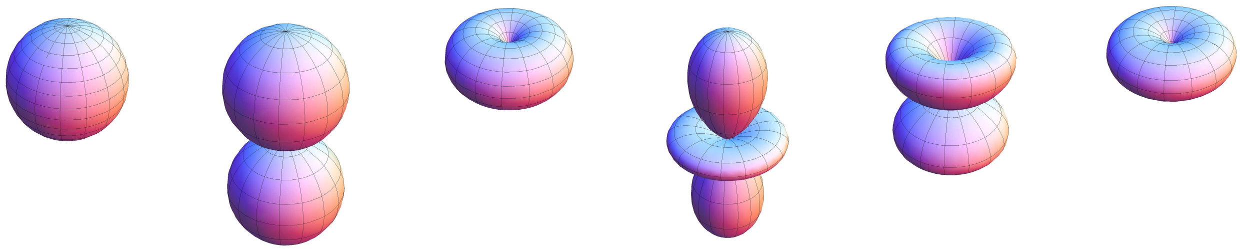
Σημείωση. Μια βασική χρησιμότητα των σφαιρικών αρμονικών οφείλεται στο γεγονός ότι οι σφαιρικές αρμονικές αποτελούν ένα πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων. Διαφορετικά, κάθε συνάρτηση $f(\theta,\phi)$ που ικανοποιεί γενικές ιδιότητες συνέχειας μπορεί να παρασταθεί με μια ομοιόμορφα συγκλίνουσα σειρά σφαιρικών αρμονικών της μορφής:

$$\boxed{f(\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} c_{lm} Y_l^m(\theta,\phi)} \tag{4.31α΄}$$

όπου:

$$\boxed{c_{lm} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \left(Y_l^m(\theta,\phi)\right)^* f(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega} \tag{4.31β΄}$$

Τέλος, στο Σχ. 4.3 δίνεται η μορφή του μέτρου μερικών σφαιρικών αρμονικών.



Σχήμα 4.3: Η γραφική παράσταση της $|Y_l^m(\theta,\phi)|$ για $lm = 00,\ 10,\ 11,\ 20,\ 21$ και 22, αντίστοιχα.

Οι γραφικές παραστάσεις των σφαιρικών αρμονικών του Σχ. 4.3 έγιναν με τις παρακάτω εντολές της Mathematica.

```
f[lx_, mx_, theta_, phi_] := Abs[SphericalHarmonicY[lx, mx, theta, phi]]
For[l = 0, l < 3, l++,
For[m = 0, m <= l, m++,
xxx = SphericalPlot3D[f[l, m, x, y], {x, 0, Pi}, {y, 0, 2 * Pi}, Axes → None, Boxed → False];
Print["l = ", l, "  m = ", m, xxx]    ]    ]
```

Συνοψίζοντας, παρατηρούμε ότι οι σφαιρικές αρμονικές είναι ιδιοσυναρτήσεις τόσο του τελεστή $\widehat{\mathbf{l}}^2$ όσο και του τελεστή $\widehat{l}_z$ με ιδιοτιμές που δίνονται από τις σχέσεις:

$$\boxed{\widehat{\mathbf{l}}^2 Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\phi), \qquad l = 0,1,2,\ldots} \tag{4.32α'}$$

$$\boxed{\widehat{l}_z Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar m Y_l^m(\theta,\phi), \qquad m = 0,\pm 1,\pm 2,\ldots,\pm l} \tag{4.32β'}$$

Επειδή στην ίδια τιμή το l και επομένως στην ίδια ιδιοτιμή $\hbar^2 l(l+1)$ του τελεστή $\widehat{\mathbf{l}}^2$, αντιστοιχούν $2l+1$ διαφορετικές τιμές του m, δηλαδή διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις $Y_l^m(\theta,\phi)$, οι καταστάσεις καθορισμένης τιμής της του τετραγώνου της στροφορμής είναι $2l+1$ φορές εκφυλισμένες. Αυτό οφείλεται στη σφαιρική συμμετρία, λόγω της οποίας δεν υπάρχει καμιά προτιμητέα διεύθυνση στο χώρο. Ο εκφυλισμός αίρεται αν το σωματίδιο είναι φορτισμένο (π.χ. το ηλεκτρόνιο στο άτομο) και τεθεί μέσα σε μαγνητικό πεδίο.

Επειδή οι ιδιοτιμές του $\widehat{\mathbf{l}}^2$ και επομένως οι δυνατές τιμές του τετραγώνου της στροφορμής μπορούν να παίρνουν τις τιμές:

$$\mathbf{l}^2: \quad 0,\ 2\hbar^2,\ 6\hbar^2,\ 12\hbar^2,\ \ldots$$

οι δυνατές τιμές του μέτρου της στροφορμής είναι:

$$|\mathbf{l}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}\,, \quad l = 0,1,2,3\ldots \quad \Rightarrow \quad |\mathbf{l}| : 0, \sqrt{2}\,\hbar,\ \sqrt{6}\,\hbar,\ \sqrt{12}\,\hbar, \ldots$$

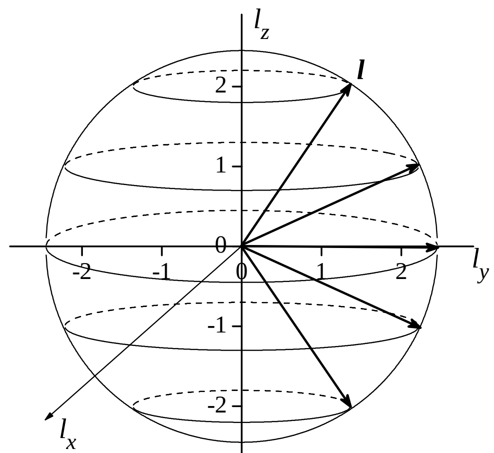
Επίσης οι δυνατές τιμές του παρατηρήσιμου μεγέθους της προβολής της στροφορμής στο $z-$ άξονα, αλλά και σε οποιοδήποτε άλλον άξονα, είναι:

$$l_z = 0,\ \pm\hbar,\ \pm 2\hbar,\ \ldots,\ \pm l\hbar$$

Από τα παραπάνω βλέπουμε ότι, τόσο το μέτρο της στροφορμής όσο και η προβολή της σ' έναν άξονα είναι κβαντισμένες. Επίσης, λόγω αυτών των σχέσεων συμπεραίνουμε ότι:

$$l_z < |\mathbf{l}|$$

Δηλαδή, το μέτρο της στροφορμής είναι μεγαλύτερο από τη μέγιστη τιμή της $z-$συνιστώσας της. Αυτό σημαίνει ότι η στροφορμή δεν μπορεί να έχει τη διεύθυνση του $z-$άξονα. Εκ πρώτης όψεως αυτό φαίνεται μη λογικό επειδή θα μπορούσαμε να διαλέξουμε το $z-$άξονα κατά μήκος της στροφορμής. Όμως κάτι τέτοιο δεν μπορεί να γίνει επειδή τότε θα γνωρίζαμε και τις τρεις συνιστώσες της στροφορμής, αφού σύμφωνα με την αρχή της απροσδιοριστίας αυτό δεν είναι δυνατό. Αν η συνιστώσα $\widehat{l}_z$ έχει μια καθορισμένη τιμή, οι συνιστώσες $\widehat{l}_x$ και $\widehat{l}_y$ δεν έχουν. Δεν έχει νόημα ακόμη να χρησιμοποιούμε διανύσματα όπως στο Σχ. 4.4. Τουλάχιστον πρέπει να φανταζόμαστε ότι το διάνυσμα της στροφορμής καλύπτει την επιφάνεια ενός κώνου ώστε να υποδηλώνεται ότι οι συνιστώσες l_x και l_y είναι ακαθόριστες.



Σχήμα 4.4: "Γεωμετρική παράσταση" της στροφορμής για $l = 2$.

Οι καταστάσεις της στροφορμής που αντιστοιχούν στους κβαντικούς αριθμούς $l = 0$, 1, 2,3. . . συμβολίζονται στη φασματοσκοπία με τα γράμματα: s, p, d, f, g, h,. . .. Η ονομασία προκύπτει από την οπτική φασματοσκοπία, όπου τα γράμματα s (sharp), p (principle),

d (diffuse) κλπ, χρησιμοποιούνταν για να χαρακτηρίσουν τις φασματοσκοπικές σειρές. Αν υπάρχουν πολλά σωματίδια στο κεντρικό πεδίο δυνάμεων οι καταστάσεις της στροφορμής κάθε σωματιδίου χαρακτηρίζονται με τα μικρά γράμματα, ενώ της ολικής στροφορμής του συστήματος με τα κεφαλαία γράμματα: L, P, D, $F, \ldots$.

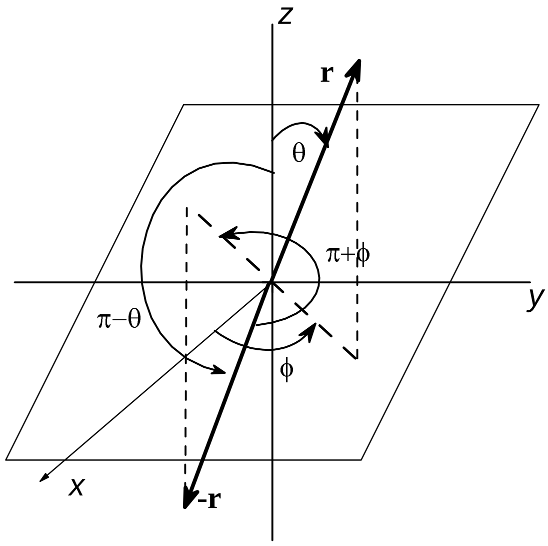
Επειδή ο τελεστής του Hamilton είναι αναλλοίωτος ως προς την αρχή των αξόνων ($\widehat{H}(-\mathbf{r}) = \widehat{H}(-\mathbf{r})$) αντιμετατίθεται με τον τελεστή της της πάριτυ. Επομένως πρέπει να υπάρχει τουλάχιστον ένα σύνολο ενεργειακών ιδιοσυναρτήσεων καθορισμένης πάριτυ (ομοτιμίας). Θα δείξουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις $u_{klm}(\mathbf{r}) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$, όπου $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, είναι ένα τέτοιο σύνολο.

Η αντιστροφή ως προς την αρχή των αξόνων: $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ μπορεί να παρασταθεί με καρτεσιανές συντεταγμένες:

$$x \to -x, \;\; y \to -y, \;\; z \to -z$$

ή με σφαιρικές συντεταγμένες:

$$r \to r, \;\; \theta \to \pi - \theta, \;\; \phi \to \pi + \phi$$



Σχήμα 4.5:

όπως φαίνεται και στο Σχ. 4.5. Σε αυτόν το μετασχηματισμό το ακτινικό μέρος,$R_{kl}(r)$, των κυματοσυναρτήσεων παραμένει αναλλοίωτο, ενώ οι δύο παράγοντες των σφαιρικών αρμονικών: $Y_l^m(\theta,\phi) =$ σταθ. $P_l^m(\cos\theta)\,\mathrm{e}^{im\phi}$, συμπεριφέρονται ως εξής:

$$\mathrm{e}^{im\phi} \;\to\; \mathrm{e}^{im(\pi+\phi)} = \mathrm{e}^{im\pi}\,\mathrm{e}^{im\phi} = (-1)^m\,\mathrm{e}^{im\phi}$$

$$\begin{aligned}
P_l^m(\cos\theta) &= (1-\cos^2\theta)^{|m|/2}\,\frac{d^{|m|}P_l(\cos\theta)}{d\cos^{|m|}\theta} \\
&\to\; \Big(1-\cos^2(\pi-\theta)\Big)^{|m|/2}\,\frac{d^{|m|}P_l(\cos(\pi-\theta))}{d\cos^{|m|}(\pi-\theta)} = \Big(1-\cos^2\theta\Big)^{|m|/2}\,\frac{d^{|m|}P_l(-\cos\theta)}{d\cos^{|m|}(-\theta)} \\
&= (1-\cos^2\theta)^{|m|/2}\,\frac{(-1)^l}{(-1)^m}\,\frac{d^{|m|}P_l(\cos\theta)}{d\cos^{|m|}\theta} = (-1)^{l+m}\,P_l^m(\cos\theta)
\end{aligned}$$

οπότε:

$$\boxed{Y_l^m(\theta,\phi) \to \; (-1)^m(-1)^{l+m}\,Y_l^m(\theta,\phi) = (-1)^l\,Y_l^m(\theta,\phi)}$$

Επομένως, σε προβλήματα σφαιρικής συμμετρίας, οι ομοτιμία (πάριτυ) των καταστάσεων καθορισμένης τιμής του τετραγώνου της στροφορμής είναι $(-1)^l$, δηλαδή εξαρτάται μόνο από τον κβαντικό αριθμό l της τροχιακής στροφορμής.

4.2.2 Μελέτη της ακτινικής εξίσωσης

Η ακτινική εξίσωση της Δ.Ε. του Schrödinger (σχέση 4.16)), θέτοντας $\lambda_1 = l(l+1)$, γράφεται:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{1}{r^2}\,\frac{d}{dr}\Big(r^2\,\frac{dR(r)}{dr}\Big) + \Big(V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)R(r) = ER(r) \qquad (4.33α')$$

ή

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Big(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{dR}{dr}\Big) + \Big(V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)R(r) = ER(r) \qquad (4.33β')$$

Σημειώνεται ότι η ακτινική εξίσωση εξαρτάται μόνο από την ενέργεια και τον κβαντικό αριθμό της τροχιακής στροφορμής l και δεν εξαρτάται από τον κβαντικό αριθμό m.

Η ακτινική Δ.Ε. γίνεται απλούστερη αν θέσουμε:

$$R(r) = \frac{\eta(r)}{r} \tag{4.34α΄}$$

οπότε:

$$\frac{dR}{dr} = \frac{1}{r^2}\Big(r\,\frac{d\eta}{dr} - \eta\Big) \qquad \text{και} \qquad \frac{d}{dr}\Big(r^2\,\frac{dR}{dr}\Big) = r\,\frac{d^2\eta}{dr^2} \tag{4.34β΄}$$

Η αντικατάσταση των παραπάνω σχέσεων στη Δ.Ε. (4.33α΄) δίνει τη Δ.Ε.:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{d^2\eta}{dr^2} + \Big(V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)\eta(r) = E\eta(r)} \tag{4.35}$$

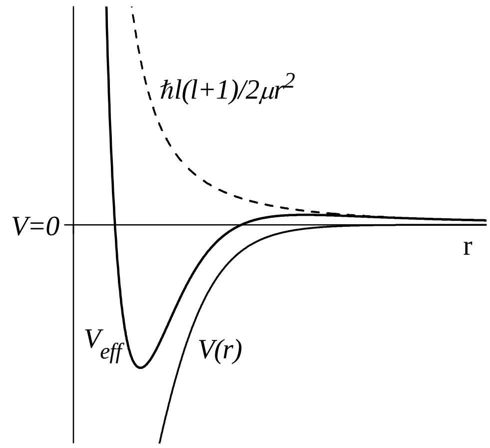
Η εξίσωση αυτή λέγεται **“μονοδίαστατη ” ακτινική εξίσωση**. Είναι ίδια με την ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση του Schrödinger ενός μονοδιάστατου προβλήματος, με τη διαφορά ότι αντί του δυναμικού $V(r)$ εμφανίζεται το **ενεργό δυναμικό**:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2} \tag{4.36}$$

που περιέχει τον επιπλέον απωστικό όρο $\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{l(l+1)}{r^2}$ που λέγεται συχνά “φυγόκεντρος” όρος.

Επίσης, η ακτινική συντεταγμένη r δεν μπορεί να πάρει αρνητικές τιμές. Έτσι, το σημείο $r = 0$ είναι ένα οριακό σημείο της εξίσωσης. Ένα άλλο οριακό σημείο είναι το σημείο $r = \infty$.

Για τον προσδιορισμό της “ακτινικής ” κυματοσυνάρτησης $\eta(r)$ (ή της $R(r) = \eta(r)/r$), όταν δοθεί το δυναμικό $V(r)$, πρέπει να λύσουμε τη μονοδιάστατη ακτινική εξίσωση (4.35) με κατάλληλες οριακές συνθήκες στα σημεία $r = 0$ και $r = \infty$.



Σχήμα 4.6: Γραφική παράσταση του κεντρικού δυναμικού $V(r)$, του φυγόκεντρου όρου $\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{l(l+1)}{r^2}$ και του ενεργού δυναμικού V_{eff}.

• Η οριακή συνθήκη που επιβάλλεται στην $\eta(r)$ για $r = 0$ βρίσκεται από την απαίτηση ο τελεστής του Hamilton να είναι ερμιτιανός. Αποδεικνύεται ότι πρέπει να ισχύει η συνθήκη:

$$\lim_{r\to 0}\left[\eta_1^*\,\frac{d\eta_2}{dr} - \frac{d\eta_1^*}{dr}\,\eta_2\right] = 0$$

όπου η_1 και η_2 δύο αποδεκτές ιδιοσυναρτήσεις της (4.35). Στην πράξη η συνθήκη αυτή αντικαθίσταται συνήθως με την απλούστερη:

$$\boxed{\eta(r = 0) = 0} \tag{4.37}$$

που προκύπτει από την απαίτηση η $R(r) = \eta(r)/r$ να είναι παντού πεπερασμένη. Αυτό βέβαια δεν είναι απαραίτητα αναγκαία προϋπόθεση.

• Η συνθήκη της $\eta(r)$ στο άπειρο, σε προβλήματα δεσμίων καταστάσεων είναι: η $\eta(r)$ (αλλά και η $R(r)$) να τείνει γρήγορα στο μηδέν για μεγάλα r ώστε να συγκλίνει το ολοκλήρωμα κανονικοποίησης:

$$\boxed{\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\eta(r)|^2 dr = 1}$$

Στην περίπτωση μη δεσμίων καταστάσεων η συνθήκη κανονικοποίησης των ιδιοσυναρτήσεων είναι:

$$\int_0^\infty R_E^*(r)R_{E'}(r)r^2dr = \int_0^\infty \eta_E^*(r)\eta_{E'}(r)dr = \delta(E-E')$$

Στις περιπτώσεις που το δυναμικό είναι παντού πεπερασμένη συνάρτηση εκτός ίσως από το σημείο $r=0$, όπου μπορεί να συμπεριφέρεται όπως η συνάρτηση: $V(r) = \text{σταθ.}\, r^k, \quad k > -2$, τότε η λύση της Δ.Ε. (4.35) συμπεριφέρεται στην περιοχή του σημείου $r=0$, όπως η λύση της Δ.Ε.

$$\frac{d^2\eta}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\eta(r) = 0$$

Αυτή προκύπτει από τη Δ.Ε. (4.35) αγνοώντας τους όρους που είναι αμελητέοι σε σχέση με τον όρο $\frac{1}{r^2}$. Η λύση αυτής της Δ.Ε. για $l \neq 0$ είναι:

$$\eta(r) = c_1\, r^{l+1} + c_2\, r^{-l}$$

Επειδή η $R(r) = \eta(r)/r$ είναι φραγμένη συνάρτηση για $r=0$, πρέπει να ισχύει $c_2 = 0$ για $l \neq 0$, οπότε η συμπεριφορά της $\eta(r)$ είναι:

$$\eta(r) = c_1\, r^{l+1}, \quad l \neq 0$$

Για $l=0$ χρειάζεται ξεχωριστή μελέτη.

Σημείωση. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις της (4.35) καθορίζονται από τη μορφή του δυναμικού $V(r)$. Για παράδειγμα:

• Αν $V(r) > 0$ και $\lim_{r\to\infty} V(r) = 0$ το φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας είναι συνεχές και $E > 0$ για όλες τις καταστάσεις, αφού:

$$E = \langle \widehat{H} \rangle = \langle \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \rangle + \langle V \rangle \geq 0$$

Σ' αυτήν την περίπτωση το σωματίδιο μπορεί να διαφύγει στο άπειρο όπου κινείται ελεύθερο, οπότε έχουμε μη δέσμιες καταστάσεις και το φάσμα των ιδιοτιμών της ενέργειας είναι συνεχές.

• Αν $V(r) < 0$ και $\lim_{r\to\infty} V(r) = 0$ το φάσμα ιδιοτιμών της ενέργειας είναι εν γένει μικτό. Οι αρνητικές τιμές της ενέργειας είναι κβαντισμένες και αντιστοιχούν στις δέσμιες καταστάσεις του συστήματος (εφόσον υπάρχουν τέτοιες καταστάσεις). Οι θετικές τιμές τις ενέργειας είναι μη κβαντισμένες και αντιστοιχούν στις μη δέσμιες καταστάσεις του συστήματος.

• Οι ενεργειακές ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις της Δ.Ε. (4.35) εξαρτώνται άμεσα από το φυγόκεντρο όρο $\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}$, δηλαδή από τον κβαντικό αριθμό l που χαρακτηρίζει την τροχιακή στροφορμής. Αυτό φαίνεται και στο Σχ. 4.6.

4.2.3 Ανασκόπηση των χαρακτηριστικών ιδιοτήτων

Στα προβλήματα κεντρικών δυναμικών ισχύουν μερικές χαρακτηριστικές ιδιότητες ανεξάρτητα από τη μορφή του δυναμικού, μερικές από τις οποίες αναφέρονται παρακάτω:

• Τα παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη της ενέργειας, του μέτρου της στροφορμής και της προβολής της σ' έναν άξονα είναι συμβιβαστά μεγέθη. Δηλαδή, για τους τελεστές $\widehat{H}$, $\widehat{\mathbf{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$ ισχύει:

$$\left[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{l}}^2\right] = \left[\widehat{H}, \widehat{l}_z\right] = \left[\widehat{\mathbf{l}}^2, \widehat{l}_z\right] = 0$$

και επομένως έχουν ένα κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων, που σε σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων είναι της μορφής:

$$u_{klm}(\mathbf{r}) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta,\phi), \qquad k^2 = 2\mu E/\hbar^2, \quad l = 0,1,2,\ldots, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \pm l$$

Οι κυματοσυναρτήσεις αυτές, που περιγράφουν καταστάσεις καθορισμένης τιμή ενέργειας, μέτρου της στροφορμής και της προβολής της στον άξονα z, είναι κοινές ιδιοσυναρτήσεις των προβλημάτων ιδιοτιμών:

$$\begin{aligned}\widehat{H}u_{klm}(\mathbf{r}) &= Eu_{klm}(\mathbf{r})\\ \widehat{\mathbf{l}}^2 u_{klm}(\mathbf{r}) &= \hbar^2 l(l+1)u_{klm}(\mathbf{r}), \quad l = 0, 1, 2, \dots\\ \widehat{l}_z u_{klm}(\mathbf{r}) &= \hbar m\, u_{klm}(\mathbf{r}), \quad m = 0, \pm1, \pm2, \dots, \pm l\end{aligned}$$

• Οι καταστάσεις καθορισμένης τιμή ενέργειας και μέτρου της στροφορμής είναι τουλάχιστον $2l+1$ φορές εκφυλισμένες.

• Η μέγιστη τιμή της προβολής της στροφορμής πάνω σε οποιοδήποτε άξονα είναι μικρότερη της στροφορμής· Δηλαδή $l_z < |\mathbf{l}|$, $l_x < |\mathbf{l}|$ και $l_y < |\mathbf{l}|$.

• Οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις $R_{kl}(r)$ είναι λύσεις της ακτινικής εξίσωσης του Schrödinger (4.33β′) και εξαρτώνται από την ιδιοτιμή της ενέργειας και τον κβαντικό αριθμό της στροφορμής l. Στην περίπτωση των δεσμίων καταστάσεων, η $R_{kl}(r)$ και η λύση της μονοδιάστατης ακτινικής εξίσωσης θεωρούνται κανονικοποιημένες, όταν ισχύει:

$$\int_0^\infty |R_{kl}(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\eta_{kl}(r)|^2 dr = 1$$

• Το γωνιακό μέρος της κυματοσυνάρτησης $Y_l^m(\theta, \phi)$ είναι οι σφαιρικές αρμονικές. Αυτές είναι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών $\widehat{\mathbf{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$:

$$\widehat{\mathbf{l}}^2 Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\phi) \qquad \text{και} \qquad \widehat{l}_z Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar m\, Y_l^m(\theta,\phi)$$

• Επειδή ισχύει η σχέση $\big[\widehat{H}, \widehat{\Pi}\big] = 0$, οι κυματοσυναρτήσεις $u_{klm}(\mathbf{r})$ έχουν καθορισμένη ομοτιμία που καθορίζεται από από τον κβαντικό αριθμό l:

$$u_{klm}(\mathbf{r}) = (-1)^l u_{klm}(-\mathbf{r})$$

4.3 Δυναμικό Coulomb - Υδρογονοειδή άτομα

Θα εξετάσουμε την περίπτωση που το δυναμικό μεταξύ δύο νουκλεονίων είναι το ελκτικό δυναμικό Coulomb με φορτία Ze και $-e$. Το θετικό φορτίο Ze μπορεί να αναφέρεται στο φορτίο ενός πυρήνα με Z πρωτόνια και το φορτίο $-e$ στο ηλεκτρόνιο. Η μελέτη αυτή συμπεριλαμβάνει όλα τα υδρογονοειδή άτομα. Επειδή η μάζα του νουκλεονίου είναι πολύ μεγαλύτερη (περίπου 2000 φορές) από τη μάζα του ηλεκτρονίου, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το ηλεκτρόνιο κινείται υπό την επίδραση του δυναμικού Coulomb του πυρήνα που θεωρείται ακίνητος στην αρχή των αξόνων. Διαφορετικά μπορούμε να θεωρήσουμε τη σχετική κίνηση του συστήματος πυρήνας - ηλεκτρόνιο όπου μ είναι η ανηγμένη μάζα του συστήματος.

Επειδή το ελκτικό δυναμικό Coulomb που εξετάζουμε είναι κεντρικό :

$$V(r) = -\frac{Ze\,e}{r} = -\frac{Ze^2}{r}$$

η μονοδιάστατη ακτινική εξίσωση (4.35) γράφεται:

$$\frac{d^2\eta}{dr^2} + \Big(\frac{2\mu}{\hbar^2}E + \frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\Big)\eta(r) = 0 \tag{4.38}$$

Για τη λύση της Δ.Ε. (4.38) θα ακολουθήσουμε τα ίδια βήματα που ακολουθήσαμε στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή στο εδάφιο 3.5.1. Επειδή θα ασχοληθούμε με τις δέσμιες καταστάσεις, θέτουμε:

$$E = -|E| \qquad \text{και} \qquad \frac{2\mu}{\hbar^2}E = -\frac{2\mu}{\hbar^2}|E| = -k^2 \tag{4.39α΄}$$

και εισάγουμε την αδιάστατη μεταβλητή:

$$\rho = \alpha\, r, \qquad \text{όπου} \qquad \alpha = 2k = \Big(\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\Big)^{1/2} \tag{4.39β΄}$$

και την παράμετρο:

$$A = Ze^2\Big(\frac{\mu}{2\hbar^2|E|}\Big)^{1/2} \tag{4.39γ΄}$$

οπότε η Δ.Ε. (4.38) γράφεται:

$$\frac{d^2\eta}{d\rho^2} + \Big(-\frac{1}{4} + \frac{A}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\Big)\eta(\rho) = 0 \tag{4.40}$$

Αυτή είναι Δ.Ε. 2ης τάξης με μη σταθερούς συντελεστές. Μπορούμε να ζητήσουμε λύσεις υπό μορφή γενικευμένης δυναμοσειράς:

$$\eta(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \rho^{n+\lambda}, \qquad \lambda = \text{παράμετρος}$$

Η αντικατάσταση της δυναμοσειράς στη Δ.Ε. (4.40) οδηγεί σε αναδρομική σχέση που συνδέει τρεις συντελεστές με διαφορετικό δείκτη, που δεν είναι κατάλληλη για να δώσει τους συντελεστές υπό κλειστή μορφή. Γι' αυτόν το λόγο προσπαθούμε να βρούμε έναν μετασχηματισμό που ανάγει τη Δ.Ε. (4.40) σε μια άλλη που μπορεί να λυθεί με τη μέθοδο των δυναμοσειρών. Ο μετασχηματισμός αυτός προκύπτει συχνά από την εύρεση της συμπεριφοράς της λύσης της Δ.Ε. στην περιοχή κάποιου ιδιάζοντος σημείου της Δ.Ε. Δύο τέτοια σημεία, για τη Δ.Ε. που εξετάζουμε, είναι τα σημεία $\rho = \infty$ και $\rho = 0$.

Στην περιοχή του σημείου $\rho = \infty$ η λύση της Δ.Ε. (4.40) συμπεριφέρεται όπως η λύση της Δ.Ε.

$$\frac{d^2\eta}{d\rho^2} - \frac{1}{4}\,\eta(\rho) = 0$$

Αυτή προκύπτει από τη Δ.Ε. (4.40) αγνοώντας τους όρους που είναι πολύ μικρότεροι του $1/4$ όταν το $\rho \to \infty$. Η γενική της λύση είναι:

$$\eta(\rho) = C_1\,\mathrm{e}^{-\rho/2} + C_2\,\mathrm{e}^{\rho/2}$$

Επειδή η $\eta(\rho)$ πρέπει να μηδενίζεται στο σημείο $\rho = \infty$, για τη σταθερά C_2 θα ισχύει $C_2 = 0$, οπότε:

$$\eta(\rho) = C_1\,\mathrm{e}^{-\rho/2}, \qquad \rho \to \infty$$

Στην περιοχή του σημείου $\rho = 0$ η λύση της Δ.Ε. (4.40) συμπεριφέρεται όπως η λύση της Δ.Ε.

$$\frac{d^2\eta}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\,\eta(\rho) = 0$$

Αυτή προκύπτει από τη Δ.Ε. (4.40) αγνοώντας τους όρους που είναι πολύ μικρότεροι του $l(l+1)/\rho^2$ όταν το $\rho \to 0$. Η γενική της λύση είναι:

$$\eta(\rho) = \tilde{C}_1\,\rho^{l+1} + \tilde{C}_2\,\rho^{-l}$$

Επειδή η $\eta(\rho)$ πρέπει να είναι φραγμένη στο σημείο $\rho = 0$, για τη σταθερά $\tilde{C}_2$ θα ισχύει $\tilde{C}_2 = 0$, οπότε:

$$\eta(\rho) = \tilde{C}_1 \, \mathrm{e}^{-\rho/2}, \qquad \rho \to 0, \qquad l \neq 0$$

Έτσι οδηγούμαστε να χρησιμοποιήσουμε το μετασχηματισμό:

$$\eta = \rho^{l+1} \, \mathrm{e}^{-\rho/2} \, f(\rho) \tag{4.41}$$

Η αντικατάσταση αυτής της συνάρτησης στη Δ.Ε. (4.40), μετά από κάποιες πράξεις δίνει τη Δ.Ε. που έχει ως λύση την συνάρτηση $f(\rho)$:[1]

$$\rho f''(\rho) + \big[2(l+1) - \rho\big] f'(\rho) + \big[A - (l+1)\big] f(\rho) = 0 \tag{4.42}$$

Η Δ.Ε (4.42) είναι μια γνωστή Δ.Ε., που λέγεται **συμφυής υπεργεωμετρική εξίσωση**. Επειδή ενδιαφερόμαστε για λύση της Δ.Ε. (4.42) που είναι αναλυτική στο σημείο $\rho = 0$, ζητάμε λύση υπό μορφή δυναμοσειράς:

$$f(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \, \rho^n \tag{4.43α΄}$$

οπότε:

$$f'(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} n \, a_n \, \rho^{n-1}, \qquad f''(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) \, a_n \, \rho^{n-2} \tag{4.43β΄}$$

Η αντικατάσταση των f, f' και f'' στη Δ.Ε. (4.42) δίνει:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) a_n \rho^{n-1} + \sum_{n=0}^{\infty} 2(l+1) n a_n \rho^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \, \rho^n + \sum_{n=0}^{\infty} (A - l - 1) a_n \, \rho^n = 0$$

ή

$$\sum_{n=0}^{\infty} n(n+2l+1) a_n \rho^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} (-A + n + l + 1) a_n \, \rho^n = 0$$

Στην πρώτη σειρά, που ό πρώτος της όρος είναι μηδέν και επομένως αρχίζει από το $n = 1$, θέτουμε $n - 1 = n'$ και στη συνέχεια $n' \to n$. Στη συνέχεια γράφουμε τις δύο σειρές ως μια. Έτσι, η προηγούμενη σχέση γράφεται:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \big[(n+1)(n+2l+2) a_{n+1} - (-A + n + l + 1) a_n\big] \rho^n = 0$$

---

[1]Επειδή η εύρεση της 2ης παραγώγου ενός γινομένου τριών συναρτήσεων και η αντικατάσταση αυτής στη Δ.Ε. θέλει αρκετές και προσεκτικές πράξεις, είναι χρήσιμο να καταφεύγουμε σε κάποια "γλώσσα" συμβολικού προγραμματισμού για την εκτέλεση αυτών των πράξεων. Οι παρακάτω εντολές της Mathematica δίνει εύκολα τη Δ.Ε (4.42) ξεκινώντας από τη Δ.Ε. (4.40) και χρησιμοποιώντας η συνάρτηση $\eta(\rho)$ της (4.41).

```
DEoperator@Psi_ := D[Psi, {z, 2}] + (-1/4 + A/z - l * (l + 1)/z^2) * Psi;
eta[z_] := z^(l+1) * E^(-z/2) * f[z];
DEeta2 = DEoperator@eta[z]//Expand//Simplify
DifEquationf = Simplify[Expand[ DEeta2/(E^(-z/2) * z^l)]] == 0/(E^(-z/2) * z^l)
```

Στην 1η εντολή ορίζεται το αριστερό μέλος της Δ.Ε. (4.40) ως ένας τελεστής που δρα σε μια τυχαία συνάρτηση `Psi`. Στη 2η εντολή ορίζεται η συνάρτηση `eta` ως γινόμενο τριών συναρτήσεων. Στην 3η εντολή βρίσκεται η δράση του τελεστή στη συνάρτηση `eta`. Στη 4η εντολή εξισώνουμε αυτή τη δράση με το μηδέν για να πάρουμε τη Δ.Ε. (4.42), πολλαπλασιάζοντας συγχρόνως και τα δύο μέλη της εξίσωσης με τον ίδιο παράγοντα.

Για να είναι η δυναμοσειρά ίση με το 0, πρέπει να ισχύει:

$$(n+1)(n+2l+2)a_{n+1} - (-A+n+l+1)a_n \quad \Rightarrow \quad \boxed{a_{n+1} = \frac{-A+n+l+1}{(n+1)(n+2l+2)}\, a_n, \quad n \geq 0} \tag{4.44}$$

Παρατηρούμε ότι, αν είναι γνωστός ο συντελεστής a_0 μπορούν να βρεθούν όλοι οι άλλοι από την αναδρομική σχέση (4.44). Ο συντελεστής a_0 είναι η αυθαίρετη σταθερά της λύσης.

Η αντικατάσταση της σειράς (4.43α΄) στην (4.41) δίνει τη λύση της Δ.Ε. (4.40). Η συνάρτηση αυτή είναι φραγμένη συνάρτηση $\forall \rho < \infty$. Πρέπει όμως να εξεταστεί αν έχει τη σωστή συμπεριφορά για $\rho \to \infty$, δηλαδή αν πηγαίνει γρήγορα στο μηδέν. Γι' αυτό εξετάζουμε το λόγο δύο γειτονικών όρων της σειράς της $f(\rho)$ για $n \to \infty$. Ο λόγος αυτός, χρησιμοποιώντας την αναδρομική σχέση (4.44) είναι:

$$\frac{a_{n+1}\rho^{n+1}}{a_n \rho^n} = \frac{-A+n+l+1}{(n+1)(n+2l+2)}\,\rho \approx \frac{1}{n}\,\rho \qquad \text{όταν} \qquad n \to \infty$$

Όμως, αυτός είναι ο λόγος δύο διαδοχικών όρων της σειράς: $\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\,\rho^n = \mathrm{e}^{\rho}$. Δηλαδή, η σειρά της $f(\rho)$ συμπεριφέρεται στην περιοχή του σημείου $\rho = \infty$ όπως η συνάρτηση e^{ρ}. Επομένως η λύση της ακτινικής εξίσωσης συμπεριφέρεται στο άπειρο όπως η συνάρτηση:

$$\rho^{l+1}\,\mathrm{e}^{-\rho/2}\,\mathrm{e}^{\rho} = \rho^{l+1}\,\mathrm{e}^{\rho/2}$$

Δηλαδή, δεν τείνει στο 0 όταν $\rho \to \infty$. Ο μόνος τρόπος για να διορθωθεί η συμπεριφορά της $\eta(\rho)$ στο άπειρο είναι να γίνει η σειρά ένα πολυώνυμο. Αυτό μπορεί να συμβεί όταν ο αριθμητής της αναδρομικής σχέσης (4.44) γίνει 0 για κάποιον ακέραιο $n = n_r$ ώστε $a_{n_r+1} = 0$. Δηλαδή, όταν ισχύει:

$$-A + n_r + l + 1 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{A = n_r + l + 1, \quad n_r = 0, 1, 2, 3 \ldots} \tag{4.45}$$

Αν θέσουμε: $n = n_r + l + 1$, επειδή $n_r = 0, 1, 2, 3 \ldots$ και $l = 0, 1, 2, 3 \ldots$, ο ακέραιος αριθμός n, που λέγεται **κύριος κβαντικός αριθμός**, παίρνει τις τιμές $\mathbf{n = 1, 2, , 3, \ldots}$ και συγχρόνως ισχύει η σχέση $n \geq l + 1$. Αν στη σχέση (4.45) αντικαταστήσουμε το A από τη σχέση (4.39γ΄) και επειδή $E < 0$, συμπεράνουμε ότι:

$$\boxed{E = E_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}\,, \quad n = 1, 2, 3 \ldots, \quad n \geq l + 1} \tag{4.46α΄}$$

Καταλήξαμε λοιπόν ότι, οι δυνατές τιμές της ενέργειας των δεσμίων καταστάσεων του ηλεκτρονίου ενός υδρογονοειδούς ατόμου είναι κβαντισμένες. Η σχέση (4.46α΄) συμπίπτει με την αντίστοιχη σχέση της θεωρίας του Bohr. Η σχέση αυτή γράφεται συχνά και με τη μορφή:

$$\boxed{E_n = -\frac{e^2 Z^2}{2a_0}\,\frac{1}{n^2}\,, \quad n = 1, 2, 3 \ldots, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}} \tag{4.46β΄}$$

Η σταθερά a_0 λέγεται ακτίνα του Bohr.

Παρατηρούμε ότι υπάρχει ένας επιπλέον εκφυλισμός των ενεργειακών καταστάσεων, επειδή ο ίδιος κβαντικός αριθμός n μπορεί να ληφθεί με διαφορετικούς συνδυασμούς των n_r και l. Αν λάβουμε υπόψη αυτόν του τυχαίο εκφυλισμό, που **οφείλεται στην ιδιαιτερότητα του**

δυναμικού Coulomb και τον εκφυλισμό που οφείλεται στη σφαιρική συμμετρία, ο βαθμός εκφυλισμού κάθε ενεργειακής κατάστασης E_n είναι:

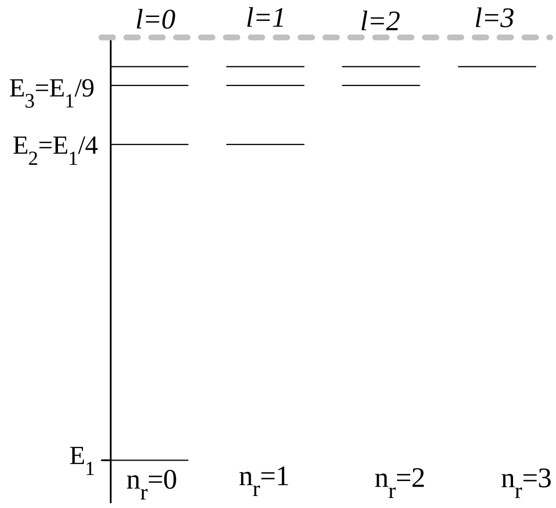
$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 1+3+5+\cdots+(2n-1) = \frac{1+(2n-1)}{2}\,n = n^2$$

Για παράδειγμα, στην ενεργειακή κατάσταση με κβαντικό αριθμό $n=1$ επειδή $n \geq l+1$, αντιστοιχεί μια μόνο κατάσταση, η $(nlm) = (100)$. Δηλαδή η ενέργεια της βασικής κατάστασης δεν είναι εκφυλισμένη. Στην ενεργειακή κατάσταση με κβαντικό αριθμό $n=2$ αντιστοιχούν τέσσερις διαφορετικές καταστάσεις:

$$(nlm)\ :\ (200),\ (21-1),\ (210)\ (211)$$

Στην ενεργειακή κατάσταση με κβαντικό αριθμό $n=3$ αντιστοιχούν εννέα διαφορετικές καταστάσεις κλπ.

Στο Σχ. 4.7 φαίνεται το ενεργειακό φάσμα του ατόμου του υδρογόνου και ο εκφυλισμός των πρώτων ενεργειακών καταστάσεων.



Σχήμα 4.7: Το ενεργειακό φάσμα του ατόμου του υδρογόνου, όπου $E_1 = -\frac{e^2}{2a_0} = -13.6\,\mathrm{eV}$.

Σχετικά με τη μορφή των ακτινικών κυματοσυναρτήσεων παρατηρούμε ότι η συμφυής υπεργεωμετρική εξίσωση (4.42) για $A = n$ γράφεται:

$$\rho f''(\rho) + \big[2(l+1) - \rho\big]f'(\rho) + \big[n-l-1\big]f(\rho) = 0$$

Αυτή είναι η προσηρτημένη Δ.Ε. του Laquerre πού έχει ως λύσεις τα προσηρτημένα πολυώνυμα του Laquerre $L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho)$.[2] Τα πολυώνυμα αυτά μελετώνται στις Μαθηματικές Μεθόδους Φυσικής.

Έτσι, οι λύσεις της μονοδιάστατης ακτινικής εξίσωσης είναι:

$$\eta_{nl}(\rho) = \rho^{l+1}\,\mathrm{e}^{-\rho/2}\,L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho)$$

[2] Τα προσαρτημένα πολυώνυμα Laquerre ορίζονται από τη σχέση $L^\nu_n(\xi) = \dfrac{1}{n!}\,\xi^{-\nu}\mathrm{e}^{\xi}\,\dfrac{d^n}{d\xi^n}\left(\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{n+\nu}\right)$ και είναι ορθογώνιες συναρτήσεις στο διάστημα $\xi \in [0,\infty)$ με συνάρτηση βάρους $\rho(\xi) = \xi^\nu \mathrm{e}^{-\xi}$. Η σχέση ορθοκανονικότητας αυτών των πολυωνύμων είναι:

$$\int_0^\infty \xi^\nu \mathrm{e}^{-\xi} L^\nu_n(\xi) L^\nu_m(\xi)\, d\xi = \frac{(n+\nu)!}{n!}\,\delta_{nm}$$

Ικανοποιούν τις αναδρομικές σχέσεις

$$\begin{aligned}(n+1)L^\nu_{n+1} &= (2n+\nu+1-x)L^\nu_n - (n+\nu)L^\nu_{n-1}, \quad n=1,2,3,\ldots\\ x(L^\nu_n)' &= nL^\nu_n - (n+\nu)L^\nu_{n-1}, \quad n=0,1,2,\ldots\end{aligned}$$

και είναι λύσεις της Δ.Ε.

$$x(L^\nu_n)'' + (\nu+1-x)(L^\nu_n)' + nL^\nu_n = 0 \quad 0 \leq x < \infty$$

Πρέπει να προσέχουμε όταν χρησιμοποιούμε τα πολυώνυμα Laquerre επειδή πολλοί συγγραφείς τα ορίζουν με κάπως διαφορετικές συμβάσεις.

Αν επανέλθουμε στα φυσικά μεγέθη r και E, επειδή

$$\rho = ar = 2kr = 2\Big(\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}\Big)^{1/2} r = 2\Big(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\,\frac{Z^2}{n^2}\Big)^{1/2} r = \frac{2Z}{a_0 n}\, r$$

η κανονικοποιημένη ακτινική κυματοσυνάρτηση $R_{nl}(r) = \eta_{nl}/r$ γράφεται:

$$\boxed{R_{nl}(r) = N_{nl}\big(\frac{2Z}{na_0}\, r\big)^l\, L^{2l+1}_{n-l-1}\big(\frac{2Z}{na_0}\, r\big)\, \mathrm{e}^{-\frac{Z\,r}{na_0}}}\,, \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{4.47α΄}$$

Ο παράγοντας κανονικοποίησης N_{nl} που προκύπτει από τον υπολογισμό του ολοκληρώματος:

$$\int_0^\infty R^2_{nl}(r) r^2 dr = 1, \qquad \text{είναι} \qquad N_{nl} = \Big[\Big(\frac{2Z}{na_0}\Big)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\Big]^{1/2} \tag{4.47β΄}$$

Έτσι, οι κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις $u_{nlm}(\mathbf{r})$ ενός υδρογονοειδούς ατόμου είναι:

$$\boxed{u_{nlm}(\mathbf{r}) = N_{nl}\big(\frac{2Z}{na_0}\, r\big)^l\, L^{2l+1}_{n-l-1}\big(\frac{2Z}{na_0}\, r\big)\, \mathrm{e}^{-\frac{Z\,r}{na_0}}\, Y_l^m(\theta,\phi)} \tag{4.47γ΄}$$

όπου $n = 1, 2, 3\ldots, \quad l = 0, 1, 2, \ldots, n-1, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l.$

Παρακάτω δίνονται μερικές από τις πρώτες κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις ενός υδρογονοειδούς ατόμου:

$$u_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\big(\frac{Z}{a_0}\big)^{3/2}\, \mathrm{e}^{-Zr/a_0} \qquad u_{200}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\big(\frac{Z}{a_0}\big)^{3/2}\,\big(2 - \frac{Z\,r}{a_0}\big)\, \mathrm{e}^{-Zr/2a_0}$$

$$u_{210}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\big(\frac{Z}{a_0}\big)^{3/2}\,\frac{Z\,r}{a_0}\, \mathrm{e}^{-Zr/2a_0}\,\cos\theta \qquad u_{21\pm1}(\mathbf{r}) = \frac{\mp1}{8\sqrt{\pi}}\big(\frac{Z}{a_0}\big)^{3/2}\,\frac{Z\,r}{a_0}\, \mathrm{e}^{-Zr/2a_0}\,\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\phi}$$

Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας $r^2 R_{nl}(r)$ δίνει την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σ' ένα σφαιρικό φλοιό πάχους dr σε απόσταση r από την αρχή. Σύμφωνα με την άσκηση 15 του εδαφίου 4.5, η πιθανότητα αυτή για την κατάσταση u_{100} του ατόμου του υδρογόνου γίνεται μέγιστη στην απόσταση $r = a_0$ που συμπίπτει με το αποτέλεσμα της θεωρίας του Bohr.

Στις εφαρμογές είναι χρήσιμες και οι παρακάτω μέσες τιμές:

$$\langle r\rangle_{nl} = \frac{a_0}{2Z}\,[3n^2 - l(l+1)]\,, \qquad \langle r^2\rangle_{nl} = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2}\,[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]\,, \qquad \langle r^{-1}\rangle_{nl} = \frac{Z}{a_0 n^2}\,,$$

$$\langle r^{-2}\rangle_{nl} = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l+\frac{1}{2})}\,, \qquad \langle r^{-3}\rangle_{nl} = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

Θα κλείσουμε το εδάφιο δίνοντας μερικά αριθμητικά χαρακτηριστικά του ατόμου του υδρογόνου. Επειδή:

$$\mu c^2 = m_e c^2 = 5,11\cdot 10^5\,\mathrm{eV}, \quad \hbar c = 1973,3\,\mathrm{eV}\,\mathring{\mathrm{A}}, \quad \frac{e^2}{\hbar c} = \text{σταθερά της λεπτής υφής} = \frac{1}{137,04}$$

η ακτίνα του Bohr και οι ενεργειακές ιδιοτιμές του ατόμου του υδρογόνου είναι:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\hbar c}{m_e c^2}\,\frac{\hbar c}{e^2} = \frac{1973,3}{5,11\cdot 10^5}\,137,05\,\mathring{\mathrm{A}} = 0,529\,\mathring{\mathrm{A}}$$

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2} = -\frac{m_e c^2}{2}\,\Big(\frac{e^2}{\hbar c}\Big)^2\frac{1}{n^2} = -\frac{5,11\cdot 10^5}{2}\,\frac{1}{137,04^2}\,\frac{1}{n^2}\,\mathrm{eV} = -13,6\,\frac{1}{n^2}\,\mathrm{eV}$$

Επομένως, οι διαστάσεις του ατόμου σχετίζονται με την ακτίνα του Bohr και είναι της τάξης μεγέθους του $\mathring{A}$ και οι δυνατές τιμές της ενέργειας είναι της τάξης μεγέθους του eV. Η ενέργεια ιονισμού του ατόμου του υδρογόνου είναι $13,6\,\mathrm{eV}$ ενώ της βασικής κατάστασης και της πρώτης διεγερμένης είναι:

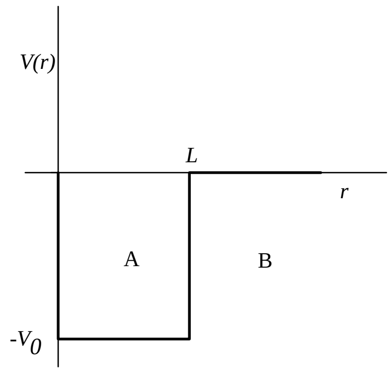
$$E_1 = -13,6\,\mathrm{eV}, \quad \mathrm{E}_2 = -3,4\,\mathrm{eV} \qquad \text{και} \qquad \Delta\mathrm{E} = \mathrm{E}_2 - \mathrm{E}_1 = 10,2\,\mathrm{eV}$$

Δηλαδή, για να διεγερθεί το άτομο του Υδρογόνου απαιτείται ενέργεια $10,2\,\mathrm{eV}$. Η τιμή αυτή της ενέργειας είναι πολύ μεγαλύτερη από την ενέργεια που ανταλλάσσουν τα άτομα κατά τις θερμικές κρούσεις και η οποία σε θερμοκρασία δωματίου ($T = 293^o\,\mathrm{K}$) είναι: $kT \simeq \frac{1}{40}\,\mathrm{eV}$. Δηλαδή, για μια μεγάλη περιοχή θερμοκρασιών η πλειονότητα των ατόμων παραμένει στη βασική κατάσταση.

4.4 Σφαιρικά συμμετρικό φρέαρ δυναμικού

Θα εξετάσουμε τις δέσμιες $s-$ καταστάσεις ενός σφαιρικά συμμετρικού φρέατος δυναμικού ακτίνας L και βάθους V_0:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \le r < L \qquad V_0 > 0 \\ 0 & L < r, \infty \end{cases}$$



Σχήμα 4.8:

Το δυναμικό αυτό βρίσκει συχνά εφαρμογή στην Πυρηνική Φυσική, όπως για παράδειγμα στον πυρήνα του δευτερίου.

Επειδή ενδιαφερόμαστε για τις καταστάσεις με $l = 0$, οπότε το γωνιακό μέρος της κυματοσυνάρτησης είναι $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$, θα εξετάσουμε τη μονοδιάστατη ακτινική εξίσωση για $E < 0$ γράφοντάς την στις δύο περιοχές A και B που το δυναμικό χωρίζει τον $r-$ άξονα:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\eta_A(r)}{dr^2} - V_0\eta_A(r) = E\eta_A(r) \quad \Rightarrow \quad \eta_A'' + k^2\eta_A = 0, \quad k^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \qquad (4.48\alpha')$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\eta_B(r)}{dr^2} = E\eta_B(r) \quad \Rightarrow \quad \eta_B'' - \gamma^2\eta_B = 0, \quad \gamma^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \qquad (4.48\beta')$$

Οι λύσεις των δύο Δ.Ε δίνει την κυματοσυνάρτηση που είναι της μορφής:

$$\eta(r) = \begin{cases} \eta_A(r) = A_+\cos kr + A_-\sin kr, & 0 \le r \le L \\ \eta_B(r) = B_+\mathrm{e}^{\gamma r} + B_-\mathrm{e}^{-\gamma r}, & r \ge L \end{cases} \qquad (4.49\alpha')$$

Επειδή η ακτινική κυματοσυνάρτηση $R(r) = \eta(r)/r$ είναι φραγμένη στο σημείο $r = 0$ πρέπει να θέσουμε$A_+ = 0$. Επίσης για $r \to \infty$ (λόγω του όρου $\mathrm{e}^{\gamma r}$), πρέπει να θέσουμε $B_+ = 0$. Θέτοντας $A_- = A$ και $B_- = B$ η κυματοσυνάρτηση (4.49α΄) γράφεται:

$$\eta(r) = \begin{cases} \eta_A(r) = A\sin kr, & 0 \le r \le L \\ \eta_B(r) = B\mathrm{e}^{-\gamma r}, & r \ge L \end{cases} \qquad (4.49\beta')$$

Εφαρμόζοντας τις συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της στο σημείο $r = L$ παίρνουμε τις εξισώσεις:

$$\eta_A(L) = \eta_B(L) \qquad \Rightarrow \qquad A\sin kL = B\,\mathrm{e}^{-\gamma L} \qquad (4.50\alpha')$$

$$\eta_A'(L) = \eta_B'(L) \qquad \Rightarrow \qquad A\,k\,\cos kL = -B\,\gamma\,\mathrm{e}^{-\gamma L} \qquad (4.50\beta')$$

Η διαίρεση κατά μέλη των δύο εξισώσεων δίνει:

$$k\,\cot kL = -\gamma \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{k\,L\,\cot kL = -\gamma\,L} \tag{4.51}$$

Η εξίσωση αυτή δίνει τις δυνατές τιμές της ενέργειας των δεσμίων καταστάσεων. Αυτή έχει λύσεις (αν έχει) μόνο για διακεκριμένες τιμές της ενέργειας. Η (4.51) είναι μια υπερβατική εξίσωση και λύνεται αριθμητικά ή γραφικά. Θα περιγράψουμε τη γραφική μέθοδο που θα οδηγήσει και σε ένα χρήσιμο συμπέρασμα.
Αν θέσουμε:

$$\xi = kL \geq 0 \qquad \text{και} \qquad \nu = \gamma\,L \geq 0 \quad \text{(4.52α')}$$

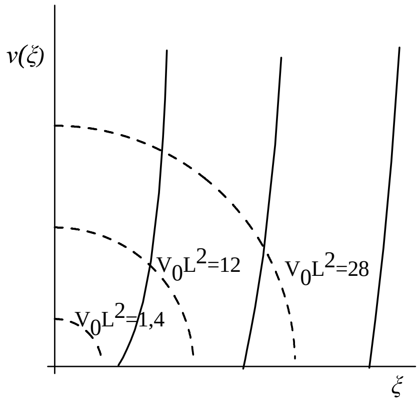
η εξίσωση (4.51) γράφεται:

$$\nu = -\xi\,\cot\xi \quad \text{(4.52β')}$$

Επίσης, από τις σχέσεις της (4.52α') παίρνουμε:

$$\xi^2 + \nu^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\,L^2 \quad \Rightarrow \quad \nu = +\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\,L^2 - \xi^2} \quad \text{(4.52γ')}$$

Τα σημεία τομής των γραφικών παραστάσεων της συνάρτησης $\nu(\xi)$ της (4.52β') και της συνάρτησης $\nu(\xi)$ της (4.52γ') δίνουν τις δυνατές τιμές της $\xi = \xi(E)$ που είναι οι λύσεις της υπερβατικής εξίσωσης (4.51).



Σχήμα 4.9: Γραφική παράσταση των συναρτήσεων $\nu = +\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\,L^2 - \xi^2}$ και $\nu = -\xi\,\cot\xi$ για διαφορετικές τιμές του γινομένου V_0L^2.

Στο Σχ. 4.9 έχει γίνει η γραφική παράσταση των παραπάνω. Τα τόξα των κύκλων αντιστοιχούν στη συνάρτηση $\nu = +\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\,L^2 - \xi^2}$ για τρεις διαφορετικές τιμές του γινομένου V_0L^2, δηλαδή του βάθους και της εμβέλειας του δυναμικού.

Επειδή η συνάρτηση $\cot\xi$ έχει ρίζες στα σημεία $\xi = (2n+1)\frac{\pi}{2}$, για να υπάρχει μια τουλάχιστον δέσμια κατάσταση, πρέπει να ισχύει:

$$\boxed{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\,L^2 \geq \frac{\pi^2}{4}} \tag{4.53}$$

Για παράδειγμα (στο σύστημα μονάδων $2\mu = \hbar = 1$) όταν $V_0L^2 = 1,4$ δεν υπάρχει δέσμια κατάσταση, αφού το αντίστοιχο τόξο κύκλου (βλέπε Σχ. 4.9) δεν τέμνει την καμπύλη $\nu(\xi) = -\xi\cot\xi$. Όταν $V_0L^2 = 12$, το δεύτερο τόξο κύκλου του Σχ. 4.9 τέμνει τη συνάρτηση $\nu(\xi) = -\xi\cot\xi$ σε ένα σημείο που αντιστοιχεί στην ύπαρξη μιας δέσμιας κατάστασης. Για να υπάρχει μια δέσμια κατάσταση πρέπει να ισχύει:

$$\frac{\pi^2}{4} \leq \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\,L^2 \leq \frac{9\pi^2}{4} \tag{4.54}$$

Η ενέργεια αυτής της κατάστασης καθορίζεται από την τιμή:

$$\xi_1 = kL = \sqrt{\frac{2\mu(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}\,L \qquad \Rightarrow \qquad |E| = V_0 - \frac{\hbar^2}{2\mu L^2}\,\xi_1$$

Η τιμή αυτή αντιστοιχεί στο σημείο τομής των δύο καμπυλών.

Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε ότι η ύπαρξη μιας τουλάχιστον δέσμιας $s-$ κατάστασης στο σφαιρικά συμμετρικό φρέαρ δυναμικού εξαρτάται από το γινόμενο τριών παραμέτρων, της μάζας του σωματιδίου, του βάθους του φρέατος και του τετραγώνου του εύρους του.

Αν ενδιαφερόμαστε για τις καταστάσεις με $l \neq 0$ πρέπει να λυθεί η μονοδιάστατη ακτινική εξίσωση:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\eta(r)}{dr^2} + \Big[V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\Big]\eta(r) = E\eta(r)$$

στην περιοχή A με $V(r) = -V_0$ και στην περιοχή B με $V(r) = 0$. Σ' αυτήν την περίπτωση οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις είναι:

$$R_{kl}(r) = \frac{\eta_{kl}(r)}{r} = \begin{cases} A\, j_l(kr), & 0 \leq r \leq L \\ B\, h_l^+(i\gamma r), & r \geq L \end{cases}$$

όπου $j_l(kr)$ η **σφαιρική συνάρτηση Bessel** τάξης l και $h_l^+(i\gamma r)$ η **σφαιρική συνάρτηση Hankel** τάξης l. Οι συναρτήσεις αυτές μελετώνται στις Μαθηματικές Μεθόδους φυσικής. Οι δυνατές τιμές της ενέργειας και μια από τις αυθαίρετες σταθερές προκύπτουν πάλι από τις συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της.

4.5 Ασκήσεις Κεφαλαίου 4

1. Η κατάσταση ενός σωματιδίου σε κυβικό κουτί ακμής L με τελείως ανακλαστικά τοιχώματα περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$u_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\,\sin\frac{n_x\pi x}{L}\,\sin\frac{n_y\pi y}{L}\,\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

Να υπολογιστούν οι αναμενόμενες τιμές των συνιστωσών της στροφορμής: $\widehat{l}_x$, $\widehat{l}_y$, $\widehat{l}_z$.

Υπόδειξη. $\widehat{l}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$, $\widehat{l}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$, $\widehat{l}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$.

Οι συναρτήσεις $\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n_x\pi x}{L}$ είναι ορθοκανονικές συναρτήσεις στο διάστημα $x \in [0, L]$ κλπ.

2. Σε κυβικό κουτί ακμής L με τελείως ανακλαστικά τοιχώματα βρίσκονται N το πλήθος, όμοια και μη αλληλεπιδρώντα σωματίδια. Αυτά υποτίθενται χωρίς σπιν και η κάθε κατάσταση ενός σωματιδίου (sigle particle state) καταλαμβάνεται από ένα μόνο σωματίδιο. Να υπολογιστεί προσεγγιστικά η ολική ενέργεια της βασικής κατάστασης του συστήματος των N σωματιδίων.

Υπόδειξη. Η ενέργεια ενός σωματιδίου είναι: $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$, $n^2 = n_x^2+n_y^2+n_z^2$, $n_x, n_y, n_z = 1, 2, \ldots$. Θεωρήστε ότι τα n_x, n_y, n_z παίρνουν και την τιμή 0. Η κάθε διατεταγμένη τριάδα n_x, n_y, n_z αντιστοιχεί σε ένα σημείο του χώρου με συντεταγμένες $n_x \geq 0$, $n_y \geq 0$, $n_z \geq 0$ που βρίσκεται στο 1/8 της επιφάνειας μιας σφαίρας ακτίνας $r = n$. Δείξτε ότι όταν $N \gg 1$ η μέγιστη ενέργεια (ενέργεια Fermi) των σωματιδίων είναι: $E_F = 3^{2/3}\pi^{4/3}\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$, όπου $V = L^3 =$ ο όγκος του κυβικού κουτιού.

3. Να μελετηθεί η κίνηση ελεύθερου σωματιδίου εγκλωβισμένου σε ορθογώνιο κουτί με τελείως ανακλαστικά τοιχώματα και μήκη ακμών L_1, L_2, L_3. Ισχύει εν γένει ως προς τον εκφυλισμό των ενεργειακών ιδιοτιμών ανάλογο συμπέρασμα με το αντίστοιχο πρόβλημα του κυβικού κουτιού;

4. Οι ενεργειακές ιδιοτιμές ενός τρισδιάστατου ισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή δίνονται από τη σχέση: $E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$, $n = n_x + n_y + n_z$, $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \ldots$. Να δειχθεί ότι ο βαθμός εκφυλισμού μιας ενεργειακής κατάστασης είναι:

$$g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

5. Να μελετηθεί ο δισδιάστατος ανισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής και να δειχθεί ότι αν ω_x/ω_y είναι ένας άρρητος αριθμός η αντίστοιχη ενέργεια δεν είναι εκφυλισμένη.

6. Να βρεθούν οι ενεργειακές ιδιοτιμές και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις ενός τρισδιάστατου ανισοτροπικού αρμονικού ταλαντωτή για τον οποίο το δυναμικό είναι $V = \frac{1}{2}\big(k_x x^2 + k_y y^2 + k_z z^2\big)$. Πως μεταβάλλονται οι ιδιοτιμές της ενέργειας και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις αν ο ταλαντωτής είναι φορτισμένος με φορτίο q και βρίσκεται σε ομογενές ηλεκτρικό πεδίο εντάσεως $\mathcal{E}$;

Υπόδειξη. Δείξτε πρώτα ότι οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του ανισοτροπικού ταλαντωτή είναι:

$$E_{n_x n_y n_z} = \big(n_x + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega_x + \big(n_y + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega_y + \big(n_z + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega_z, \qquad n_x,\, n_y,\, n_z = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

$$u_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = N_{n_x n_y n_z} H_{n_x}(\alpha_x x) H_{n_y}(\alpha_y y) H_{n_z}(\alpha_z z)\, \mathrm{e}^{-(\alpha_x^2 x^2 + \alpha_y^2 y^2 + \alpha_z^2 z^2)/2}, \;\; N_{n_x n_y n_z} = N_{n_x} N_{n_y} N_{n_z}$$

Θεωρήστε το $z-$ άξονα κατά τη διεύθυνση του ηλεκτρικού πεδίου.

7. **α)** Η περιστροφική ενέργεια ενός διατομικού μορίου βρίσκεται θεωρώντας το μόριο ως στερεό περιστροφέα. Δηλαδή, στερεό σύστημα αποτελούμενο από δύο υλικά σημεία ευρισκόμενα σε σταθερή απόσταση, που περιστρέφεται γύρω από το κέντρο μάζας του. Αν I είναι η ροπή αδράνειας του μορίου, να δειχθεί ότι οι δυνατές τιμές της ενέργειας του μορίου είναι: $E_l = \frac{\hbar^2}{2I}\, l(l+1),\;\; l = 0, 1, 2, 3, \ldots$.

β) Το φάσμα περιστροφής ενός μορίου υδρογόνου (H_2) χαρακτηρίζεται από ακτινοβολία μήκους κύματος $\lambda = 10^7\ \mathring{\mathrm{A}}$. Να υπολογιστεί η τάξη μεγέθους της απόστασης των δύο ατόμων του υδρογόνου. (Δίνεται ότι $\frac{h}{m_H c} \simeq 1,32 \cdot 10^{-5}\ \mathring{\mathrm{A}}$ και $I = \frac{1}{2}\, m_H r^2$, όπου I η ροπή αδράνειας του μορίου και r η μέση απόσταση μεταξύ των δύο ατόμων. Επίσης, λόγω ενός κανόνα επιλογής είναι επιτρεπτές μόνο μεταπτώσεις μεταξύ δύο γειτονικών ενεργειακών καταστάσεων.)

8. Να ελεγχθεί αν η συνάρτηση $f(\theta,\phi) = 15 \sin^2\theta \cos\theta\, \mathrm{e}^{i2\phi}$ είναι ιδιοσυνάρτηση των τελεστών $\widehat{\mathrm{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$. Ποιες είναι οι αντίστοιχες ιδιοτιμές;

Υπόδειξη. $\widehat{\mathrm{l}}^2 = -\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big]$ και $\widehat{l}_z = -i\hbar\,\frac{d}{d\phi}$.

9. Ένα σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση για την οποία ισχύει: α) Το μέτρο της στροφορμής της είναι $\hbar\sqrt{2}$. β) $\langle\widehat{l}_z\rangle = 0$. γ) Η πιθανότητα μια μέτρηση του $l_z = 0$ είναι $0,2$. Να βρεθεί η κυματοσυνάρτηση $\psi(\theta,\phi)$ που περιγράφει την κατάσταση.

10. Η κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\big(\sin\phi\,\sin\theta + i\cos\theta\big)$$

Να δειχθεί ότι η $\psi(\theta,\phi)$ είναι ιδιοσυνάρτηση του $\widehat{\mathrm{l}}^2$. Ποια είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή; Ποια είναι τα δυνατά αποτελέσματα της μέτρησης του l_z και με ποια πιθανότητα;

Δίνεται ότι: $Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\; Y_1^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\phi}$.

11. Σωματίδιο είναι εγκλωβισμένο στο χώρο μεταξύ δύο ομόκεντρων σφαιρών ακτίνων r_1 και r_2 $(r_2 > r_1)$. Στο χώρο μεταξύ των δύο σφαιρών το δυναμικό είναι μηδέν. Να δειχθεί ότι οι δυνατές τιμές της ενέργεια του σωματιδίου και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις με $l = 0$ είναι:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu(r_2 - r_1)^2}\, n^2, \quad R_{n0} = \Big(\frac{2}{r_2 - r_1}\Big)^{1/2}\frac{1}{r}\,\sin\frac{n\pi(r - r_1)}{r_2 - r_1}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

12. Ηλεκτρόνιο βρίσκεται στο πεδίο Coulomb ενός πρωτονίου και η κατάστασή του περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{6}\Big(4u_{100}(\mathbf{r}) + 3u_{210}(\mathbf{r}) - u_{211}(\mathbf{r}) + \sqrt{10}\, u_{21-1}(\mathbf{r})\Big)$$

α) Να ελεγχθεί αν η κυματοσυνάρτηση είναι κανονικοποιημένη.
β) Να βρεθούν οι μέσες τιμές των μεγεθών E, $\mathbf{l}^2$ και l_z.
γ) Ποια είναι τα δυνατά αποτελέσματα κατά μια μέτρηση του μέτρου της στροφορμής και ποια κατά τη μέτρηση της προβολής της στροφορμής στο $z-$ άξονα και με ποια πιθανότητα;

13. Σωματίδιο βρίσκεται σε κεντρικό δυναμικό και η κατάστασή του περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$u(\mathbf{r}) = N(\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2) f(r)$$

όπου $\alpha,\ \beta,\ \gamma$ σταθερές και N παράγοντας κανονικοποίησης.

Αν $\alpha = \beta = \gamma = 1$ ποια είναι τα πιθανά αποτελέσματα της μέτρησης του $\mathbf{l}^2$ και των $l_x,\ l_y,\ l_z$ και ποιες οι αντίστοιχες πιθανότητες;

14. Τη χρονική στιγμή $t = 0$ η κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{10}}\big(2u_{100}(\mathbf{r}) + u_{210}(\mathbf{r}) + \sqrt{2}\, u_{211}(\mathbf{r}) + \sqrt{3}\, u_{21-1}(\mathbf{r})\big)$$

α) Να ελεγχθεί αν η $u(\mathbf{r})$ είναι κανονικοποιημένη.
β) Να βρεθεί η χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης.
γ) Να βρεθούν οι μέσες τιμές των E, $\mathbf{l}^2$ και l_z ως συναρτήσεις του χρόνου.
δ) Αν η μέτρηση των $|\mathbf{l}|$ και l_z δώσει ως αποτέλεσμα $\hbar\sqrt{2}$ και $\hbar$, αντίστοιχα, ποια είναι η κυματοσυνάρτηση αμέσως μετά τη μέτρηση;

15. Η ιδιοσυνάρτηση της $1s$ κατάστασης του ατόμου του υδρογόνου είναι: $u_{100}(r) = N\,\mathrm{e}^{-r/a_0}$. a_0 είναι η ακτίνα του Bohr. Να βρεθεί η πιθανότητα ένα ηλεκτρόνιο να βρίσκεται σε απόσταση από τον πυρήνα μεταξύ r και $r + dr$. Να δειχθεί ότι η πιθανότητα αυτή γίνεται μέγιστη στην απόσταση $r = a_0$ και ότι η μέση τιμή του r είναι $\langle r\rangle = \frac{3}{2}\,a_0$.

16. Ένα υδρογονοειδές άτομο αποτελείται από ένα ηλεκτρόνιο και ένα σφαιρικό πυρήνα ακτίνας $R = 5\cdot 10^{-6} a_0 A^{1/3}$ και φορτίου $Z = A/2$. Να υπολογιστεί η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο μέσα στον πυρήνα.

17. Σωματίδιο βρίσκεται σε δυναμικό της μορφής $V(r) = -V_0\,\mathrm{e}^{-r/a}$, $(V_0 > 0)$. Να βρεθεί η κυματοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης. Αν η αντίστοιχη ιδιοτιμή της ενέργειας είναι E, ποια είναι η σχέση που συνδέει το βάθος του δυναμικού V_0 με την παράμετρο a που καθορίζει την εμβέλεια του δυναμικού;
Υπόδειξη. Χρησιμοποιήστε το μετασχηματισμό $\xi = e^{-r/2a}$

18. Θεώρημα των Feynman - Helman. Να δειχθεί ότι αν ο ερμιτιανός τελεστής $\widehat{H}$ εξαρτάται από μια πραγματική παράμετρο λ και η $u(\lambda)$ είναι κανονικοποιημένη ιδιοσυνάρτηση που ανήκει στην ιδιοτιμή $E(\lambda)$ τότε ισχύει η σχέση:

$$\boxed{\frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda} = \langle u(\lambda)\Big|\frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial\lambda}\Big|u(\lambda)\rangle} \tag{4.55}$$

Να γίνει εφαρμογή του θεωρήματος στις περιπτώσεις:
α) Στον αρμονικό ταλαντωτή σε μια διάσταση και να δειχθεί ότι $\langle x^2\rangle_n = \frac{\hbar}{m\omega}\,(n+\frac{1}{2})$
β) Στο υδρογονοειδές άτομο και να δειχθεί ότι:

$$\langle\frac{1}{r}\rangle_{nl} = \frac{Z}{a_0 n^2}\,, \quad \langle\frac{1}{r^2}\rangle_{nl} = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l+\frac{1}{2})} \tag{4.56}$$

Υπόδειξη. Στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή θεωρήστε ως παράμετρο το ω. Στην περίπτωση του υδρογονοειδούς ατόμου μπορείτε να θεωρήσετε ως παράμετρο το Z ή το e, ενώ στη δεύτερη μέση τιμή το l. Προσοχή η ακτίνα του Bohr εξαρτάται από το e.

Άσκηση 19. Να δειχθεί η σχέση του Krammer για ένα υδρογονειδές άτομο:

$$\boxed{\frac{k+1}{n^2}\,\langle r^k\rangle_{nl} = (2k+1)\,a\,\langle r^{k-1}\rangle_{nl} - \frac{k}{4}\,\Big[(2l+1)^2 - k^2\Big]a^2\langle r^{k-2}\rangle_{nl}} \tag{4.57}$$

όπου $a = a_0/Z$ και $a_0 = \hbar^2/\mu e^2 =$ η ακτίνα του Bohr. Η σχέση αυτή συνδέει τη μέση τιμή τριών διαδοχικών δυνάμεων του r ως προς τις κυματοσυναρτήσεις του υδρογονοειδούς ατόμου.

Υπόδειξη. α) Αν $R_{nl}(r)$ και $\eta_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ είναι οι λύσεις της ακτινικής εξίσωσης και της μονοδιάστατης ακτινικής εξίσωσης, αντίστοιχα, για τη μέση τιμή του r^k έχουμε:

$$\langle r^k\rangle_{nl} = \langle R_{nl}(r)|r^k|R_{nl}(r)\rangle = \langle \eta_{nl}(r)|r^k|\eta_{nl}(r)\rangle = \int_0^\infty r^k \eta_{nl}^2(r)dr \tag{4.58α΄}$$

β) Γράψτε τη μονοδιάστατη ακτινική εξίσωση ενός υδρογονοειδούς ατόμου (σχέση (4.38)) με τη μορφή:

$$\eta_{nl}''(r) = \Big[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{a}\,\frac{1}{r} + \frac{1}{a^2n^2}\Big]\eta_{nl}(r) \tag{4.58β΄}$$

γ) Πολλαπλασιάστε εσωτερικά και τα δύο μέλη της Δ.Ε. (4.58β΄) με $r^k\eta_{nl}(r)$ για να οδηγηθείτε στη σχέση:

$$\langle\eta_{nl}|r^k|\eta_{nl}''\rangle = l(l+1)\langle r^{k-2}\rangle_{nl} - \frac{2}{a}\,\langle r^{k-1}\rangle_{nl} + \frac{1}{a^2n^2}\,\langle r^k\rangle_{nl} \tag{4.58γ΄}$$

δ) Δείξτε ότι: $\langle\eta_{nl}|r^k|\eta_{nl}''\rangle = -k\langle\eta_{nl}|r^k|\eta_{nl}'\rangle - \langle\eta_{nl}'|r^k|\eta_{nl}'\rangle$, $\langle\eta_{nl}|r^{k-1}|\eta_{nl}'\rangle = -\frac{k-1}{2}\langle r^{k-2}\rangle_{nl}$, $\langle\eta_{nl}'|r^{k-1}|\eta_{nl}'\rangle = -\frac{2}{k+1}\langle\eta_{nl}''|r^{k+1}|\eta_{nl}'\rangle$.
ε) Στο τελευταίο εσωτερικό γινόμενο αντικαταστήστε το η_{nl}'' από τη Δ.Ε. (4.58β΄).

Άσκηση 20. Να βρεθεί η μέση τιμή του r^k ($\langle r^k\rangle_{nl} = \int_0^\infty r^{k+2}R_{nl}^2(r)dr$) ενός υδρογονοειδούς ατόμου για $k = 1, 2, -1, -2, -3$. Συγκεκριμένα να δειχθεί ότι:

$$\langle r\rangle_{nl} = \frac{a_0}{2Z}\,[3n^2 - l(l+1)]\,, \qquad \langle r^2\rangle_{nl} = \frac{a_0^2n^2}{2Z^2}\,[5n^2+1-3l(l+1)]\,, \qquad \langle r^{-1}\rangle_{nl} = \frac{Z}{a_0n^2}\,,$$

$$\langle r^{-2}\rangle_{nl} = \frac{Z^2}{a_0^2n^3(l+\frac{1}{2})}\,, \qquad \langle r^{-3}\rangle_{nl} = \frac{Z^3}{a_0^3n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

Υπόδειξη. Χρησιμοποιήστε τη σχέση (4.55) για τις μέσες τιμές των $1/r$ και $1/r^2$ και τη σχέση (4.57) για τις μέσες τιμές των άλλων δυνάμεων του r.

Άσκηση 21. Να δειχθεί ότι για οποιαδήποτε στάσιμη κατάσταση ενός υδρογονοειδούς ατόμου ισχύει η σχέση:

$$\langle\widehat{T}\rangle_{nlm} = -E_n$$

όπου $\widehat{T} = \frac{\widehat{\mathrm{p}}^2}{2\mu}$ και $E_n = -\frac{e^2Z^2}{2a_0}\,\frac{1}{n^2}$.
Υπόδειξη. $\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V}$. Χρησιμοποιήστε τη μέση τιμή του $1/r$ από την προηγούμενη άσκηση.

Παράρτημα Α΄

Ορθογώνιες συναρτήσεις

Στη Φυσική και στα Μαθηματικά συναντούμε συχνά σύνολα συναρτήσεων $y_n(x)$, $n = 1, 2, 3, ...$ $a \leq x \leq b$ που έχουν την ιδιότητα:

$$\int_a^b y_n^*(x) y_m(x)\, dx = \delta_{nm} \equiv \begin{cases} 1 & \text{όταν} \quad n = m \\ 0 & \text{όταν} \quad n \neq m \end{cases}$$

Η σχέση αυτή μοιάζει με τη σχέση: $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij},$ που συναντούμε στην Αναλυτική Γεωμετρία, όπου $\mathbf{e}_i (i = 1, 2, 3)$ είναι μια ορθοκανονική βάση ενός χώρου 3-διαστάσεων. Αν:

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^{3} a_i \mathbf{e}_i \quad \text{και} \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^{3} b_i \mathbf{e}_i$$

είναι δύο διανύσματα του χώρου, τότε:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^{3} a_i b_i$$

είναι το εσωτερικό γινόμενο των δύο διανυσμάτων.

Τα παραπάνω μας οδηγούν να δώσουμε την ίδια ορολογία για ένα σύνολο ολοκληρώσιμων συναρτήσεων (ή πιο γενικά για ένα σύνολο τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων).

Ορισμός 1. Εσωτερικό γινόμενο δύο συναρτήσεων $y(x)$ και $g(x)$ στο διάστημα $[a, b]$, που το συμβολίζουμε (y, g), λέγεται το ολοκλήρωμα:

$$\boxed{(y, g) \equiv \int_a^b y^*(x) g(x)\, dx} \tag{Α΄.1}$$

Ορισμός 2. Δύο συναρτήσεις $y(x)$ και $g(x)$ λέγονται **ορθογώνιες** στο διάστημα $[a, b]$ αν:

$$\boxed{(y, g) = 0} \tag{Α΄.2}$$

Ορισμός 3. Μια συνάρτηση $y(x)$ λέγεται **κανονικοποιημένη** στο διάστημα $[a, b]$ αν:

$$(y, y) \equiv \int_a^b y^*(x) y(x)\, dx = \int_a^b |y(x)|^2\, dx = 1 \tag{Α΄.3}$$

Ορισμός 4. Ο μη αρνητικός αριθμός: $\boxed{\|y\| \equiv \sqrt{(y, y)}}$ λέγεται **norm ή μήκος** της $y(x)$ στο διάστημα $[a, b]$.

Κάθε συνάρτηση $y(x)$ για την οποία ισχύει $\|y\| \neq 0$ μπορεί να **κανονικοποιηθεί**. Δηλαδή μπορεί να βρεθεί μια άλλη συνάρτηση,

$$\tilde{y}(x) = Ny(x)$$

γραμμικά εξαρτημένη προς τη $y(x)$ που να είναι κανονικοποιημένη, αρκεί να πάρουμε:

$$N = \|y(x)\|^{-1}$$

Ο N λέγεται **παράγοντας κανονικοποιήσεως**.

Ορισμός 5. Ένα σύνολο συναρτήσεων $y_n(x),\ n = 1, 2, 3, \ldots$, λέγεται **ορθοκανονικό σύστημα** στο διάστημα $[a, b]$ αν ισχύει:

$$\boxed{(y_n, y_m) \equiv \int_a^b y_n^*(x) y_m(x)\, dx = \delta_{nm}} \tag{Α΄.4}$$

Παραδείγματα. α) Οι συναρτήσεις:

$$y_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}},\ y_n^{(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\ y_n^{(2)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\ n = 1, 2, \ldots$$

και οι συναρτήσεις: $y_n(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2L}} \exp\left[i\dfrac{n\pi x}{L}\right],\quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ είναι δύο ορθοκανονικά συστήματα στο διάστημα $[-L, L]$.

β) Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός ερμιτιανού τετελεστού είναι ένα ορθοκανονικό σύστημα ή μπορούν να κατασκευαστούν, στην περίπτωση των εκφυλισμένων ιδιοτιμών, έτσι ώστε να αποτελούν ένα ορθοκανονικό σύστημα.

Για το εσωτερικό γινόμενο, (f, g), δύο συναρτήσεων ισχύουν οι ιδιότητες:

$(f, f) \geq 0,\quad (f, f) = 0$ τότε και μόνο τότε, αν $f(x) = 0\quad \forall x \in [a, b]$
$(f, g) = (g, f)^*$
$(c_1 f, c_2 g) = c_1^* c_2 (f, g)$
$(f, g_1 + g_2) = (f, g_1) + (f, g_2)$
$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\|$ τριγωνική ιδιότητα
$\lvert (f, g) \rvert \leq \|f\| \cdot \|g\|$ ανισότητα των Cauchy-Schwarz

Σημείωση. Το εσωτερικό γινόμενο, όπως ορίστηκε προηγουμένως, έχει τις ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου ενός Ευκλείδειου διανυσματικού χώρου, όπως ορίζεται στη διανυσματική ανάλυση. Η κύρια διαφορά είναι ότι εδώ το εσωτερικό γινόμενο είναι μιγαδικός αριθμός και επομένως έχει σημασία η διάταξη των δύο διανυσμάτων (συναρτήσεων).

Α΄.1 Ανάπτυγμα συναρτήσεως σε σειρά συναρτήσεων

Όπως ένα διάνυσμα μπορεί να αναπτυχθεί (αναλυθεί) στις συνιστώσες του ως προς μια ορθοκανονική βάση του χώρου, έτσι και μια συνάρτηση (που ικανοποιεί ορισμένες γενικές συνθήκες) μπορεί να παρασταθεί με σειρά ορθοκανονικών συναρτήσεων σύμφωνα με το παρακάτω θεώρημα. Το ανάπτυγμα μιας συναρτήσεως κατά Fourier είναι μια μερική περίπτωση.

Θεώρημα αναπτύγματος. Υποθέσεις: α) Οι συναρτήσεις $y_n(x),\ x \in [a, b]$ του ορθοκανονικού συστήματος $\{y_n(x)\},\ n = 1, 2, 3, \ldots$ ικανοποιούν τις οριακές συνθήκες: $y(a) = y(b) = 0$ ή $y(a) = y(b)$ και $y'(a) = y'(b)$. β) Η συνεχής συνάρτηση $f(x)$ στο διάστημα $[a, b]$ έχει πρώτη και δεύτερη παράγωγο που είναι κατά τμήματα συνεχείς και ικανοποιεί τις ίδιες οριακές συνθήκες.

Συμπέρασμα: Η $f(x)$ μπορεί να παρασταθεί στο διάστημα $[a, b]$ με μια απόλυτα και ομοιόμορφα συγκλίνουσα σειρά της μορφής:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n y_n(x) \tag{Α΄.5}$$

όπου:

$$C_n = (y_n, f) \equiv \int_a^b y_n^*(x) f(x)\, dx, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{Α΄.6}$$

Θα δώσουμε μόνο την απόδειξη του δεύτερου μέρους του θεωρήματος. Δηλαδή θα δείξουμε ότι αν η σειρά της (Α΄.5) συγκλίνει απόλυτα και ομοιόμορφα στη συνάρτηση $f(x)$ τότε οι συντελεστές C_n δίνονται από τη σχέση (Α΄.6).

Η έκφραση των συντελεστών C_n προκύπτει εύκολα αν πολλαπλασιάσουμε και τα δύο μέλη της (Α΄.5) επί $y_k^*(x)$ και ολοκληρώσουμε από a έως b. Επειδή η σειρά συγκλίνει ομοιόμορφα μπορούμε να αλλάξουμε την τάξη των συμβόλων της ολοκληρώσεως και της σειράς, οπότε, λόγω και της ορθοκανονικότητας των $y_n(x)$, έχουμε:

$$(y_k, f) = \big(y_k, \sum_{n=1}^{\infty} C_n y_n\big) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n (y_k, y_n) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \delta_{kn} = C_k$$

Δηλαδή,

$$C_n = (y_n, f) \equiv \int_a^b y_n^*(x) f(x)\, dx, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Οι αριθμοί C_n που ορίζονται από την (Α΄.6) λέγονται **συντελεστές του αναπτύγματος ή συνιστώσες ή συντελεστές Fourier** της $f(x)$.

Για να υπάρχουν οι συντελεστές αυτοί θα πρέπει η συνάρτηση $f(x)$ να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη στο διάστημα $[a, b]$, επειδή η ολοκληρωσιμότητα των $y_n(x)$ είναι μια από τις συνθήκες του ορθοκανονικού συστήματος.

Έτσι μπορούμε να διατυπώσουμε την πρόταση: *σε κάθε συνάρτηση* $f(x)$ *που είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη στο* $[a, b]$, *μπορούμε να αντιστοιχίσουμε ένα ανάπτυγμα ως προς το ορθοκανονικό σύστημα* $\{y_n(x)\}$ *στο διάστημα* $[a, b]$,

$$\boxed{f(x) \sim \sum_{n=1}^{\infty} C_n y_n(x)\ , \quad \text{όπου} \quad C_n = (y_n, f)} \tag{Α΄.7}$$

Οι συνθήκες που πρέπει να ισχύουν ώστε μια συνάρτηση $f(x)$ να μπορεί να παρασταθεί με σειρά της μορφής (Α΄.7), δηλαδή το σύμβολο $\sim$ να αντικατασταθεί από το σύμβολο της ισότητας, εξαρτώνται από τις ιδιότητες του ορθοκανονικού συστήματος $\{y_n(x)\}$.

Ορθοκανονικά συστήματα συναρτήσεων παίρνουμε συνήθως κατά τη λύση διαφορικών εξισώσεων με κατάλληλες οριακές συνθήκες ή ακόμη και από μη ορθογώνια συστήματα συναρτήσεων με τη βοήθεια της μεθόδου Gram-Schmidt.

Ορισμός. Ένα ορθοκανονικό σύστημα, $\{y_n(x)\},\ n = 1, 2, 3, \ldots$, στο διάστημα $[a, b]$ λέγεται **πλήρες** αν για κάθε συνάρτηση $f(x) \in L^2[a, b]$, ισχύει

$$\lim_{N \to \infty} \int_a^b \left| f(x) - \sum_{n=1}^{N} C_n y_n(x) \right|^2 dx = 0\ , \qquad C_n = (y_n, f) \tag{Α΄.8}$$

Σ' αυτήν την περίπτωση λέμε ότι το ορθοκανονικό σύστημα $\{y_n(x)\}$ είναι μια βάση του χώρου $L^2[a, b]$. Το σύμβολο $L^2[a, b]$ παριστά την κλάση των συναρτήσεων που είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες στο διάστημα $[a, b]$.

Παράρτημα Β΄

Στοιχεία Πιθανοτήτων - Στατιστικής

Επειδή η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει την κατάσταση ενός συστήματος σχετίζεται με την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στο στοιχειώδη όγκο $d\mathbf{r}$ στην περιοχή του σημείου $\mathbf{r}$ είναι σκόπιμο να αναφέρουμε μερικές βασικές έννοιες της θεωρίας Πιθανοτήτων και της Στατιστικής.

Βασική έννοια στη θεωρία Πιθανοτήτων είναι **το πείραμα** ο ορισμός του οποίου δεν είναι τελείως ξεκάθαρος. Στη θεωρία Πιθανοτήτων μας ενδιαφέρουν τα πειράματα τα οποία μπορούν να επαναληφθούν όσες φορές θέλουμε κάτω από τις ίδιες συνθήκες.

Το σύνολο των δυνατών αποτελεσμάτων ενός πειράματος λέγεται **δειγματικός χώρος** (Ω).

Κάθε δυνατό αποτέλεσμα ενός πειράματος λέγεται **απλό ή στοιχειώδες γεγονός** και η συλλογή απλών γεγονότων λέγεται **γεγονός** (event). Ο δειγματοχώρος είναι το σύνολο όλων των απλών γεγονότων, ενώ κάθε γεγονός μπορεί να θεωρηθεί ως υποσύνολο του Ω.

Για παράδειγμα, η εμφάνιση της μιας ή της άλλης όψης ενός νομίσματος ή η εμφάνιση ενός από τους αριθμούς 1 έως 6 κατά τη ρίψη ενός ζαριού είναι απλά γεγονότα.

Σε ένα πείραμα υπάρχει πάντα αβεβαιότητα να συμβεί ένα ορισμένο απλό γεγονός ή όχι. Αν οι εμφανίσεις των απλών γεγονότων αποτελούν ένα αριθμήσιμο σύνολο $\Omega = \{A_1,\, A_2, \cdots,\, A_n\}$, ως μέτρο του να συμβεί το απλό γεγονός A_k ορίζουμε κατάλληλα έναν πραγματικό αριθμό $(P(A_k))$, που λέγεται πιθανότητα και παίρνει τιμές μεταξύ του 0 και του 1 ($0 \leq P(A_k) \leq 1$). Αν το k απλό γεγονός δεν συμβαίνει ποτέ, τότε $P(A_k) = 0$, ενώ αν σίγουρα συμβαίνει τότε $P(A_k) = 1$.

Εκτός από τον αξιωματικό ορισμό της πιθανότητας χρησιμοποιούνται πολύ συχνά και οι παρακάτω δύο ορισμοί:

Ορισμός 1. Κλασική μέθοδος (ή εκ των προτέρων) . Αν ένα πείραμα μπορεί να δώσει N διαφορετικά και **εξ ίσου πιθανά** αποτελέσματα, από τα οποία N_A είναι ευνοϊκά, η πιθανότητα του γεγονότος A είναι $P(A) = \frac{N_A}{N}$.

Ορισμός 2. Μέθοδος της σχετικής συχνότητας (ή εκ των υστέρων). Αν μετά από N επαναλήψεις ενός πειράματος (με N πολύ μεγάλο) ένα γεγονός παρατηρείται N_A φορές τότε η πιθανότητα του γεγονότος είναι $P(A) = \frac{N_A}{N}$.

Για τη μελέτη των αποτελεσμάτων ενός πειράματος, μας ευκολύνει, συχνά, να **αντιστοιχίσουμε** σε κάθε γεγονός έναν πραγματικό αριθμό. **Η συνάρτηση αυτή (αντιστοιχία) λέγεται τυχαία μεταβλητή** και συμβολίζεται συνήθως με ένα κεφαλαίο γράμμα.

Παράδειγμα. Ρίχνουμε δύο νομίσματα (που το καθένα έχει τις όψεις K και Γ) μια φορά, τότε ο δειγματοχώρος είναι:

$$\Omega = \{KK,\ K\Gamma,\ \Gamma K,\ \Gamma\Gamma\}$$

Αν X είναι το πλήθος των όψεων K, η αντιστοιχία των σημείων του Ω και των τιμών του X είναι:

$$X(KK) = 2,\ X(K\Gamma) = 1,\ X(\Gamma K) = 1,\ X(\Gamma\Gamma) = 0$$

Αν μια τυχαία μεταβλητή παίρνει πεπερασμένο ή άπειρο αριθμήσιμο πλήθος τιμών λέγεται **διακριτή τυχαία μεταβλητή**, ενώ αν παίρνει άπειρο μη αριθμήσιμο πλήθος τιμών, λέγεται **συνεχής τυχαία μεταβλητή**.

Αν η διακριτή τυχαία μεταβλητή μπορεί να πάρει τις τιμές $x_1, x_2, x_3, \ldots$ (διατεταγμένες κατά αύξουσα σειρά) με πιθανότητες:

$$P(X = x_k) = f(x_k), \quad k = 1, 2, 3, \ldots \tag{Β΄.1}$$

είναι βολικό να ορίσουμε μια **συνάρτηση πιθανότητας** ή **κατανομή** (distribution) **πιθανότητας**:

$$P(X = x) = \rho(x) \tag{Β΄.2}$$

τέτοια ώστε η $\rho(x)$ να δίνει την τιμή $\rho(x_k)$ όταν $x = x_k$, ενώ για τις άλλες τιμές του x να είναι $\rho(x) = 0$. Η $\rho(x)$ είναι μια κατανομή πιθανότητας αν:

$$\rho(x) \geq 0 \quad \text{και} \quad \sum_x \rho(x) = 1 \tag{Β΄.3}$$

Στο παράδειγμα των δύο νομισμάτων, η συνάρτηση πιθανότητας είναι

$$\begin{array}{l} P(x=0) = P(\Gamma\Gamma) = \frac{1}{4} \\ P(x=1) = P(K\Gamma) + P(\Gamma K) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2} \\ P(x=2) = P(KK) = \frac{1}{4} \end{array}$$

ή

x	0	1	2
$f(x)$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$

• Όταν η τυχαία μεταβλητή X παίρνει συνεχείς τιμές δεν μπορούμε να ορίσουμε (για κάθε σημείο των τιμών του X) την πιθανότητα $P(X = x)$. Αυτό σημαίνει ότι δεν μπορούμε να ορίσουμε μια συνάρτηση πιθανότητας με τον ίδιο τρόπο όπως γίνεται για μια διακριτή μεταβλητή. Για να έχει νόημα η κατανομή πιθανότητας πρέπει το X να βρίσκεται μεταξύ δύο διαφορετικών τιμών. Η παρατήρηση αυτή και οι ιδιότητες της (Β΄.3) μας οδηγούν να δεχτούμε αξιωματικά την ύπαρξη μιας συνάρτησης $\rho(x)$ με τις ιδιότητες:

$$\rho(x) \geq 0 \quad \text{και} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = 1 \tag{Β΄.4}$$

Η πιθανότητα να πάρει η X τιμές στο διάστημα (x_1, x_2) ορίζεται από τη σχέση:

$$P(x_1 < X < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x)dx$$

Η συνάρτηση $\rho(x)$ λέγεται **συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας** (probability density function).

• Όταν οι αριθμητικές τιμές των στοιχείων ενός συνόλου (μιας τυχαίας μεταβλητής) εμφανίζουν την τάση να συγκεντρώνονται γύρω από μια συγκεκριμένη τιμή είναι χρήσιμο να χαρακτηρίζουμε το σύνολο των τιμών με λίγους αριθμούς (παραμέτρους) που σχετίζονται με τις διάφορες ορμές της κατανομής των τιμών. Δύο χαρακτηριστικές παράμετροι είναι η μέση τιμή και η διασπορά της τυχαίας μεταβλητής.

Ορισμός. Η **μέση τιμή** ή **αναμενόμενη τιμή** μιας διακριτής τυχαίας μεταβλητής ορίζεται από τη σχέση:

$$\boxed{\langle X \rangle \equiv \mu = \sum_{i=1}^{N} x_i P(X = x_i)} \tag{B΄.5}$$

Για μια συνεχή τυχαία μεταβλητή η μέση τιμή ορίζεται από τη σχέση:

$$\boxed{\langle X \rangle \equiv \mu = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx} \tag{B΄.6}$$

όπου $\rho(x)$ η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας.

Μια συνάρτηση της τυχαίας μεταβλητής X**,** $\mathrm{g(X)}$**, είναι και αυτή τυχαία μεταβλητή**. Η μέση τιμή της $g(X)$, για διακριτή και συνεχή τυχαία μεταβλητή, είναι αντίστοιχα:

$$\langle g(X) \rangle \equiv \mu = \sum_{i=1}^{N} g(x_i) P(X = x_i) \tag{B΄.7}$$

$$\langle g(X) \rangle \equiv \mu = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\rho(x)dx \tag{B΄.8}$$

Για τη μέση τιμή μιας τυχαίας μεταβλητής ισχύουν οι ιδιότητες:

$$\langle cX \rangle = c\langle X \rangle, \qquad c = \text{σταθερά} \tag{B΄.9}$$

$$\langle X + Y \rangle = \langle X \rangle + \langle Y \rangle \tag{B΄.10}$$

$$\langle XY \rangle = \langle X \rangle \langle Y \rangle, \quad X, Y \text{ ανεξάρτητες μεταβλητές} \tag{B΄.11}$$

Ορισμός. Η **διασπορά** (variance) μιας τυχαίας μεταβλητής ορίζεται από τη σχέση:

$$\boxed{\sigma^2 = \langle (X - \mu)^2 \rangle} \tag{B΄.12}$$

Η θετική τετραγωνική ρίζα της διασποράς, λέγεται **τυπική απόκλιση** (ή αβεβαιότητα):

$$\sigma = \sqrt{\langle (X - \mu)^2 \rangle} \tag{B΄.13}$$

Η τυπική απόκλιση είναι ένα μέτρο της απόκλισης των τιμών της τυχαίας μεταβλητής X από τη μέση τιμή της.

Μπορεί εύκολα να δειχτεί ότι για τη διασπορά ισχύουν οι σχέσεις:

$$\sigma^2 = \langle (X - \mu)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \mu^2 \tag{B΄.14}$$

$$\sigma^2[cX] = c^2 \sigma^2[X], \qquad c = \text{ σταθερά} \tag{B΄.15}$$

$$\sigma^2[X \pm Y] = \sigma^2[X] + \sigma^2[Y], \quad X, Y \text{ ανεξάρτητες μεταβλητές} \tag{B΄.16}$$

Παράρτημα Γ΄

Θεωρία Τελεστών

Στο Κεφάλαιο 2 χρησιμοποιήθηκε ο όρος τελεστής χωρίς να δοθεί κάποια διευκρίνιση ή ορισμός. Είδαμε επίσης ότι η εξίσωση του Schrödinger μπορεί να εισαχθεί αξιωματικά με τη βοήθεια αυτής της έννοιας. Επειδή η χρήση των τελεστών είναι βασικής σημασίας στην Κβαντομηχανική είναι σκόπιμο να δοθούν οι απαραίτητοι ορισμοί και οι ιδιότητες των τελεστών. Χρησιμοποιώντας απλά λόγια, μπορούμε να πούμε ότι: *Τελεστής είναι ένα σύμβολο που όταν δρα σε μια συνάρτηση την αλλάζει, εν γένει, σε μια άλλη συνάρτηση, των ιδίων μεταβλητών με έναν καθορισμένο νόμο.* Ένας τελεστής ορίζεται συνήθως μόνο για μια ορισμένη τάξη συναρτήσεων και δεν έχει έννοια για άλλες. Τους τελεστές τους συμβολίζουμε συνήθως με ένα (κεφαλαίο) γράμμα, θέτοντας το σύμβολο $\widehat{\ }$. Σύμφωνα με τα παραπάνω έχουμε:

$$\widehat{A}\Psi = \Phi \tag{Γ΄.1}$$

Πληρέστερος ορισμός του τελεστή, απαιτεί την έννοια του γραμμικού διανυσματικού χώρου:

Ορισμός. *Αν $\mathcal{V}_1$ και $\mathcal{V}_2$ είναι δύο διανυσματικοί χώροι, καλούμε τελεστή ή μετασχηματισμό την απεικόνιση A κατά την οποία*: $\forall\Psi \in \mathcal{V}_1$ *αντιστοιχεί ένα* $\Phi \in \mathcal{V}_2$ *και γράφουμε συμβολικά*: $\widehat{A}\Psi = \Phi$, *ή ακόμη*: $\widehat{A}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$.

Θα ασχοληθούμε κυρίως με την περίπτωση κατά την οποία έχουμε απεικόνιση του γραμμικού διανυσματικού χώρου $\mathcal{V}_1 = \mathcal{V}$ στον ίδιο χώρο $\mathcal{V}$. Ο $\mathcal{V}$ είναι ένας χώρος Hibert [1].

Δύο τελεστές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ λέγονται **ίσοι**, αν $\boxed{\widehat{A}y = \widehat{B}y,\ \forall y \in \mathcal{V}}$.

Παραδείγματα τελεστών. 1. Ο πολλαπλασιασμός μιας συνάρτησης $y(x)$ επί τη μεταβλητή x ορίζει μια απεικόνιση του συνόλου των συναρτήσεων πάνω στον εαυτό του.

2. Ο τελεστής $\frac{d}{dx}$ όταν δράσει σε μια συνάρτηση $y(x)$ ορίζει την παράγωγο της.

3. $\int(\cdots)dx$.

4. Ο τελεστής της parity (ομοτιμίας): $\widehat{\Pi}\Psi(x) = \Psi(-x)$. Ο τελεστής αυτός αλλάζει το πρόσημο της ανεξάρτητης μεταβλητής.

5. Ο τελεστής μετάθεσης: $T_a\Psi(x) = \Psi(x+a)$.

6. Ο τελεστής της ορμής $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ και ο τελεστής του Hamilton: $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$.

7. $\sin(\cdots)$.

Γραμμικοί τελεστές

Οι τελεστές που μας ενδιαφέρουν περισσότερο στην Κβαντομηχανική είναι αυτοί που ικανοποιούν την ιδιότητα:

$$\widehat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\widehat{A}\Psi_1 + c_2\widehat{A}\Psi_2 \tag{Γ΄.2}$$

[1] Ο χώρος Hilbert είναι ένας διανυσματικός χώρος εφοδιασμένος με ένα εσωτερικό γινόμενο που είναι γενικά μιγαδικός αριθμός. Κάθε διανυσματικός χώρος πεπερασμένων διαστάσεων είναι χώρος Hibert. Οι συναρτήσεις του $L_2(a,b)$ (των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων στο διάστημα (a,b)), που μας ενδιαφέρουν στην Κβαντομηχανική, είναι ένα άλλο παράδειγμα χώρου Hibert.

όπου c_1, c_2 είναι (εν γένει μιγαδικές) σταθερές και Ψ_1, Ψ_2 δύο τυχαίες συναρτήσεις (διανύσματα του $\mathcal{V}$).

Ένας τελεστής που ικανοποιεί τη σχέση (Γ΄.2) λέγεται **γραμμικός τελεστής**.

Οι τελεστές 1-6 που αναφέρθηκαν παραπάνω είναι παραδείγματα γραμμικών τελεστών, ενώ ο τελεστής $\sin$ δεν ικανοποιεί τη σχέση (Γ΄.2) και επομένως δεν είναι γραμμικός τελεστής. Επειδή οι τελεστές που θα μας απασχολήσουν στη συνέχεια είναι μόνο οι γραμμικοί τελεστές θα αναφερόμαστε σε αυτούς χωρίς τον προσδιορισμό της γραμμικότητας.

Δύο βασικοί τελεστές είναι: Ο **Μηδενικός τελεστής**: $\boxed{\widehat{0}\Psi = 0, \quad \forall\, \Psi \in \mathcal{V}}$ και ο **ταυτοτικός τελεστής**: $\boxed{\widehat{I}\Psi = \Psi, \quad \forall\, \Psi \in \mathcal{V}}$.

Όταν αναφερόμαστε στους διαφορικούς τελεστές, όπως για παράδειγμα στον τελεστή της μορφής: $\widehat{D} = A(x)\frac{d^2}{dx^2} + B(x)\frac{d}{dx} + C(x)$ δεν εννοούμε μόνο τη διαφορική έκφραση του τελεστή $\widehat{D}$, αλλά και το πεδίο ορισμού και τις διάφορες συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούν οι συναρτήσεις στις οποίες δρα ο $\widehat{D}$.

Γ΄.1 Άλγεβρα των γραμμικών τελεστών

Εκτός από την ιδιότητα της ισότητας δύο τελεστών που ορίστηκε στο προηγούμενο εδάφιο ορίζουμε και άλλες πράξεις μεταξύ των τελεστών, με ανάλογο τρόπο με εκείνο της συνηθισμένης άλγεβρας.

• Πρόσθεση τελεστών

$$\widehat{C} = \widehat{A} + \widehat{B} \quad \Leftrightarrow \quad \widehat{C}\Psi = \widehat{A}\Psi + \widehat{B}\Psi, \quad \forall\, \Psi \in \mathcal{V} \tag{Γ΄.3}$$

Για παράδειγμα ο τελεστής του Laplace $\Delta = \nabla^2$ ορίζεται με τη σχέση:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$

• Πολλαπλασιασμός τελεστών

$$\widehat{D}_{AB} = \widehat{A}\,\widehat{B} \quad \Leftrightarrow \quad \widehat{D}_{AB}\Psi = \widehat{A}(\widehat{B}\Psi), \quad \forall\, \Psi \in \mathcal{V} \tag{Γ΄.4}$$

Δηλαδή, για το γινόμενο δύο τελεστών $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ παίρνουμε το αποτέλεσμα που προκύπτει με εφαρμογή σε μια συνάρτηση, πρώτα του τελεστή $\widehat{B}$ και στη συνέχεια του τελεστή $\widehat{A}$.

Παράδειγμα 1. Αν $\widehat{A} = \widehat{x} = x$ και $\widehat{B} = \widehat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$ είναι οι τελεστές της θέσης και της ορμής σε μια διάσταση, τότε:

$$\widehat{x}\widehat{p}_x\Psi = x(-i\hbar\frac{d}{dx}\Psi) = -i\hbar x\frac{d\Psi}{dx}$$

Αλλά

$$\widehat{p}_x\widehat{x}\Psi = -i\hbar\frac{d}{dx}(x\Psi) = -i\hbar\big[\Psi + x\frac{d\Psi}{dx}\big]$$

Παρατηρούμε ότι $\widehat{x}\widehat{p}_x \neq \widehat{p}_x\widehat{x}$. Δηλαδή, για το γινόμενο των τελεστών της θέσης, $\widehat{x}$ και της ορμής, $\widehat{p}_x$, αλλά και για το γινόμενο οποιονδήποτε τελεστών $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ δεν ισχύει γενικά η αντιμεταθετική ιδιότητα. Είναι, επομένως, δυνατό να συμβαίνει όπως στο παράδειγμα 1:

$$\widehat{A}\,\widehat{B} \neq \widehat{B}\,\widehat{A}$$

Γι' αυτόν το λόγο είναι χρήσιμο να εισάγουμε τον αντιμεταθέτη δύο τελεστών που είναι βασικής σημασίας στην Κβαντομηχανική.

Ορισμός. Αντιμεταθέτης δύο τελεστών λέγεται ο τελεστής $\widehat{A}\widehat{B}-\widehat{B}\widehat{A}$ που συμβολίζεται με $\big[\widehat{A},\widehat{B}\big]$. Δηλαδή:

$$\boxed{[\widehat{A},\widehat{B}]=\widehat{A}\widehat{B}-\widehat{B}\widehat{A}} \tag{Γ΄.5}$$

Όταν $[\widehat{A},\widehat{B}]=0$ λέμε ότι οι τελετές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ αντιμετατίθενται. Ένας τελεστής αντιμετατίθεται με οποιαδήποτε σταθερά.

Παράδειγμα 2. Ο αντιμεταθέτης των τελεστών $\widehat{x}=x$ και $\widehat{p}_x=-i\hbar\frac{d}{dx}$ είναι:

$$[\widehat{x},\widehat{p}_x]\Psi=\widehat{x}\,\widehat{p}_x\Psi-\widehat{p}_x x\Psi=-i\hbar x\frac{d\Psi}{dx}-(-i\hbar)\big[\Psi+x\frac{d\Psi}{dx}\big]=i\hbar\Psi \quad\Rightarrow\quad \boxed{[\widehat{x},\widehat{p}_x]=i\hbar}$$

Δηλαδή, οι τελεστές της θέσης και της ορμής δεν αντιμετατίθενται.

Σημείωση. Στο σημείο αυτό είναι χρήσιμο να δώσουμε τους αντιμεταθέτες των τελεστών που αντιστοιχούν στις συντεταγμένες του διανύσματος της θέσης $\mathbf{r}=(x,y,z)=(x_1,x_2,x_3)$ και του διανύσματος της ορμής $\mathbf{p}=(p_x,p_y,p_z)=(p_1,p_2,p_3)$, Αν ορίσουμε του τελεστές:

$$\widehat{x}=x,\ \ \widehat{y}=y,\ \ \widehat{z}=z,\ \ \widehat{p}_x=-i\hbar\frac{d}{dx},\ \ \widehat{p}_y=-i\hbar\frac{d}{dy},\ \ \widehat{p}_z=-i\hbar\frac{d}{dz}$$

τότε οι αντιμεταθέτες τους μπορεί εύκολα να δειχθεί ότι είναι:

$$\begin{aligned}
&[\widehat{x},\widehat{y}]=[\widehat{x},\widehat{z}]=[\widehat{y},\widehat{z}]=0,\quad [\widehat{p}_x,\widehat{p}_y]=[\widehat{p}_x,\widehat{p}_z]=[\widehat{p}_y,\widehat{p}_z]=0\\
&[\widehat{x},\widehat{p}_x]=[\widehat{y},\widehat{p}_y]=[\widehat{z},\widehat{p}_z]=i\hbar\\
&[\widehat{x},\widehat{p}_y]=[\widehat{x},\widehat{p}_z]=[\widehat{y},\widehat{p}_x]=[\widehat{y},\widehat{p}_z]=[\widehat{z},\widehat{p}_x]=[\widehat{z},\widehat{p}_y]=0
\end{aligned}$$

Οι παραπάνω σχέσεις γράφονται συχνά με τη συμπαγή μορφή:

$$\boxed{[\widehat{x}_i,\widehat{x}_j]=0,\quad [\widehat{p}_i,\widehat{p}_j]=0,\quad [\widehat{x}_i,\widehat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij},\quad i=1,2,3,\quad j=1,2,3} \tag{Γ΄.7}$$

Για τον αντιμεταθέτη δύο τελεστών ισχύουν οι παρακάτω ιδιότητες, που αποδεικνύονται εύκολα από τον ορισμό του:

$$[\widehat{A},\widehat{B}]=-[\widehat{B},\widehat{A}] \tag{Γ΄.8α΄}$$

$$[\widehat{A},\widehat{B}+\widehat{C}]=[\widehat{A},\widehat{B}]+[\widehat{A},\widehat{C}] \tag{Γ΄.8β΄}$$

$$[\widehat{A},\widehat{B}\,\widehat{C}]=[\widehat{A},\widehat{B}]\widehat{C}+\widehat{B}[\widehat{A},\widehat{C}] \tag{Γ΄.8γ΄}$$

Η τελευταία σχέση αποδεικνύεται ξεκινώντας από το δεξιό μέλος και αναπτύσοντας τους αντιμεταθέτες.

Η **n−** **δύναμη** ενός τελεστή ορίζεται από τη σχέση: $\widehat{A}^n=\underbrace{\widehat{A}\cdot\widehat{A}\cdots\widehat{A}}_{n-\text{φορές}}$.

Παράδειγμα 3. Η δεύτερη δύναμη του τελεστή της ορμής είναι: $\widehat{p}_x^2=-i\hbar\frac{d}{dx}(-i\hbar)\frac{d}{dx}=-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}$.

Συναρτήσεις τελεστών. Με τη βοήθεια των δυνάμεων ενός τελεστή είναι δυνατό να οριστούν και συναρτήσεις του τελεστή. Αν $F=F(z)$ είναι μια αναλυτική συνάρτηση του z:

$$F(z)=c_0+c_1z+c_2z^2+\cdots$$

ορίζουμε τη συνάρτηση του τελεστή $\widehat{A}$: $\widehat{F} = F(\widehat{A})$. Η συνάρτηση αυτή προκύπτει με την αντικατάσταση της μεταβλητής z με τον τελεστή $\widehat{A}$. Για παράδειγμα μπορεί να οριστεί ο πολυωνυμικός τελεστής:

$$P_n(\widehat{A}) = c_0 + c_1\widehat{A} + c_2\widehat{A}^2 + \cdots + n_n\widehat{A}^n$$

ο εκθετικός τελεστής:

$$\mathrm{e}^{\lambda\widehat{A}} = \widehat{I} + \lambda\widehat{A} + \frac{\lambda^2}{2!}\widehat{A}^2 + \frac{\lambda^3}{3!}\widehat{A}^3 + \cdots$$

το $\sin$ και $\cos$ ενός τελεστή και να δειχθεί η σχέση: $\mathrm{e}^{i\widehat{A}} = \cos\widehat{A} + i\sin\widehat{A}$.

Είναι φανερό ότι ένας τελεστής αντιμετατίθεται με οποιαδήποτε συνάρτησή του.

Γ΄.1.1 Ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις τελεστή

Ορισμός. Ένας αριθμός a λέγεται **ιδιοτιμή** του τελεστή $\widehat{A}$ αν ισχύει:

$$\boxed{\widehat{A}y_a = ay_a} \tag{Γ΄.9}$$

Τη συνάρτηση (διάνυσμα) y_a τη λέμε **ιδιοσυνάρτηση** (ιδιοδιάνυσμα) του τελεστή $\widehat{A}$ που ανήκει στην ιδιοτιμή a. Δηλαδή, οι ιδιοσυναρτήσεις ενός τελεστή είναι εκείνες οι συναρτήσεις για τις οποίες η δράση του τελεστή έχει ως αποτέλεσμα να τις αφήνει αναλλοίωτες, εκτός από τον πολλαπλασιασμό με μια σταθερά. Με άλλα λόγια, οι ιδιοσυναρτήσεις ενός τελεστή είναι εκείνα τα διανύσματα του χώρου Hilbert, στα οποία ο τελεστής αλλάζει μόνο το μέτρο, χωρίς να αλλάζει τη διεύθυνση.

Ένας τελεστής μπορεί να έχει μια ή περισσότερες ιδιοτιμές. Το σύνολο των ιδιοτιμών ενός τελεστή ή (όπως συχνά λέμε) **το φάσμα των ιδιοτιμών** μπορεί να είναι **διακεκριμένο** ή **συνεχές** ή **μικτό**.

Επίσης ενδέχεται σε μια ιδιοτιμή να αντιστοιχεί μια ιδιοσυνάρτηση (η κανονικοποιημένη) ή στην ίδια ιδιοτιμή να ανήκουν περισσότερες από μια ιδιοσυναρτήσεις (γραμμικά ανεξάρτητες μεταξύ τους). Στη δεύτερη περίπτωση λέμε ότι η ιδιοτιμή του τελεστή είναι **εκφυλισμένη**.

Επειδή τα προβλήματα της Κβαντομηχανικής είναι ουσιαστικά ή εύρεση των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων τελεστών που αντιστοιχούν σε παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη, είναι χρήσιμο να εξετάσουμε κάποια παραδείγματα με τα οποία θα γίνουν κατανοητά τα παραπάνω.

Σημείωση. Το θεώρημα αναπτύγματος που αναφέρεται στο παράρτημα Α΄ μπορεί να επαναληφθεί και για τις ιδιοσυναρτήσεις ενός τελεστή. Η πληρότητα των ιδιοσυναρτήσεων μπορεί να αποδειχθεί σε πολλές περιπτώσεις που παρουσιάζουν ενδιαφέρον στην Κβαντομηχανική. Στις περιπτώσεις που δεν είναι δυνατό να αποδειχθεί, υποθέτουμε ότι ισχύει και αντί του θεωρήματος αναπτύγματος έχουμε το αξίωμα αναπτύγματος.

Παράδειγμα 1. Ο τελεστής της parity που ορίζεται από τη σχέση:

$$\widehat{\Pi}f(x) = f(-x), \quad \forall f(x) \in \mathcal{V} \tag{Γ΄.10α΄}$$

έχει ιδιοτιμές τους αριθμούς $+1$ και -1. Δηλαδή, το φάσμα των ιδιοτιμών του $\widehat{\Pi}$ είναι διακεκριμένο.

Απόδειξη. Ξεκινάμε από την εξίσωση ιδιοτιμών του $\widehat{\Pi}$:

$$\widehat{\Pi}\Psi(x) = \lambda\Psi(x) \tag{Γ΄.10β΄}$$

Η επίδραση του $\widehat{\Pi}$ και στα δύο μέλη της (Γ΄.10β΄) δίνει:

$$\widehat{\Pi}\,\underbrace{(\widehat{\Pi}\Psi(x))}_{\Psi(-x)} = \lambda\,\underbrace{\widehat{\Pi}\Psi(x)}_{\lambda\Psi(x)} \quad\Rightarrow\quad \underbrace{\widehat{\Pi}\Psi(-x)}_{\Psi(x)} = \lambda\lambda\Psi(x) \quad\Rightarrow\quad \Psi(x) = \lambda^2\Psi(x) \quad\Rightarrow\quad \boxed{\lambda = \pm 1}$$

Για $\lambda = 1$ και $\lambda = -1$ η (Γ΄.10β΄) γράφεται, αντίστοιχα:

$$\underbrace{\widehat{\Pi}\Psi_{+1}(x)}_{\Psi_{+1}(-x)} = +1\cdot\Psi_{+1}(x) \quad\Rightarrow\quad \Psi_{+1}(-x) = \Psi_{+1}(x) \quad\Rightarrow\quad \Psi_{+1}(x) = \text{άρτια συνάρτηση}$$

$$\underbrace{\widehat{\Pi}\Psi_{-1}(x)}_{\Psi_{-1}(-x)} = -1\cdot\Psi_{-1}(x) \quad\Rightarrow\quad \Psi_{-1}(-x) = -\Psi_{-1}(x) \quad\Rightarrow\quad \Psi_{-1}(x) = \text{περιττή συνάρτηση}$$

Δηλαδή, όλες οι άρτιες συναρτήσεις και όλες οι περιττές συναρτήσεις είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{\Pi}$ που ανήκουν στις ιδιοτιμές $\lambda = 1$ και $\lambda = -1$, αντίστοιχα. Οι ιδιοτιμές του $\widehat{\Pi}$ είναι άπειρες φορές εκφυλισμένες, αφού στις ιδιοτιμές $+1$ και -1 αντιστοιχούν άπειρες άρτιες και άπειρες περιττές συναρτήσεις .

Παράδειγμα 2. Ο τελεστής της στροφορμής, που ορίστηκε στο εδάφιο 2.1.2 (σχέση (2.15)) είναι ένας διανυσματικός τελεστής. Η προβολή του στον άξονα z μπορεί να γραφεί, χρησιμοποιώντας σφαιρικές συντεταγμένες, με τη μορφή:

$$\widehat{L}_z = -i\hbar\,\frac{d}{d\varphi} \tag{Γ΄.11α΄}$$

Ο τελεστής αυτός δρα στις συναρτήσεις $\Phi(\varphi)$, όπου φ η αζιμουθιακή γωνία. Οι συναρτήσεις αυτές απαιτούμε να είναι συνεχείς (περιοδικές) και επομένως να ισχύει: $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$.

Θα δείξουμε ότι οι ιδιοτιμές του και οι αντίστοιχες κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις είναι:

$$\boxed{\lambda = \hbar m, \;\; m = 0, \pm1, \pm2, \cdots, \qquad \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{im\varphi}} \tag{Γ΄.11β΄}$$

Δηλαδή, οι ιδιοτιμές του $\widehat{L}_z$ είναι αριθμήσιμες (διακεκριμένες και άπειρες) και μη εκφυλισμένες.

Απόδειξη. Ξεκινάμε από την εξίσωση ιδιοτιμών του $\widehat{L}_z$:

$$\widehat{L}_z\Phi_\lambda(\varphi) = \lambda\Phi_\lambda(\varphi), \qquad \Phi_\lambda(\varphi) = \Phi_\lambda(\varphi + 2\pi) \tag{Γ΄.11γ΄}$$

που γράφεται ακόμη:

$$-i\hbar\frac{d\Phi_\lambda}{d\varphi} = \lambda\Phi_\lambda \quad\Rightarrow\quad \frac{d\Phi_\lambda}{\Phi_\lambda} = \frac{i}{\hbar}\,\lambda d\varphi \quad\Rightarrow\quad \boxed{\Phi_\lambda(\varphi) = C\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\lambda\varphi}} \tag{Γ΄.11δ΄}$$

Λόγω της περιοδικότητας των λύσεων, έχουμε:

$$C\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\lambda\varphi} = C\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\lambda(\varphi+2\pi)} \quad\Rightarrow\quad \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\lambda 2\pi} = 1 \quad\Rightarrow\quad \boxed{\lambda = m\hbar, \;\; m = 0, \pm1, \pm2, \ldots} \tag{Γ΄.11ε΄}$$

Η αντικατάσταση της (Γ΄.11ε΄) στην (Γ΄.11δ΄) δίνει τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις:

$$\Phi_m(\varphi) = C\mathrm{e}^{im\varphi}$$

Η σταθερά C προσδιορίζεται με κανονικοποίηση της Φ_m στο διάστημα $\varphi \in [0, 2\pi]$.

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \quad\Rightarrow\quad |C|^2\int_0^{2\pi} d\varphi = 1 \quad\Rightarrow\quad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Παράδειγμα 3. Το φάσμα των ιδιοτιμών του τελεστή της θέσης, $\widehat{x} = x$, είναι συνεχές. Συγκεκριμένα κάθε αριθμός $x_0 \neq x$ είναι ιδιοτιμή του τελεστή $\widehat{x}$.

Απόδειξη. Ξεκινάμε πάλι από την εξίσωση ιδιοτιμών του τελεστή $\widehat{x} = x$. Αν x_0 είναι η ιδιοτιμή του $\widehat{x}$ και $\delta_{x_0}(x)$ η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση του, τότε:

$$\widehat{x}\delta_{x_0}(x) = x_0\delta_{x_0}(x) \tag{Γ΄.12α΄}$$

Επειδή $\widehat{x} = x$ η (Γ΄.12α΄) γράφεται:

$$x\delta_{x_0}(x) = x_0\delta_{x_0}(x) \quad \Rightarrow \quad (x - x_0)\delta_{x_0}(x) = 0 \tag{Γ΄.12β΄}$$

Η εξίσωση (Γ΄.12β΄) αληθεύει $\forall\, x_0 \in \mathbb{R}$ με $x \neq x_0$. Δηλαδή οι ιδιοτιμές x_0 του τελεστή της θέσης, $\widehat{x} = x$ αποτελούν συνεχές φάσμα ιδιοτιμών και για x_0 αντιστοιχεί η ιδιοσυνάρτηση:

$$\delta_{x_0}(x) = 0 \quad \text{για} \quad x \neq x_0 \tag{Γ΄.12γ΄}$$

ενώ για $x = x_0$ η $\delta_{x_0}(x)$ μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή. Μια τέτοια συνάρτηση, όμως, κανονικά θα δίνει μηδέν, όταν υπολογίζουμε τους συντελεστές του αναπτύγματος μιας κυματοσυνάρτησης $\Psi(x,t)$ ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{x} = x$, που δίνονται από τη σχέση:

$$\big(\delta_{x_0}(x), \Psi(x,t)\big) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta^*_{x_0}(x)\Psi(x,t)dx \tag{Γ΄.12δ΄}$$

Ο μόνος τρόπος να αποφύγουμε το μηδενισμό όλων των συντελεστών $\big(\delta_{x_0}(x), \Psi(x,t)\big)$ είναι να έχουμε $\delta_{x_0}(x)\big|_{x=x_0} = \infty$, ώστε το γινόμενο $\big[\delta_{x_0}(x)\big|_{x=x_0}dx\big]$ να δίνει έναν πεπερασμένο αριθμό. Δηλαδή η ιδιοσυνάρτηση $\delta_{x_0}(x)$ είναι η συνάρτηση δέλτα του Dirac:

$$\delta_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \tag{Γ΄.12ε΄}$$

και η κανονικοποίηση λαμβάνεται έτσι ώστε:

$$\big(\delta(x - x_0), \Psi(x,t)\big) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\Psi(x,t)dx = \Psi(x_0,t) \tag{Γ΄.12ϛ΄}$$

Παράδειγμα 4. Το φάσμα των ιδιοτιμών του τελεστή της ορμής, $\widehat{p}_x = -i\hbar\,\frac{d}{dx}$, είναι συνεχές. Συγκεκριμένα, κάθε αριθμός p_0 είναι ιδιοτιμή του τελεστή $\widehat{p}_x$.

Απόδειξη. Αν p_0 είναι η ιδιοτιμή του τελεστή της ορμής, $\widehat{p}_x$ και $\theta_{p_0}(x)$ η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση, που απαιτούμε να είναι φραγμένη για κάθε x, η εξίσωση ιδιοτιμών του $\widehat{p}_x$ γράφεται:

$$\widehat{p}_x\theta_{p_0}(x) = p_0\theta_{p_0}(x), \qquad \theta_{p_0}(x) = \text{φραγμένη} \tag{Γ΄.13α΄}$$

Επειδή $\widehat{p}_x = -i\hbar\,\frac{d}{dx}$ η (Γ΄.13α΄) γράφεται:

$$-i\hbar\,\frac{d\theta_{p_0}(x)}{dx} = p_0\theta_{p_0}(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d\theta_{p_0}}{\theta_{p_0}} = \frac{i}{\hbar}\,p_0 dx \quad \Rightarrow \quad \theta_{p_0}(x) = C\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} \tag{Γ΄.13β΄}$$

Είναι φανερό ότι κάθε πραγματικός αριθμός p_0 (γιατί όχι φανταστικός ή μιγαδικός αριθμός;) με αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση $\theta_{p_0}(x)$ ικανοποιούν την εξίσωση ιδιοτιμών (Γ΄.13α΄). Δηλαδή το φάσμα των ιδιοτιμών του τελεστή της ορμής είναι συνεχές.

Εκ πρώτης όψεως φαίνεται ότι οι ιδιοσυναρτήσεις $\theta_{p_0}(x) = C\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}$ του τελεστή της ορμής δεν παρουσιάζουν τις δυσκολίες των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή της θέσης. Όμως υπάρχει πρόβλημα αν προσπαθήσουμε να διαλέξουμε την αυθαίρετη σταθερά C έτσι ώστε η $\theta_{p_0}(x)$ να είναι κανονικοποιημένη. Εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι:

$$\left(\theta_{p_0}, \theta_{p_0}\right) = \infty \quad (!)$$

Για να αποφύγουμε αυτήν τη δυσκολία είναι απαραίτητο να τροποποιηθεί ο ορισμός της ορθοκανονικότητας με τη βοήθεια της συναρτήσεως δ. Πράγματι αν διαλέξουμε τη σταθερά C να έχει την τιμή $C = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$, θα έχουμε:

$$\left(\theta_{p_1}, \theta_{p_2}\right) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(p_1-p_2)x}\, dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-i(p_1-p_2)\xi}\, d\xi = \delta(p_1 - p_2) \qquad (\Gamma΄.13\gamma΄)$$

Με αυτήν την έννοια οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ορμής, αλλά και οι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών με συνεχές φάσμα ιδιοτιμών, θεωρούνται ορθοκανονικές.

Παρατήρηση. Με μια προσεκτική ματιά στους τελεστές των παραδειγμάτων 2 και 4 διαπιστώνουμε ότι ενώ οι διαφορικοί τελεστές $\widehat{L}_z$ και $\widehat{p}_x$ διαφέρουν μόνο στο σύμβολο της ανεξάρτητης μεταβλητής, οι ιδιοτιμές τους και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις έχουν πολλές διαφορές. Μπορείτε να δώσετε μια λογική εξήγηση;

Γ΄.2 Επιπρόσθετοι ορισμοί και θεωρήματα των γραμμικών τελεστών

Πρόταση. Αν $\widehat{A}y_n = a_n y_n$ και $\widehat{F} = F(\widehat{A})$ μια συνάρτηση του τελεστή $\widehat{A}$, τότε:

$$\boxed{F(\widehat{A})y_n = F(a_n)y_n} \qquad (\Gamma΄.14)$$

Δηλαδή, αν y_n είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $\widehat{A}$ που ανήκει στην ιδιοτιμή a_n, αυτή είναι ιδιοσυνάρτηση οποιασδήποτε συνάρτησης του $\widehat{A}$ που ανήκει στην ιδιοτιμή $F(a_n)$.

Απόδειξη. Επειδή $\widehat{A}y_n = a_n y_n \;\Rightarrow\; \widehat{A}^2 y_n = a_n^2 y_n$ και επαγωγικά βρίσκεται ότι: $\widehat{A}^k y_n = a_n^k y_n$.

Αν $F(\widehat{A}) = \sum_k c_k \widehat{A}^k$ είναι μια συνάρτηση του τελεστή $\widehat{A}$, η δράση αυτής επάνω στη y_n δίνει:

$$F(\widehat{A})y_n = \sum_k c_k \widehat{A}^k y_n = \sum_k c_k a_n^k y_n = \Big(\sum_k c_k a_n^k\Big) y_n = F(a_n)y_n$$

Παράδειγμα. Είδαμε ότι: $\widehat{L}_z\phi_m(\varphi) = \lambda_m\phi_m(\varphi)$, όπου $\lambda_m = \hbar m$ και $\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\varphi}$. Σύμφωνα με την πρόταση, οι ιδιοτιμές του τελεστή $\mathrm{e}^{\widehat{L}_z}$ είναι $\mathrm{e}^{m\hbar}$ και οι ιδιοσυναρτήσεις του είναι οι $\phi_m(\varphi)$.

Θεμελιώδες θεώρημα. Η αναγκαία και ικανή συνθήκη για να έχουν δύο τελεστές ένα κοινό πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων είναι να αντιμετατίθενται.

α) Θα δείξουμε πρώτα ότι αν οι τελεστές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ έχουν ένα κοινό πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων: y_1, y_2, …, τότε $\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = 0$.

Επειδή οι y_n είναι ιδιοσυναρτήσεις των $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ θα έχουμε:

$$\widehat{A}y_n = a_n y_n \quad\Rightarrow\quad \widehat{B}\widehat{A}y_n = a_n\widehat{B}y_n \quad\Rightarrow\quad \widehat{B}\widehat{A}y_n = a_n b_n y_n \qquad (\Gamma΄.15\alpha΄)$$

$$\widehat{B}y_n = b_n y_n \quad\Rightarrow\quad \widehat{A}\widehat{B}y_n = b_n\widehat{A}y_n \quad\Rightarrow\quad \widehat{A}\widehat{B}y_n = a_n b_n y_n \qquad (\Gamma΄.15\beta΄)$$

Από τις σχέσεις (Γ΄.15α΄) και (Γ΄.15β΄) έχουμε:

$$\widehat{A}\widehat{B}y_n = \widehat{B}\widehat{A}y_n \qquad \Rightarrow \qquad \big[\widehat{A},\widehat{B}\big]y_n = 0 \tag{Γ΄.15γ΄}$$

Επειδή το σύνολο των ιδιοσυναρτήσεων y_n είναι πλήρες, οπότε:

$$\forall\, f \in \mathcal{V} \,:\; f = \sum_n c_n y_n, \qquad c_n = (y_n, f) \tag{Γ΄.16}$$

η επίδραση του αντιμεταθέτη των $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ και στα δύο μέλη της (Γ΄.16) δίνει:

$$\big[\widehat{A},\widehat{B}\big]f = \big[\widehat{A},\widehat{B}\big]\sum_n c_n y_n = \sum_n c_n\big[\widehat{A},\widehat{B}\big]y_n = \sum_n c_n \cdot 0 = 0$$

οπότε:

$$\boxed{\big[\widehat{A},\widehat{B}\big] = 0} \tag{Γ΄.17}$$

β) Αντίστροφα. Θα δείξουμε ότι αν ισχύει η (Γ΄.17), οπότε ισχύει και η σχέση:

$$\big[\widehat{A},F(\widehat{B})\big] = 0 \tag{Γ΄.18}$$

τότε οι τελεστές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ έχουν ένα κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων.

Αν οι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ είναι ϕ_n και y_n, αντίστοιχα:

$$\widehat{A}\phi_k = a_k\phi_k, \qquad \widehat{B}y_n = b_n y_n \tag{Γ΄.19}$$

και το σύνολο των ιδιοσυναρτήσεων y_n είναι πλήρες, τότε οι ϕ_k μπορούν να παρασταθούν σε σειρά των y_n:

$$\phi_k = \sum_n c_{kn} y_n, \qquad c_{kn} = (y_n, \phi_k)$$

Η δράσει του γινομένου $\widehat{A}F(\widehat{B})$ στη ϕ_k δίνει:

$$\widehat{A}F(\widehat{B})\phi_k = \sum_n c_{kn}\widehat{A}F(\widehat{B})y_n = \sum_n c_{kn}F(b_n)\widehat{A}y_n \tag{Γ΄.20α΄}$$

Η δράση του γινομένου $F(\widehat{B})\widehat{A}$ στη ϕ_k δίνει:

$$\begin{aligned} F(\widehat{B})\widehat{A}\phi_k &= F(\widehat{B})a_k\phi_k = a_k F(\widehat{B})\sum_n c_{kn}y_n = a_k\sum_n c_{kn}F(\widehat{B})y_n \\ &= a_k\sum_n c_{kn}F(b_n)y_n \end{aligned} \tag{Γ΄.20β΄}$$

Επειδή τα αριστερά μέλη των (Γ΄.20α΄) και (Γ΄.20β΄) είναι ίσα, λόγω της σχέσης (Γ΄.18) και τα δεξιά μέλη είναι ίσα. Δηλαδή:

$$\sum_n c_{kn}F(b_n)\widehat{A}y_n = a_k\sum_n c_{kn}F(b_n)y_n \qquad \Rightarrow \qquad \sum_n \Big[\widehat{A}y_n - a_k y_n\Big]c_{kn}F(b_n) = 0 \tag{Γ΄.21}$$

Η τελευταία σχέση ισχύει για κάθε αναλυτική συνάρτηση $F(b_n)$ και επειδή τα c_{kn} δεν μπορεί να είναι όλα μηδέν, θα πρέπει:

$$\Big[\widehat{A}y_n - a_k y_n\Big] = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\widehat{A}y_n = a_k y_n}$$

Δηλαδή, οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{B}$ είναι και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{A}$.

Σημείωση. Όταν μια συνάρτηση είναι ιδιοσυνάρτηση δύο τελεστών, γράφεται συνήθως με δύο δείκτες. Ο πρώτος δείκτης αντιστοιχεί στον έναν τελεστή και ο δεύτερος στον άλλο. Για παράδειγμα οι **σφαιρικές αρμονικές**, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, είναι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών: $\widehat{\mathbf{L}}^2$ και $\widehat{L}_z$, όπου $\widehat{\mathbf{L}}$ ο τελεστής της στροφορμής και $\widehat{L}_z$ ο τελεστής της προβολής της στροφορμής στο άξονα z. Οι δείκτες l και m χαρακτηρίζουν τις ιδιοτιμές των τελεστών $\widehat{\mathbf{L}}^2$ και $\widehat{L}_z$, αντίστοιχα, που είναι:

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1)\, Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, \ldots \\
\widehat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \hbar m\, Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l
\end{aligned}$$

Γ΄.2.1 Μέση τιμή και αβεβαιότητα τελεστή

Ορισμός 1. Μέση τιμή ή **αναμενόμενη τιμή** ενός τελεστή $\widehat{A}$ ως προς τη συνάρτηση $\Psi(x)$, ονομάζεται η ποσότητα:

$$\langle \widehat{A} \rangle_\Psi = \frac{\int \Psi^*(x) \widehat{A} \Psi(x) dx}{\int \Psi^*(x) \Psi(x) dx} = \frac{\big(\Psi, \widehat{A}\Psi\big)}{\big(\Psi, \Psi\big)} \tag{Γ΄.22α΄}$$

Αν η $\Psi(x)$ είναι κανονικοποιημένη, τότε:

$$\boxed{\langle \widehat{A} \rangle_\Psi = \big(\Psi, \widehat{A}\Psi\big)} \tag{Γ΄.22β΄}$$

Στην Κβαντομηχανική, η Ψ είναι η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει την κατάσταση ενός συστήματος. Η φυσική σημασία της Ψ, που είναι λύση της εξίσωσης του Schrödinger δίνεται με τη βοήθεια της έννοιας της πιθανότητας. Στο κεφάλαιο 2 ασχολούμαστε με το πως μπορεί κανείς να οδηγηθεί στον παραπάνω ορισμό. Αν περιοριστούμε όμως στην περίπτωση που ο τελεστής $\widehat{A}$ σημαίνει πολλαπλασιασμό επί μια συνάρτηση $f(x)$, τότε ο παραπάνω ορισμός συμπίπτει με τον ορισμό της μέσης τιμής μιας συνάρτησης σύμφωνα με τη στατιστική, εφόσον η ποσότητα $\frac{\Psi^*(x)\Psi(x)dx}{\int \Psi^*(x)\Psi(x)dx}$ είναι η πυκνότητα πιθανότητας $\rho(x)$.

Πρόταση. Η μέση τιμή ενός τελεστή ως προς μια ιδιοσυνάρτησή του ($\widehat{A} y_a = a y_a$) ισούται με την αντίστοιχη ιδιοτιμή του τελεστή.

Απόδειξη.

$$\langle \widehat{A} \rangle_{y_a} = \frac{\big(y_a, \widehat{A} y_a\big)}{\big(y_a, y_a\big)} = \frac{\big(y_a, a y_a\big)}{\big(y_a, y_a\big)} = a \tag{Γ΄.23}$$

Παρουσιάζει ενδιαφέρον η έκφραση της $\langle \widehat{A} \rangle_\Psi$ όταν η κανονικοποιημένη συνάρτηση Ψ δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του $\widehat{A}$. Στην περίπτωση αυτή αν αναπτύξουμε τη συνάρτηση Ψ σε σειρά των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή $\widehat{A}$, που τις θεωρούμε ότι αποτελούν ένα πλήρες σύνολο:

$$\Psi = \sum_n c_n y_n, \quad c_n = (y_n, \Psi) \quad \text{και} \quad \sum_n |c_n|^2 = 1$$

θα έχουμε:

$$\begin{aligned}
\langle \widehat{A} \rangle_\Psi = \big(\Psi, \widehat{A}\Psi\big) &= \Big(\sum_n c_n y_n, \widehat{A} \sum_k c_k y_k\Big) = \sum_n \sum_k c_n^* c_k \big(y_n, \widehat{A} y_k\big) \\
&= \sum_n \sum_k c_n^* c_k a_k \underbrace{\big(y_n, y_k\big)}_{\delta_{nk}} = \sum_n |c_n|^2 a_n
\end{aligned} \tag{Γ΄.24}$$

Η σύγκριση αυτής με τη σχέση (Β΄.5) του παραρτήματος Β΄ καθώς και του αξιώματος της Κβαντομηχανικής σχετικά με την αντιστοιχία των δυναμικών μεταβλητών με τελεστές μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι: *Όταν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από την κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση* Ψ, *τότε το τετράγωνο του μέτρου του συντελεστή* $c_n = \big(y_n, \Psi\big)$, *του αναπτύγματος της* Ψ, *εκφράζει την πιθανότητα, μια μέτρηση του φυσικού μεγέθους στο οποίο αντιστοιχεί ο τελεστής, να δώσει ως αποτέλεσμα την ιδιοτιμή του* a_n.

Ορισμός 2. Η μέση τιμή $\langle\big(\widehat{A} - \langle\widehat{A}\rangle\big)^2\rangle$ λέγεται **μέση τετραγωνική απόκλιση** (ή μέσο τετραγωνικό σφάλμα ή διασπορά) του τελεστή $\widehat{A}$ και συμβολίζεται με $(\Delta\widehat{A})^2$:

$$(\Delta\widehat{A})^2 = \langle\big(\widehat{A} - \langle\widehat{A}\rangle\big)^2\rangle \qquad (Γ΄.25α΄)$$

Ο ορισμός αυτός όπως και ο αντίστοιχος ορισμός της μέσης τιμής τελεστή, δίνεται κατ' επέκταση του αντίστοιχου ορισμού της Στατιστικής (βλέπε σχέση (Β΄.12).

Η σχέση αυτή μπορεί να γραφεί με την παρακάτω πιο εύχρηστη μορφή:

$$\begin{aligned}(\Delta\widehat{A})^2 &= \langle\big(\widehat{A} - \langle\widehat{A}\rangle\big)^2\rangle = \big\langle\, \widehat{A}^2 - 2\widehat{A}\langle\widehat{A}\rangle + \langle\widehat{A}\rangle^2\big\rangle \\ &= \langle\widehat{A}^2\rangle - \langle\widehat{A}\rangle^2 \end{aligned} \qquad (Γ΄.25β΄)$$

Το $\Delta\widehat{A}$ αποτελεί ένα μέτρο του εύρους της στατιστικής κατανομής του φυσικού μεγέθους προς το οποίο αντιστοιχεί ο τελεστής. Αυτό εκφράζει την αβεβαιότητα με την οποία μας είναι γνωστό το μετρούμενο φυσικό μέγεθος και γι' αυτό καλείται συνήθως **αβεβαιότητα**.

Είναι προφανές, από τις σχέσεις (Γ΄.25β΄) και (Γ΄.23) ότι αν η συνάρτηση Ψ είναι ιδιοσυνάρτηση του $\widehat{A}$, τότε:

$$\boxed{\Delta\widehat{A} = 0} \qquad (Γ΄.25γ΄)$$

Η σχέση αυτή μας οδηγεί στο εξής συμπέρασμα: *Αν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή* $\widehat{A}$, *τότε το αποτέλεσμα της μέτρησης του φυσικού μεγέθους προς το οποίο αντιστοιχεί ο τελεστής είναι η ιδιοτιμή του* $\widehat{A}$ *στην οποία ανήκει η ιδιοσυνάρτηση.*

Γ΄.3 Παράσταση τελεστή με πίνακα

Ένα πλήρες σύστημα συναρτήσεων είναι όμοιο με το σύνολο των μοναδιαίων- ορθογωνίων διανυσμάτων που σαρώνουν ένα τρισδιάστατο χώρο και το θεώρημα αναπτύγματος που αναφέρεται στο εδάφιο Α΄.1 είναι όμοιο με την ανάλυση ενός τυχαίου διανύσματος ως προς τα παραπάνω ορθοκανονικά διανύσματα.

Ένας τελεστής $\widehat{A}$ δρα στα διανύσματα (συναρτήσεις) του διανυσματικού χώρου. Για παράδειγμα στη σχέση:

$$\widehat{A}\Psi = \Phi \qquad (Γ΄.26)$$

ο τελεστής $\widehat{A}$, όταν τα χαρακτηριστικά του έχουν καθοριστεί, δίνει τη συνάρτηση Φ από τη Ψ με μοναδικό τρόπο. Αν αναπτύξουμε τις συναρτήσεις Ψ και Φ ως προς το πλήρες σύνολο συναρτήσεων y_n:

$$\Psi = \sum_n c_n y_n, \qquad c_n = (y_n, \Psi) \qquad (Γ΄.27α΄)$$

$$\Phi = \sum_m d_m y_m, \qquad d_m = (y_m, \Phi) \qquad (Γ΄.27β΄)$$

το σύνολο των συντελεστών c_n και d_m των αναπτυγμάτων, αν γραφούν ως πίνακες στήλη

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

καθορίζουν πλήρως τις συναρτήσεις (διανύσματα) Ψ και Φ.

Αν αντικαταστήσουμε τις εκφράσεις (Γ΄.27α΄) και (Γ΄.27β΄) στη (Γ΄.26), θα έχουμε:

$$\widehat{A} \sum_n c_n y_n = \sum_m d_m y_m \tag{Γ΄.28}$$

Πολλαπλασιάζοντας εσωτερικά με y_k και τα δύο μέλη της (Γ΄.28) παίρνουμε:

$$\sum_n c_n \big(y_k, \widehat{A} y_n\big) = \sum_m d_m \underbrace{\big(y_k, y_m\big)}_{\delta_{km}} = d_k$$

Η σχέση αυτή γράφεται ακόμη:

$$\boxed{\sum_n a_{kn} c_n = d_k}\,, \quad \text{όπου} \quad \boxed{a_{kn} = \big(y_k, \widehat{A} y_n\big)} \tag{Γ΄.29}$$

Οι αριθμοί a_{kn} λέγονται **στοιχεία πίνακα** ως προς τη βάση y_n. Το σύνολο των αριθμών αυτών που είναι μια διπλή ακολουθία είναι ένας πίνακας που αντιστοιχεί στον τελεστή $\widehat{A}$, ή διαφορετικά, ο τελεστής $\widehat{A}$ μπορεί να παρασταθεί με τον πίνακα A ως προς την ορθοκανονική βάση y_n:

$$\widehat{A} \quad \Rightarrow \quad A = (a_{kn}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kn} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

και η σχέση (Γ΄.26) μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\widehat{A}\Psi = \Phi \qquad \Rightarrow \qquad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kn} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_k \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{Γ΄.30}$$

Οι δείκτες k και n του πίνακα A παίρνουν τους αριθμούς $1, 2, \ldots$, δηλαδή η διπλή ακολουθία μπορεί να είναι πεπερασμένη ή να μην είναι πεπερασμένη, ανάλογα με τις διαστάσεις του διανυσματικού χώρου. Σημειώνεται ότι ενώ η έκφραση του τελεστή $\widehat{A}$ είναι συγκεκριμένη και καθορίζεται από τη δράση του στα διανύσματα του διανυσματικού χώρου, τα στοιχεία πίνακα εξαρτώνται από τη βάση που χρησιμοποιείται για την αναπαράσταση του τελεστή. Έτσι, αν διαλέξουμε ως βάση το πλήρες σύνολο των ορθοκανονικών ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή $\widehat{A}$ (εφόσον ένα τέτοιο σύνολο υπάρχει) τα στοιχεία πίνακα της σχέσης (Γ΄.29) είναι:

$$a_{kn} = \big(y_k, \widehat{A} y_n\big) = \big(y_k, a_n y_n\big) = a_n \big(y_k, y_n\big) = a_n\, \delta_{kn} \tag{Γ΄.31}$$

και ο πίνακας A γίνεται διαγώνιος, με τα διαγώνια στοιχεία να είναι οι ιδιοτιμές του τελεστή.

Σημειώνεται επίσης ότι τόσο στους τελεστές όσο και στους πίνακες ισχύουν η επιμεριστική και η προσεταιριστική ιδιότητα του πολλαπλασιασμού αλλά δεν ισχύει η αντιμεταθετική ιδιότητα.

Παράδειγμα 1. Στο παράδειγμα 2 του εδαφίου Γ΄.1.1 είδαμε ότι οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{L}_z = -i\hbar\,\frac{d}{d\varphi}$, $\varphi \in [0, 2\pi]$ και $\phi(0) = \phi(2\pi)$ είναι: $\lambda_m = m\hbar$ και $\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-im\varphi}$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ Οι $\phi_m(\varphi)$ αποτελούν ένα πλήρες σύνολο ορθοκανονικών ιδιοσυναρτήσεων. Ο πίνακας που αντιστοιχεί στον τελεστή $\widehat{A} = \widehat{L}_z + \hbar$ είναι:

$$\begin{aligned} a_{km} &= \big(\phi_k, \widehat{A}\phi_m\big) = \big(\phi_k, (\widehat{L}_z + \hbar)\phi_m\big) = \big(\phi_k, \widehat{L}_z\phi_m\big) + \hbar\big(\phi_k, \phi_m\big) = m\hbar\big(\phi_k, \phi_m\big) + \hbar\big(\phi_k, \phi_m\big) \\ &= (m+1)\hbar\,\delta_{km} \end{aligned}$$

Δηλαδή ο πίνακας είναι διαγώνιος.

Παράδειγμα 2. Ο πίνακας του τελεστή $\widehat{B} = \varphi\widehat{L}_z$ ως προς το ίδιο ορθοκανονικό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων είναι:

$$b_{kn} = \big(\phi_k, \widehat{B}\phi_n\big) = \big(\phi_k, \varphi\widehat{L}_z\phi_n\big) = n\hbar\big(\phi_k, \varphi\phi_n\big) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \varphi\mathrm{e}^{i(n-k)\varphi}d\varphi = \cdots = \begin{cases} \frac{in\hbar}{k-n} & k \neq n \\ n\pi\hbar & k = n \end{cases}$$

Ο πίνακας $\widehat{B}$ δεν είναι διαγώνιος αφού οι $\phi_m(\varphi)$ δεν είναι ιδιοσυναρτήσεις του.

Γ΄.4 Ερμιτιανοί τελστές

Στην Κβαντομηχανική, σε κάθε παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος, A, αντιστοιχούμε έναν τελεστή $\widehat{A}$. Η μέση τιμή του μεγέθους αυτού είναι ίση με τη μέση τιμή του $\widehat{A}$ ως προς την κυματοσυνάρτηση Ψ που περιγράφει την κατάσταση του συστήματος. Η μέση τιμή, εφόσον η Ψ είναι κανονικοποιημένη, είναι το εσωτερικό γινόμενο:

$$\langle\widehat{A}\rangle = \int \Psi^*\widehat{A}\Psi dx = \big(\Psi, \widehat{A}\Psi\big)$$

Το αποτέλεσμα μιας μέτρησης πρέπει να είναι ένας πραγματικός αριθμός. Πραγματικός αριθμός πρέπει να είναι και η μέση τιμή πολλών μετρήσεων. Δηλαδή πρέπει να ισχύει:

$$\langle\widehat{A}\rangle = \langle\widehat{A}\rangle^*$$

Επειδή η μιγαδική συζυγής ενός εσωτερικού γινομένου αντιστρέφει τη σειρά των διανυσμάτων του εσωτερικού γινομένου, η προηγούμενη σχέση γράφεται:

$$\big(\Psi, \widehat{A}\Psi\big) = \big(\widehat{A}\Psi, \Psi\big)$$

και αυτό πρέπει να ισχύει για κάθε κυματοσυνάρτηση Ψ. Έτσι, οι τελεστές που αντιστοιχούν στα παρατηρήσιμα μεγέθη πρέπει να έχουν την πολύ ειδική ιδιότητα:

$$\boxed{\big(\Psi, \widehat{A}\Psi\big) = \big(\widehat{A}\Psi, \Psi\big), \quad \forall\,\Psi \in \mathcal{H}} \tag{Γ΄.32α΄}$$

και λέγονται **ερμιτιανοί τελεστές**. Αν γνωρίζουμε ότι ένας τελεστής είναι ερμιτιανός, τότε μπορούμε να τον εφαρμόσουμε, τόσο στο πρώτο διάνυσμα ενός εσωτερικού γινομένου, όσο και στο δεύτερο και θα έχουμε το ίδιο αποτέλεσμα.

Σημείωση. Σ' ορισμένα βιβλία ο ορισμός του ερμιτιανού τελεστή δίνεται με τη σχέση:

$$\boxed{\big(\Psi_1, \widehat{A}\Psi_2\big) = \big(\widehat{A}\Psi_1, \Psi_2\big), \quad \forall\, \Psi_1,\ \Psi_2 \in \mathcal{H}} \tag{Γ΄.32β΄}$$

Μπορεί, όμως να δειχθεί ότι οι δύο ορισμοί είναι ισοδύναμοι.

Παράδειγμα. Για το εσωτερικό γινόμενο του τελεστή της ορμής σε μια διάσταση, $\widehat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$, εφόσον ισχύουν κατάλληλες οριακές συνθήκες, έχουμε:

$$\begin{aligned}\big(\Psi, \widehat{p}_x\Psi\big) &= -i\hbar\int_a^b \Psi^*(x)\frac{d\Psi(x)}{dx}\,dx = -i\hbar\,\underbrace{\Psi^*(x)\Psi(x)\Big|_a^b}_{=0} + i\hbar\int_a^b \frac{d\Psi^*(x)}{dx}\,\Psi(x)dx \\ &= \int_a^b \Big(-i\hbar\frac{d\Psi(x)}{dx}\Big)^*\,\Psi(x)dx = \big(\widehat{p}_x\Psi, \Psi\big)\end{aligned}$$

Επομένως, ο τελεστής της ορμής σε μια διάσταση, εφόσον οι οριακές συνθήκες είναι τέτοιες ώστε να μηδενίζεται ο όρος $\Psi^*(x)\Psi(x)\Big|_x^b$, είναι ερμιτιανός τελεστής.

Σημείωση. Όμοια μπορεί να δειχθεί ότι και οι τελεστές $\widehat{p}_y$ και $\widehat{p}_z$ είναι ερμιτιανοί τελεστές. Επομένως, ο τελεστής της ορμής $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ είναι ερμιτιανός τελεστής. Ερμιτιανοί τελεστές είναι και οι τελεστές της θέσης $\widehat{x}$, $\widehat{y}$, $\widehat{z}$ και $\widehat{\mathbf{r}}$ ως πραγματικές συναρτήσεις.

Ορισμός. Αν ένας τελεστής $\widehat{A}$ δεν είναι ερμιτιανός, μπορούμε να ορίσουμε έναν άλλο τελεστή, που ονομάζεται **ερμιτιανός συζυγής** του $\widehat{A}$ και συμβολίζεται με $\widehat{A}^\dagger$, τέτοιον ώστε:

$$\boxed{\big(\Psi_1, \widehat{A}\Psi_2\big) = \big(\widehat{A}^\dagger\Psi_1, \Psi_2\big), \quad \forall\, \Psi_1,\ \Psi_2 \in \mathcal{H}} \tag{Γ΄.33}$$

Αν $\widehat{A}^\dagger = \widehat{A}$, τότε ο $\widehat{A}$ είναι ερμιτιανός. Δηλαδή αν ο $\widehat{A}$ είναι αυτοσυζυγής θα είναι ερμιτιανός.

Εύκολα μπορούν να αποδειχθούν οι παρακάτω ιδιότητες:

$$\big(\widehat{A}^\dagger\big)^\dagger = \widehat{A}, \qquad \big(\widehat{A}_1 \pm \widehat{A}_2\big)^\dagger = \widehat{A}_1^\dagger \pm \widehat{A}_2^\dagger \tag{Γ΄.34α΄}$$

$$\big(a\widehat{A}\big)^\dagger = a^*\widehat{A}^\dagger, \qquad \big(\widehat{A}_1\widehat{A}_2\big)^\dagger = \widehat{A}_2^\dagger\widehat{A}_1^\dagger \tag{Γ΄.34β΄}$$

Γ΄.4.1 Ιδιότητες ερμιτιανών τελεστών

Ιδιότητα 1. Οι ιδιοτιμές ενός ερμιτιανού τελεστή $\widehat{A}$ είναι πραγματικοί αριθμοί. Αντίστροφα, αν όλες οι ιδιοτιμές ενός τελεστή είναι πραγματικοί αριθμοί, αυτός είναι ερμιτιανός.

Απόδειξη. Χρησιμοποιώντας την εξίσωση ιδιοτιμών του τελεστή $\widehat{A}$:

$$\widehat{A}y_n = a_n y_n \tag{Γ΄.35}$$

σχηματίζουμε τα εσωτερικά γινόμενα $\big(y_n, \widehat{A}y_n\big)$ και $\big(\widehat{A}y_n, y_n\big)$, τα οποία, λόγω της (Γ΄.35), γράφονται ως εξής:

$$\left.\begin{aligned}\big(y_n, \widehat{A}y_n\big) &= a_n\big(y_n, y_n\big) \\ \big(\widehat{A}y_n, y_n\big) &= a_n^*\big(y_n, y_n\big)\end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad a_n^* = a_n \quad\Rightarrow\quad a_n \in \mathbb{R}$$

Εύκολα προκύπτει και το αντίστροφο, επειδή αν $a_n^* = a_n$ τα δεύτερα μέλη των παραπάνω εξισώσεων είναι ίσα και επομένως ο τελεστής είναι ερμιτιανός, εφόσον δεχθούμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις του είναι ένα πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων.

Ιδιότητα 2. Οι ιδιοσυναρτήσεις ενός ερμιτιανού τελεστή $\widehat{A}$, που ανήκουν σε διαφορετικές ιδιοτιμές: $a_1, a_2, \ldots$, είναι ορθογώνιες συναρτήσεις.

Απόδειξη. Σύμφωνα με τις υποθέσεις έχουμε:

$$\widehat{A}y_n = a_n y_n \qquad \text{και} \qquad \widehat{A}y_k = a_k y_k, \qquad a_n \neq a_k$$

Σχηματίζουμε τα εσωτερικά γινόμενα $\big(y_k, \widehat{A}y_n\big)$ και $\big(\widehat{A}y_k, y_n\big)$, που δίνουν:

$$\big(y_k, \widehat{A}y_n\big) = \big(y_k, a_n y_n\big) = a_n\big(y_k, y_n\big)$$
$$\big(\widehat{A}y_k, y_n\big) = \big(a_k y_k, y_n\big) = a_k\big(y_k, y_n\big)$$

Επειδή ο $\widehat{A}$ είναι ερμιτιανός, τα πρώτα μέλη των δύο εξισώσεων είναι ίσα και με αφαίρεση κατά μέλη έχουμε:

$$\underbrace{(a_n - a_k)}_{\neq 0}\big(y_k, y_n\big) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \big(y_k, y_n\big) = 0$$

Δηλαδή, οι ιδιοσυναρτήσεις y_n και y_k του $\widehat{A}$, που ανήκουν σε διαφορετικές τιμές, είναι ορθογώνιες συναρτήσεις.

Σημείωση. Η ιδιότητα 2 αναφέρεται στις ιδιοσυναρτήσεις διαφορετικών ιδιοτιμών. Αν μια ιδιοτιμή είναι εκφυλισμένη οι ιδιοσυναρτήσεις που ανήκουν σ' αυτή ενδέχεται να μην είναι ορθογώνιες μεταξύ τους. Σε αυτήν την περίπτωση μπορούμε να κατασκευάσουμε ορθογώνιες ιδιοσυναρτήσεις που ανήκουν στην εκφυλισμένη ιδιοτιμή με τη μέθοδο Gram-Schmidt.

Ιδιότητα 3. Αν οι τελεστές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ είναι ερμιτιανοί, τότε:

α) Το άθροισμά τους είναι ερμιτιανός τελεστής.

β) Αν $\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = 0$, το γινόμενό τους είναι ερμιτιανός τελεστής.

γ) Αν $\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] \neq 0$, ο αντιμεταθέτης τους μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = i\widehat{C} \tag{Γ'.36}$$

όπου $\widehat{C}$ είναι ερμιτιανός τελεστής.

Θα δείξουμε μόνο το γ), οι άλλες δύο περιπτώσεις είναι απλές.

Επειδή $\widehat{C} = \frac{1}{i}\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = -i\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big]$, για τη μέση τιμή του τελεστή $\widehat{C}$ θα έχουμε:

$$\begin{aligned}
\big(\Psi, \widehat{C}\Psi\big) &= \big(\Psi, -i[\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}]\Psi\big) = -i\Big[\big(\Psi, \widehat{A}\widehat{B}\Psi\big) - \big(\Psi, \widehat{B}\widehat{A}\Psi\big)\Big] \\
&= -i\Big[\big(\widehat{B}\widehat{A}\Psi, \Psi\big) - \big(\widehat{A}\widehat{B}\Psi, \Psi\big)\Big] = -i\big(-[\widehat{A}, \widehat{B}]\Psi, \Psi\big) = \big(-i[\widehat{A}, \widehat{B}]\Psi, \Psi\big) \\
&= \big(\widehat{C}\Psi, \Psi\big)
\end{aligned}$$

Άρα ο $\widehat{C}$ είναι ερμιτιανός.

Σημείωση. Αν ένας τελεστής $\widehat{A}$ είναι ερμιτιανός, όλες οι δυνάμεις του είναι ερμιτιανοί τελεστές. Επίσης κάθε συνάρτηση του $\widehat{A}$ με πραγματικούς συντελεστές είναι ερμιτιανός τελεστής.

Άσκηση. Να δειχθεί ότι, αν οι τελεστές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ είναι ερμιτιανοί τελεστές, τότε:

α) Οι τελεστές:

$$\widehat{A}' = \widehat{A} - \langle\widehat{A}\rangle \quad \text{και} \quad \widehat{B}' = \widehat{B} - \langle\widehat{B}\rangle \tag{Γ'.37α'}$$

είναι ερμιτιανοί τελεστές.

β)

$$\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = \big[\widehat{A}', \widehat{B}'\big] \tag{Γ'.37β'}$$

Γ΄.5 Γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας

Θεώρημα. Αν οι ερμιτιανοί τελεστές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ δεν αντιμετατίθενται, οπότε :

$$\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = i\widehat{C}, \quad \widehat{C} = \text{ερμιτιανός τελεστής}$$

τότε για το γινόμενο των αβεβαιοτήτων τους ισχύει η ανισότητα:

$$\boxed{(\Delta\widehat{A})(\Delta\widehat{B}) \geq \frac{1}{2}|\langle\widehat{C}\rangle|} \tag{Γ΄.38}$$

Απόδειξη. Με βάση τον ορισμό του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, έχουμε:

$$\begin{aligned}(\Delta\widehat{A})^2(\Delta\widehat{B})^2 &= \langle\big(\underbrace{\widehat{A} - \langle\widehat{A}\rangle}_{\widehat{A}'}\big)^2\rangle\langle\big(\underbrace{\widehat{B} - \langle\widehat{B}\rangle}_{\widehat{B}'}\big)^2\rangle = \big(\Psi, \widehat{A}'^2\Psi\big)\big(\Psi, \widehat{B}'^2\Psi\big) \\ &= \big(\widehat{A}'\Psi, \widehat{A}'\Psi\big)\big(\widehat{B}'\Psi, \widehat{B}'\Psi\big) = ||\widehat{A}'\Psi||^2 \cdot ||\widehat{B}'\Psi||^2\end{aligned}$$

Αν χρησιμοποιήσουμε την ανισότητα των Cauchy-Schwarz για τα διανύσματα $\widehat{A}'\Psi$ και $\widehat{B}'\Psi$:

$$||\widehat{A}'\Psi|| \cdot ||\widehat{B}'\Psi|| \geq |\big(\widehat{A}'\Psi, \widehat{B}'\Psi\big)|$$

η προηγούμενη σχέση γράφεται:

$$(\Delta\widehat{A})^2(\Delta\widehat{B})^2 \geq |\big(\widehat{A}'\Psi, \widehat{B}'\Psi\big)|^2 = |\big(\Psi, \widehat{A}'\widehat{B}'\Psi\big)|^2 \tag{Γ΄.39}$$

Το γινόμενο των τελεστών $\widehat{A}'$, $\widehat{B}'$ γράφεται:

$$\widehat{A}'\widehat{B}' = \frac{\widehat{A}'\widehat{B}' + \widehat{B}'\widehat{A}'}{2} + \frac{\widehat{A}'\widehat{B}' - \widehat{B}'\widehat{A}'}{2} = \frac{\widehat{A}'\widehat{B}' + \widehat{B}'\widehat{A}'}{2} + \frac{\big[\widehat{A}', \widehat{B}'\big]}{2}$$

Ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους αυτής της σχέσης είναι ερμιτιανός τελεστής, ενώ για το δεύτερο όρο, που γράφεται: $\big[\widehat{A}', \widehat{B}'\big] = \big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = i\widehat{C}$, ο τελεστής $\widehat{C}$ είναι ερμιτιανός. Έτσι η σχέση (Γ΄.39) γράφεται:

$$(\Delta\widehat{A})^2(\Delta\widehat{B})^2 \geq \left|\Big(\Psi, \frac{\widehat{A}'\widehat{B}' + \widehat{B}'\widehat{A}'}{2}\,\Psi\Big) + i\Big(\Psi, \frac{\widehat{C}}{2}\,\Psi\Big)\right|^2 = \left\langle\frac{\widehat{A}'\widehat{B}' + \widehat{B}'\widehat{A}'}{2}\right\rangle^2 + \left\langle\frac{\widehat{C}}{2}\right\rangle^2$$

Επειδή ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους της ανισότητας είναι θετικός αριθμός, η ανισότητα γράφεται:

$$(\Delta\widehat{A})^2(\Delta\widehat{B})^2 \geq \left\langle\frac{\widehat{C}}{2}\right\rangle^2 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{(\Delta\widehat{A})(\Delta\widehat{B}) \geq \left|\left\langle\frac{\widehat{C}}{2}\right\rangle\right|} \tag{Γ΄.40}$$

Καταλήξαμε στο εξής συμπέρασμα: *Αν δύο τελεστές, που αντιστοιχούν σε δύο παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη ενός κβαντικού συστήματος, δεν αντιμετατίθενται, το γινόμενο των αβεβαιοτήτων κατά τη μέτρηση των δύο μεγεθών είναι μεγαλύτερο ή ίσο με ορισμένη ελάχιστη τιμή σύμφωνα με τη σχέση (Γ΄.40).* Η σχέση αυτή είναι η γενική μορφή της σχέσης αβεβαιότητας του Heisenberg.

Παράδειγμα. Στο εδάφιο Γ΄.1 είδαμε ότι ο αντιμεταθέτης των τελεστών της θέσης και της ορμής είναι: $\big[\widehat{x}, \widehat{p}_x\big] = i\hbar$. Στην περίπτωση αυτή ο τελεστής $\widehat{C} = \hbar$ είναι μια σταθερά. Έτσι, η σχέση (Γ΄.40) δίνει:

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \left|\left\langle\frac{\hbar}{2}\right\rangle\right| \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2}} \tag{Γ΄.41}$$

Η ανισότητα (Γ΄.41) είναι η αρχική διατύπωση της σχέσης απροσδιοριστίας του Heizenberg, η οποία όμως είναι μια εφαρμογή της γενικότερης σχέσης (Γ΄.40). Στην πραγματικότητα υπάρχει μια σχέση απροσδιοριστίας για κάθε ζεύγος τελεστών που αντιστοιχούν σε παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη και δεν αντιμετατίθενται. Τέτοια ζεύγη λέγονται **ασυμβίβαστα** και οι αντίστοιχοι τελεστές δεν έχουν ένα κοινό πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων. Σύμφωνα με τη σχέση (Γ΄.40) η ταυτόχρονη γνώση αυτών των μεγεθών είναι αδύνατη.

Τα παρατηρήσιμα μεγέθη των οποίων οι αντίστοιχοι τελεστές έχουν ένα κοινό πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων και επομένως αντιμετατίθενται λέγονται **συμβιβαστά** μεγέθη. Η ταυτόχρονη ακριβής γνώση των μεγεθών αυτών είναι δυνατή.

Τα ζεύγη των μεγεθών: (x, p_x), (x^2, p_x), (l_x, l_y), $(l_x, \mathbf{l})$ είναι ασυμβίβαστα, ενώ τα ζεύγη των μεγεθών (x, y), (x, p_y), (p_x, p_y), $(l_x, \mathbf{l}^2)$ είναι συμβιβαστά.

Τα συμπεράσματα του προηγούμενου θεωρήματος και του θεμελιώδους θεωρήματος του εδαφίου Γ΄.2 συνοψίζονται στο παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα. Δύο κβαντομηχανικά μεγέθη A και B είναι συμβιβαστά (μπορούν να μετρηθούν με απόλυτη ακρίβεια) μόνο όταν οι αντίστοιχοι τελεστές τους αντιμετατίθενται. Αν οι τελεστές των μεγεθών A και B δεν αντιμετατίθενται, $\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] \neq 0$, τα μεγέθη είναι ασυμβίβαστα (είναι αδύνατον να μετρηθούν ταυτόχρονα με απόλυτη ακρίβεια).

Γ΄.5.1 Η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας - χρόνου

Στη σχέση αβεβαιότητας θέσης - ορμής: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$, η αβεβαιότητα της θέσης είναι η τυπική απόκλιση (σ_x) από τη μέση τιμή των αποτελεσμάτων επαναλαμβανόμενων μετρήσεων ομοίων συστημάτων. Αντίστοιχα ισχύουν για το Δp_x. Η προηγούμενη ανισότητα συνδέεται συχνά με την αβεβαιότητα ενέργειας - χρόνου, που μπορούμε να "δούμε" ποιοτικά αν θεωρήσουμε ένα ελεύθερο σωματίδιο με ενέργεια $E = \frac{p_x^2}{2m}$. Από αυτήν τη σχέση έχουμε: $\Delta E = \frac{p_x \Delta p_x}{m}$. Η αντικατάσταση του $p_x = \frac{1}{m}\frac{\Delta x}{\Delta t}$ στην προηγούμενη σχέση δίνει:

$$\Delta E \cdot \Delta t = \Delta x \cdot \Delta p_x \quad \Rightarrow \quad \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \tag{Γ΄.42}$$

Στη σχέση (Γ΄.42) το ΔE είναι η αβεβαιότητα (τυπική απόκλιση) με την οποία είναι γνωστή η ενέργεια του συστήματος και Δt ένα είδος "αβεβαιότητας χρόνου" που πρέπει να οριστεί.

Είναι χρήσιμο να παρατηρήσουμε ότι ενώ η θέση, η ορμή και η ενέργεια είναι δυναμικές μεταβλητές, δηλαδή μετρήσιμα μεγέθη που χαρακτηρίζουν το σύστημα κάποια χρονική στιγμή, ο χρόνος δεν είναι μια δυναμική μεταβλητή. Δεν έχει έννοια να μετρήσουμε το χρόνο ενός σωματιδίου όπως μπορούμε να κάνουμε για τη θέση και την ορμή του. Ο χρόνος είναι μια παράμετρος από την οποία εξαρτώνται οι δυναμικές μεταβλητές. Επομένως το Δt στη σχέση αβεβαιότητας ενέργειας - χρόνου δεν είναι η τυπική απόκλιση μιας συλλογής μετρήσεων του χρόνου. Το Δt μπορεί όμως να ερμηνευτεί ως ένα χαρακτηριστικό χρονικό διάστημα κατά το οποίο μεταβάλλονται αισθητά οι ιδιότητες του εξεταζόμενου συστήματος.

Ένα μέτρο του πόσο γρήγορα μεταβάλλεται το σύστημα μπορεί να προκύψει από τον υπολογισμό του ρυθμού μεταβολής της μέσης τιμής ενός παρατηρήσιμου μεγέθους $Q(x, p_x)$. Αυτός ο ρυθμός, σύμφωνα με τη σχέση (2.69) που δείχθηκε στο εδάφιο 2.5.1, είναι:

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle = \frac{d}{dt}\big(\Psi, \widehat{Q}\Psi\big) = \frac{1}{i\hbar}\big\langle\big[\widehat{H}, \widehat{Q}\big]\big\rangle \tag{Γ΄.43}$$

Από τη γενική μορφή της σχέσης αβεβαιότητας (σχέση (Γ΄.40)), για $\widehat{A} = \widehat{H}$ και $\widehat{B} = \widehat{Q}$, $\sigma_H = \Delta H = \Delta E$ και $\sigma_Q = \Delta Q$, έχουμε:

$$\Delta E \cdot \Delta Q \geq \frac{1}{2}\big|\big\langle\big[\widehat{H}, \widehat{Q}\big]\big\rangle\big| \tag{Γ΄.44}$$

Η αντικατάσταση του αντιμεταθέτη $\left[\widehat{H}, \widehat{Q}\right]$ από τη σχέση (Γ΄.43) δίνει:

$$\Delta E \cdot \Delta Q \geq \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d\langle\widehat{Q}\rangle}{dt}\right| \tag{Γ΄.45}$$

Αν τώρα ορίσουμε την "αβεβαιότητα" του χρόνου από τη σχέση:

$$\boxed{\Delta t = \frac{\Delta Q}{\left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|}} \tag{Γ΄.46}$$

Η σχέση (Γ΄.45) γράφεται:

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}} \tag{Γ΄.47}$$

που είναι η σχέση αβεβαιότητας ενέργειας - χρόνου.

Επειδή $\Delta Q = \left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|\Delta t$, *το Δt παριστάνει το χρονικό διάστημα που απαιτείται ώστε η μέση τιμή του μεγέθους Q να μεταβληθεί κατά μια τυπική απόκλιση*. Το Δt εξαρτάται από το παρατηρήσιμο μέγεθος που εξετάζουμε. Όσο πιο αργά μεταβάλλεται ένα φυσικό σύστημα (Δt μεγάλο), τόσο πιο καλά καθορισμένη είναι η ενέργεια του (ΔE μικρό) και αντίστροφα.

Στην ακραία περίπτωση μιας στάσιμης κατάστασης, στην οποία η ενέργεια είναι καλά καθορισμένη, οι μέσες τιμές των παρατηρήσιμων μεγεθών είναι ανεξάρτητες του χρόνου (βλέπε εδάφιο 2.5.1), οπότε $\Delta E = 0$ και επομένως $\Delta t = \infty$.

Πεπερασμένος χρόνος εξέλιξης μπορεί να εμφανιστεί μόνο σε καταστάσεις που δεν έχουν καθορισμένη ενέργεια, είναι δηλαδή $\Delta E \neq 0$. Μια τέτοια κατάσταση περιγράφεται από μια επαλληλία στάσιμων καταστάσεων. Για παράδειγμα η επαλληλία δύο στάσιμων καταστάσεων:

$$\psi(x,t) = \alpha u_1(x)\mathrm{e}^{-iE_1 t/\hbar} + \beta u_2(x)\mathrm{e}^{-iE_2 t/\hbar}$$

με α, β, u_1 και u_2 πραγματικά, έχει πυκνότητα πιθανότητας:

$$|\psi(x,y)|^2 = \alpha^2 u_1^2(x) + \beta^2 u_2^2(x) + 2\alpha\beta u_1(x)u_2(x)\cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}\,t\right)$$

που παριστάνει μια ταλαντούμενη ποσότητα. Η περίοδος της ταλάντωσης είναι $T = \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1}$. Χονδρικά, η αβεβαιότητα της ενέργειας είναι $\Delta E \approx E_2 - E_1$ και ο χαρακτηριστικός χρόνος είναι:

$$\Delta t \approx \frac{T}{2} = \frac{\pi\hbar}{E_2 - E_1} = \frac{\pi\hbar}{\Delta E} \quad \Rightarrow \quad \Delta E \cdot \Delta t \approx \pi\hbar$$

Το γινόμενο $\Delta E \cdot \Delta t$ είναι πράγματι μεγαλύτερος του $\hbar/2$.

Η σχέση (Γ΄.47) χρησιμοποιείται πολύ συχνά για τον καθορισμό του χρόνου ζωής μιας διεγερμένης κατάστασης ή ενός ασταθούς σωματιδίου. Για παράδειγμα κατά τη μέτρηση της μάζας του σωματιδίου Δ βρίσκεται ότι η κατανομή των μετρήσεων είναι περίπου γκαουσιανή με μέση τιμή $1232\,\mathrm{MeV/c^2}$ και εύρος $2\Delta E/c^2 = 120\,\mathrm{MeV/c^2}$. Επειδή $\hbar/2 \simeq 3\cdot 10^{-22}\,\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{sec}$, ο χρόνος ζωής ($\tau$) του σωματιδίου Δ πριν την αυθόρμητη διάσπασή του είναι:

$$\tau = \Delta t \simeq \frac{\hbar}{2}\,\frac{1}{\Delta E} = 3\cdot 10^{-22}\,\mathrm{MeV\,sec}\frac{1}{120/2\,\mathrm{MeV}} \simeq 10^{-23}\,\mathrm{sec}$$

Γ΄.6 Συμβολισμός του Dirac

Στο εδάφιο αυτό θα παρουσιαστεί ο συμβολισμός του Dirac με τη βοήθεια του οποίου οι διάφορες εκφράσεις της Κβαντομηχανικής γράφονται με έναν συμπαγή και κομψό τρόπο.

Ένας κατάλληλος τρόπος περιγραφής ενός συνηθισμένου διανύσματος $\boldsymbol{a}$ (για παράδειγμα σε δύο διαστάσεις) είναι η χρησιμοποίηση καρτεσιανών συντεταγμένων x, y και ο καθορισμός των συνιστωσών του διανύσματος ως προς αυτούς τους άξονες:

$$a_x = \boldsymbol{x_0} \cdot \boldsymbol{a}, \qquad a_y = \boldsymbol{y_0} \cdot \boldsymbol{a}$$

Το διάνυσμα $\boldsymbol{a}$ μπορεί να περιγραφεί εξ ίσου καλά και με τη χρησιμοποίηση ενός άλλου συστήματος αξόνων x', y', οπότε έχουμε:

$$a_{x'} = \boldsymbol{x'_0} \cdot \boldsymbol{a}, \qquad a_{y'} = \boldsymbol{y'_0} \cdot \boldsymbol{a}$$

Οι βάσεις $\{\boldsymbol{x_0}, \boldsymbol{y_0}\}$ και $\{\boldsymbol{x'_0}, \boldsymbol{y'_0}\}$ εκφράζουν το ίδιο διάνυσμα $\boldsymbol{a}$: $\boldsymbol{a} = (a_x, a_y) = (a_{x'}, a_{y'})$.

Στην Κβαντομηχανική η κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση. Η φυσική κατάσταση (ή η κυματοσυνάρτηση) αναπαρίσταται με ένα διάνυσμα του χώρου Hilbert. Οι διαστάσεις του χώρου Hilbert εξαρτώνται από τη φύση του συστήματος. Στην περίπτωση πεπερασμένων διαστάσεων ο χώρος είναι Ευκλείδειος με εσωτερικό γινόμενο που είναι ένας μιγαδικός αριθμός. Πολύ συχνά είναι χρήσιμος ο συμβολισμός του Dirac. Στο συμβολισμό αυτό τα διανύσματα του χώρου Hilbert λέγονται **ket** και συμβολίζονται με $|\alpha\rangle$ ή $|y_n\rangle$ ή $|n\rangle$ και έχουν τις παρακάτω ιδιότητες:

- $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle, \qquad c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c \quad (c \in \mathcal{C})$
- Τα ket $|\alpha\rangle$ και $c|\alpha\rangle$ με $c \neq 0$ παριστάνουν την ίδια κατάσταση, δηλαδή ενδιαφερόμαστε μόνο για τη διεύθυνση.
- Ένας τελεστής $\hat{A}$ δρα σε ένα ket από αριστερά και δίνει ένα άλλο ket:

$$\hat{A}(|\alpha\rangle) = \hat{A}|\alpha\rangle = |\phi\rangle$$

Αν συμβαίνει $|\phi\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ ο αριθμός α λέγεται ιδιοτιμή του τελεστή $\hat{A}$ και το $|\alpha\rangle$ ιδιο-ket του $\hat{A}$ που ανήκει στην ιδιοτιμή α.

Σε σχέση με το χώρο των ket θεωρούμε ένα **δυαδικό χώρο** (dual space), το χώρο των **bra**, τα διανύσματα του οποίου συμβολίζονται με $\langle a|$. Δηλαδή θεωρούμε την αμφιμονοσήμαντη αντιστοιχία:

$$\boxed{\langle\alpha| \quad \longleftrightarrow \quad |\alpha\rangle \quad \text{ή} \quad \langle\alpha| = (|\alpha\rangle)^\dagger} \tag{Γ΄.48}$$

Θα μπορούσαμε να πούμε περιγραφικά ότι ο χώρος των bra είναι σαν το είδωλο σε έναν καθρέφτη του χώρου των ket. Τα bra έχουν τις παρακάτω ιδιότητες:

- Το bra του $c|\alpha\rangle$ είναι $c^*\langle\alpha|$ και όχι $c\langle\alpha|$. Γενικά ισχύει:

$$c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle \quad \longleftrightarrow \quad c_1^*\langle\alpha| + c_2^*\langle\beta|$$

- Ένας τελεστής δρα σε ένα bra από τα δεξιά και δίνει ένα άλλο bra:

$$\langle\alpha|\hat{A} = \langle\phi|$$

Τα $\hat{A}|\alpha\rangle$ και $\langle\alpha|\hat{A}$ δεν είναι εν γένει δυαδικά. Δηλαδή, εν γένει ισχύει: $\hat{A}|\alpha\rangle \not\longleftrightarrow \langle\alpha|\hat{A}$.

Αν υπάρχει ένας τελεστής $\hat{A}^\dagger$ για τον οποίο ισχύει:

$$\boxed{\langle\alpha|\hat{A}^\dagger \quad \longleftrightarrow \quad \hat{A}|\alpha\rangle} \tag{Γ΄.49}$$

Ο $\hat{A}^\dagger$ λέγεται ερμιτιανός συζυγής του $\hat{A}$. Αν $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός.

• Ένα bra και ένα ket μπορούν να πολλαπλασιαστούν με δύο τρόπους, εσωτερικά και εξωτερικά.

Το εσωτερικό γινόμενο είναι ένας μιγαδικός αριθμός:

$$\underbrace{(\langle\beta|)}_{bra}\underbrace{\cdot}_{[c]}\underbrace{(|\alpha\rangle)}_{ket} = \langle\beta|\alpha\rangle$$

Για το εσωτερικό γινόμενο ισχύουν οι γνωστές ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου:

$$\begin{aligned}
&\langle\beta|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|\beta\rangle \\
&\langle\gamma|c_1\alpha + c_2\beta\rangle = c_1\langle\gamma|\alpha\rangle + c_2\langle\gamma|\beta\rangle \\
&\langle c_1\alpha + c_2\beta|\gamma\rangle = c_1^*\langle\alpha|\gamma\rangle + c_2^*\langle\beta|\gamma\rangle
\end{aligned}$$

Αν συμβαίνει $\langle\beta|\alpha\rangle = 0$ τα ket $|\alpha\rangle$ και $|\beta\rangle$ λέγονται ορθογώνια. Αν $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, το $|\alpha\rangle$ λέγεται κανονικοποιημένο.

Σ' ένα χώρο συναρτήσεων το bra μπορεί να παρασταθεί ως μια προετοιμασία ενός ολοκληρώματος:

$$\langle\psi| = \int \psi^*(x)\cdot[\cdots]dx$$

με τις τελείες να περιμένουν να αντικατασταθούν με οτιδήποτε μπορεί να συνδυαστεί με το bra.

Αν το ket αντιστοιχεί σε πίνακα στήλη: $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$, το αντίστοιχο bra είναι ο πίνακας γραμμή: $\langle\alpha| = (a_1^*, a_2^*, \cdots)$. Έτσι:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 \cdots$$

• Αν $|\alpha\rangle$ είναι ένα τυχαίο ket του χώρου Hilbert αυτό γράφεται με τη μορφή:

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_{\alpha,i}|\beta_i\rangle, \qquad c_{\alpha,i} = \langle\beta_i|\alpha\rangle$$

όπου $|\beta_i\rangle$ είναι τα ιδιο-ket ενός τελεστή $\hat{B}$ που θεωρούμε ότι αποτελούν ένα πλήρες σύνολο.

Το εξωτερικό γινόμενο, $(|\beta\rangle)(\langle a|) = |\beta\rangle\langle a|$, είναι ένας τελεστής, αφού όταν επιδρά σε ένα ket (ή bra) δίνει ένα ket (ή bra):

$$(|\beta\rangle\langle a|)\cdot|\gamma\rangle = \underbrace{|\beta\rangle}_{ket}\underbrace{(\langle a|\gamma\rangle)}_{\text{αριθμός}} = (\langle a|\gamma\rangle)|\beta\rangle \qquad \text{και} \qquad \langle\gamma|\cdot(|\beta\rangle\langle a|) = (\langle\gamma|\beta\rangle)\langle a|$$

Η δυνατότητα χρησιμοποίησης των bra και ket ως ξεχωριστές οντότητες μας επιτρέπει να εκφράζουμε ορισμένες χρήσιμες σχέσεις σε γενική και συμπαγή μορφή. Ένα τέτοιο παράδειγμα είναι ο τελεστής:

$$\boxed{\hat{P}_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|, \qquad \langle\alpha|\alpha\rangle = 1} \tag{Γ.50}$$

που έχει την ιδιότητα, όταν επιδρά σε οποιαδήποτε κατάσταση (ket) $|\beta\rangle$ να την "προβάλει" στην κατάσταση $|\alpha\rangle$:

$$\hat{P}_\alpha|\beta\rangle = |\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle|\alpha\rangle$$

Ο τελεστής $\hat{P}_\alpha$ λέγεται **προβολικός τελεστής** (projection operator) του υποχώρου μιας διάστασης που σαρώνεται από το $|\alpha\rangle$.

Αν το σύνολο $\{|n\rangle\}$ είναι μια ορθοκανονική βάση ($\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$), οπότε για οποιοδήποτε διάνυσμα του χώρου ισχύει:

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_{\alpha,n}|n\rangle = \sum_n \langle n|\alpha\rangle|n\rangle = \left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\alpha\rangle$$

συμπεραίνουμε ότι

$$\boxed{\hat{I} = \sum_n |n\rangle\langle n|} \tag{Γ΄.51}$$

όπου $\hat{I}$ είναι ο ταυτοτικός τελεστής. Η σχέση αυτή είναι γνωστή και ως σχέση πληρότητας.

Η σχέση (Γ΄.51) χρησιμοποιείται συχνά στην απλοποίηση ή ανάλυση διαφόρων εκφράσεων. Για παράδειγμα, εισάγοντας το δεξιό μέλος της (Γ΄.51) μεταξύ των $\langle\alpha|$ και $|\alpha\rangle$ στο εσωτερικό γινόμενο $\langle\alpha|\alpha\rangle$, έχουμε:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{I}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\alpha\rangle = \sum_n (\langle\alpha|n\rangle)(\langle n|\alpha\rangle) = \sum_n |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \sum_n |c_{\alpha,n}|^2$$

Η σχέση αυτή δείχνει ότι αν το $|\alpha\rangle$ είναι κανονικοποιημένο τότε οι συντελεστές $c_{\alpha,n}$ του αναπτύγματος ικανοποιούν τη σχέση:

$$\sum_n |c_{\alpha,n}|^2 = \sum_n |\langle n|\alpha\rangle|^2 = 1$$

Ο προβολικός τελεστής έχει τις παρακάτω αξιοσημείωτες ιδιότητες:

- Είναι ερμιτιανός τελεστής: $\hat{P}_n{}^\dagger = \hat{P}_n$.
- Είναι αυτοδύναμος (idempotent): $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$.
- Αν $\hat{P}_n|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ τότε $\lambda = 0,\ 1$.

Γ΄.7 Ο τελεστής της στροφορμής

Αντί να ασχοληθούμε με τετριμμένες ασκήσεις και παραδείγματα για την εμπέδωση των προηγουμένων εδαφίων θα ασχοληθούμε με τον τελεστή της στροφορμής και θα αποδείξουμε μερικές βασικές ιδιότητές του, που θα μπορούν να χρησιμοποιηθούν κυρίως στο κεφάλαιο που αναφέρεται σε προβλήματα κεντρικών πεδίων δυνάμεων, ($V(\mathbf{r}) = V(r)$), όπως στο άτομο του υδρογόνου. Στην κλασική Φυσική, σε κεντρικά πεδία δυνάμεων, ένα βασικό φυσικό μέγεθος είναι το διάνυσμα της στροφορμής, $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, που είναι διατηρήσιμο μέγεθος. Στην Κβαντομηχανική βασικής σημασίας είναι ο διανυσματικός τελεστής της (τροχιακής) στροφορμής, που ορίστηκε στο εδάφιο 2.1.2:

$$\widehat{\mathbf{l}} = \widehat{\mathbf{r}} \times \widehat{\mathbf{p}} = \widehat{\mathbf{r}} \times (-i\hbar\boldsymbol{\nabla}) = \begin{vmatrix} \mathbf{x_0} & \mathbf{y_0} & \mathbf{z_0} \\ x & y & z \\ \widehat{p}_x & \widehat{p}_y & \widehat{p}_z \end{vmatrix} = \widehat{l}_x\mathbf{x_0} + \widehat{l}_y\mathbf{y_0} + \widehat{l}_z\mathbf{z_0} \tag{Γ΄.52}$$

Οι συνιστώσες $\widehat{l}_x$, $\widehat{l}_y$ και $\widehat{l}_z$ του τελεστή της στροφορμής, που προκύπτουν από τον υπολογισμό της ορίζουσας της σχέσης (Γ΄.52) είναι:

$$\widehat{l}_x = y\widehat{p}_z - z\widehat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{Γ΄.53α΄}$$

$$\widehat{l}_y = z\widehat{p}_x - x\widehat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{Γ΄.53β΄}$$

$$\widehat{l}_z = x\widehat{p}_y - y\widehat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{Γ΄.53γ΄}$$

Λόγω της σπουδαιότητας του τελεστή της στροφορμής στην Κβαντομηχανική θα εξετάσουμε μερικές από τις βασικές ιδιότητές.

Ιδιότητα 1. Οι τελεστές $\widehat{l}_x$, $\widehat{l}_y$, $\widehat{l}_z$, $\widehat{\mathbf{l}}$ και $\widehat{\mathbf{l}}^2$ είναι ερμιτιανοί τελεστές. Επομένως έχουν πραγματικές ιδιοτιμές και μέσες τιμές και πλήρη σύνολα ιδιοσυναρτήσεων.

Απόδειξη. Ξεκινάμε με τον τελεστή $\widehat{l}_x$. Επειδή οι τελεστές $\widehat{y} = y$ και $\widehat{p}_z$ είναι ερμιτιανοί για τους οποίους ισχύει $[y, \widehat{p}_z] = 0$, το γινόμενο $y\widehat{p}_z$ είναι ερμιτιανός τελεστής. Για τον ίδιο λόγο και το γινόμενο $z\widehat{p}_y$ είναι ερμιτιανός τελεστής. Άρα ο $\widehat{l}_x$ ως διαφορά δύο ερμιτιανών τελεστών είναι ερμιτιανός τελεστής.

Το ίδιο ισχύει για τις συνιστώσες $\widehat{l}_y$ και $\widehat{l}_z$. Επομένως ο τελεστής $\widehat{\mathbf{l}} = \widehat{l}_x\mathbf{x_0} + \widehat{l}_y\mathbf{y_0} + \widehat{l}_z\mathbf{z_0}$ είναι ερμιτιανός τελεστής ώς (διανυσματικό) άθροισμα ερμιτιανών τελεστών. Επίσης, κάθε δύναμη του $\widehat{\mathbf{l}}$ είναι ερμιτιανός τελεστής.

Ιδιότητα 2. Σε αντίθεση με τις συνιστώσες $\widehat{p}_x$, $\widehat{p}_y$, $\widehat{p}_z$ του τελεστή της ορμής $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$, που αντιμετατίθενται μεταξύ τους:

$$\left[\widehat{p}_x, \widehat{p}_y\right] = \left[\widehat{p}_y, \widehat{p}_z\right] = \left[\widehat{p}_z, \widehat{p}_x\right] = 0$$

οι συνιστώσες $\widehat{l}_x$, $\widehat{l}_y$, $\widehat{l}_z$ του τελεστή της στροφορμής δεν αντιμετατίθενται και για τους αντιμεταθέτες ισχύουν οι σχέσεις:

$$\boxed{\left[\widehat{l}_x, \widehat{l}_y\right] = i\hbar\widehat{l}_z, \qquad \left[\widehat{l}_y, \widehat{l}_z\right] = i\hbar\widehat{l}_x, \qquad \left[\widehat{l}_z, \widehat{l}_x\right] = i\hbar\widehat{l}_y} \tag{Γ΄.54}$$

Οι σχέσεις αντιμετάθεσης των συνιστωσών του τελεστή της στροφορμής είναι από τις βασικότερες σχέσεις της Κβαντομηχανικής και σχεδόν όλες οι ιδιότητες του τελεστή της στροφορμής μπορούν να προκύψουν από αυτές. Για το λόγο αυτόν *αν οι συνιστώσες ενός διανυσματικού τελεστή ικανοποιούν τις παραπάνω σχέσεις αντιμετάθεσης λέγεται τελεστής της στροφορμής*. Ο τρόπος αυτός ορισμού του τελεστή της στροφορμής χρησιμοποιείται στις περιπτώσεις που δεν υπάρχει κλασικό ανάλογο, όπως στην περίπτωση της "ιδιοστροφορμής" (ή σπιν) ενός σωματιδίου.

Επειδή οι συνιστώσες του τελεστή της στροφορμής δεν αντιμετατίθενται μεταξύ τους δεν είναι δυνατό να βρούμε ένα κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων τους και τα αντίστοιχα φυσικά μεγέθη δεν μπορούν να καθοριστούν συγχρόνως με όση ακρίβεια επιθυμούμε. Επομένως δεν μπορούμε να γνωρίζουμε τη στροφορμή του σωματιδίου με όση ακρίβεια επιθυμούμε. Διαφορετικά, δεν μπορούμε να γνωρίζουμε το μέτρο της στροφορμής και τη διεύθυνσή της συγχρόνως. Τι μπορούμε να γνωρίζουμε; Στην ερώτηση αυτή θα απαντήσουμε παρακάτω αφού πρώτα δείξουμε μια από τις σχέσεις της (Γ΄.54). Οι άλλες δύο αποδεικνύονται με τον ίδιο τρόπο.

Απόδειξη. Για την απόδειξη της σχέσης του πρώτου αντιμεταθέτη χρησιμοποιούμε πρώτα την ιδιότητα του αντιμεταθέτη της σχέσης (Γ'.8β'):

$$\begin{aligned}\big[\widehat{l}_x,\widehat{l}_y\big] &= \big[y\widehat{p}_z - z\widehat{p}_y,\, z\widehat{p}_x - x\widehat{p}_z\big] = \big[y\widehat{p}_z,\, z\widehat{p}_x - x\widehat{p}_z\big] - \big[z\widehat{p}_y,\, z\widehat{p}_x - x\widehat{p}_z\big] \\ &= \big[y\widehat{p}_z,\, z\widehat{p}_x\big] - \underbrace{\big[y\widehat{p}_z,\, x\widehat{p}_z\big]}_{=0} - \underbrace{\big[z\widehat{p}_y,\, z\widehat{p}_x\big]}_{=0} + \big[z\widehat{p}_y,\, x\widehat{p}_z\big]\end{aligned} \qquad (Γ'.55)$$

Οι δεύτερος αντιμεταθέτης είναι μηδέν επειδή οι τελεστές y, $\widehat{p}_z$, x και $\widehat{p}_z$ αντιμετατίθενται, καθώς και τα γινόμενα $y\widehat{p}_z$ και $x\widehat{p}_z$. Για τους ίδιους λόγους είναι μηδέν και ο τρίτος αντιμεταθέτης. Για τους άλλους δύο αντιμεταθέτες, χρησιμοποιώντας την ιδιότητα του αντιμεταθέτη της σχέσης (Γ'.8γ'), έχουμε:

$$\big[y\widehat{p}_z,\, z\widehat{p}_x\big] = \big[y\widehat{p}_z, z\big]\widehat{p}_x + z\underbrace{\big[y\widehat{p}_z, \widehat{p}_x\big]}_{=0} = \Big(y\underbrace{\big[\widehat{p}_z, z\big]}_{=-i\hbar} + \underbrace{\big[y, z\big]}_{=0}\widehat{p}_z\Big)\widehat{p}_x = -i\hbar y\widehat{p}_x \qquad (Γ'.56α')$$

$$\big[z\widehat{p}_y,\, x\widehat{p}_z\big] = \underbrace{\big[z\widehat{p}_y,\, x\big]}_{=0}\widehat{p}_z + x\big[z\widehat{p}_y,\, \widehat{p}_z\big] = x\Big(z\underbrace{\big[\widehat{p}_y,\widehat{p}_z\big]}_{=0} + \underbrace{\big[z,\widehat{p}_z\big]}_{i\hbar}\widehat{p}_y\Big) = i\hbar x\widehat{p}_y \qquad (Γ'.56β')$$

Η αντικατάσταση των σχέσεων (Γ'.56α') και (Γ'.56β') στη σχέση (Γ'.55) δίνει:

$$\big[\widehat{l}_x,\widehat{l}_y\big] = i\hbar(x\widehat{p}_y - y\widehat{p}_x) = i\hbar\widehat{l}_z,$$

Ιδιότητα 3. Οι συνιστώσες του τελεστή της στροφορμής αντιμετατίθενται με το τετράγωνο του τελεστή της στροφορμής:

$$\widehat{\mathbf{l}}^2 = \widehat{l}_x^2 + \widehat{l}_y^2 + \widehat{l}_z^2 \qquad (Γ'.57α')$$

Δηλαδή, ισχύουν οι σχέσεις:

$$\boxed{[\widehat{\mathbf{l}}^2,\widehat{l}_x] = [\widehat{\mathbf{l}}^2,\widehat{l}_y] = [\widehat{\mathbf{l}}^2,\widehat{l}_z] = 0} \qquad (Γ'.57β')$$

Σύμφωνα με αυτές τις σχέσεις αντιμετάθεσης, μπορούμε να γνωρίζουμε με ακρίβεια το μέτρο της στροφορμής και την τιμή της προβολής της στροφορμής επάνω σε έναν άξονα. Έτσι είναι δυνατό να ορίσουμε ένα κοινό πλήρες σύνολο ορθοκανονικών ιδιοσυναρτήσεων του $\widehat{\mathbf{l}}^2$ και μιας συνιστώσας του $\widehat{\mathbf{l}}$. Συνήθως χρησιμοποιούμε ως κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσων, τις ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών $\widehat{\mathbf{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$. Το κοινό σύνολο αυτών των ιδιοσυναρτήσεων είναι οι σφαιρικές αρμονικές, $Y_{lm}(\theta,\phi)$, που θα συναντήσουμε στο άτομο του υδρογόνου.

Απόδειξη. Θα αποδείξουμε την πρώτη από τις σχέσεις (Γ'.57β'). Στην απόδειξη θα χρησιμοποιήσουμε την ιδιότητα του αντιμεταθέτη της σχέσης (Γ'.8γ'), ότι ένας τελεστής αντιμετατίθεται με μια δύναμή του και τους αντιμεταθέτες της (Γ'.54):

$$\begin{aligned}[\widehat{\mathbf{l}}^2,\widehat{l}_x] &= \underbrace{[\widehat{l}_x^2,\widehat{l}_x]}_{=0} + [\widehat{l}_y^2,\widehat{l}_x] + [\widehat{l}_z^2,\widehat{l}_x] = \widehat{l}_y[\widehat{l}_y,\widehat{l}_x] + [\widehat{l}_y,\widehat{l}_x]\widehat{l}_y + \widehat{l}_z[\widehat{l}_z,\widehat{l}_x] + [\widehat{l}_z,\widehat{l}_x]\widehat{l}_z \\ &= \widehat{l}_y(-i\hbar\widehat{l}_z) + (-i\hbar\widehat{l}_z)\widehat{l}_y + \widehat{l}_z(i\hbar\widehat{l}_y) + (i\hbar\widehat{l}_y)\widehat{l}_z = 0\end{aligned}$$

Οι άλλες σχέσεις αντιμετάθεσης της (Γ'.57β') προκύπτουν με όμοιο τρόπο.

Ιδιότητα 4. Σε κεντρικά πεδία δυνάμεων οι τελεστές: $\widehat{\mathbf{l}}$, $\widehat{\mathbf{l}}^2$, και $\widehat{l}_i$ $(i = x, y, z)$ αντιμετατίθενται με τον τελεστή του Hamilton:

$$\boxed{\big[\widehat{H},\widehat{\mathbf{l}}\big] = \big[\widehat{H},\widehat{\mathbf{l}}^2\big] = \big[\widehat{H},\widehat{l}_i\big] = 0, \quad i = x, y, z} \qquad (Γ'.58)$$

Απόδειξη. Η παραπάνω σχέσεις προκύπτουν αν γράψουμε τον τελεστή του Laplace σε σφαιρικές συντεταγμένες, οπότε ο τελεστής του Hamilton γράφεται με τη μορφή:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + \frac{\widehat{\mathrm{l}}^2}{2mr^2} + V(r), \quad m = \text{η μάζα του σωματιδίου}$$

Επειδή οι τελεστές $\widehat{\mathrm{l}}$, $\widehat{\mathrm{l}}^2$, και $\widehat{l}_i$, $(i = x, y, z)$ επιδρούν μόνο σε συναρτήσεις της πολικής γωνίας ϑ και της αζιμουθιακής γωνίας φ, είναι φανερό ότι αυτοί αντιμετατίθενται με τον τελεστή $\widehat{H}$.

Λόγω της (Γ΄.58) και της γενικής σχέσης (2.69), που ισχύει για ένα παρατηρήσιμο μέγεθος που δεν εξαρτάται άμεσα από το χρόνο:

$$i\hbar\frac{d\langle\widehat{A}\rangle}{dt} = \langle[\widehat{A}, \widehat{H}]\rangle$$

προκύπτει ότι η μέση τιμή της στροφορμής και των συνιστωσών της είναι σταθερές της κίνησης. Δηλαδή σε προβλήματα κεντρικής κίνησης, υπάρχει διατήρηση των παρατηρήσιμων μεγεθών του μέτρου της στροφορμής και της προβολής της επάνω σε έναν άξονα. Από τις παραπάνω σχέσεις καθώς και τις σχέσεις αντιμετάθεσης των προβολών της στροφορμής, προκύπτει ότι, *σε κεντρικά πεδία δυνάμεων, τα φυσικά μεγέθη H, l^2 και l_z είναι συμβιβαστά και οι αντίστοιχοι τελεστές $\widehat{H}$, $\widehat{\mathrm{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$ έχουν ένα κοινό πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων.*

Ιδιότητα 5. Οι μέσες τιμές των τελεστών $\widehat{l}_x$ και $\widehat{l}_y$ ως προς τις κοινές ιδιοσυναρτήσεις των $\widehat{\mathrm{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$ είναι μηδέν. Δηλαδή:

$$\boxed{\langle\widehat{l}_x\rangle_{Y_{lm}} = 0, \qquad \langle\widehat{l}_y\rangle_{Y_{lm}} = 0} \tag{Γ΄.59}$$

όπου τα l και m χαρακτηρίζουν τις ιδιοτιμές των $\widehat{\mathrm{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$ και Y_{lm} οι κοινές ιδιοσυναρτήσεις των $\widehat{\mathrm{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$.

Απόδειξη. Οι σχέσεις αυτές αποδεικνύονται αν χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις αντιμετάθεσης (Γ΄.54), την εξίσωση ιδιοτιμών $\widehat{l}_z Y_{lm} = \mu_m Y_{lm}$ και ότι η ιδιοτιμή μ_m είναι πραγματικός αριθμός, αφού ο $\widehat{l}_z$ είναι ερμιτιανός. Έτσι, η μέση τιμή του $\langle\widehat{l}_x\rangle_{Y_{lm}}$ γράφεται:

$$\begin{aligned}\langle\widehat{l}_x\rangle_{Y_{lm}} &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\widehat{l}_y, \widehat{l}_z]\rangle_{Y_{lm}} = \frac{1}{i\hbar}\langle\widehat{l}_y\widehat{l}_z - \widehat{l}_z\widehat{l}_y\rangle_{Y_{lm}} = \frac{1}{i\hbar}\Big[\big(Y_{lm}, \widehat{l}_y\widehat{l}_z Y_{lm}\big) - \big(Y_{lm}, \widehat{l}_z\widehat{l}_y Y_{lm}\big)\Big]\\ &= \frac{1}{i\hbar}\Big[\mu_m\big(Y_{lm}, \widehat{l}_y Y_{lm}\big) - \big(\widehat{l}_z Y_{lm}, \widehat{l}_y Y_{lm}\big)\Big] = \frac{1}{i\hbar}\Big[\mu_m\big(Y_{lm}, \widehat{l}_y Y_{lm}\big) - \mu_m^*\big(Y_{lm}, \widehat{l}_y Y_{lm}\big)\Big] = 0\end{aligned}$$

αφού $\mu_m = \mu_m^*$. Με όμοιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε και τη δεύτερη σχέση.

Ιδιότητα 6. Οι ιδιοτιμές των τελεστών $\widehat{\mathrm{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$.

Όταν μελετήσουμε τα προβλήματα της Κβαντομηχανικής σε κεντρικά πεδία δυνάμεων, η λύση της εξίσωσης του Shcrödinger θα δώσει επίσης τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών $\widehat{\mathrm{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$. Ένας άλλος τρόπος είναι να χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις αντιμετάθεσης (Γ΄.54). Η μέθοδος αυτή είναι πολύ χρήσιμη επειδή μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε εκείνες τις περιπτώσεις που δεν υπάρχει κλασικό ανάλογο. Επειδή η διαδικασία δεν είναι τόσο απλή όπως στην απόδειξη των προηγούμενων ιδιοτήτων, θα χρησιμοποιήσουμε για συντομογραφία το συμβολισμό του Dirac και θα δώσουμε ορισμένες σχέσεις, η απόδειξη των οποίων αφήνεται ως άσκηση.

1ο βήμα. Αν ονομάσουμε $Y_{lm} = |lm\rangle$ το κοινό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων των $\widehat{\mathrm{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$, τότε μπορούμε να γράψουμε τις εξισώσεις ιδιοτιμών:

$$\widehat{\mathrm{l}}^2|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1)|lm\rangle, \qquad \widehat{l}_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle \tag{Γ΄.60α΄}$$

Η σταθερά $\hbar$ μπήκε για διαστατικούς λόγους. Επειδή οι τελεστές $\widehat{\mathbf{l}}^2$ και $\widehat{l}_z$ είναι ερμιτιανοί, οι αριθμοί l και m είναι πραγματικοί και οι ιδιοσυναρτήσεις είναι ορθοκανονικές:

$$\langle l'm'|lm\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

Επειδή $\langle lm|\hat{\mathbf{l}}^2|lm\rangle \geq 0$ πρέπει να ισχύει $l(l+1) \geq 0$. Από αυτήν προκύπτει $\boxed{l \geq 0}$.

Επίσης, επειδή $\langle \widehat{l}_x^2\rangle \geq 0$, $\langle \widehat{l}_y^2\rangle \geq 0$ και $\langle \widehat{l}_z^2\rangle \geq 0$ θα έχουμε:

$$\langle \widehat{\mathbf{l}}^2\rangle = \langle \widehat{l}_x^2\rangle + \langle \widehat{l}_y^2\rangle + \langle \widehat{l}_z^2\rangle \geq \langle \widehat{l}_z^2\rangle \qquad \Rightarrow \quad l(l+1) \geq m^2 \tag{Γ΄.60β΄}$$

Δηλαδή, υπάρχει ένα άνω όριο και ένα κάτω όριο για τις δυνατές τιμές του m.

2ο βήμα. Εισαγάγουμε τους τελεστές:

$$\widehat{l}_\pm = \widehat{l}_x \pm i\widehat{l}_y \tag{Γ΄.61}$$

Οι τελεστές $\widehat{l}_+$ και $\widehat{l}_-$ λέγονται **τελεστές αναβίβασης** (raising) και **υποβιβασμού** (lowering), αντίστοιχα. Ο λόγος της ονομασίας τους θα φανεί παρακάτω.

Για τους τελεστές $\widehat{l}_+$ και $\widehat{l}_-$ ισχύουν τα παρακάτω, ή απόδειξη των οποίων αφήνεται ως άσκηση:

• Ο $\widehat{l}_+$ είναι ερμιτιανός συζυγής του $\widehat{l}_-$ και αντίστροφα, δηλαδή ισχύει η σχέση:

$$\langle \widehat{l}_+\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\widehat{l}_-\psi\rangle \tag{Γ΄.62}$$

• Ισχύουν οι σχέσεις αντιμετάθεσης:

$$[\widehat{l}_+, \widehat{l}_-] = 2\hbar\widehat{l}_z, \quad [\widehat{l}_z, \widehat{l}_\pm] = \pm\hbar\widehat{l}_\pm, \quad [\widehat{\mathbf{l}}^2, \widehat{l}_\pm] = 0 \tag{Γ΄.63}$$

• Ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$\widehat{l}_+\widehat{l}_- = \widehat{\mathbf{l}}^2 - \widehat{l}_z^2 + \hbar\widehat{l}_z \quad \Rightarrow \quad \widehat{\mathbf{l}}^2 = \widehat{l}_+\widehat{l}_- + \widehat{l}_z^2 - \hbar\widehat{l}_z \tag{Γ΄.64α΄}$$

$$\widehat{l}_-\widehat{l}_+ = \widehat{\mathbf{l}}^2 - \widehat{l}_z^2 - \hbar\widehat{l}_z \quad \Rightarrow \quad \widehat{\mathbf{l}}^2 = \widehat{l}_-\widehat{l}_+ + \widehat{l}_z^2 + \hbar\widehat{l}_z \tag{Γ΄.64β΄}$$

3ο βήμα. Επειδή $\widehat{\mathbf{l}}^2\widehat{l}_\pm = \widehat{l}_\pm\widehat{\mathbf{l}}^2$ (από τη σχέση (Γ΄.63γ)), έχουμε:

$$\boxed{\widehat{\mathbf{l}}^2\left(\widehat{l}_\pm|lm\rangle\right) = \widehat{l}_\pm\left(\widehat{\mathbf{l}}^2|lm\rangle\right) = \hbar^2 l(l+1)\left(\widehat{l}_\pm|lm\rangle\right)}$$

Δηλαδή, η κατάσταση $\widehat{l}_\pm|lm\rangle$ είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $\widehat{\mathbf{l}}^2$ που χαρακτηρίζεται από το ίδιο l, όπως και η ιδιοσυνάρτηση $|lm\rangle$.

Επίσης, επειδή $\widehat{l}_z\widehat{l}_\pm = \widehat{l}_\pm\widehat{l}_z \pm \hbar\widehat{l}_\pm$ (από τη σχέση (Γ΄.63β)), έχουμε:

$$\widehat{l}_z\left(\widehat{l}_+|lm\rangle\right) = (\widehat{l}_+\widehat{l}_z + \hbar\widehat{l}_+)|lm\rangle = \hbar(m+1)\left(\widehat{l}_+|lm\rangle\right)$$

και

$$\widehat{l}_z\left(\widehat{l}_-|lm\rangle\right) = (\widehat{l}_-\widehat{l}_z - \hbar\widehat{l}_-)|lm\rangle = \hbar(m-1)\left(\widehat{l}_-|lm\rangle\right)$$

Οι εξισώσεις αυτές δηλώνουν ότι: η κατάσταση $\widehat{l}_+|lm\rangle$ είναι ιδιοκατάσταση του $\widehat{l}_z$ που αντιστοιχεί σε ιδιοτιμή αυξημένη κατά 1 ως προς το m, ενώ η κατάσταση $\widehat{l}_-|lm\rangle$ είναι ιδιοκατάσταση του $\widehat{l}_z$ που αντιστοιχεί σε τιμή που ελαττώθηκε κατά 1 ως προς το m.. Έτσι, μπορούμε να γράψουμε:

$$\boxed{\widehat{l}_+|lm\rangle = C_+(l,m)|l,m+1\rangle, \qquad \widehat{l}_-|lm\rangle = C_-(l,m)|l,m-1\rangle} \tag{Γ΄.65}$$

όπου $C_\pm(l,m)$ σταθερές που θα υπολογιστούν στη συνέχεια.

Από την πρώτη σχέση έχουμε, αν χρησιμοποιήσουμε τη σχέση (Γ΄.64β΄):

$$|C_+(l,m)|^2\langle l,m+1|l,m+1\rangle = \langle \widehat{l}_+(lm)|\widehat{l}_+(lm)\rangle = \langle lm|\widehat{l}_-\widehat{l}_+|lm\rangle \tag{Γ΄.66α΄}$$

$$= \langle lm|\widehat{\mathbf{l}}^2 - \widehat{l}_z^2 - \hbar\widehat{l}_z|lm\rangle = \hbar^2[l(l+1)-m^2-m]$$
$$= \hbar^2[l(l+1)-m(m+1)] = \hbar^2[(l-m)(l+m+1)] \geq 0 \tag{Γ΄.66β΄}$$

αφού $|C_+(l,m)|^2 \geq 0$ και $\langle l,m+1|l,m+1\rangle = 1$.

Όμοια βρίσκεται ότι:

$$|C_-(l,m)|^2\langle l,m-1|l,m-1\rangle = \hbar^2[l(l+1)-m(m-1)] = \hbar^2[(l+m)(l-m+1)] \geq 0 \tag{Γ΄.66γ΄}$$

Διαλέγοντας το $C_\pm(l,m)$ θετικούς αριθμούς και επειδή $\langle l,m\pm 1|l,m\pm 1\rangle = 1$, έχουμε:

$$C_+(l,m) = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)} \tag{Γ΄.67α΄}$$

$$C_-(l,m) = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \tag{Γ΄.67β΄}$$

Από τις σχέσεις (Γ΄.66β΄) και (Γ΄.66γ΄) διαπιστώνουμε ότι:

$$l(l+1) \geq m(m+1) \quad \text{και} \quad l(l+1) \geq m(m-1)$$

και επειδή $l \geq 0$ καταλήγουμε σε ένα κατώτερο και σε ένα ανώτερο φράγμα των δυνατών τιμών του m. Πρέπει να ισχύει η σχέση:

$$\boxed{-l \leq m \leq l} \tag{Γ΄.68}$$

Ας υποθέσουμε τώρα ότι m_{min} είναι η ελάχιστη τιμή του m, τότε:

$$\widehat{l}_-|lm_{min}\rangle = 0$$

αφού η δράση του $\widehat{l}_-$ θα υποβιβάσει το m_{min} κατά ένα, αλλά μια τέτοια κατάσταση δεν μπορεί να υπάρξει. Παρατηρώντας το συντελεστής $C_-(l,m_{min})$, διαπιστώνουμε ότι αυτός γίνεται μηδέν όταν $m_{min} = -l$. Επομένως, η ελάχιστη τιμή το m είναι: $\boxed{m_{min} = -l}$.

Αν m_{max} είναι η μέγιστη τιμή του m, τότε:

$$\widehat{l}_+|lm_{max}\rangle = 0$$

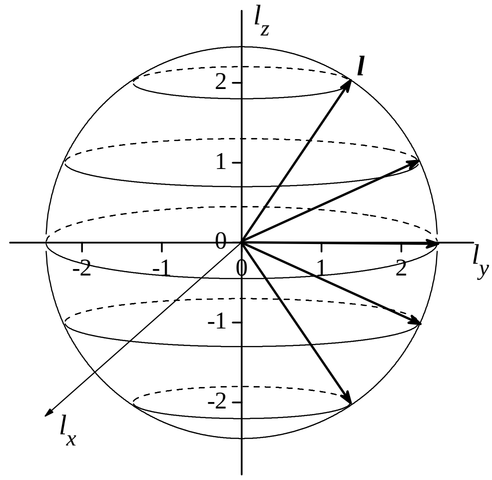
αφού η δράση του $\widehat{l}_+$ θα αυξήσει το m_{max} κατά ένα, αλλά μια τέτοια κατάσταση δεν μπορεί να υπάρξει. Παρατηρώντας το συντελεστής $C_+(l,m_{min})$, διαπιστώνουμε ότι αυτός γίνεται μηδέν όταν $m_{max} = l$. Επομένως η μέγιστη τιμή το m είναι: $\boxed{m_{max} = l}$.

Επειδή η μέγιστη τιμή του m πρέπει να προκύψει από την ελάχιστη τιμή του, με διαδοχικές προσθέσεις του 1, συμπεραίνουμε ότι **υπάρχουν $\mathbf{2l+1}$ τιμές του $\mathbf{m}$ για κάθε $\mathbf{l}$**. Δηλαδή οι τιμές του m είναι:

$$\boxed{m = -l,\ -l+1,\ -l+2, \cdots, l-1,\ l}$$

Τέλος επειδή το $2l+1$ είναι ακέραιος αριθμός, αφού είναι ο αριθμός των βημάτων από το $-l$ στο l, το l μπορεί να παίρνει ακέραιες τιμές (όπως στην περίπτωση της τροχιακής στροφορμής) ή ημιακέραιες τιμές (όπως στην περίπτωση του σπιν).

Τα προηγούμενα παριστάνονται, σε ορισμένα βιβλία, με διαγράμματα της μορφής του Σχ. Γ΄.1 (που έγινε για την περίπτωση $l = 2$). Τα διανύσματα του σχήματος, υποτίθεται, ότι παριστάνουν τις πιθανές στροφορμές σε μονάδες $\hbar$ που έχουν όλες το ίδιο μέτρο $\sqrt{l(l+1)} = \sqrt{2(2+1)} = \sqrt{6}$ και οι συνιστώσες παίρνονται από τις επιτρεπτές τιμές του m $(-2,-1,0,1,2)$. Σημειώνεται ότι το μέτρο των διανυσμάτων είναι μεγαλύτερο από τη μέγιστη τιμή της $z-$συνιστώσας. Αυτό σημαίνει ότι η στροφορμή δεν μπορεί να έχει τη διεύθυνση του $z-$άξονα. Εκ πρώτης όψεως αυτό φαίνεται μη λογικό επειδή θα μπορούσαμε να διαλέξουμε το $z-$άξονα κατά μήκος της στροφορμής. Όμως κάτι τέτοιο δεν μπορεί να γίνει επειδή τότε θα γνωρίζαμε και τις τρεις συνιστώσες της στροφορμής, αφού σύμφωνα με την αρχή της απροσδιοριστίας αυτό δεν είναι δυνατό. Αν η συνιστώσα $\widehat{l_z}$ έχει μια καθορισμένη τιμή, οι συνιστώσες $\widehat{l_x}$ και $\widehat{l_y}$ δεν έχουν. Δεν έχει νόημα ακόμη να χρησιμοποιούμε διανύσματα όπως στο Σχ. Γ΄.1. Τουλάχιστον πρέπει να φανταζόμαστε ότι το διάνυσμα της στροφορμής καλύπτει την επιφάνεια ενός κώνου ώστε να υποδηλώνεται ότι οι συνιστώσες l_x και l_y είναι ακαθόριστες.



Σχήμα Γ΄.1: .

Τέλος είναι εντυπωσιακό ότι χρησιμοποιώντας μόνο τις σχέσεις αντιμετάθεσης των συνιστωσών του τελεστή της στροφορμής μπορέσαμε να αποδείξουμε τις πιο βασικές σχέσεις και ιδιότητες της στροφορμής, χωρίς να έχουμε βρει τις ιδιοσυναρτήσεις. Αυτές μπορούν να βρεθούν με παρόμοια (αλλά κάπως πιο πολύπλοκη) διαδικασία με αυτήν που χρησιμοποιήθηκε για τις ιδιοτιμές. Δεν θα ασχοληθούμε σε αυτό το σημείο με τις ιδιοσυναρτήσεις. Θα επανέλθουμε όμως όταν εξετάσουμε τα προβλήματα σφαιρικής συμμετρίας.

Γ΄.8 Ασκήσεις παραρτήματος

1. Να δειχθεί ότι: $\widehat{A}^2 - \widehat{B}^2 = (\widehat{A}+\widehat{B})(\widehat{A}-\widehat{B}) + [\widehat{A},\widehat{B}]$.
Σημείωση. Η γνωστή ταυτότητα: $\alpha^2-\beta^2 = (\alpha+\beta)(\alpha-\beta)$, ισχύει στους τελεστές μόνο όταν οι τελεστές αντιμετατίθενται.

2. Δίνεται ο τελεστής $T_a = \mathrm{e}^{a\frac{d}{dx}}$ και η συνάρτηση $f(x) = x^2$. Να δειχθεί ότι: $T_a f(x) = f(x+a)$.

3. Να δειχθεί ότι, αν $\widehat{D} = [\widehat{A},\widehat{B}]$ και $[\widehat{A},\widehat{D}] = [\widehat{B},\widehat{D}] = 0$, τότε ισχύουν οι σχέσεις:

$$\alpha)\quad [\widehat{A},\widehat{B}^n] = n\widehat{B}^{n-1}[\widehat{A},\widehat{B}], \qquad [\widehat{A}^n,\widehat{B}] = n\widehat{A}^{n-1}[\widehat{A},\widehat{B}]$$

$$\beta)\quad [\widehat{A},F(\widehat{B})] = [\widehat{A},\widehat{B}]F'(\widehat{B}), \qquad [F(\widehat{A}),\widehat{B}] = [\widehat{A},\widehat{B}]F'(\widehat{A})$$

όπου $F(z)$ μια αναλυτική συνάρτηση του z και $F'(z)$ η παράγωγός της.

4. Αν ο τελεστής $\widehat{A}$ αντιστοιχεί στο παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος $A(x_i,p_i)$ να δειχθεί ότι ισχύουν οι σχέσεις:

$$[x_i,\widehat{A}] = i\hbar\,\frac{\partial\widehat{A}}{\partial\widehat{p_i}}, \quad [\widehat{p}_i,\widehat{A}] = -i\hbar\,\frac{\partial\widehat{A}}{\partial\widehat{x_i}}$$

Σημείωση. Στις σχέσεις αυτές, οι μερικές παράγωγοι έχουν συμβολικό χαρακτήρα και δηλώνουν ότι αφού βρεθούν οι παράγωγοι $\frac{\partial A}{\partial x_i}$ και $\frac{\partial A}{\partial p_i}$ γίνονται οι αντικαταστάσεις $x_i \to \widehat{x}_i$ και $p_i \to \widehat{p}_i$.

5. Να ελεγχθεί ποιά από τα παρακάτω ζεύγη φυσικών μεγεθών μπορούν να μετρηθούν συγχρόνως με όση ακρίβεια επιθυμούμε και ποιά όχι:

$$(x, l_x), \quad (x, l_y), \quad (x, l_z), \quad (p_x, l_x), \quad (p_x, l_y), \quad (p_x, l_z)$$

6. Να βρεθούν οι αντιμεταθέτες:

$$\big[x^2, \widehat{l}_x\big], \quad \big[y^2, \widehat{l}_y\big], \quad \big[z^2, \widehat{l}_z\big]$$

Δίνεται ότι: $\big[x, \widehat{p}_x\big] = i\hbar$ και ότι ο $\widehat{x}$ αντιμετατίθεται με τους τελεστές $\widehat{y}$, $\widehat{z}$, $\widehat{p}_y$ και $\widehat{p}_z$.

7. Να δειχθεί ότι αν y_1 και y_2 είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{A}$ που ανήκουν στην ίδια ιδιοτιμή, τότε κάθε γραμμικός συνδυασμός είναι πάλι ιδιοσυνάρτηση του $\widehat{A}$ που ανήκει στην ίδια ιδιοτιμή.

8. Να δειχθεί ότι: $\widehat{\mathbf{l}} \times \widehat{\mathbf{l}} = i\hbar\widehat{\mathbf{l}}$. Οι σχέσεις αντιμετάθεσης μεταξύ των $\widehat{l}_x$, $\widehat{l}_y$ και $\widehat{l}_z$ θεωρούνται γνωστές.

9. Να δειχθεί ότι αν ο τελεστής του Hamilton ενός σωματιδίου είναι αναλλοίωτος σε έναν μετασχηματισμό συντεταγμένων, τότε ο $\widehat{H}$ αντιμετατίθεται με αυτόν τον μετασχηματισμό. Δηλαδή

$$\text{αν} \quad \widehat{T}\, f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}'), \quad \text{και} \quad \widehat{T}\widehat{H}(\mathbf{r}) = \widehat{H}(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \big[\widehat{T}, \widehat{H}\big] = 0$$

10. Σ' ένα μονοδιάστατο πρόβλημα το δυναμικό είναι περιοδική συνάρτηση με περίοδο a. Να δειχθεί ότι: $\big[\widehat{T}_a, \widehat{H}\big] = 0$, όπου $\widehat{T}_a$ ο τελεστής μετάθεσης.

11. Σ' ένα μονοδιάστατο πρόβλημα το δυναμικό παραμένει αναλλοίωτο σε μετασχηματισμό αντιστροφής: $V(x) = V(-x)$. Να δειχθεί ότι: $\big[\widehat{\Pi}, \widehat{H}\big] = 0$, όπου $\widehat{\Pi}$ ο τελεστής της parity.

12. $\widehat{T}_a$ είναι ο τελεστής μετάθεσης: $\widehat{T}_a\psi(x) = \psi(x + a)$. Να δειχθεί ότι:

α) Ο $\widehat{T}_a$ μπορεί να παρασταθεί με τη μορφή: $\widehat{T}_a = \mathrm{e}^{ia\widehat{p}_x/\hbar}$, όπου $\widehat{p}_x = -i\hbar\,\frac{d}{dx}$.

β) Αν η συνάρτηση $g(x)$ είναι μια περιοδική συνάρτηση με περίοδο a, τότε η συνάρτηση $\psi(x) = \mathrm{e}^{inx}g(x)$, όπου n πραγματικός αριθμός, είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή $\widehat{T}_a$ με ιδιοτιμή e^{ina}.

13. Για τους τελεστές $\widehat{A}$, $\widehat{B}$ και $\widehat{C}$ ισχύουν οι σχέσεις $\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = \big[\widehat{A}, \widehat{C}\big] = 0$ και $\big[\widehat{B}, \widehat{C}\big] \neq 0$. Να δειχθεί ότι οι ιδιοτιμές του $\widehat{A}$ είναι εκφυλισμένες.

14. Να αποδειχθούν οι παρακάτω ιδιότητες του ερμιτιανού συζυγούς:

$$\big(\widehat{A}^\dagger\big)^\dagger = \widehat{A}, \qquad \big(\widehat{A}_1 \pm \widehat{A}_2\big)^\dagger = \widehat{A}_1^\dagger \pm \widehat{A}_2^\dagger \tag{Γ.69}$$

$$\big(a\widehat{A}\big)^\dagger = a^*\widehat{A}^\dagger, \qquad \big(\widehat{A}_1\widehat{A}_2\big)^\dagger = \widehat{A}_2^\dagger\widehat{A}_1^\dagger \tag{Γ.70}$$

15. Να δειχθεί ότι αν οι ερμιτιανοί τελεστές $\widehat{A}$ και $\widehat{B}$ αντιμετατίθενται τότε ο πίνακας του τελεστή $\widehat{B}$, ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις του $\widehat{A}$,είναι διαγώνιος.

16. Να δειχθεί ότι αν $\big[\widehat{A}, \widehat{B}\big] = k =$ ένας αριθμός, τότε:

$$\mathrm{e}^{\lambda(\widehat{A}+\widehat{B})} = \mathrm{e}^{\lambda\widehat{A}}\,\mathrm{e}^{\lambda\widehat{A}}\,\mathrm{e}^{-\lambda^2k/2}$$

όπου λ είναι μια παράμετρος.