Κβαντομηχανική

Μαυρόπουλος Φοίβος

ΕΚΠΑ, 2021

Εισαγωγικές σημειώσεις Κβαντικής Μηχανικής

Φοίβος Μαυρόπουλος
Τμήμα Φυσικής, ΕΚΠΑ

Αθήνα 2022

Περιεχόμενα

1 Αδυναμίες της κλασικής Φυσικής

Παραθέτουμε μερικά παραδείγματα φυσικών φαινομένων όπου αποτυγχάνει κάθε απόπειρα εξήγησης με βάση την κλασική Φυσική. (Τέλη 19^{ου}-αρχές 20^{ου} αιώνα).

- Ακτινοβολία μέλανος σώματος. *Μέλαν σώμα* χαρακτηρίζεται ένα σώμα που απορροφά όλη την ακτινοβολία που προσπίπτει σε αυτό. Η απορροφούμενη ακτινοβολία μετατρέπεται σε θερμότητα, και το σώμα επανεκπέμπει λόγω της θερμοκρασίας του. (Π.χ.: Ήλιος. Π.χ. μικρή οπή σε κοιλότητα με μονωμένα τοιχώματα.) Το φάσμα της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας δεν εξηγείται από την κλασική φυσική. Ερμηνεύθηκε από τον Max Planck (1900) βάσει κβαντικής υπόθεσης.(1)

- Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (1887). Ηλεκτρόνια εκπέμπονται από μεταλλικές επιφάνειες λόγω απορρόφησης ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Ένα πρόβλημα είναι ότι η εκπομπή σταματά όταν η συχνότητα της ακτινοβολίας πέσει κάτω από μια κρίσιμη τιμή. Ερμηνεύθηκε από τον Albert Einstein (1905) βάσει κβαντικής υπόθεσης. Πειραματική επιβεβαίωση από τον Robert Millikan (1915).(2)

- Φαινόμενο Compton. Πρόκειται για σκέδαση ηλεκτρονίων–φωτονίων. Ο κλασικός τύπος για τη γωνία σκέδασης δεν συμφωνεί με τα πειραματικά δεδομένα. Εξήγηση με βάση την κβαντική θεωρία.(3)

- Σταθερότητα των ατόμων. Στο κλασικό «πλανητικό» μοντέλο, τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται σε τροχιές γύρω από τα άτομα, άρα βρίσκονται σε διαρκή επιτάχυνση. Λόγω του φορτίου τους και της επιτάχυνσης, θα έπρεπε να εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, να χάνουν διαρκώς ενέργεια, και να πέφτουν στον πυρήνα σε περίπου 1 ns. Ερμηνεύθηκε από τους Niels Bohr και Ernest Rutherford (1913) βάσει κβαντικής υπόθεσης.(4)

- Μαγνητισμός της ύλης σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας. Το θεώρημα van Leeuwen (1919) δείχνει ότι ένα κλασικό σύστημα κινούμενων φορτίων σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας δεν μπορεί να έχει μαγνήτιση. Προφανής αντίφαση με την ύπαρξη μόνιμων μαγνητών. Εξήγηση με βάση την κβαντική θεωρία της ύλης.

(1) Βλ. π.χ. S. Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015), κεφ. 1.
(2) Ομοίως.
(3) Ομοίως.
(4) Ομοίως.

2 Οι φυσικές καταστάσεις στην κβαντική μηχανική

Η κβαντική μηχανική περιγράφει, στις περισσότερες περιπτώσεις, τη δυναμική στο μικρόκοσμο (ηλεκτρόνια, ατομικοί πυρήνες, άτομα, μόρια), ενώ στο μακρόκοσμο συνήθως δεν παρατηρούμε απευθείας κβαντική συμπεριφορά (αλλά παρατηρούμε τις συνέπειές της σε διάφορα φαινόμενα).

Οι καταστάσεις διαφέρουν εννοιολογικά σε σχέση με την κλασική Φυσική. Οι κβαντικές καταστάσεις οδηγούν σε *κατανομές πιθανότητας με κάτω φράγμα στη διασπορά* μετρήσεων, πλην εξαιρέσεων. Αντίθετα, οι κλασικές καταστάσεις οδηγούν, ιδεατά, σε μοναδικές τιμές μετρήσεων χωρίς διασπορά. Αυτές οι έννοιες θα εξηγηθούν αργότερα.

Θα ορίσουμε κάποια μεγέθη σε συγκεκριμένο παράδειγμα. Έστω ένα σωματίδιο που κινείται σε μια χωρική διάσταση, $x \in \mathbb{R}$. Οι κβαντικές καταστάσεις του συστήματος είναι μιγαδικές συναρτήσεις, $\Psi(x) \in \mathbb{C}$, οι οποίες ονομάζονται *κυματοσυναρτήσεις* και ικανοποιούν τη συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1. \tag{1}$$

Εάν μια κυματοσυνάρτηση ικανοποιεί τη συνθήκη $0 < \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = C < \infty$, τότε ονομάζεται *τετραγωνικά ολοκληρώσιμη (square integrable)*. Εάν $C \neq 1$, η αντίστοιχη κβαντική κατάσταση είναι η $\frac{1}{\sqrt{C}}\Psi$. Σε μια κυματοσυνάρτηση Ψ κωδικοποιείται το μάξιμουμ της πληροφορίας που μπορεί κανείς να έχει για το σύστημα ως προς οποιοδήποτε μετρήσιμο μέγεθος (θέση, ορμή, ενέργεια, κ.ο.κ.).

Ίσως το απλούστερο φυσικό μέγεθος που προκύπτει από την κυματοσυνάρτηση είναι η *κατανομή πιθανότητας* $p(x)$ να βρεθεί το σωματίδιο στη θέση x:

$$p(x) = \Psi^*(x)\Psi(x) = |\Psi(x)|^2. \tag{2}$$

Συνεπώς, η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο εντός του διαστήματος $a < x < b$ είναι

$$P(a,b) = \int_a^b |\Psi(x)|^2 dx. \tag{3}$$

Η εξ. 1 έχει τη φυσική ερμηνεία ότι το σωματίδιο έχει πιθανότητα 1 να βρεθεί κάπου στο χώρο.

Αναφερθήκαμε σε πιθανότητα, η οποία έχει την ερμηνεία της σχετικής συχνότητας. Αυτό, διότι η Ψ δεν αντιπροσωπεύει ένα μόνο σύστημα, αλλά μια *συλλογή (ensemble) από συστήματα, προετοιμασμένα με πανομοιότυπο τρόπο*. Όσο αυξάνεται ο αριθμός των συστημάτων της συλλογής, τόσο η σχετική συχνότητα εύρεσης σωματιδίων σε μια πολύ μικρή περιοχή δx γύρω από τη θέση x προσεγγίζεται από την ποσότητα $|\Psi(x)|^2\delta x$. [5]

Αυτό είναι λοιπόν ένα βασικό χαρακτηριστικό των κβαντικών καταστάσεων: δεν αναφέρονται σε μεμονωμένα συστήματα, αλλά σε συλλογές πανομοιότυπα προετοιμασμένων συστημάτων.

---

[5] Είναι δυνατόν να κατασκευαστεί κυματοσυνάρτηση επαρκώς εντοπισμένη, ώστε να αναπαριστά πρακτική βεβαιότητα (πιθανότητα 1) εύρεσης κάθε σωματιδίου της συλλογής στην ίδια θέση x; Ναι, είναι δυνατόν, ως όριο εντοπισμένων κυματοσυναρτήσεων, εφόσον το σύστημα προετοιμαστεί κατάλληλα. Θα συζητηθεί στο εδάφιο 3.7.

Πώς μπορούν να υπολογιστούν άλλες ποσότητες με βάση την Ψ; Σε κάθε φυσικό μέγεθος αντιστοιχεί ένας τελεστής που μετασχηματίζει την κυματοσυνάρτηση σε μια άλλη. Ας πάρουμε, για παράδειγμα, την ορμή. Συμβολίζουμε τον τελεστή της ορμής με $\hat{p}$. Για λόγους που εν μέρει αναλύονται στο εδάφιο 5.1, ο ορισμός του είναι

$$\hat{p}\,\Psi(x) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x} \tag{4}$$

δηλ. συμπίπτει με την παράγωγο της κυματοσυνάρτησης επί $-i\hbar$, όπου $\hbar = h/2\pi$ με h τη σταθερά του Planck.[(6)] Σύμφωνα με αυτό τον ορισμό, ο τελεστής ορμής μετασχηματίζει την Ψ σε μια άλλη κυματοσυνάρτηση, την $\Phi(x) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}$. Η κβαντική θεωρία μάς υπαγορεύει ότι η μέση τιμή των μετρήσεων της ορμής στη συλλογή που αντιστοιχεί στην Ψ είναι

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}\rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,\hat{p}\,\Psi(x)dx & (5)\\ &= -i\hbar\int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}dx & (6)\end{aligned}$$

με προφανή συμβολισμό στο αριστερό μέλος.

Το ίδιο, φυσικά, μπορούμε να κάνουμε και για τη θέση του σωματιδίου. Όπως σε κάθε φυσικό μέγεθος, έτσι και στη θέση αντιστοιχεί ένας τελεστής. Συμβολίζεται με $\hat{x}$ και δρα πολλαπλασιαστικά: $\hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x)$. Έτσι, μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση τιμή της θέσης

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,\hat{x}\,\Psi(x)dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,x\,\Psi(x)dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x)|^2\,x\,dx & (7)\end{aligned}$$

σε συμφωνία και με τον τύπο (2).

Ήδη διαφαίνεται η σημασία της μιγαδικής κυματοσυνάρτησης $\Psi(x)$, σε σχέση με το να είχαμε μόνο μια πραγματική (θετική) κατανομή πιθανότητας στο χώρο $p(x)$. Η $|\Psi(x)|^2$ περιέχει εμφανώς λιγότερη πληροφορία από την $\Psi(x)$. Εάν γράψουμε $\Psi(x) = |\Psi(x)|e^{i\theta(x)}$ ($\theta(x) \in \mathbb{R}$), βλέπουμε ότι η *φάση* $\theta(x)$ θα συνεισφέρει στην ορμή λόγω της παραγώγισης (4), παρόλο που στη θέση συνεισφέρει μόνο η απόλυτη τιμή $|\Psi(x)|$.

Ωστόσο, κάθε μέτρηση φυσικού μεγέθους πρέπει να δίνει ως τιμή έναν πραγματικό αριθμό, επομένως και η μέση τιμή πρέπει να είναι πραγματικός αριθμός. Αυτό εξασφαλίζεται από την εξής απαίτηση της κβαντικής θεωρίας: οι τελεστές που αντιστοιχούν σε μετρήσιμα μεγέθη πρέπει να είναι *ερμιτιανοί (hermitian)*. Εξ' ορισμού, ένας τελεστής $\hat{A}$ λέγεται ερμιτιανός, εάν πληροί τις ακόλουθες δύο προϋποθέσεις. Πρώτον, να είναι

[(6)] Το $\hbar \approx 1,055 \times 10^{-34}$Js είναι μια φυσική σταθερά εξίσου θεμελιώδης με την ταχύτητα του φωτός στο κενό c. Όπως η θεωρία της σχετικότητας αποκαλύπτει τη σύνδεση του χώρου με το χρόνο μέσω του συντελεστή αναλογίας c, έτσι και η κβαντική θεωρία αποκαλύπτει τη σύνδεση χρόνου-ενέργειας, ή, ακριβέστερα, συχνότητας-ενέργειας, μέσω του συντελεστή αναλογίας $\hbar$.

γραμμικός, δηλαδή, για κυματοσυναρτήσεις Ψ_1 και Ψ_2 και (μιγαδικούς) αριθμούς c_1 και c_2, να ισχύει

$$\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{A}\Psi_1 + c_2\hat{A}\Psi_2 \tag{8}$$

(υπό την αίρεση, βέβαια, να βρίσκονται οι κυματοσυναρτήσεις στο πεδίο ορισμού). Δεύτερον, για κάθε συνάρτηση $\Psi \in \mathbb{C}$ (τέτοια ώστε να συγκλίνει το παρακάτω ολοκλήρωμα), να ισχύει

$$\int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,\hat{A}\,\Psi(x)dx \in \mathbb{R}. \tag{9}$$

Παραδείγματα ερμιτιανών τελεστών είναι οι τελεστές θέσης και ορμής. Πράγματι,

$$\int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,\hat{x}\,\Psi(x)dx = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,x\,\Psi(x)dx = \int_{\mathbb{R}} x\,|\Psi(x)|^2 dx \in \mathbb{R} \tag{10}$$

(αφού όλες οι ολοκληρωτέες ποσότητες είναι πραγματικές). Εξάλλου,

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,\hat{p}\,\Psi(x)dx &= -i\hbar \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}dx \\
&= -i\hbar\,[\Psi^*(x)\Psi(x)]_{-\infty}^{\infty} + i\hbar \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial\Psi(x)^*}{\partial x}\,\Psi(x)dx \\
&= 0 + \left(-i\hbar \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}dx\right)^* \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\,\hat{p}\,\Psi(x)dx\right)^*,
\end{aligned} \tag{11}$$

δηλαδή η τιμή του αριστερού μέλους ισούται με το μιγαδικό συζυγές της, επομένως είναι πραγματική. Εδώ χρησιμοποιήσαμε παραγοντική ολοκλήρωση και το γεγονός ότι οι κυματοσυναρτήσεις μηδενίζονται στο $x \to \pm\infty$ (διαφορετικά δεν θα ήταν τετραγωνικά ολοκληρώσιμες).

Στις ως τώρα εξισώσεις παρουσιάζεται συχνά η έκφραση του τύπου $\int \Psi^*\Phi dx$. Αυτή ονομάζεται *εσωτερικό γινόμενο* της Ψ με τη Φ και συμβολίζεται ως εξής:

$$(\Psi, \Phi) \equiv \int \Psi^*(x)\,\Phi(x)\,dx. \tag{12}$$

Π.χ., $(\Psi, \hat{A}\,\Psi) \equiv \int \Psi^*(x)\,\hat{A}\,\Psi(x)\,dx$. Είναι εύκολο να αποδειχθούν οι ακόλουθες ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου:[7]

$$\begin{aligned}
(\Psi, \Phi) &= (\Phi, \Psi)^* \\
(\Psi, c_1\,\Phi_1 + c_2\,\Phi_2) &= c_1\,(\Psi, \Phi_1) + c_2\,(\Psi, \Phi_2) \text{ (γραμμικότητα ως προς το } 2^{\text{ο}} \text{ όρισμα)} \\
(c_1\,\Psi_1 + c_2\,\Psi_2, \Phi) &= c_1^*\,(\Psi_1, \Phi) + c_2^*\,(\Psi_2, \Phi) \text{ (αντιγραμμικότητα ως προς το } 1^{\text{ο}} \text{ όρισμα)}
\end{aligned} \tag{13}$$

Η ποσότητα $\|\Psi\| = \sqrt{(\Psi, \Psi)}$ ονομάζεται *νόρμα* της Ψ και είναι προδήλως θετική, αν $\Psi \neq 0$, ή μηδέν, αν $\Psi(x) = 0$ (σε όλο το πεδίο ορισμού πλην ενδεχομένως διακριτών σημείων). Δύο κυματοσυναρτήσεις Ψ και Φ ονομάζονται *ορθογώνιες*, αν $(\Psi, \Phi) = 0$. Επίσης, ισχύει η ακόλουθη *ανισότητα Cauchy-Schwarz*:

$$(\Phi, \Phi)(\Psi, \Psi) \geq |(\Phi, \Psi)|^2 \tag{14}$$

---

[7] Πρόβλημα 3.1.

από την οποία προκύπτει ότι, για κανονικοποιημένες κυματοσυναρτήσεις (δηλ. $(\Phi,\Phi) = (\Psi,\Psi) = 1$), έχουμε $0 \leq |(\Phi,\Psi)| \leq 1$.

Ο συμβολισμός του εσωτερικού γινομένου επιτρέπει την ακόλουθη συντομογραφία για τις ιδιότητες ερμιτιανών τελεστών $\hat{A}$:

$$
\begin{aligned}
(\Psi, \hat{A}\,\Psi) &\in \mathbb{R} \qquad (15)\\
(\Phi, \hat{A}\,\Psi) &= (\hat{A}\,\Phi, \Psi), \qquad (16)
\end{aligned}
$$

για κάθε Φ και Ψ στο πεδίο ορισμού. Η πρώτη ιδιότητα είναι συντομογραφία της εξ. (9) του ορισμού, ενώ η δεύτερη προκύπτει εύκολα από τον ορισμό.[8]

[8] Πρόβλημα 3.2.

3 Η μέτρηση στην κβαντική μηχανική

Έστω ένα σύστημα στο οποίο γίνεται μια σειρά από μετρήσεις, και το οποίο *προετοιμάζουμε πριν από κάθε μέτρηση με τον ίδιο τρόπο.*[(9)] Όπως είπαμε, η πανομοιότυπη προετοιμασία μάς δίνει μια συλλογή που εκφράζεται, μαθηματικά, με την κυματοσυνάρτηση Ψ. Αυτή περιέχει, κωδικοποιημένη, την κατανομή πιθανότητας για τις τιμές όλων των παρατηρήσιμων μεγεθών. Ας υποθέσουμε ότι μετράμε κάθε φορά το ίδιο μέγεθος. Οι τιμές των μετρήσεων θα παρουσιάζουν, εν γένει, μια διασπορά (πλην ειδικών περιπτώσεων που θα συζητηθούν πιο κάτω). Κάθε μέτρηση θα δώσει, προφανώς, μια μόνο τιμή, αλλά οποιαδήποτε μεμονωμένη τιμή δεν είναι δυνατόν να προβλεφθεί με βάση την Ψ. Μόνο η κατανομή πιθανότητας μπορεί να προβλεφθεί (δηλαδή, η σχετική συχνότητα που παρουσιάζει κάθε τιμή στο σύνολο των μετρήσεων).

Τα μετρήσιμα μεγέθη αναπαρίστανται από ερμιτιανούς τελεστές. Αν $\hat{A}$ ένας τέτοιος τελεστής, και $\Psi(x)$ η κυματοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στην συλλογή, τότε η μέση τιμή και οι ροπές της κατανομής εκφράζονται από:[(10)]

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\, \hat{A}\, \Psi(x) dx \equiv (\Psi, \hat{A}\Psi) \\
\langle \hat{A}^2 \rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\, \hat{A}^2\, \Psi(x) dx \equiv (\Psi, \hat{A}^2\Psi) \\
\text{και γενικά:} \quad \langle \hat{A}^n \rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\, \hat{A}^n\, \Psi(x) dx \equiv (\Psi, \hat{A}^n\Psi)
\end{aligned} \tag{17}$$

Η n-οστή δύναμη ενός ερμιτιανού τελεστή επιδέχεται την ακόλουθη φυσική ερμηνεία: πραγματοποιούμε μια μέτρηση και παίρνουμε την n-οστή δύναμη της μετρημένης τιμής, $a \to a^n$. Επαναλαμβάνουμε πολλές φορές με πανομοιότυπη προετοιμασία του συστήματος, ώστε να αποκτήσουμε στατιστική εντός της συλλογής Ψ. Τότε, ο μέσος όρος των a^n αναπαριστάται, μαθηματικά, από το $(\Psi, \hat{A}^n\Psi)$.[(11)]

Οι παραπάνω εξισώσεις καταδεικνύουν ότι μια ολική φάση, $e^{i\gamma}$ (με $\gamma \in \mathbb{R}$ μια σταθερά), δεν παίζει κανένα ρόλο στα παρατηρήσιμα μεγέθη. Εάν κάνουμε την αλλαγή $\Psi(x) \to \Psi(x)e^{i\gamma}$, τότε $\Psi^*(x) \to \Psi^*(x)e^{-i\gamma}$, και οι παράγοντες $e^{i\gamma}e^{-i\gamma}$ αλληλοαναιρούνται στο τελικό αποτέλεσμα των εξ. (17).[(12)]

---

(9) Ισοδύναμα, ένα σύνολο από πανομοιότυπα συστήματα, προετοιμασμένα κάθε φορά με τον ίδιο τρόπο.

(10) Αν ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, δηλ. $\forall \Psi, (\Psi, \hat{A}\Psi) \in \mathbb{R}$, τότε και οι δυνάμεις $\hat{A}^n$ είναι ερμιτιανοί. Αυτό φαίνεται ως εξής: Για $n = 2$, $(\Psi, \hat{A}^2\,\Psi) = (\Psi, \hat{A}\hat{A}\,\Psi) = (\hat{A}\,\Psi, \hat{A}\Psi) = \|\hat{A}\,\Psi\|^2 \in \mathbb{R}$, άρα ο $\hat{A}^2$ είναι ερμιτιανός. Για $n = 3$, $(\Psi, \hat{A}^3\,\Psi) = (\hat{A}\,\Psi, \hat{A}[\hat{A}\,\Psi]) \in \mathbb{R}$ (αφού ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός), άρα και ο $\hat{A}^3$ είναι ερμιτιανός. Για ανώτερες δυνάμεις προχωρούμε με επαγωγή, κατ' αναλογία με την περίπτωση $n = 2$ για τις άρτιες δυνάμεις, και με την περίπτωση $n = 3$ για τις περιττές δυνάμεις. (Πρόβλημα 3.)

(11) Με ανάλογο τρόπο, αν $f(z) = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \cdots$ μια αναλυτική συνάρτηση, ορίζουμε τον τελεστή $\hat{f}(\hat{A}) = c_0 + c_1\hat{A} + c_2\hat{A}^2 + \cdots$. Αν οι συντελεστές c_n είναι πραγματικοί, και αν $\hat{A}$ ερμιτιανός, τότε και ο $\hat{f}(\hat{A})$ είναι ερμιτιανός και επιδέχεται την ακόλουθη ερμηνεία: πραγματοποιούμε μια μέτρηση, παίρνουμε αποτέλεσμα a, και υπολογίζουμε την τιμή $f(a)$. Επαναλαμβάνουμε πολλές φορές με πανομοιότυπη προετοιμασία του συστήματος, ώστε να αποκτήσουμε στατιστική εντός της συλλογής Ψ. Ο μέσος όρος των $f(a)$ αναπαρίσταται, μαθηματικά, από το $(\Psi, \hat{f}(\hat{A})\Psi)$.

(12) Λόγω γραμμικότητας, η δράση του τελεστή $\hat{A}^n$ δεν επηρεάζεται από την παρουσία της σταθεράς $e^{i\gamma}$. Επίσης, η σταθερά $e^{i\gamma}$ έχει μέτρο τη μονάδα, ώστε δεν επηρεάζει τη νόρμα $\|\Psi\|$.

Εφαρμόζοντας τις εξ. (17) για τη θέση λαμβάνουμε

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\, x\, \Psi(x) dx & (18)\\ \langle \hat{x}^2 \rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\, x^2\, \Psi(x) dx & (19)\end{aligned}$$

κ.ο.κ., ενώ για την ορμή

$$\begin{aligned}\langle \hat{p} \rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\, \hat{p}\, \Psi(x) dx = -i\hbar \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} dx & (20)\\ \langle \hat{p}^2 \rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x)\, \hat{p}^2\, \Psi(x) dx = (-i\hbar)^2 \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} dx & (21)\end{aligned}$$

κ.ο.κ. Από τις ροπές προκύπτει η κατανομή πιθανότητας.

Θα εισαγάγουμε, τώρα, μια ειδική κατηγορία ερμιτιανών τελεστών, τους *προβολικούς τελεστές*. Ένας προβολικός τελεστής που αντιστοιχεί σε μια κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση, έστω Φ με $(\Phi, \Phi) = 1$, ορίζεται ως εξής.

$$\hat{P}_\Phi\, \Psi = (\Phi, \Psi)\, \Phi, \tag{22}$$

για τυχαία Ψ. Σε μια γεωμετρική ερμηνεία του χώρου καταστάσεων ως διανυσματικού χώρου, την οποία θα συζητήσουμε σε επόμενο κεφάλαιο, αυτή η πράξη δίνει την προβολή της κυματοσυνάρτησης Ψ πάνω στη Φ. Οι προβολικοί τελεστές έχουν την ιδιότητα $\hat{P}_\Phi^2 = \hat{P}_\Phi$, δηλαδή η απλή είτε πολλαπλή δράση τους έχει το ίδιο αποτέλεσμα. Είναι εύκολο να δείξει κανείς ότι πρόκειται για ερμιτιανούς τελεστές με ιδιοτιμές 0 ή 1.[13] Επιδέχονται την ακόλουθη ερμηνεία μετρήσιμου μεγέθους: Εξετάζουμε αν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση Φ· αν ναι, δίνουμε ως μετρημένη τιμή το 1, διαφορετικά το 0. Η έννοια του προβολικού τελεστή γενικεύεται και στην προβολή σε υπόχωρους περισσότερων διαστάσεων: αν Φ_i, $i = 1, 2, \ldots$ κυματοσυναρτήσεις ορθογώνιες μεταξύ τους, τότε σε αυτό το σύνολο αντιστοιχεί ο προβολικός τελεστής $\hat{P} = \sum_i \hat{P}_{\Phi_i}$ με $\hat{P}\, \Psi = (\Phi_1, \Psi)\, \Phi_1 + (\Phi_2, \Psi)\, \Phi_2 + \cdots$.

3.1 Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές

Είναι δυνατόν ένα μέγεθος να μην παρουσιάσει διασπορά στην κατανομή; Δηλαδή, είναι δυνατόν να έχουμε κατανομή μετρήσεων ουσιαστικά εντοπισμένη σε μια μοναδική τιμή; Ναι: για κάθε μέγεθος, υπάρχουν κυματοσυναρτήσεις που εξαρτώνται από αυτό, για τις οποίες ισχύει είτε η πλήρης απουσία διασποράς, είτε ότι η διασπορά γίνεται αυθαίρετα μικρή. Παρατηρούμε: Αν $\hat{A}$ ο ερμιτιανός τελεστής που αντιστοιχεί στο μέγεθος, τότε, έστω ότι βρίσκουμε μια κατάλληλη κατάσταση $\Psi_{\hat{A}}$, τέτοια ώστε να ισχύει

$$\hat{A}\, \Psi_{\hat{A}} = a\, \Psi_{\hat{A}}, \tag{23}$$

όπου a αριθμός. Υπό αυτή τη συνθήκη, η $\Psi_{\hat{A}}$ ονομάζεται *ιδιοκατάσταση (eigenstate)* του $\hat{A}$ και ο αριθμός a *ιδιοτιμή (eigenvalue)* του $\hat{A}$. (Ένας τελεστής μπορεί να έχει πολλές διαφορετικές ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές.)

[13] Πρόβλημα 4.

Η εξ. (23) μας δίνει αμέσως $(\Psi_{\hat{A}}, \hat{A}\,\Psi_{\hat{A}}) = (\Psi_{\hat{A}}, a\,\Psi_{\hat{A}}) = a\,(\Psi_{\hat{A}}, \Psi_{\hat{A}}) = a$ (λόγω κανονικοποίησης). Επειδή ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, το αριστερό μέλος πρέπει να είναι πραγματικό, άρα $a \in \mathbb{R}$. Συμπεραίνουμε ότι *οι ιδιοτιμές των ερμιτιανών τελεστών είναι πραγματικές.*[14] Οι ιδιοτιμές έχουν και μια επιπλέον εξέχουσα θέση στη θεωρία μέτρησης της κβαντικής Φυσικής: *κάθε μεμονωμένη μέτρηση δίνει ως τιμή μια ιδιοτιμή του τελεστή του μετρούμενου μεγέθους.*[15][16] Επομένως, ναι μεν δεν μπορούμε εν γένει να προβλέψουμε το αποτέλεσμα κάθε μεμονωμένης μέτρησης, αλλά γνωρίζουμε ότι πρέπει να ανήκει στο σύνολο ιδιοτιμών.[17]

Ας εξετάσουμε τη διασπορά τιμών, όταν το σύστημα βρίσκεται σε ιδιοκατάσταση του $\hat{A}$. Θυμίζουμε ότι η διασπορά ποσοτικοποιείται από την τυπική απόλιση (ΔA). Για τυχαία κατάσταση Ψ έχουμε (με το σύμβολο $\langle \cdots \rangle$ υπονούμε μέσο όρο στην Ψ, $\langle \cdots \rangle_\Psi$)

$$
\begin{aligned}
(\Delta A)^2 &= \langle\, (\,\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \,\rangle && \text{(από ορισμό)} \qquad (24)\\
&= \langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \rangle && \text{(ταυτοτικά)}\\
&= \langle \hat{A}^2 \rangle - 2\langle \hat{A}\langle \hat{A} \rangle\rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 && \text{(γραμμικότητα μέσης τιμής)}\\
&= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 && \text{(το } \langle \hat{A} \rangle \text{ είναι αριθμός)}\\
&= (\Psi, \hat{A}^2\,\Psi) - (\Psi, \hat{A}\,\Psi)^2 && \text{(από εξ. 17)} \qquad (25)
\end{aligned}
$$

Στην ειδική περίπτωση που έχουμε ιδιοκατάσταση, έστω $\Psi_{\hat{A}}$, με ιδιοτιμή a, παρατηρούμε ότι $\hat{A}^2\,\Psi_{\hat{A}} = \hat{A}\,\hat{A}\,\Psi_{\hat{A}} = \hat{A}\,a\,\Psi_{\hat{A}} = a\hat{A}\,\Psi_{\hat{A}} = a^2\Psi_{\hat{A}}$ (λαμβάνοντας υπ΄ όψη και την κανονικοποίηση της Ψ).[18] Εφαρμογή στην (25) δίνει $(\Delta A)^2 = a^2 - a^2 = 0$.

Έστω ότι ένα μέγεθος έχει μηδενική διασπορά, $(\Delta A)^2 = 0$. Για ευκολία, εξετάζουμε το μέγεθος $\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, το οποίο έχει την ίδια τυπική απόκλιση με το $\hat{A}$, αλλά μέση τιμή μηδέν.[19] Τότε: $0 = (\Delta A')^2 = (\Psi, \hat{A}'^{\,2}\,\Psi) = (\hat{A}'\,\Psi, \hat{A}'\,\Psi) = \|\hat{A}'\,\Psi\|^2$,[20] δηλ. η νόρμα $\|\hat{A}'\,\Psi\|$ μηδενίζεται, το οποίο είναι δυνατόν μόνον αν $\hat{A}'\,\Psi = 0$. Επομένως, η Ψ πρέπει να είναι ιδιοκατάσταση του $\hat{A}'$ με ιδιοτιμή μηδέν: $0 = \hat{A}'\,\Psi = \hat{A}\,\Psi - \langle \hat{A} \rangle\,\Psi$, άρα $\hat{A}\,\Psi = \langle \hat{A} \rangle\,\Psi$. Δηλαδή, η Ψ είναι ιδιοκατάσταση του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή $a = \langle \hat{A} \rangle$.

Καταλήγουμε: *Έστω μια συλλογή αναπαριστώμενη από μια κυματοσυνάρτηση και ένας ερμιτιανός τελεστής $\hat{A}$. Τότε, αυτή η κυματοσυνάρτηση είναι ιδιοκατάσταση του $\hat{A}$, αν και μόνο αν δεν υπάρχει διασπορά τιμών στη μέτρηση του μεγέθους που αντιστοιχεί στον $\hat{A}$.*

Δίνουμε, τέλος, μια ιδιότητα των ερμιτιανών τελεστών: *Ιδιοκαταστάσεις ερμιτιανού τελεστή που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι ορθογώνιες μεταξύ τους.* Η

---

[14] Ιδιοτιμές μπορούν να έχουν και μη ερμιτιανοί τελεστές, αλλά αυτές δεν είναι κατ΄ ανάγκη πραγματικές.

[15] Στο εδάφιο 3.4 θα δούμε ότι αυτή η απαίτηση προκύπτει και από το αξίωμα προβολής.

[16] Υπάρχουν ερμιτιανοί τελεστές, οι οποίοι δεν έχουν ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές, αλλά χαρακτηρίζονται από ένα συνεχές φάσμα τιμών που μπορούν να λαμβάνουν τα αντίστοιχα μεγέθη. Για αυτούς μπορούμε να βρούμε καταστάσεις που προσεγγίζουν την ιδιότητα της ιδιοκατάστασης με αυθαίρετη ακρίβεια. Βλ. τη συζήτηση στο εδάφιο 3.7.

[17] Για παράδειγμα, το σπιν του ηλεκτρονίου έχει μόνο δύο ιδιοτιμές: $\pm\hbar/2$. Μια σειρά μετρήσεων θα εμφανίσει μια κατανομή αυτών των δυό τιμών: ποτέ δεν θα υπάρξει μετρημένη τιμή π.χ. 0, αν και η μέση τιμή των μετρήσεων ενδέχεται, αναλόγως την κατάσταση, να είναι οποιαδήποτε στο διάστημα $[-\hbar/2, \hbar/2]$.

[18] Γενικά, $\hat{A}^n\,\Psi_{\hat{A}} = a^n\,\Psi_{\hat{A}}$, όπως προκύπτει με επαγωγή.

[19] Πρόβλημα 6.

[20] Στο δεύτερο βήμα χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα των ερμιτιανών τελεστών $(\Psi, \hat{A}\,\Phi) = (\hat{A}\,\Psi, \Phi)$ (εξ. 16) με $\Phi = \hat{A}\,\Psi$.

απόδειξη είναι απλή: έστω $\hat{A}$ ερμιτιανός τελεστής και Ψ_1, Ψ_2 ιδιοκαταστάσεις του με ιδιοτιμές a_1, a_2 αντίστοιχα. Τότε: $(\Psi_1, \hat{A}\,\Psi_2) = (\Psi_1, a_2\,\Psi_2) = a_2(\Psi_1, \Psi_2)$. Επίσης: $(\Psi_1, \hat{A}\,\Psi_2) = (\hat{A}\,\Psi_1, \Psi_2) = (a_1\,\Psi_1, \Psi_2) = a_1(\Psi_1, \Psi_2)$ (το πρώτο βήμα προκύπτει από την ιδιότητα (16) των ερμιτιανών τελεστών και στο τελευταίο βήμα εκμεταλλευθήκαμε το γεγονός ότι $a_2 \in \mathbb{R}$). Άρα, $a_2(\Psi_1, \Psi_2) = a_1(\Psi_1, \Psi_2)$. Αν $a_1 \neq a_2$, τότε, αναγκαστκά, $(\Psi_1, \Psi_2) = 0$, δηλ. οι Ψ_1, Ψ_2 είναι ορθογώνιες.

3.2 Προετοιμασία κατάστασης και φιλτράρισμα

Ποιου είδους πειραματικές διατάξεις παράγουν συλλογές που αντιστοιχούν σε ιδιοκαταστάσεις τελεστών; Τα πειράματα αυτά πρέπει να κάνουν ένα είδος διαλογής, ή φιλτραρίσματος, μιας αρχικής συλλογής, επιλέγοντας ένα κατάλληλο υποσύνολο συστημάτων ως νέα συλλογή. Παραδείγματα:

- Ηλεκτρόνια εκπέμπονται από μια πηγή, τοποθετημένη στο χώρο σε $z < 0$, προς μια μεμβράνη που τα σταματά στο επίπεδο xy (δηλ. $z = 0$). Ανοίγουμε μια μικρή οπή στη μεμβράνη στο σημείο $x = y = 0$, η οποία επιτρέπει στα ηλεκτρόνια να διέλθουν. Όσα περάσουν την οπή, βρίσκονται, αμέσως αφού περάσουν ($z > 0$ αλλά πολύ μικρό), σε κατάσταση που είναι με πολύ καλή προσέγγιση ιδιοκατάσταση των τελεστών θέσης $\hat{x}$ και $\hat{y}$.

- Ηλεκτρόνια εκπέμπονται ευθύγραμμα από μια πηγή και διέρχονται μέσα από χωρικά εντοπισμένο μαγνητικό πεδίο. Λόγω της δύναμης Lorenz, αποκλίνουν της πορείας τους, με τη γωνία απόκλισης να εξαρτάται από το μέτρο της ορμής τους (δηλ. την κινητική τους ενέργεια). Επιλέγοντας τα ηλεκτρόνια που έχουν αποκλίνει υπό συγκεκριμένη γωνία (και σταματώντας τα υπόλοιπα), έχουμε μια νέα συλλογή, η οποία αντιστοιχεί με πολύ καλή προσέγγιση σε ιδιοκατάσταση του τελεστή της κινητικής ενέργειας.

- Άτομα (ηλεκτρικά ουδέτερα) με εσωτερική μαγνητική ροπή διέρχονται από ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο. Το πεδίο διασπά τη δέσμη των ατόμων και τα ανακατευθύνει, ανάλογα με τη σχετική κατεύθυνση της μαγνητικής ροπής προς την κατεύθυνση του πεδίου. Επιλέγοντας δέσμη συγκεκριμένης κατεύθυνσης, έχουμε μια νέα συλλογή, που αντιστοιχεί σε ιδιοκατάσταση του τελεστή της μαγνητικής ροπής.(21)

3.3 Συμβατά και ασύμβατα μεγέθη

Έστω ότι, μετά από κατάλληλο φιλτράρισμα, έχουμε καταλήξει σε μια συλλογή που αντιστοιχεί σε ιδιοκατάσταση $\Psi_{\hat{A}}$, με ιδιοτιμή a, ενός ερμιτιανού τελεστή $\hat{A}$. Εάν μετρήσουμε τώρα ένα άλλο μέγεθος, που αντιστοιχεί στον τελεστή $\hat{B}$, θα βρούμε διασπορά στις τιμές; Σύμφωνα με τα προηγούμενα, δεν θα έχουμε διασπορά στο $\hat{B}$ αν και μόνο αν η $\Psi_{\hat{A}}$ τυγχάνει ιδιοκατάσταση και του $\hat{B}$.

(21) Ο τελεστής της μαγνητικής ροπής προκύπτει από συνδυασμό του τελεστή της τροχιακής στροφορμής, $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$, και της στροφορμής σπιν. Στην πράξη συνεισφέρουν εδώ μόνο τα ηλεκτρόνια και όχι οι πυρήνες. Οι Otto Stern και Walter Gerlach χρησιμοποίησαν το 1922 μια τέτοια διάταξη για να αποδείξουν την κβάντωση της στροφορμής.

Είναι δυνατόν δυο τελεστές να μην έχουν ούτε μια κοινή ιδιοκατάσταση; Ναι. Έστω Ψ μια κοινή ιδιοκατάσταση των $\hat{A}$ και $\hat{B}$, με $\hat{A}\,\Psi = a\,\Psi$ και $\hat{B}\,\Psi = b\,\Psi$. Τότε, $[\hat{A},\hat{B}]\Psi \equiv (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\,\Psi = \hat{A}b\,\Psi - \hat{B}a\,\Psi = b\hat{A}\,\Psi - a\hat{B}\,\Psi = (ba - ab)\Psi = 0$. Δηλαδή, η δράση του μεταθέτη $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ στη συγκεκριμένη κατάσταση δίνει μηδέν. Επομένως, αν η δράση του $[\hat{A},\hat{B}]$ σε *όλες* τις καταστάσεις του πεδίου ορισμού του δεν μηδενίζεται, τότε οι $\hat{A}$ και $\hat{B}$ δεν έχουν ούτε μια κοινή ιδιοκατάσταση. Παράδειγμα αποτελεί το ζεύγος τελεστών θέσης και ορμής, για το οποίο (σε μία διάσταση)

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar, \tag{26}$$

δηλ. $[\hat{x},\hat{p}]\Psi = i\hbar\,\Psi$ για κάθε Ψ.[22] Ζεύγη μεγεθών, που ικανοποιούν τη σχέση $[\hat{A},\hat{B}] = i\hbar$, ονομάζονται *κανονικά συζυγή (canonical conjugate)*. Άλλα παραδείγματα ζευγών που δεν έχουν ούτε μια κοινή ιδιοκατάσταση (χωρίς, απαραίτητα, να είναι κανονικά συζυγή) είναι η θέση και δυνάμεις της ορμής (π.χ., θέση και κινητική ενέργεια), ή, γενικότερα, συναρτήσεις της θέσης και συναρτήσεις της ορμής, και ανά δύο οι συνιστώσες του διανύσματος της στροφορμής.

Δυο μεγέθη, που αντιπροσωπεύονται από μετατιθέμενους ερμιτιανούς τελεστές κατά δράση τους σε *ολες* τις κυματοσυναρτήσεις (δηλ. $[\hat{A},\hat{B}]\Psi = 0,\ \forall\Psi$), ονομάζονται *συμβατά (compatible)*, σε διαφορετική περίπτωση ονομάζονται *ασύμβατα (incompatible)*. (Είναι δυνατόν, δύο ασύμβατα μεγέθη $\hat{A}$ και $\hat{B}$ να έχουν κάποιες κοινές ιδιοκαταστάσεις, έστω Ψ. Τότε, η δράση του μεταθέτη τους σε αυτές μηδενίζεται: $[\hat{A},\hat{B}]\Psi = 0$, αλλά θα υπάρχουν άλλες, έστω Φ για τις οποίες $[\hat{A},\hat{B}]\Phi \neq 0$.) Λόγω της ύπαρξης ασύμβατων μεγεθών, παρουσιάζεται στην κβαντική Φυσική η εξής ιδιομορφία, η οποία είναι απούσα στην κλασική Φυσική. Έστω ότι προετοιμάζουμε το σύστημα (π.χ. μέσω φιλτραρίσματος) σε μια ιδιοκατάσταση $\Psi_{\hat{A}}$ του μεγέθους $\hat{A}$. Τότε, μπορούμε να βρούμε μέγεθος ασύμβατο με το $\hat{A}$, δηλαδή τέτοιο ώστε οι μετρήσεις του να παρουσιάζουν υποχρεωτικά διασπορά. Η διασπορά λόγω ασυμβατότητας δεν σχετίζεται με την ακρίβεια του οργάνου της μέτρησης, ούτε με την ακρίβεια της προετοιμασίας της συλλογής. Στην κλασική Φυσική δεχόμαστε ως αξίωμα ότι μπορούμε να προετοιμάσουμε ένα σύστημα με επαρκή ακρίβεια, και επιπρόσθετα να έχουμε επαρκή ακρίβεια στη μέτρηση, ώστε η διασπορά να καθίσταται αυθαίρετα μικρή, ή και να μηδενίζεται. Στην κβαντική Φυσική, αυτό είναι αδύνατον μεταξύ ασύμβατων μεγεθών, των οποίων την ύπαρξη δεχόμαστε, κατ΄ ουσία, αξιωματικά.

Γενικά, για οποιεσδήποτε δύο διαφορετικές κυματοσυναρτήσεις δεν είναι ορθογώνιες μεταξύ τους (δηλ. $1 \neq |(\Phi,\Psi)| \neq 0$), οι αντίστοιχοι προβολικοί τελεστές αντιστοιχούν σε ασύμβατα μεγέθη. Αυτό προκύπτει από τη δράση του μεταθέτη $[\hat{P}_\Psi, \hat{P}_\Phi]$ είτε στην Ψ είτε στη Φ.[23]

Η ύπαρξη ασύμβατων μεγεθών στην κβαντική Φυσική επάγεται απ΄ ευθείας από την αρχή της επαλληλίας, χάρη στην οποία μπορούμε να κατασκευάσουμε μη ορθογώνιες κυματοσυναρτήσεις από οποιοδήποτε ζεύγος κυματοσυναρτήσεων οι οποίες δεν ταυτίζονται, ακόμα και αν δεν είναι ορθογώνιες. Έστω Ψ_1 και Ψ_2 δύο κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε διαφορετικές συλλογές (δηλ., δεν είναι η μια πολλαπλάσιο

[22] Έχουμε $[\hat{x},\hat{p}]\Psi = \hat{x}(\hat{p}\Psi) - \hat{p}(\hat{x}\Psi) = -i\hbar x(\partial\Psi/\partial x) + i\hbar\partial(x\Psi)/\partial x = i\hbar(-x\partial\Psi/\partial x + \Psi + x\partial\Psi/\partial x) = i\hbar\Psi$, για κάθε διαφορίσιμη Ψ.

[23] Θέτουμε $Q(x) = [\hat{P}_\Psi, \hat{P}_\Phi]\Psi$ και υπολογίζουμε $(Q,Q) = |(\Phi,\Psi)|^2 - |(\Phi,\Psi)|^4 \geq 0$ [αφού $0 \leq |(\Phi,\Psi)| \leq 1$ από την ανισότητα Cauchy-Schwarz (14)], το οποίο μηδενίζεται μόνο αν $|(\Phi,\Psi)| = 0$ η 1, δηλ. μόνο αν οι Ψ και Φ είναι ορθογώνιες ή ταυτίζονται. (Πρόβλημα 7.)

της άλλης: δεν υπάρχει σταθερά c, τέτοια ώστε $\Psi_1 = c\,\Psi_2$). Κατασκευάζουμε τώρα, μέσω επαλληλίας, μια νέα κυματοσυνάρτηση η οποία να αδυνατεί να είναι ταυτόχρονα ορθογώνια και στην Ψ_1 και στην Ψ_2: $\Phi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$, με $a_1 \neq 0 \neq a_2$ και $|a_1|^2 + |a_2|^2 + 2\mathrm{Re}[a_1^* a_2(\Psi_1, \Psi_2)] = 1$ ώστε να είναι κανονικοποιημένη [π.χ., αν οι Ψ_1 και Ψ_2 είναι ορθογώνιες, $\Phi = (1/\sqrt{2})\Psi_1 + (1/\sqrt{2})\Psi_2$]. Τότε, ο προβολικός τελεστής της Φ είναι μέγεθος ασύμβατο είτε με την Ψ_1 είτε την Ψ_2 είτε και με τις δύο.[24]

Από τα παραπάνω αναδεικνύεται η θεμελιώδης σημασία της *αρχής της επαλληλίας* στην κβαντική θεωρία. Κατασκευάζοντας την κυματοσυνάρτηση $\Phi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$, καταλήξαμε στην αναγκαιότητα ύπαρξης ασύμβατων μεγεθών. Είναι απαραίτητο να τονίσουμε ότι η Φ είναι εξίσου έγκυρη κυματοσυνάρτηση με τις Ψ_1 και Ψ_2. Η κάθε μια από τις τρεις αντιστοιχεί και σε μια διαφορετική προετοιμασία της συλλογής. Η Φ δεν επιδέχεται ερμηνεία άγνοιας: αν η συλλογή βρίσκεται στη Φ, δεν μπορούμε να υποθέσουμε ότι είτε βρίσκεται στην Ψ_1 είτε στην Ψ_2, και ότι απλώς αγνοούμε σε ποια από τις δύο. Αυτό φαίνεται και από το γεγονός ότι οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί ως επαλληλία δύο ή περισσότερων άλλων κυματοσυναρσήσεων. Η δομή της κβαντικής θεωρίας είναι τέτοια που θεωρεί όλες τις κυματοσυναρτήσεις ισάξιες ως προετοιμασίες συλλογής.

3.4 Το αξίωμα προβολής

Ας συζητήσουμε τώρα τη διαδικασία μέτρησης. Αναφερόμαστε σε μετρήσεις οι οποίες δεν καταστρέφουν το σύστημα.[25] Δεχόμαστε ότι, κατά τη διάρκεια της μέτρησης, το μετρούμενο σύστημα αλληλεπιδρά με τη μετρητική συσκευή, η οποία είναι ένα δεύτερο σύστημα. Στο τέλος της διαδικασίας, η αλληλεπίδραση σταματά, και η μετρητική συσκευή δείχνει μια τιμή (π.χ. μέσω της θέσης ενός δείκτη η οποία αντιστοιχεί σε πραγματικό αριθμό), την οποία καταγράφουμε. Ως αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας, το σύστημα ενδέχεται να αλλάξει την κατάστασή του. Συγκεκριμένα, εάν η αρχική κυματοσυνάρτηση αντιστοιχεί σε μέγεθος ασύμβατο με το μετρούμενο μεγεθος, τότε η κατάσταση θα αλλάξει σίγουρα: η διαδικασία της μέτρησης επηρεάζει την κατάσταση του συστήματος.

Ποια η κατάσταση του συστήματος αμέσως μετά τη μέτρηση; Η κβαντική θεωρία απαντά με το *αξίωμα προβολής (projection postulate): Δύο αλλεπάλληλες μετρήσεις του ίδιου μεγέθους θα δώσουν την ίδια τιμή.* Με βάση όσα είπαμε ως τώρα, αυτό σημαίνει ότι μια μέτρηση φέρνει το σύστημα σε κυματοσυνάρτηση η οποία αντιστοιχεί σε ιδιοκατάσταση του μετρημένου μεγέθους, τέτοια ώστε να της αντιστοιχεί η μετρημένη τιμή ως ιδιοτιμή. Με άλλα λόγια, έστω μέγεθος $\hat{A}$ με ζεύγη ιδιοκατάστασης-ιδιοτιμής $\{\Psi_1, a_1\}$, $\{\Psi_2, a_2\}$, ... Έστω ότι, δεδομένης μιας προετοιμασίας της συλλογής στην κατάσταση Φ, πραγματοποιούμε μια μέτρηση του $\hat{A}$. Επαναλαμβάνοντας πολλές φορές, σε κάθε σύστημα της συλλογής, βρίσκουμε διαφορετικές τιμές $\{a_i\}$. Επιλέγοντας εκείνα τα συστήματα για τα οποία μετρήσαμε π.χ. a_1, δημιουργούμε μια νέα συλλογή. Αν επικεντρωθούμε στη νέα συλλογή και κάνουμε αμέσως (πριν προλάβει να εξελιχθεί χρονικά η κατάσταση) δεύτερο σετ μετρήσεων του μεγέθους $\hat{A}$, τότε, σύμφωνα με το αξίωμα προβολής, θα ξαναβρούμε σε όλες τις μετρήσεις του δεύτερου σετ την τιμή a_1

(24) Πρόβλημα 8.

(25) Υπάρχουν και μετρήσεις που καταστρέφουν το μετρούμενο σύστημα. Π.χ., η μέτρηση της ενέργειας ενός φωτονίου γίνεται μέσω της απορρόφησής του, οπότε και το φωτόνιο καταστρέφεται.

χωρίς διασπορά. Σύμφωνα με το προηγούμενο εδάφιο, η απουσία διασποράς συνεπάγεται ότι η νέα συλλογή θα βρίσκεται σε ιδιοκατάσταση του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή a_1, δηλαδή θα αντιπροσωπεύεται από την κατάσταση Ψ_1. Βλέπουμε ότι η μέτρηση μπορεί να ερμηνευθεί και ως διαδικασία φιλτραρίσματος της κατάστασης Ψ_1. Η διαδικασία ονομάζεται μερικές φορές και *αναγωγή (reduction)* ή *κατάρρευση (collapse)* της κατάστασης Φ στην Ψ_1. Η αναγωγή είναι ασυνεχής μεταβολή της κυματοσυνάρτησης, σε αντίθεση με τη χρονική εξέλιξη που είναι συνεχής μεταβολή (βλ. κεφ. 5).

Το αξίωμα προβολής συνάδει με την απαίτηση κάθε μέτρηση να δίνει ιδιοτιμή του τελεστή που αντιστοιχεί στο μετρούμενο μέγεθος (βλ. εδάφιο 3.1 *Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές*). Ας δούμε πάλι το παράδειγμα της προηγούμενης παραγράφου, δεχόμενοι το αξίωμα προβολής, αλλά χωρίς κατ΄ αρχήν να απαιτήσουμε κάθε μέτρηση να δίνει ιδιοτιμή. Κάνουμε σειρά μετρήσεων του $\hat{A}$ και επιλέγουμε ως νέα συλλογή το υποσύνολο των συστημάτων που έχουν δώσει a ως μετρημένη τιμή. Σύμφωνα με το αξίωμα προβολής, εάν κάναμε αμέσως δεύτερη μέτρηση στη νέα συλλογή, θα βρίσκαμε και πάλι μόνον a χωρίς διασπορά. Η απουσία διασποράς σημαίνει ότι η νέα συλλογή εκπροσωπείται από την ιδιοσυνάρτηση $\Psi_{\hat{A}}$ με ιδιοτιμή a.

Έστω ότι κάνουμε μέτρηση του μεγέθους $\hat{A}$ σε ένα σύστημα προετοιμασμένο στην κατάσταση Φ. Η πιθανότητα να μεταβεί το σύστημα στην ιδιοκατάσταση $\Psi_{\hat{A},i}$ κατά τη μέτρηση (δηλαδή η σχετική συχνότητα εμφάνισης της ιδιοτιμής a_i στις μετρήσεις εντός της συλλογής), δίνεται μέσω της μέσης τιμής του προβολικού τελεστή της $\Psi_{\hat{A},i}$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}} \rangle_\Phi &= (\Phi, \hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}} \Phi) \\ &= (\Phi, (\Psi_{\hat{A},i}, \Phi)\, \Psi_{\hat{A},i}) \\ &= (\Psi_{\hat{A},i}, \Phi)(\Phi, \Psi_{\hat{A},i}) \\ &= |(\Psi_{\hat{A},i}, \Phi)|^2 \end{aligned} \tag{27}$$

Εδώ χρησιμοποιήσαμε τον ορισμό (22) και την ιδιότητα του εσωτερικού γινομένου $(\Phi, \Psi_{\hat{A},i}) = (\Psi_{\hat{A},i}, \Phi)^*$. Η ποσότητα (27) ονομάζεται *πιθανότητα μετάβασης*, ενώ η (μιγαδική) ποσότητα $(\Psi_{\hat{A},i}, \Phi)$, δηλαδή η προβολή της Φ στην $\Psi_{\hat{A},i}$, ονομάζεται *πλάτος μετάβασης*. Προφανώς, το άθροισμα των πιθανοτήτων μετάβασης σε όλες τις (ορθογώνιες μεταξύ τους) ιδιοκαταστάσεις του μετρούμενου μεγέθους πρέπει να δίνει μονάδα:

$$\sum_i \langle \hat{P}_{\Psi_{\hat{A},i}} \rangle_\Phi = \sum_i |(\Psi_{\hat{A},i}, \Phi)|^2 = 1. \tag{28}$$

Αυτή η ιδιότητα εξασφαλίζεται μαθηματικά από το φασματικό θεώρημα (spectral theorem) της συναρτησιακής ανάλυσης.

Τέλος, ας δούμε το αξίωμα προβολής στην περίπτωση *εκφυλισμού*, δηλαδή δύο ή περισσότερων γραμμικά ανεξάρτητων ιδιοσυναρτήσεων του μετρούμενου μεγέθους $\hat{A}$, $\Psi_1, \Psi_2, \ldots$, οι οποίες τυγχάνει να αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή α. Ας υποθέσουμε ότι μετράμε το μέγεθος $\hat{A}$ και βρίσκουμε α. Αυτή η πληροφορία δεν επαρκεί για να ξέρουμε σε ποια από τις $\Psi_1, \Psi_2, \ldots$ (ή σε ποιον γραμμικό συνδυασμό τους) βρίσκεται το σύστημα. Τότε έχουμε ατελές φιλτράρισμα, η συλλογή που προκύπτει δεν αντιστοιχεί σε κυματοσυνάρτηση, και η μέτρηση πρέπει να συνοδευτεί από μέτρηση άλλου μεγέθους $\hat{B}$, συμβατού με το $\hat{A}$, ώστε η συλλογή να εκλεπτυνθεί περαιτέρω και να αντιστοιχεί τελικά σε κυματοσυνάρτηση. Η μέτρηση του $\hat{B}$ γίνεται στα ίδια συστήματα στα οποία μετρήθηκε το $\hat{A}$, ώστε να εφαρμοστεί εκ νέου το αξίωμα προβολής. Εάν υπάρχουν και εκφυλισμένες ιδιοτιμές (έστω β) του μεγέθους $\hat{B}$, πρέπει να γίνει και τρίτη μέτρηση κάποιου κατάλληλου $\hat{C}$, συμβατού με τα $\hat{A}$ και $\hat{B}$, κ.ο.κ., έως ότου αρθούν όλοι οι εκφυλισμοί. Μια οικογένεια μεγεθών που απαιτείται κατ΄ ελάχιστο να μετρηθούν ώστε να προκύψει κατάλληλη συλλογή που να αντιστοιχεί σε κυματοσυνάρτηση ονομάζεται *πλήρες σύστημα μετατιθέμενων μεγεθών* (*complete system of commuting observables*). Ένα παράδειγμα είναι οι ενεργειακές στάθμες του ατόμου του υδρογόνου: η ενέργεια καθορίζεται από τον κύριο κβαντικό αριθμό n, ενώ σε ιδιοτιμή ενέργειας E_n αντιστοιχούν περισσότερες καταστάσεις που διακρίνονται με βάση τη στροφορμή. Τα μετατιθέμενα μεγέθη που αποτελούν το πλήρες σύστημα σε αυτό το πρόβλημα είναι η ενέργεια, το μέτρο της στροφορμής, η συνιστώσα z της στροφορμής, και η συνιζτώσα z της ιδιοστροφορμής (σπιν) του ηλεκτρονίου.

Τα παραπάνω εκφράζονται μαθηματικά από αντίστοιχο θεώρημα, το οποίο θα δούμε στο εδάφιο 4.4.

3.5 Αρχή της απροσδιοριστίας

Για μεγέθη ασύμβατα, $\hat{A}$ και $\hat{B}$, είπαμε ότι, προετοιμάζοντας τη συλλογή σε ιδιοκατάσταση του ενός, παρατηρούμε διασπορά στη μέτρηση του άλλου (για τις καταστάσεις που δεν είναι κοινές ιδιοκαταστάσεις). Ας υποθέσουμε ότι προετοιμάζουμε τη συλλογή σε μια κατάσταση, Ψ, η οποία δεν είναι κατ΄ ανάγκη ιδιοκατάσταση κανενός από τα δύο μεγέθη. Τότε, αποδεικνύεται η *αρχή της απροσδιοριστίας (indeterminacy principle)* ή αλλιώς *αρχή της αβεβαιότητας (uncertainty principle)*:

$$(\Delta A)_\Psi (\Delta B)_\Psi \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\Psi| \tag{29}$$

Συντομεύουμε την απόδειξη καταφεύγοντας ξανά στο τέχνασμα να εξετάσουμε τα μεγέθη $\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\Psi$ και $\hat{B}' = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\Psi$, τα οποία έχουν την ίδια τυπική απόκλιση με τα $\hat{A}$ και $\hat{B}$, αντίστοιχα, αλλά μηδενική μέση τιμή. Για αυτά ισχύει, επομένως, $(\Delta A)^2_\Psi = (\Delta A')^2_\Psi = \langle \hat{A}'^{\,2} \rangle_\Psi$, και αντίστοιχα για το $\hat{B}'$. Επίσης, ισχύει ότι $[\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A}, \hat{B}] - [\hat{A}, \langle \hat{B} \rangle_\Psi] - [\langle \hat{A} \rangle_\Psi, \hat{B}] + [\langle \hat{A} \rangle_\Psi, \langle \hat{B} \rangle_\Psi] = [\hat{A}, \hat{B}] - 0 - 0 + 0 = [\hat{A}, \hat{B}]$, διότι οι μεταθέτες τελεστών με αριθμούς (ή αριθμών μεταξύ τους) μηδενίζονται.

Η απόδειξη προχωρεί σε δύο βήματα. Πρώτον, εκμεταλλευόμαστε την ανισότητα Cauchy-Schwarz (14):

$$\begin{aligned}
(\Delta A)^2_\Psi (\Delta B)^2_\Psi &= \langle \hat{A}'^{\,2} \rangle_\Psi \langle \hat{B}'^{\,2} \rangle_\Psi \\
&= (\Psi, \hat{A}'^{\,2}\, \Psi)(\Psi, \hat{B}'^{\,2}\, \Psi) \\
&= (\hat{A}'\, \Psi, \hat{A}'\, \Psi)(\hat{B}'\, \Psi, \hat{B}'\, \Psi) \quad [\text{από ιδιότητα εξ. (16)}] \\
&\geq |(\hat{A}'\, \Psi, \hat{B}'\, \Psi)|^2 \qquad (\text{από ανισότητα Cauchy-Schwarz})
\end{aligned} \tag{30}$$

Δεύτερον, εκμεταλλευόμαστε την ακόλουθη ιδιότητα οποιουδήποτε μιγαδικού αριθμού z: $|z|^2 = |\mathrm{Re}z|^2 + |\mathrm{Im}z|^2 \geq |\mathrm{Im}z|^2$, δηλ. $|z| \geq |\mathrm{Im}z|$. Θέτοντας $z = (\hat{A}'\, \Psi, \hat{B}'\, \Psi)$, έχουμε

$$
\begin{aligned}
|(\hat{A}'\,\Psi, \hat{B}'\,\Psi)| \geq |\mathrm{Im} z| &= \frac{1}{2}|z - z^*| \\
&= \frac{1}{2}|(\hat{A}'\,\Psi, \hat{B}'\,\Psi) - (\hat{B}'\,\Psi, \hat{A}'\,\Psi)| \\
&= \frac{1}{2}|(\Psi, \hat{A}'\,\hat{B}'\,\Psi) - (\Psi, \hat{B}'\,\hat{A}'\,\Psi)| \quad [\text{από ιδιότητα εξ. (16)}] \\
&= \frac{1}{2}|(\Psi, [\hat{A}'\,\hat{B}' - \hat{B}'\,\hat{A}']\,\Psi)| \quad (\text{γραμμικότητα εσωτ. γινομένου}) \\
&\equiv \frac{1}{2}|(\Psi, [\hat{A}', \hat{B}']\,\Psi)| \\
&\equiv \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}', \hat{B}']\rangle_\Psi| \qquad (31)
\end{aligned}
$$

Από τις (30) και (31) προκύπτει $(\Delta A)^2_\Psi (\Delta B)^2_\Psi \geq \left(\frac{1}{2}|\langle[\hat{A}', \hat{B}']\rangle_\Psi|\right)^2$, που είναι ισοδύναμη με την (29).

Η αρχή της απροσδιοριστίας θέτει, λοιπόν, ένα ελάχιστο στη διασπορά δύο μεγεθών, *μετρημένων σε συστήματα της ίδιας συλλογής* (δηλ. σε συστήματα με πανομοιότυπη προετοιμασία).[(26)] Θα συζητήσουμε την ερμηνεία της αρχής στο παράδειγμα του ζεύγους μεγεθών ορμής-θέσης στον χώρο των καταστάσεων σωματιδίου σε μια διάσταση ($x \in \mathbb{R}$). Για αυτά είδαμε ότι ισχύει $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, ανεξάρτητα της κυματοσυνάρτησης στην οποία που δρουν. Επομένως, $|\langle[\hat{x}, \hat{p}]\rangle| = |i\hbar(\Psi, \Psi)| = \hbar$, ανεξάρτητα της Ψ (αρκεί $\|\Psi\| = 1$). Λαμβάνουμε:

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{1}{2}\hbar. \qquad (32)$$

Αυτή η σχέση, διατυπωμένη από το Heisenberg, είναι ίσως η πιο διάσημη περίπτωση της αρχής της απροσδιοριστίας. Ποια είναι η ερμηνεία της; Ξεκινάμε με μια συλλογή, που αναπαριστάται από κάποια κυματοσυνάρτηση Ψ. Μετράμε σε κάποια συστήματα της συλλογής τη θέση, σε *κάποια άλλα* συστήματα της συλλογής την ορμή (αρκετά συστήματα, και στις δύο περιπτώσεις, ώστε να έχουμε επαρκείς μετρήσεις για στατιστική). Τότε, η τυπική απόκλιση των αποτελεσμάτων στη θέση, (Δx), και στην ορμή, (Δp), ικανοποιούν την (32): το γινόμενό $(\Delta x)(\Delta p)$ έχει κάτω φράγμα. Εναλλακτικά, αλλά στο ίδιο πνεύμα, από μια αρχική συλλογή δημιουργούμε με φιλτράρισμα μια υποσυλλογη με τυπική απόκλιση στη θέση (Δx). Μετράμε σε αυτή την υποσυλλογή την ορμή και βρίσκουμε την τυπική απόκλιση (Δp). Το γινόμενο $(\Delta x)(\Delta p)$ έχει κάτω φράγμα.

Ενδέχεται το γινόμενο $(\Delta x)(\Delta p)$ να είναι μεγαλύτερο από $\frac{1}{2}\hbar$. Αυτό εξαρτάται από τη συλλογή Ψ. Δεν υπάρχει, όμως, συλλογή, η οποία να δίνει γινόμενο μικρότερο από $\frac{1}{2}\hbar$.

Συνεπεία της ανισότητας (32), όσο πιο εντοπισμένη είναι η κατανομή στο ένα από τα δύο μεγέθη (θέση ή ορμή), δηλαδή, όσο πιο κοντά βρίσκεται η Ψ σε ιδιοκατάσταση ενός από τα δύο, τόσο μεγαλύτερη είναι η διασπορά στο άλλο μέγεθος (ασυμπτωτικά, αν η διασπορά του ενός γίνει απειροστά μικρή, τότε η διασπορά του άλλου απειρίζεται). Στα

[(26)] Πρέπει να τονίσουμε ότι δεν αναφερόμαστε σε διαδοχική μέτρηση των δύο μεγεθών στο ίδιο σύστημα: π.χ., δεν αναφερόμαστε σε μέτρηση πρωτα της θέσης και στη συνέχεια την ορμής του ίδιου ηλεκτρονίου. Αντίθετα, προετοιμάζουμε N ηλεκτρόνια με τον ίδιο τρόπο, και σε ένα υποσύνολο μετράμε τη θέση, ενώ σε άλλο υποσύνολο την ορμή.

δύο αυτά μεγέθη δεν αντιστοιχούν ιδιοκαταστάσεις.[27] Επομένως, δεν είναι δυνατόν να μηδενιστεί κανένα από τα (Δx) και (Δp). Ωστόσο, στη γενική περίπτωση, η σχέση απροσδιοριστίας (29) ισχύει και για μεγέθη που έχουν ιδιοκαταστάσεις. Εάν η Ψ τύχει να είναι ιδιοκατάσταση π.χ. του $\hat{A}$, τότε το γινόμενο $(\Delta A)(\Delta B) = 0$ (και, υποχρεωτικά, το δεξιό μέλος της (29) επίσης μηδενίζεται).[28] Εάν, όμως, η Ψ δεν είναι ταυτόχρονα ιδιοκατάσταση και του $\hat{B}$, τότε το (ΔB) θα είναι μη μηδενικό.

3.6 Είναι τα γινόμενα και οι μεταθέτες ερμιτιανών τελεστών ερμιτιανοί τελεστές;

Το γινόμενο ερμιτιανών τελεστών $\hat{A}\hat{B}$ είναι ερμιτιανός τελεστής, αν και μόνο αν οι $\hat{A}$ και $\hat{B}$ μετατίθενται. Για να αποδειχθεί αυτό, έστω ότι το γινόμενο $\hat{A}\hat{B}$ είναι ερμιτιανός τελεστής. Η δράση του μεταθέτη σε τυχαία κυματοσυνάρτηση Φ δίνει:

$$\begin{aligned}
\|[\hat{A},\hat{B}]\Phi\|^2 &= ([\hat{A},\hat{B}]\Phi, [\hat{A},\hat{B}]\Phi) \qquad \text{(από ορισμό νόρμας)}\\
&= ([\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}]\Phi, [\hat{A},\hat{B}]\Phi)\\
&= (\hat{A}\hat{B}\Phi, [\hat{A},\hat{B}]\Phi) - (\hat{B}\hat{A}\Phi, [\hat{A},\hat{B}]\Phi) \text{ (από ιδιότητα εξ. 13)}\\
&= (\hat{A}\hat{B}\Phi, [\hat{A},\hat{B}]\Phi) - (\hat{A}\Phi, \hat{B}[\hat{A},\hat{B}]\Phi) \text{ (ο } \hat{B} \text{ είναι ερμιτιανός, βλ. εξ. 16)}\\
&= (\hat{A}\hat{B}\Phi, [\hat{A},\hat{B}]\Phi) - (\Phi, \hat{A}\hat{B}[\hat{A},\hat{B}]\Phi) \text{ (ο } \hat{A} \text{ είναι ερμιτιανός, βλ. εξ. 16)}\\
&= (\hat{A}\hat{B}\Phi, [\hat{A},\hat{B}]\Phi) - (\hat{A}\hat{B}\Phi, [\hat{A},\hat{B}]\Phi) \text{ (από υπόθεση ότι ο } \hat{A}\hat{B} \text{ είναι ερμιτιανός)}\\
&= 0
\end{aligned}$$

Δηλαδή, αν ο $\hat{A}\hat{B}$ είναι ερμιτιανός, τότε $[\hat{A},\hat{B}] = 0$. Αντίστροφα, αν $[\hat{A},\hat{B}] = 0$, τότε, για οποιαδήποτε Ψ, έχουμε

$$\begin{aligned}
(\Psi, [\hat{A},\hat{B}]\Psi) &= (\Psi, \hat{A}\hat{B}\,\Psi) - (\Psi, \hat{B}\hat{A}\,\Psi)\\
&= (\Psi, \hat{A}\hat{B}\,\Psi) - (\hat{B}\,\Psi, \hat{A}\,\Psi) \text{ (ο } \hat{B} \text{ είναι ερμιτιανός)}\\
&= (\Psi, \hat{A}\hat{B}\,\Psi) - (\hat{A}\hat{B}\,\Psi, \Psi) \text{ (ο } \hat{A} \text{ είναι ερμιτιανός)}\\
&= (\Psi, \hat{A}\hat{B}\,\Psi) - (\Psi, \hat{A}\hat{B}\,\Psi)^*\\
&\equiv 2i\,\mathrm{Im}(\Psi, \hat{A}\hat{B}\,\Psi) \text{ (διότι } z - z^* = 2i\,\mathrm{Im} z,\ \forall z \in \mathbb{C}\text{)}.
\end{aligned} \tag{33}$$

Αν $[\hat{A},\hat{B}] = 0$, τότε η έκφραση μηδενίζεται λόγω του αριστερού μέλους, επομένως το εσωτερικό γινόμενο $(\Psi, \hat{A}\hat{B}\,\Psi)$ είναι πραγματικός αριθμός, που εξ΄ ορισμού σημαίνει ότι το γινόμενο $\hat{A}\hat{B}$ είναι ερμιτιανός τελεστής.

Από την εξίσωση (33) προκύπτει αμέσως και το εξής συμπέρασμα, το οποίο θα χρειαστούμε αργότερα: για ερμιτιανούς τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{B}$, η ποσότητα $(\Psi, i\,[\hat{A},\hat{B}]\Psi)$ είναι πάντα πραγματικός αριθμός, επομένως ο τελεστής $i\,[\hat{A},\hat{B}]$ είναι ερμιτιανός.

3.7 Παράρτημα: Μεγέθη με συνεχές φάσμα τιμών

Έχουν όλοι οι ερμιτιανοί τελεστές ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές; Όχι: υπάρχουν σημαντικές εξαιρέσεις. Για παράδειγμα, ο τελεστής θέσης $\hat{x}$ και ο τελεστής ορμής $\hat{p}$ (στο

[27] Βλ. συζήτηση για τα μεγέθη με συνεχές φάσμα τιμών και πρόβλημα 9.
[28] Πρόβλημα 13.

χώρο των κυματοσυναρτήσεων ορισμένων στο $\mathbb{R}$)[29] δεν έχουν ιδιοκαταστάσεις.[30] Η διαπίστωση αυτή έχει την ακόλουθη φυσική ερμηνεία. Μεγέθη όπως η θέση, με συνεχή, αντί για διακριτή, κατανομή τιμών, δεν είναι δυνατόν να μετρηθούν με απόλυτη ακρίβεια. Οποιαδήποτε μετρητική συσκευή, όσο ακριβής και να είναι, θα δίνει τιμές a με κάποια διασπορά εντός ενός διαστήματος $[a-\delta a, a+\delta a]$, με το δa να γίνεται αυθαίρετα μικρό, αλλά ποτέ ακριβώς μηδέν. Όμοια, οποιαδήποτε προετοιμασία ή φιλτράρισμα μιας συλλογής θα δίνει μια αντίστοιχη διασπορά, έστω και αν αυτή γίνεται αυθαίρετα μικρή. Αυτό αντανακλάται στον αντίστοιχο ερμιτιανό τελεστή $\hat{A}$, ο οποίος δεν έχει ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές. Μπορεί, όμως, να κατασκευάσει κανείς κυματοσυναρτήσεις οι οποίες αντιστοιχούν σε αυθαίρετα μικρή απόκλιση γύρω από μια επιθυμητή τιμή a, και οι οποίες επέχουν, υπό αυτό το πρίσμα, ρόλο των ιδιοκαταστάσεων με ιδιοτιμή a. Ένα παράδειγμα για τον τελεστή θέσης είναι η κυματοσυνάρτηση

$$\Phi_{x_0,\varepsilon}(x) = [\delta_\varepsilon(x-x_0)]^{1/2} \equiv \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\varepsilon^2}}\right]^{1/2} = \left[\frac{1}{2\pi\varepsilon^2}\right]^{1/4} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\varepsilon^2}}, \tag{34}$$

η οποία αντιστοιχεί σε γκαουσιανή κατανομή πιθανότοτας $|\Phi(x)|^2$ με μέση τιμή x_0 και τυπική απόκλιση ε (προφανώς $\varepsilon > 0$). Παίρνοντας ε ολοένα μικρότερο, αποκτούμε μια ολοένα πιο εντοπισμένη κυματοσυνάρτηση και μια ολοένα καλύτερη προσέγγιση σε κατάσταση με απουσία διασποράς. Δεν μπορούμε, ωστόσο, να πάρουμε $\varepsilon = 0$. Όμοια προσέγγιση αποκτούμε με την κυματοσυνάρτηση

$$\Phi_{x_0,\varepsilon}(x) = \begin{cases} 1/\sqrt{\varepsilon}, & \text{αν } x \in [x_0 - \frac{1}{2}\varepsilon, x_0 + \frac{1}{2}\varepsilon], \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases} \tag{35}$$

καθώς και με άλλες επαρκώς εντοπισμένες κυματοσυναρτήσεις με ελεγχόμενη διασπορά.[31]

Με τη βοήθεια του τελεστή θέσης, μπορούμε να κατασκευάσουμε ερμιτιανούς τελεστές που να έχουν ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές και να έχουν, στην πράξη, την ίδια φυσική σημασία με τον τελεστή θέσης. Ανάλογη δυνατότητα υπάρχει και με όλους τους τελεστές που αντιστοιχούν σε μεγέθη συνεχούς φάσματος τιμών.

Θα δείξουμε εδώ τη γενική ιδέα. Ας ονομάσουμε $\hat{P}_{x_0,\varepsilon}$ τον προβολικό τελεστή στην κυματοσυνάρτηση $\Phi_{x_0,\varepsilon}$ της εξ. (35). Για κάθε x_0 έχουμε έναν τέτοιο τελεστή. Η δράση του σε κυματοσυνάρτηση Ψ είναι

$$\begin{aligned} \hat{P}_{x_0,\varepsilon}\Psi(x) &= (\Phi_{x_0,\varepsilon}, \Psi)\, \Phi_{x_0,\varepsilon}(x) \\ &= \left[\int_{\mathbb{R}} \Phi_{x_0,\varepsilon}(x')\Psi(x')dx'\right] \Phi_{x_0,\varepsilon}(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left[\int_{x_0-\varepsilon/2}^{x_0+\varepsilon/2} \Psi(x')dx'\right] \Phi_{x_0,\varepsilon}(x) \\ &\approx \sqrt{\varepsilon}\, \Psi(x_0)\, \Phi_{x_0,\varepsilon}(x) \\ &= \begin{cases} \Psi(x_0), & \text{αν } x \in [x_0 - \varepsilon/2, x_0 - \varepsilon/2]. \\ 0, & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \end{aligned} \tag{36}$$

[29] Θα δούμε και παραδείγματα, όπου ο τελεστής ορμής έχει ιδιοσυναρτήσεις, π.χ. για σωματίδιο περιορισμένο σε δακτύλιο με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

[30] Πρόβλημα 9.

[31] Πρόβλημα 14 κεφ. 4.

Η προσέγγιση του προτελευταίου βήματος γίνεται όλοένα και ακριβέστερη, όσο μικρότερο λαμβάνουμε το ε σε σχέση με το χαρακτηριστικό μήκος μεταβολής της $\Psi(x)$. Θεωρούμε τώρα μια διαμέριση του χώρου (της ευθείας x από το $-\infty$ ως το $+\infty$) σε αλλεπάλληλα εφαπτόμενα διαστήματα μήκους ε και κέντρου x_i, $i \in \mathbb{Z}$. Σε αυτά τα διαστήματα θεωρούμε αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις $\Phi_{x_i,\varepsilon}$, οι οποίες ορίζονται ακριβώς όπως η (35), με το x_i στη θέση του x_0. Επίσης, θεωρούμε τους αντίστοιχους προβολικούς τελεστές $\hat{P}_{x_i,\varepsilon}$. Ορίζουμε στη συνέχεια τον τελεστή $\hat{X}_{i,\varepsilon} = x_i \hat{P}_{x_i,\varepsilon}$, ο οποίος διαφέρει από τον προβολικό τελεστή μόνο κατά το ότι δίνει τιμή x_i εκεί όπου ο προβολικός τελεστής δίνει τιμή 1. Εφόσον ο $\hat{X}_{i,\varepsilon}$ προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό ερμιτιανού τελεστή με πραγματικό αριθμό, είναι επίσης ερμιτιανός, με δύο ιδιοτιμές: x_i και 0.

Από την (36) λαμβάνουμε ότι, για $\varepsilon \ll 1$, δηλαδή στο όριο πυκνής διαμέρισης, $\hat{X}_{i,\varepsilon}\Psi(x) = x_i\,\Psi(x_i)$, για $x \in [x_0 - \varepsilon/2, x_0 - \varepsilon/2]$, και 0, διαφορετικά. Το τελευταίο βήμα του συλλογισμού έγκειται στο να πάρουμε το άθροισμα των τελεστών $\hat{X}_{i,\varepsilon}$, ώστε να καλύπτεται όλος ο χώρος (όλη η ευθεία x) λόγω της διαμέρισης: ορίζουμε τον τελεστή

$$\hat{X} = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \hat{X}_i, \tag{37}$$

ο οποίος είναι ερμιτιανός, ως άθροισμα ερμιτιανών τελεστών. Προκύπτει τότε

$$\hat{X}\Psi(x) = x_i\Psi(x_i) \approx x\Psi(x) \tag{38}$$

με x_i το κέντρο του διαστήματος όπου βρίσκεται το x. Η τελευταία προσέγγιση γίνεται ολοένα ακριβέστερη για πυκνότερες διαμερίσεις ($\varepsilon \to 0$). Σε αυτό το όριο, επομένως, ο τελεστής $\hat{X}$ τείνει στον τελεστή θέσης $\hat{x}$. Από την άλλη, ο $\hat{X}$ είναι διακριτό (αν και άπειρο) άθροισμα ερμιτιανών τελεστών με καλά ορισμένες ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές, επομένως έχει άπειρες αλλά διακριτές ιδιοκαταστάσεις (τις $\Phi_{x_i,\varepsilon}$) και ιδιοτιμές (τις x_i). Με αυτό τον τρόπο παρακάμπτουμε το πρόβλημα της απουσίας ιδιοκαταστάσεων και ιδιοτιμών του τελεστή θέσης.

Η ίδια φιλοσοφία που οδήγησε στον $\hat{X}$, δηλαδή η διαμέριση του συνεχούς φάσματος τιμών, ο ορισμός αντίστοιχων προβολικών τελεστών, και τέλος η διακριτοποίηση του τελεστή, μπορεί να εκλεπτυνθεί και να χρησιμοποιηθεί και σε τελεστές άλλων μεγεθών συνεχούς φάσματος. Η αντίστοιχη θεωρία οδηγεί στην εισαγωγή της έννοιας του *φασματικού μέτρου (spectral measure)* και στο *θεώρημα φασματικής ανάλυσης (spectral decomposition theorem)* για τελεστές συνεχούς φάσματος.

3.8 Προβλήματα

1. Πεισθείτε για τις ιδιότητες του εσωτερικού γινομμένου (13).

2. Δείξτε ότι οι ερμιτιανοί τελεστές έχουν την ιδιότητα $(\Psi, \hat{A}\,\Phi) = (\hat{A}\,\Psi, \Phi)$, για κάθε Ψ και Φ στο πεδίο ορισμού τους. Υπόδειξη: ξεκινήστε από την απαίτηση $\mathrm{Im}(\Phi + \Psi, \hat{A}\,(\Phi + \Psi)) = 0$ και ταυτόχρονα $\mathrm{Im}(\Phi + i\Psi, \hat{A}\,(\Phi + i\Psi)) = 0$ (από τον ορισμό του ερμιτιανού τελεστή). Επίσης, διαπιστώστε ότι το γινόμενο γραμμικών τελεστών είναι γραμμικός τελεστής.

3. Δείξτε ότι, αν ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, τότε και ο $\hat{A}^n$ (n θετικός ακέραιος) είναι ερμιτιανός.

4. Δείξτε ότι, αν $\hat{P}$ προβολικός τελεστής, τότε $\hat{P}^2 = \hat{P}$. Επίσης, δείξτε ότι οι προβολικοί τελεστές είναι ερμιτιανοί με ιδιοτιμές 0 ή 1.

5. Δείξτε ότι, αν ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, τότε το ίδιο ισχύει και για τον $\hat{f}(\hat{A}) = \sum_n c_n \hat{A}^n$, όπου $c_n \in \mathbb{R}$ και $f(x) = \sum_n c_n x^n$ αναλυτική συνάρτηση.

6. Δείξτε ότι το μέγεθος $\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$ έχει την ίδια τυπική απόκλιση με το $\hat{A}$, αλλά μέση τιμή μηδέν.

7. Δείξτε ότι, αν δύο καταστάσεις Ψ και Φ (κυματοσυναρτήσεις με νόρμα 1) δεν είναι ορθογώνιες (και επίσης δεν είναι η μια πολλαπλάσιο της άλλης), τότε οι αντίστοιχοι προβολικοί τελεστές δεν μετατίθενται. Υπόδειξη: Θέστε $Q(x) = [\hat{P}_\Psi, \hat{P}_\Phi]\Psi$ και δείξτε ότι $(Q, Q) > 0$. Χρησιμοποιήστε την ανισότητα Schwarz.

8. Έστω δύο κυματοσυναρτήσεις Ψ_1 και Ψ_2 με νόρμα 1 και τέτοιες ώστε να μην είναι η μια πολλαπλάσιο της άλλης. Θεωρήστε την $\Phi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$, με a_1 και a_2 μη μηδενικές σταθερές και $|a_1|^2 + |a_2|^2 + 2\mathrm{Re}[a_1^* a_2(\Psi_1, \Psi_2)] = 1$. α) Δείξτε ότι η Φ είναι κανονικοποιημένη. β) Δείξτε ότι η Φ δεν είναι ταυτόχρονα ορθογώνια στην Ψ_1 και στην Ψ_2. γ) Γιατί ο προβολικός τελεστής της Φ είναι μέγεθος ασύμβατο είτε με την Ψ_1 είτε με την Ψ_2 είτε και με τις δύο;

9. Δείξτε ότι οι τελεστές θέσης και ορμής δεν έχουν ιδιοκαταστάσεις στο χώρο των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων στο $\mathbb{R}$ (πλην, φυσικά, της τετριμμένης περίπτωσης $\Psi(x) = 0$, η οποία δεν αντιστοιχεί σε κατάσταση). (Υπόδειξη για τον τελεστή ορμής: βρείτε τις ιδιοσυναρτήσεις του και δείξτε ότι δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες.) Δείξτε το ίδιο για τον τελεστή της κινητικής ενέργειας, $\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$.

10. Δείξτε την ακόλουθη ταυτότητα μεταθετών: $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$. Συγκρίνετε με τον κανόνα παραγώγισης γινομένου συναρτήσεων, $\frac{\partial}{\partial x}[f(x)g(x)] = \left[\frac{\partial}{\partial x}f(x)\right] g(x) + f(x)\left[\frac{\partial}{\partial x}g(x)\right]$.

11. Υπολογίστε τον μεταθέτη του τελεστή θέσης με τον τελεστή κινητικής ενέργειας, $[\hat{x}, \frac{1}{2m}\hat{p}^2]$. (Υπόδειξη: χρησιμοποιήστε την ταυτότητα του προβλήματος 10.) Εάν ερμηνεύσετε τον τελεστή $\frac{1}{m}\hat{p} \equiv \hat{v}$ ως τελεστή ταχύτητας, τι λαμβάνετε;

12. Θεωρήστε κίνηση ενός σωματιδίου σε τρεις χωρικές διαστάσεις. Οι τελεστές θέσης $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{r}_x, \hat{r}_y, \hat{r}_z)$ και ορμής $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_z, \hat{p}_z)$ είναι διανυσματικοί. Δρουν με προφανή γενίκευση της μιας διάστασης: $\hat{r}_i\,\Psi(\mathbf{r}) = r_i\,\Psi(\mathbf{r})$ και $\hat{p}_i\,\Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r_i}$ ($i \in \{x, y, z\}$). Υπολογίστε τους μεταθέτες $[\hat{r}_i, \hat{p}_j]$, τον τελεστή κινητικής ενέργειας $\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2$, και το μεταθέτη $[\mathbf{r}_i, \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2]$. Τι δίνει ο μεταθέτης, εάν ερμηνεύσουμε τον τελεστή $\frac{1}{m}\hat{\mathbf{p}} \equiv \hat{\mathbf{v}}$ ως διανυσματικό τελεστή ταχύτητας;

13. Θεωρήστε τη σχέση απροσδιοριστίας (29). Υποθέστε ότι η Ψ είναι τέτοια, ώστε το αριστερό μέλος να μηδενίζεται: $(\Delta A)(\Delta B) = 0$. Δείξτε, με απ΄ ευθείας υπολογισμό της ποσότητας $\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle_\Psi$ ότι και το δεξιό μέλος μηδενίζεται. (Υπόδειξη:

για να μηδενίζεται το αριστερό μέλος, η Ψ πρέπει να είναι υποχρεωτικά ιδιοκατάσταση ενός των δύο τελεστών.)

14. Δείξτε ότι, για να ικανοποιείται το ελάχιστο γινόμενο απροσδιοριστίας, δηλαδή $(\Delta A)_\Psi(\Delta B)_\Psi = \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle_\Psi|$, θα πρέπει η Ψ να είναι τέτοια ώστε οι $\hat{A}\Psi$ και $\hat{B}\Psi$ να είναι γραμμικά εξαρτημένες, δηλ. $\hat{B}\Psi = i\lambda\hat{A}\Psi$, με $\lambda \in \mathbb{R}$. (Υπόδειξη: εξετάστε πότε η ανισότητα Cauchy-Schwarz μετατρέπεται σε ισότητα.)

15. Θεωρήστε σωματίδιο κινούμενο σε μία διάσταση στο διάστημα $(-\infty,\infty)$. Υποθέστε ότι η Ψ είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κατάσταση. Δείξτε ότι η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας στην κατάσταση είναι πάντα γνήσια θετική: $\left(\Psi, \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi\right) > 0$. (Υπόδειξη: κάνετε ολοκλήρωση κατά παράγοντες και χρησιμοποιήστε την ιδιότητα $\Psi(x) \to 0$ και $\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) \to 0$ για $x \to \pm\infty$. Εναλλακτικά, χρησιμοποιήστε την ερμιτιανή ιδιότητα του τελεστή ορμής.)

16. Θεωρήστε σωματίδιο σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού, δηλ. κινούμενο στο διάστημα $[-d,d]$ με $\Psi(-d) = \Psi(d) = 0$. Το σωματίδιο βρίσκεται σε κατάσταση $\Psi(x) = c\,(x+d)$, για $x < 0$, και $\Psi(x) = -c\,(x-d)$, για $d \geq 0$. Βρείτε την κατανομή πιθανότητας της κινητικής ενέργειας.

4 Η γεωμετρική δομή των καταστάσεων: χώρος Hilbert

4.1 Γενικά

Οι κυματοσυναρτήσεις στην κβαντική μηχανική ικανοποιούν τα αξιώματα του διανυσματικού χώρου. Συμβολίζουμε το σύνολο των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων μιγαδικών συναρτήσεων στο $\mathbb{R}$, δηλ. $\int_{\mathbb{R}} |\Psi(x)|^2 dx < \infty$ (συμπεριλαμβανόμενης και της σταθερής $\Psi = 0$), με $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Όμοια, και αναλόγως τη φύση του προβλήματος, θεωρούμε το σύνολο των κυματοσυναρτήσεων $\mathcal{L}^2([0,a])$ για σωματίδιο που κινείται σε μία διάσταση, αλλά περιορισμένο στο διάστημα $[0,a]$, το σύνολο των κυματοσυναρτήσεων $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ για σωματίδιο που κινείται στις τρεις διαστάσεις, κ.ο.κ. Το μόνο που αλλάζει στα ακόλουθα, αναλόγως την περίπτωση, είναι το όρισμα της κυματοσυνάρτησης (x στη μία διάσταση, $\mathbf{r} \equiv (x,y,z)$ στις τρεις διαστάσεις) καθώς και η μεταβλητή και τα όρια ολοκλήρωσης στο εσωτερικό γινόμενο ($\int_{\mathbb{R}} dx$, $\int_0^a dx$, $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x$, κ.ο.κ.).[(32)] Για απλότητα θα αναφερόμαστε συνήθως στον $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Έστω $\Psi, \Psi_1, \Psi_2 \ldots \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ και $c \in \mathbb{C}$ μιγαδικός αριθμός. Τότε, είναι στοιχειώδες να αποδειχθούν τα ακόλουθα:

- $(\Psi_1 + \Psi_2) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ (κλειστότητα ως προς πρόσθεση).
- $c\,\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ (κλειστότητα ως προς πολλαπλασιασμό με αριθμό).

Επίσης, ικανοποιούνται τα υπόλοιπα αξιώματα που ορίζουν ένα διανυσματικό χώρο επί του σώματος $\mathbb{C}$, με μηδενικό στοιχείο την $\Psi = 0$. Επομένως, οι κυματοσυναρτήσεις επέχουν το ρόλο διανυσμάτων.

Ο διανυσματικός χώρος είναι εφοδιασμένος με εσωτερικό γινόμενο (Φ, Ψ) (εξ. 13), από το οποίο επάγεται η νόρμα $\|\Psi\| = \sqrt{(\Psi,\Psi)}$. Η νόρμα ερμηνεύεται ως μήκος του διανύσματος και επίσης ορίζει μια απόσταση μεταξύ οποιωνδήποτε δύο διανυσμάτων Ψ και Φ:

$$\|\Psi - \Phi\| \equiv \sqrt{(\Psi - \Phi, \Psi - \Phi)} \equiv \left[\int |\Psi(x) - \Phi(x)|^2 dx\right]^{1/2} \tag{39}$$

Εάν $\|\Psi - \Phi\| = 0$, τότε τα δύο διανύσματα ταυτίζονται. Αυτό φαίνεται από την ολοκληρωτέα ποσότητα $|\Psi(x) - \Phi(x)|^2 \geq 0$, η οποία πρέπει να μηδενίζεται, για να μηδενιστεί το ολοκλήρωμα, επομένως $\Psi(x) = \Phi(x)$.[(33)]

Η ύπαρξη νόρμας επιτρέπει να μιλήσουμε για σύγκλιση ακολουθίας συναρτήσεων. Λέμε ότι μια ακολουθία Ψ_n, $n = 1, 2, \ldots$, συγκλίνει στη Φ, αν η ακολουθία θετικών

[(32)] Οι συνοριακές συνθήκες που επιβάλλουμε στις κυματοσυναρτήσεις προκύπτουν από το φυσικό πρόβλημα που προσεγγίζουμε και παίζουν σημαντικό ρόλο στους τελεστές που αναπαριστούν φυσικά μεγέθη. Βλ. πρόβλημα 1.

[(33)] Στην πραγματικότητα, εάν $\Psi(x) \neq \Phi(x)$ μόνο σε διακριτά σημεία x (η μαθηματική διατύπωση είναι *υποσύνολο μηδενικού μέτρου του* $\mathbb{R}$), τότε το ολοκλήρωμα πάλι μηδενίζεται, χωρίς να ταυτίζονται οι συναρτήσεις σε όλα τα σημεία. Ωστόσο, συναρτήσεις που διαφέρουν μόνο σε διακριτά σημεία δεχόμαστε ότι αντιστοιχούν στο ίδιο διάνυσμα. Οι κατανομές πιθανότητας που προκύπτουν από δυο τέτοιες συναρτήσεις ταυτίζονται μαθηματικά, διότι διαφορές σε διακριτά σημεία δεν συνεισφέρουν στο $\int \Psi^* \hat{A}\Psi dx$, για τον ίδιο λόγο που δεν συνεισφέρουν στο $\int |\Psi - \Phi|^2 dx$.

αριθμών $\|\Psi_n - \Phi\|$ (δηλ. η απόσταση μεταξύ των Ψ_n και Φ) συγκλίνει στο μηδέν.[34] Οι ιδιότητες εσωτερικού γινομένου και πληρότητας, που χαρακτηρίζουν το διανυσματικό χώρο, του δίνουν δομή *χώρου Hilbert*,, ο οποίος συμβολίζεται συνήθως με $\mathcal{H}$.

Θυμίζουμε ότι N διανύσματα χαρακτηρίζονται γραμμικά ανεξάρτητα μεταξύ τους, αν δεν μπορεί να γραφεί κανένα από αυτά ως γραμμικός συνδυασμός των υπόλοιπων. Εάν οποιοδήποτε άλλο διάνυσμα αναπτύσσεται ως γραμμικός συνδυασμός αυτών, τότε λέμε ότι αυτά αποτελούν βάση, και ότι ο χώρος έχει διάσταση N. Για τον χώρο Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, προκύπτει ότι η διάσταση είναι άπειρη αριθμήσιμη ($\aleph_0$).[35]

Σε πεπερασμένη διάσταση, μπορεί κανείς, χωρίς πρόβλημα, να επιλέξει οποιαδήποτε βάση για ανάπτυγμα των διανυσμάτων. Σε άπειρη διάσταση, η κατάσταση περιπλέκεται, λόγω του εν γένει άπειρου αθροίσματος που απαιτείται για να αναπτυχθεί ένα τυχαίο διάνυσμα. Οι περιορισμοί που τίθενται από την ανάγκη σύγκλισης του άπειρου αθροίσματος, οδηγούν στην απαίτηση για *ορθοκανονική βάση (orthonormal basis)*. Ορίζουμε λοιπόν ως ορθοκανονική βάση στο χώρο Hilbert $\mathcal{H}$ ένα αριθμήσιμα άπειρο σύνολο διανυσμάτων (κυματοσυναρτήσεων) $u_1(x), u_2(x), \ldots \in \mathcal{H}$, τέτοιο, ώστε:

$$\begin{aligned} &(u_i, u_i) = 1 \\ &(u_i, u_j) = 0, \text{ αν } i \neq j \end{aligned} \tag{40}$$

[με συντομογραφία $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$, όπου η συνάρτηση Kronecker $\delta_{ij} = 1$, αν $i = j$, και $= 0$, διαφορετικά] και επιπρόσθετα, για κάθε $\Psi \in \mathcal{H}$, να υπάρχει ακολουθία $c_1, c_2 \ldots \in \mathbb{C}$, τέτοια, ώστε

$$\sum_{i=1}^{\infty} c_i \, u_i = \Psi. \tag{41}$$

Οι πρώτη εξίσωση απαιτεί την κανονικοποίηση των στοιχείων βάσης και η δεύτερη τη μεταξύ τους ορθογωνιότητα. Η τρίτη ερμηνεύεται ως σύγκλιση της άπειρης σειράς ως προς τη νόρμα του $\mathcal{H}$, δηλαδή $\lim_{n\to\infty} \| \sum_{i=1}^{n} c_i \, u_i - \Psi \| = 0$.[36] Εάν έχουμε δεδομένη μια κυματοσυνάρτηση Ψ και μια ορθοκανονική βάση $\{u_i\}$, τότε οι συντελεστές αναπτύγματος c_i βρίσκονται παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο[37]

$$c_i = (u_i, \Psi) = \int u_i^*(x) \, \Psi(x) \, dx. \tag{42}$$

Συνεπώς, η έκφραση (41) γράφεται και $\sum_{i=1}^{\infty} (u_i, \Psi) \, u_i = \Psi$. Παρατηρούμε ότι εδώ εμφανίζεται ο προβολικός τελεστής στη u_i, $\hat{P}_{u_i}$, με $\hat{P}_{u_i} \Psi \equiv (u_i, \Psi) \, u_i$ [βλ. τον ορισμό (22)]. Επομένως, το ανάπτυγμα σε ορθοκανονική βάση λαμβάνει τη μορφή

$$\sum_{i=1}^{\infty} \hat{P}_{u_i} \, \Psi = \Psi, \tag{43}$$

---

[34] Αξίζει να αναφέρουμε σχετικά τα εξής, αν και δεν θα μας απασχολήσουν εδώ. Κατ΄ επέκταση της έννοιας της σύγκλισης ορίζεται και η έννοια της συνέχειας. Επίσης, ορίζονται ακολουθίες Cauchy, για τις οποίες η νόρμα $\|\Psi_n - \Psi_m\| \to 0$ καθώς τα $n, m \to \infty$, και οι οποίες συγκλίνουν σε τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις. Ως εκ τούτου, ο χώρος χαρακτηρίζεται *πλήρης*.

[35] Το ίδιο ισχύει και για τους $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ και $\mathcal{L}^2([0, a])$ (βλ. προβλήματα 2 και 3).

[36] Σε άπειρη διάσταση, αυτός ο ορισμός διαφοροποιείται από τον ορισμό της κατά σημείο σύγκλισης: $\lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} c_i \, u_i(x) = \Psi(x)$.

[37] Πρόβλημα 4.

που είναι εμφανής γενίκευση της ανάλυσης ενός διανύσματος χώρου πεπερασμένης διάστασης σε ορθογώνιο σύστημα, με τις συντεταγμένες c_i να δίνονται μέσω της προβολής του διανύσματος στους άξονες. Οι κύριες διαφορές είναι, πρώτον, το άπειρο αντί πεπερασμένο ανάπτυγμα, και δεύτερον ότι το εσωτερικό γινόμενο $c_i = (u_i, \Psi)$, που εκφράζει την τιμή της προβολής, είναι μιγαδικός, αντί πραγματικός, αριθμός.

Το γεγονός ότι η εξ. (43) ισχύει για κάθε $\Psi \in \mathcal{H}$, συνεπάγεται ότι το άθροισμα των προβολικών τελεστών δίνει τον ταυτοτικό τελεστή $\hat{I}$:[38]

$$\sum_{i=1}^{\infty} \hat{P}_{u_i} = \hat{I}, \tag{44}$$

Αυτή ονομάζεται *σχέση πληρότητας*, και εκφράζει την ιδιότητα ότι το σύνολο των u_i δεν είναι μόνο γραμμικά ανεξάρτητο, αλλά αποτελεί βάση (παράγει όλο το χώρο $\mathcal{H}$).[39]

Η νόρμα της Ψ συνδέεται με τους συντελεστές c_i ως εξής:[40]

$$\begin{aligned}
\|\Psi\|^2 &\equiv (\Psi, \Psi) \\
&= (\sum_i c_i u_i, \sum_j c_j u_j) \\
&= \sum_j c_j (\sum_i c_i u_i, u_j) \qquad \text{(βλ. 2η από εξ. (13))} \\
&= \sum_i \sum_j c_i^* c_j (u_i, u_j) \quad \text{(βλ. 3η από εξ. (13))} \\
&= \sum_i c_i^* c_i (u_i, u_i) \qquad \text{(διότι } (u_i, u_j) = 0, \text{ για } i \neq j) \\
&= \sum_i |c_i|^2 \qquad \text{(διότι } (u_i, u_i) = 1).
\end{aligned} \tag{45}$$

Συνεπώς, η απαίτηση $\|\Psi\|^2 < \infty$ συνεπάγεται την απαίτηση $\sum_i |c_i|^2 < \infty$.[41] Αλλά ισχύει και το αντίστροφο (δίνουμε το αποτέλεσμα χωρίς απόδειξη): εάν για μια ακολουθία αριθμών $\{c_i\}$ ισχύει $\sum_i |c_i|^2 < \infty$, τότε η $\sum_i c_i \, u_i$ συγκλίνει.

Δεδομένης μιας ορθοκανονικής βάσης $\{u_i\}$, το ανάπτυγμα (41), και ισοδύναμα το ανάπτυγμα (43), είναι μοναδικό. Δηλαδή, αν υποθέσουμε ότι $\sum_i c_i u_i = \Psi = \sum_i d_i u_i$, τότε, υποχρεωτικά, $d_i = c_i, \ \forall i$.

Έχουμε μια πλήρη αντιστοιχία των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσων $\Psi \in \mathcal{H}$ με τις ακολουθίες $\{c_i\}$, για τις οποίες το $\sum_i c_i u_i$ συγκλίνει. Αν $c = \{c_i\}$ και $d = \{d_i\}$ δυο τέτοιες ακολουθίες, με $\Psi = \sum_i c_i u_i$ και $\Phi = \sum_i d_i u_i$, τότε $(\Psi, \Phi) = \sum_i c_i^* d_i \equiv (c, d)$ (με προφανή συμβολισμό του εσωτερικού γινομένου ακολουθιών),

[38] Ο ταυτοτικός τελεστής ορίζεται από την ιδιότητα $\hat{I}\,\Psi = \Psi$.

[39] Σε πεπερασμένη διάσταση, ο αριθμός των u_i ταυτίζεται με τη διάσταση του χώρου. Σε άπειρη διάσταση, όμως, είναι δυνατόν τα u_i να είναι ορθοκανονικά και άπειρα, αλλά να μην επαρκούν ώστε να παράξουν όλα τα διανύσματα του χώρου. Αυτό φαίνεται στο πολύ απλό παράδειγμα του να θεωρήσουμε τη βάση πλην του u_1. Τα εναπομείναντα $(u_2, u_2, \ldots)$ είναι άπειρα και ορθοκανονικά, αλλά δεν μπορούν να παράξουν το u_1 με γραμμικό συνδυασμό, διότι είναι όλα ορθογώνια σε αυτό.

[40] Εδώ χρησιμοποιούμε κανόνες πεπερασμένων αθροισμάτων σε άπειρα αθροισματα. Ωστόσο, το αποτέλεσμα ισχύει, διότι αποδεικνύεται με προσεκτικό χειρισμό των άπειρων αθροισμάτων.

[41] Αξίζει να τονίσουμε ότι η εξ. (45) είναι γενίκευση του πυθαγόριου θεωρήματος σε άπειρες διαστάσεις.

$\Psi + \Phi = \sum_i (c_i + d_i)\, u_i$, και $a\Psi = \sum_i (ac_i)\, u_i$.[42] Επομένως, οι ακολουθίες και οι κυματοσυναρτήσεις είναι δύο διαφορετικοί τρόποι έκφρασης των ίδιων κβαντικών καταστάσεων. Ο χώρος των τετραγωνικά αθροίσιμων ακολουθιών συμβολίζεται με $\ell^2(\mathbb{N})$ (εφόσον ο δείκτης i λαμβάνει τιμές στους φυσικούς), είναι *ισόμορφος* με τον $\mathcal{H}$ και, επομένως, ικανοποιεί επίσης τα αξιώματα του χώρου Hilbert.

4.2 Πληρότητα ιδιοδιανυσμάτων και πιθανότητα μετάβασης

Έστω ότι μια κυματοσυνάρτηση μπορεί να αναπτυχθεί σε ορθογώνιες ιδιοκαταστάσεις ενός ερμιτιανού τελεστή $\hat{A}$, δηλ.

$$\Psi = \sum_i c_i u_i, \tag{46}$$

με $\hat{A}u_i = a_i u_i$ και $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$. Τότε, η πιθανότητα μέτρησης τιμής a_i ταυτίζεται με την πιθανότητα μετάβασης στην κατάσταση u_i (εξ. 27):

$$P_i = |(u_i, \Psi)|^2 = |c_i|^2. \tag{47}$$

Η μέση τιμή των μετρήσεων του $\hat{A}$ στη συλλογή Ψ και οι ροπές της κατανομής πιθανότητας των μετρήσεων θα είναι εξ ορισμού

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle_\Psi &= \sum_i P_i a_i = \sum_i |c_i|^2 a_i \\
\langle \hat{A}^2 \rangle_\Psi &= \sum_i P_i a_i^2 = \sum_i |c_i|^2 a_i^2 \\
\text{και γενικά:}\quad \langle \hat{A}^n \rangle_\Psi &= \sum_i P_i a_i^n = \sum_i |c_i|^2 a_i^n
\end{aligned} \tag{48}$$

κ.ο.κ. Από την άλλη, η εξίσωση (17) δίνει για την n-οστή ροπή: $\langle \hat{A}^n \rangle_\Psi = (\Psi, \hat{A}^n \Psi) = (\sum_i c_i u_i, \hat{A}^n \sum_j c_j u_j) = \sum_{ij} c_i^* c_j (u_i, \hat{A}^n u_j) = \sum_{ij} c_i^* c_j a_j^n (u_i, u_j) = \sum_i |c_i|^2 a_i^n$, δεδομένης της ορθοκανονικότητας. Επομένως, ο τύπος της μέσης τιμής (17) συμφωνεί με τον τύπο της πιθανότητας μετάβασης.

Τίθεται τώρα το ερώτημα, εάν μπορεί να βρεθεί ένα ανάπτυγμα (46) για οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση Ψ και για οποιοδήποτε παρατηρήσιμο μέγεθος $\hat{A}$, ώστε να εφαρμοστούν οι τύποι (47) και (48). Η απάντηση είναι αρνητική, δεδομένου ότι υπάρχουν ερμιτιανοί τελεστές που δεν έχουν ιδιοδιανύσματα στο χώρο Hilbert (όπως ο τελεστής θέσης) ή τα ιδιοδιανύσματά τους δεν επαρκούν για να παράξουν το χώρο (δεν δίνουν πληρότητα). Τα αντίστοιχα μεγέθη έχουν συνεχές φάσμα τιμών. Σε αυτή την περίπτωση, μπορούμε να κάνουμε μια ανάλυση ανάλογη εκείνης του εδαφίου 3.7, χρησιμοποιώντας μια διαμέριση του συνεχούς φάσματος με τους αντίστοιχους προβολικούς τελεστές, και τροποποιώντας το μετρήσιμο μέγεθος και τον αντίστοιχο τελεστή, ώστε να έχει ιδιοσυναρτήσεις που δίνουν πληρότητα. Ο τροποποιημένος τελεστής έχει διακριτό φάσμα, ως διαμέριση του συνεχούς φάσματος, και δίνει κατανομή πιθανότητας είτε απ΄ ευθείας, σύμφωνα με τους τύπους (47) και (48), είτε μέσω των ροπών, σύμφωνα

[42] Πρόβλημα 5.

με τον τύπο (17). Στο όριο της πυκνής διαμέρισης, το φάσμα επανέρχεται στο συνεχές, η κατανομή πιθανότητας τείνει σε πυκνότητα πιθανότητας, και πλέον εφαρμόζεται μόνο ο τύπος (17) για να βρεθεί η κατανομή.

4.3 Αναπαράσταση γραμμικών τελεστών από πίνακες

Πώς αναπαρίστανται οι *γραμμικοί τελεστές* (π.χ., οι ερμιτιανοί) στο χώρο των ακολουθιών; Αν $\{u_i\}$ τα διανύσματα βάσης, και $\hat{A}$ γραμμικός τελεστής, μπορούμε να πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο

$$A_{ij} \equiv (u_i, \hat{A}u_j) \equiv \int u_i(x)\hat{A}\, u_j(x)\, dx. \tag{49}$$

Αν $\Psi = \sum_j c_j u_j$ οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση, τότε η δράση του $\hat{A}\Psi = \Phi$ γράφεται $\hat{A}\,\Psi = \sum_j c_j \hat{A}\, u_j = \Phi$. Παίρνοντας και το ανάπτυγμα της $\Phi = \sum_k d_k u_k$, λαμβάνουμε $\sum_j c_j \hat{A}\, u_j = \sum_k d_k u_k$. Σχηματίζουμε τώρα το εσωτερικό γινόμενο της u_i με το αριστερό και δεξιό μέλος της τελευταίας εξίσωσης. Δεδομένου ότι $(u_i, u_k) = \delta_{ik}$ (εξ. 40), μηδενίζονται όλοι οι όροι πλην ενός στο δεξιό άθροισμα: $\sum_j c_j\,(u_i, \hat{A}\, u_j) = d_i$. Χρησιμοποιώντας το συμβολισμό (49), καταλήγουμε:

$$\sum_j A_{ij}\, c_j = d_i \tag{50}$$

Μέσω αυτής της έκφρασης μετασχηματίζονται οι συντεταγμένες μιας κυματοσυνάρτησης σε εκείνες μιας άλλης, λόγω της δράσης ενός τελεστή. Η έκφραση είναι αντίστοιχη με τον πολλαπλασιασμό ενός τετραγωνικού πίνακα, με στοιχεία A_{ij}, με έναν πίνακα-στήλη, με στοιχεία c_j, δίνοντας ως αποτέλεσμα έναν πίνακα-στήλη με στοιχεία d_i. Η μόνη διαφορά είναι ότι εδώ οι πίνακες έχουν διαστάσεις $(\infty \times \infty)$ (ο A) και $(\infty \times 1)$ (οι c και d). Όσο για τη δομή των τελεστών, οι μόνοι δύο περιορισμοί είναι α) να είναι γραμμικοί,[43] και β) να περιλαμβάνουν στο πεδίο ορισμού τους τις συναρτήσεις u_i, ώστε να εφαρμόζεται η εξ. (49). Κατά τα άλλα, οι τελεστές μπορεί να είναι διαφορικοί (όπως η ορμή), ολοκληρωτικοί, κ.λ.π., χωρίς αυτό να εμποδίζει την αναπαράστασή τους από πίνακες.[44]

Είναι εύκολο να δει κανείς ότι το γινόμενο γραμμικών τελεστών αναπαριστάται από το αντίστοιχο γινόμενο πινάκων:[45]

$$\hat{C} = \hat{A}\hat{B} \longrightarrow C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}. \tag{51}$$

Οι ερμιτιανοί τελεστές εκφράζονται από πίνακες με ιδιαίτερη συμμετρική δομή:

$$A_{ij} = A^*_{ji} \qquad \text{(αν και μόνο αν ο } \hat{A} \text{ είναι ερμιτιανός).} \tag{52}$$

Αυτό το βλέπουμε παίρνοντας $A_{ij} = (u_i, \hat{A}\, u_j) = (\hat{A}\, u_i, u_j) = (u_j, \hat{A}\, u_i)^* = A^*_{ji}$ [στο δεύτερο βήμα χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα (16)]. Αντίστροφα: έστω ότι, για κάποιον

[43] Η γραμμικότητα είναι απαραίτητη για την αναπαράσταση τελεστών από πίνακες, δεδομένου ότι ο πολλαπλασιασμός πινάκων είναι πάντα γραμμική πράξη.

[44] Πρόβλημα 6.

[45] Πρόβλημα 7.

γραμμικό τελεστή $\hat{A}$, ισχύει $(u_i, \hat{A}\, u_j) = (u_j, \hat{A}\, u_i)^*$ για κάθε ζεύγος στοιχείων βάσης u_i και u_j. Τότε, μπορούμε να δείξουμε ότι ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός.[46]

4.4 Κοινά ιδιοδιανύσματα μετατιθέμενων τελεστών

Έστω δύο ερμιτιανοί τελεστές, $\hat{A}$ με ιδιοδιανύσματα u_i και ιδιοτιμές α_i και $\hat{B}$ με ιδιοδιανύσματα v_i και ιδιοτιμές β_i. Έστω ότι το σύνολο $\{u_i\}$ αποτελεί ορθοκανονική βάση στο χώρο Hilbert, και ότι το ίδιο ισχύει για το σύνολο $\{v_i\}$. Τότε, οι τελεστές μετατίθενται αν και μόνο αν μπορεί να βρεθεί κοινό σύνολο ιδιοδιανυσμάτων τους που να αποτελεί ορθοκανονική βάση, δηλαδή, αν και μόνο αν υπάρχει ορθοκανονική βάση f_i τέτοια ώστε $\hat{A}f_i = \alpha'_i f_i$ και ταυτόχρονα $\hat{B}f_i = \beta'_i f_i$.

Η μία κατεύθυνση της ισοδυναμίας είναι απλή στην απόδειξη. Αν υπάρχει ορθοκανονική βάση f_i τέτοια ώστε $\hat{A}f_i = \alpha'_i f_i$ και ταυτόχρονα $\hat{B}f_i = \beta'_i f_i$, τότε οποιοδήποτε διάνυσμα Ψ μπορεί να αναπτυχθεί σε αυτή τη βάση: $\Psi = \sum_i c_i f_i$. Δρώντας με τους $\hat{A}$ και $\hat{B}$ έχουμε:

$$\hat{A}\hat{B}\Psi = \sum_i c_i \hat{A}\hat{B} f_i = \sum_i c_i \hat{A}\beta'_i f_i = \sum_i c_i \alpha' \beta'_i f_i$$
$$\hat{B}\hat{A}\Psi = \sum_i c_i \hat{B}\hat{A} f_i = \sum_i c_i \hat{B}\alpha'_i f_i = \sum_i c_i \beta'_i \alpha'_i f_i$$

δηλαδή, $\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi$, ο.ε.δ.

Η αντίθετη κατεύθυνση της ισοδυναμίας είναι πιο περίπλοκη στην απόδειξη. Αν $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, τότε εξετάζουμε τα διανύσματα $\hat{B}u_i$, δηλ. τη δράση του $\hat{B}$ στα ιδιοδιανύσματα u_i του $\hat{A}$. Έχουμε $\hat{A}(\hat{B}u_i) = \hat{B}\hat{A}u_i = \hat{B}\alpha_i u_i = \alpha_i(\hat{B}u_i)$. Δηλαδή, το διάνυσμα $\hat{B}u_i$ είναι επίσης ιδιοδιάνυσμα του $\hat{A}$ με την ίδια ιδιοτιμή, α_i. Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις.

(α) Αν η α_i δεν είναι εκφυλισμένη, δηλαδή, αν τα μόνα ιδιοδιανύσματα του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή α_i είναι πολλαπλάσια του u_i, τότε αυτόματα το $\hat{B}u_i$ είναι πολλαπλάσιο του u_i, δηλαδή, $\hat{B}u_i = \beta'_i u_i$ για κάποιο β'_i, επομένως το u_i είναι ιδιοδιάνυσμα του $\hat{B}$ και ταυτίζεται με το ζητούμενο f_i.

(β) Αν η α_i είναι εκφυλισμένη, δηλαδή αν υπάρχουν γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα $u^{(1)}, u^{(2)}, \ldots \in \{u_i\}$ με αντίστοιχες ιδιοτιμές ίσες, $\alpha^{(1)} = \alpha^{(2)} = \ldots \equiv \alpha$, τότε αυτά παράγουν έναν διανυσματικό υπόχωρο $\mathcal{H}_\alpha$, οποιοδήποτε στοιχείο του οποίου είναι ιδιοδιάνυσμα του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή α. Αυτός ονομάζεται υπόχωρος ιδιοτιμής α. Για ευκολία δεχόμαστε ότι ο υπόχωρος έχει πεπερασμένη διάσταση N (η απόδειξη για άπειρη διάσταση υπόχωρου είναι πιο περίπλοκη) και ότι τα $u^{(1)}, u^{(2)}, \ldots$ είναι ανά δύο ορθογώνια μεταξύ τους, δηλαδή αποτελούν ορθοκανονική βάση του υπόχωρου (εάν δεν είναι, παράγουμε εύκολα μια ορθοκανονική βάση με τη μέθοδο Gramm-Schmidt). Παρατηρούμε ότι τα διανύσματα $\hat{B}u^{(n)}$ είναι ιδιοδιανύσματα του $\hat{A}$ ιδιοτιμής α, διότι η μεταθετικότητα των $\hat{A}$ και $\hat{B}$ δίνει $\hat{A}(\hat{B}u^{(n)}) = \hat{B}\hat{A}u^{(n)} = \alpha(\hat{B}u^{(n)})$, δηλαδή η δράση του $\hat{B}$ στα $u^{(n)}$ μάς αφήνει εντός του υπόχωρου $\mathcal{H}_\alpha$. Μένει να κατασκευάσουμε N τον αριθμό ορθοκανονικά ιδιοδιανύσματα του $\hat{B}$ εντός του $\mathcal{H}'$, τα οποία θα είναι τα ζητούμενα f_i εντός του $\mathcal{H}_\alpha$. Προς τούτο, αναπτύσσουμε το $f = \sum_{n'} c_{n'} u^{(n')}$ και γράφουμε την εξίσωση

[46] Πρόβλημα 8.

ιδιοτιμών $\hat{B}f = \beta' f$:

$$\hat{B}\sum_{n'} c_{n'} u^{(n')} = \beta' \sum_{n'} c_{n'} u^{(n')}.$$

Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο από αριστερά με την $u^{(n)}$, και λαμβάνοντας υπ΄όψη τη σχέση ορθοκανονικότητας $(u^{(n)}, u^{(n')}) = \delta_{nn'}$, λαμβάνουμε $\sum_{n'}(B_{nn'} - \beta'\delta_{nn'})c_{n'} = 0$, όπου χρησιμοποιήσαμε το συμβολισμό $B_{nn'} = (u^{(n)}, \hat{B}u^{(n')})$. Η τελευταία εξίσωση ιδιοτιμών σε μορφή πίνακα έχει μη τετριμμένες λύσεις αν η αντίστοιχη ορίζουσα μηδενίζεται, δηλ. αν $\det(B_{nn'} - \beta'\delta_{nn'}) = 0$. Οι ρίζες της εξίσωσης είναι οι ζητούμενες ιδιοτιμές. Η ορίζουσα όμως είναι πολυώνυμο με N ρίζες $\beta'_1, \ldots, \beta'_N$ (ενδέχεται να μη διαφέρουν όλες μεταξύ τους). Άρα, κατασκευάζονται N διαφορετικά ιδιοδιανύσματα f_i του $\hat{B}$ στον $\mathcal{H}'$, τα οποία είναι ταυτόχρονα ιδιοδιανύσματα του $\hat{A}$. Δεδομένου ότι ο $\hat{B}$ είναι ερμιτιανός, τα ιδιοδιανύσματα είτε είναι ανά δύο ορθογώνια (αν αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές), είτε μπορούν να επιλεγούν ορθογώνια (εάν αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή του $\hat{B}$). Επαναλαμβάνοντας σε κάθε υπόχωρο εκφυλισμένης ιδιοτιμής του $\hat{A}$, και συμπεριλαμβάνοντας τις μη εκφυλισμένες ιδιοτιμές (περίπτωση α), καταλήγουμε στο συμπέρασμα ύπαρξης κοινού συνόλου ιδιοδιανυσμάτων που αποτελούν ορθοκανονική βάση.

Η φυσική σημασία του παραπάνω θεωρήματος στη θεωρία μέτρησης σχετίζεται με τα πλήρη συστήματα μετατιθέμενων μεγεθών και παρουσιάστηκε στο εδάφιο 3.4.

4.5 Ερμιτιανοί συζυγείς τελεστές

Οι ερμιτιανοί τελεστές και αντίστοιχοι πίνακες είναι, κατά μια έννοια, το ανάλογο των πραγματικών αριθμών: τους αντιστοιχεί πραγματική μέση τιμή, πραγματικές ιδιοτιμές, και ικανοποιούν τη σχέση συμμετρίας (52), η οποία μπορεί να ιδωθεί ως γενίκευση της σχέσης $z = z^*$. Η αναλογία γενικεύεται και σε μη ερμιτιανούς γραμμικούς τελεστές: αν $\hat{A}$ μη ερμιτιανός γραμμικός τελεστής, ορίζουμε τον *ερμιτιανό συζυγή (hermitian adjoint)* $\hat{A}^\dagger$ ως εξής:

$$(\hat{A}^\dagger\,\Phi, \Psi) = (\Phi, \hat{A}\,\Psi), \quad \forall \Phi, \Psi. \tag{53}$$

Ο ορισμός του $\hat{A}^\dagger$ έχει την ιδιαιτερότητα να μη δίνεται εκπεφρασμένα, μέσω της δράσης του σε καταστάσεις, αλλά έμμεσα, μέσω της δράσης του σε εσωτερικά γινόμενα.[47] Ωστόσο, συνάγονται πολύ απλές ιδιότητες για τον $\hat{A}^\dagger$. Πρώτον, εξετάζοντας την εφαρμογή του ορισμού σε διανύσματα ορθοκανονικής βάσης $\{u_i\}$, και θέτοντας $\Phi = u_i$, $\Psi = u_j$, παίρνουμε $(u_j, \hat{A}\,u_i) = (\hat{A}^\dagger\,u_j, u_i) = (u_i, \hat{A}^\dagger\,u_j)^*$, ή αλλιώς

$$A^\dagger_{ij} = A^*_{ji}. \tag{54}$$

Δηλαδή, ο πίνακας που αντιστοιχεί στον ερμιτιανό συζυγή δίνεται από αναστροφή και μιγαδική συζυγία του αρχικού πίνακα. Δεύτερον, εφόσον ορίσαμε τα στοιχεία πίνακα σε ορθοκανονική βάση, προκύπτει αμέσως η δράση του σε οποιοδήποτε διάνυσμα, διότι οποιοδήποτε διάνυσμα αναπτύσσεται σε ορθοκανονική βάση, $\Psi = \sum_i c_i u_i$. Σε πρώτο βήμα χρειαζόμαστε τη δράση του $\hat{A}^\dagger$ στα στοιχεία βάσης u_i σε αναλογία με την εξ.

[47] Ο ορισμός (53) προφανώς καθίσταται προβληματικός για τις καταστάσεις Ψ εκτός πεδίου ορισμού του $\hat{A}$. Για μαθηματικά αυστηρή αντιμετώπιση του προβλήματος, βλ. J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press (1955).

(50) (όπου τη θέση του $\hat{A}$ εκείνης της εξίσωσης λαμβάνει εδώ ο $\hat{A}^\dagger$). Αναπτύσσοντας σε στοιχεία βάσης u_j την $\hat{A}^\dagger u_i = \sum_j d_j u_j$, βρίσκουμε ότι οι συντελεστές είναι $d_j = (u_j, \hat{A}^\dagger u_i) \equiv A^\dagger_{ji} = A^*_{ij}$. Δηλαδή,

$$\hat{A}^\dagger\, u_i = \sum_j A^\dagger_{ji} u_j = \sum_j A^*_{ij} u_j.$$

Σε δεύτερο βήμα προκύπτει η δράση του $\hat{A}^\dagger$ στην $\Psi = \sum_i c_i u_i$:

$$\hat{A}^\dagger\,\Psi = \hat{A}^\dagger \sum_i c_i u_i = \sum_i c_i \hat{A}^\dagger\, u_i = \sum_{ij} c_i A^\dagger_{ji} u_j = \sum_{ij} c_i A^*_{ij} u_j$$

Θυμίζουμε ότι, σε αυτές τις εκφράσεις, τα $u_j \equiv u_j(x)$ είναι συναρτήσεις βάσης, ενώ τα $A^\dagger_{ji} = A^*_{ij}$ και c_i μιγαδικοί αριθμοί. Το αποτέλεσμα γράφτηκε σε δύο μορφές (με $A^\dagger_{ji}$ και A^*_{ij}) για να τονιστεί η δυνατότητα χρήσης της εξ. (54).

Εισάγουμε τώρα έναν βολικό συμβολισμό. Ήδη συμβολίσαμε τα στοιχεία πίνακα του τελεστή $\hat{A}$ με A_{ij} και τα στοιχεία πίνακα του ανάστροφου και μιγαδικού συζυγούς (δηλ. ερμιτιανού συζυγούς) με $A^\dagger_{ij} = A^*_{ji}$ (εξ. 54). Υιοθετούμε, αντίστοιχα, συμβολισμό για τις ακολουθίες που ορίζουν καταστάσεις: με c συμβολίζουμε, πέραν της ακολουθίας, τον πίνακα-στήλη που προκύπτει από τα στοιχεία της ακολουθίας c_i. Επιπλέον, με $c^\dagger$ ορίζουμε τον ανάστροφο και μιγαδικό συζυγή πίνακα του c, δηλαδή τον πίνακα-γραμμή με στοιχεία c^*_i. Επομένως, εφαρμόζοντας τους κανόνες πολλαπλασιασμού πινάκων, το εσωτερικό γινόμενο δύο καταστάσεων που ορίζονται μέσω ακολουθιών c και d γράφεται

$$(c, d) = \sum_i c^*_i d_i = c^\dagger d. \tag{55}$$

Ομοίως, η δράση γραμμικού τελεστή αναπαριστάται από τον πίνακα-στήλη (βλ. εξ. 50)

$$d = A\, c \tag{56}$$

και το εσωτερικό γινόμενο $(c, Ad) = (A^\dagger c, d)$ γράφεται σε μορφή πινάκων

$$(c, Ad) = c^\dagger\, A\, d = (A^\dagger c)^\dagger\, d, \tag{57}$$

όπως εύκολα επαληθεύεται εφαρμόζοντας τους κανόνες πολλαπλασιασμού πινάκων.

Θα δώσουμε τώρα επιπλέον ιδιότητες των ερμιτιανών συζυγών τελεστών. Έστω $\hat{A}$ και $\hat{B}$ γραμμικοί τελεστές. Τότε:[48]

1. Ο $\hat{A}^\dagger$ είναι μοναδικός (δεν υπάρχουν δύο διαφορετικοί τελεστές που να είναι ερμιτιανοί συζυγείς του $\hat{A}$).
2. $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.
3. Ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός τελεστής, αν και μόνο αν $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.
4. $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$.[49]

[48] Πρόβλημα 9.

[49] Απόδειξη: για τυχαίες Ψ και Φ έχουμε $(\Phi, \hat{A}\hat{B}\,\Psi) = (\hat{A}^\dagger\,\Phi, \hat{B}\,\Psi) = (\hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger\,\Phi, \Psi)$.

5. Οι τελεστές $\hat{A}\hat{A}^\dagger$ και $\hat{A}^\dagger\hat{A}$ είναι ερμιτιανοί.[50]

6. Οι τελεστές $\frac{1}{2}(\hat{A}+\hat{A}^\dagger)$ και $\frac{1}{2i}(\hat{A}-\hat{A}^\dagger)$ είναι ερμιτιανοί και αντιστοιχούν στη γενίκευση του πραγματικού και φανταστικού μέρους, αντίστοιχα, ενός μιγαδικού αριθμού.

4.6 Μοναδιαίοι τελεστές

Θα ορίσουμε τώρα τη γενίκευση των ορθογώνιων πινάκων, οι οποίοι διατηρούν το μέτρο και το εσωτερικό γινόμενο διανυσμάτων και αντιστοιχούν σε στροφές στον $\mathbb{R}^n$. Στο χώρο Hilbert, τις στροφές εκφράζουν οι *μοναδιαίοι τελεστές (unitary operators)*. Ένας *γραμμικός τελεστής* $\hat{U}$ λέγεται *μοναδιαίος*, αν η δράση του σε οποιαδήποτε διάνυσμα διατηρεί τη νόρμα:

$$\|\hat{U}\Psi\| = \|\Psi\|. \tag{58}$$

Από τον ορισμό προκύπτει εύκολα,[51] ότι οι μοναδιαίοι τελεστές διατηρούν και το εσωτερικό γινόμενο:

$$(\hat{U}\,\Psi, \hat{U}\,\Phi) = (\Psi, \Phi) \tag{59}$$

για τυχαίες Ψ και $\Phi \in \mathcal{H}$. Κατά συνέπεια, διατηρούν την κατανομή πιθανότητας κατά τη μέτρηση (βλ. εξ. 27). Δεδομένου ότι οι κατανομές πιθανότητας συνδέουν την κβαντική θεωρία με τις μετρήσεις, οι μονδιαίοι τελεστές παίζουν κυρίαρχο ρόλο στη μαθηματική έκφραση της αρχής της σχετικότητας.[52] Θα δούμε, επίσης, ότι οι μοναδιαίοι τελεστές αντιστοιχούν σε αλλαγή ορθοκανονικής βάσης στο χώρο Hilbert.

Για τυχαίους μοναδιαίους τελεστές $\hat{U}$ και $\hat{U}'$ είναι εύκολο να αποδείξει κανείς τις ακόλουθες ιδιότητες:[53]

1. Ο αντίστροφος ισούται με τον ερμιτιανό συζυγή: $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ (όπου $\hat{I}$ ο ταυτοτικός τελεστής). Ο αντίστροφος ενός μοναδιαίου τελεστή αντιστοιχεί στην αντίστροφη στροφή στο χώρο Hilbert.

2. Το γινόμενο $\hat{U}\hat{U}'$ είναι μοναδιαίος.

3. Οι ιδιοτιμές μοναδιαίων τελεστών έχουν μέτρο τη μονάδα, δηλαδή, αν $\hat{U}\Psi_{\hat{U}} = \alpha\Psi_{\hat{U}}$, τότε $\alpha = e^{i\gamma}$, $\gamma \in \mathbb{R}$.

4.7 Μετασχηματισμός ορθοκανονικής βάσης

Η ορθοκανονική βάση δεν είναι, προφανώς, μοναδική. Όπως και στους χώρους πεπερασμένης διάστασης, γραμμικοί συνδυασμοί των διανυσμάτων βάσης μπορούν να παράξουν άπειρες διαφορετικές ορθοκανονικές βάσεις. Ένας μετασχηματισμός μεταξύ ορθοκανονικών βάσεων $u = \{u_1, u_2, \ldots\}$ και $v = \{v_1, v_2, \ldots\}$ εκφράζεται από το εσωτερικό γινόμενο

$$U_{ij} \equiv (v_i, u_j). \tag{60}$$

[50] Απόδειξη: για τυχαία Ψ έχουμε $(\Psi, \hat{A}\hat{A}^\dagger\,\Psi) = (\hat{A}^\dagger\,\Psi, \hat{A}^\dagger\,\Psi) = \|\hat{A}^\dagger\,\Psi\|^2 \in \mathbb{R}$.

[51] Πρόβλημα 10.

[52] Με τον όρο «αρχή της σχετικότητας» δεν αναφερόμαστε στη *θεωρία της σχετικότητας* του Einstein, αλλά γενικότερα στην απαίτηση συμφωνίας φυσικών νόμων για παρατηρητές διαφορετικών συστημάτων αναφοράς.

[53] Πρόβλημα 11.

Δηλαδή, σε αναλογία με την προβολή οποιασδήποτε κυματοσυνάρτησης σε διανύσματα βάσης, που δίνει $c_i = (u_i, \Psi)$ (βλ. τις εξ. 41 και 42), αναπτύσσουμε κάθε μία των συναρτήσεων βάσης u_j στη βάση $\{v_i\}$. Αν λοιπόν θέλουμε να βρούμε τις συντεταγμένες της $\Psi = \sum_j c_j u_j$ στη νέα βάση $\{v_i\}$, ώστε να λάβουμε το νέο ανάπτυγμα $\Psi = \sum_j d_j v_j$, πρέπει να κάνουμε τα ακόλουθα βήματα:

$$d_i = (v_i, \Psi) = (v_i, \sum_j c_j u_j) = \sum_j (v_i, u_j) c_j \equiv \sum_j U_{ij} c_j. \tag{61}$$

Επομένως, ο πίνακας U (60) μετασχηματίζει τις συντεταγμένες της κυματοσυνάρτησης από τη βάση $\{u_i\}$ στη βάση $\{v_i\}$. Επίσης, ο πίνακας U αντιστοιχεί στο μοναδιαίο τελεστή $\hat{U}$, ο οποίος ορίζεται από την απεικόνιση κάθε συνάρτησης βάσης v_j στη συνάρτηση βάσης u_j:

$$\hat{U}\, v_j = u_j. \tag{62}$$

Πράγματι, τα στοιχεία πίνακα του $\hat{U}$ είναι $(v_i, \hat{U}\, v_j) = (v_i, u_j) = U_{ij}$, σε συμφωνία με την (60). Συνεπώς, ο πίνακας U είναι η αναπαράσταση του τελεστή (62) στη βάση v. Σημειώνουμε το εξής: ενώ ο τελεστής $\hat{U}$ μετασχηματίζει *τα στοιχεία βάσης* από τα v στα u, ο αντίστοιχος πίνακας U μετασχηματίζει *τις συντεταγμένες* από τη βάση u στη βάση v.

Η απεικόνιση $\hat{U}$ είναι $1-1$ και επί, δηλαδή αντιστρέψιμη. Είναι αναμενόμενο, και εύκολο να δειχθεί, ότι ο $\hat{U}$ είναι μοναδιαίος, διότι η αλλαγή ορθοκανονικής βάσης εκφράζει μια στροφή.(54) Αλλά και αντίστροφα, αν ένας τελεστής είναι μοναδιαίος, τότε απεικονίζει οποιαδήποτε ορθοκανονική βάση v σε άλλη ορθοκανονική βάση u, δεδομένου ότι διατηρεί την ορθογωνιότητα και την κανονικοποίηση των στοιχείων βάσης και δεδομένου ότι είναι αντιστρέψιμος.

4.8 Σχέση ερμιτιανών και μοναδιαίων τελεστών

Θυμίζουμε το εξής. Αν $f(z) = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \cdots$ μια αναλυτική συνάρτηση, και $\hat{A}$ γραμμικός τελεστής, ορίζουμε τον τελεστή $\hat{f}(\hat{A}) = c_0 + c_1 \hat{A} + c_2 \hat{A}^2 + \cdots$.

Με αυτό τον τρόπο, μπορούμε να ορίσουμε την ακόλουθη εκθετική συνάρτηση ενός γραμμικού τελεστή $\hat{A}$:

$$e^{\lambda \hat{A}} = 1 + \lambda \hat{A} + \frac{1}{2}\lambda^2 \hat{A}^2 + \cdots = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} \hat{A}^n \quad (\lambda \in \mathbb{C}). \tag{63}$$

Προκύπτει ότι

$$e^{\lambda \hat{A}}\, e^{\lambda \hat{B}} = e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}, \qquad \text{αν } [\hat{A}, \hat{B}] = 0. \tag{64}$$

Για να πεισθούμε για αυτό, αναπτύσσουμε τα εκθετικά: $e^{\lambda \hat{A}}\, e^{\lambda \hat{B}} = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} \hat{A}^n \sum_m \frac{\lambda^m}{m!} \hat{B}^m$. Παρατηρούμε ότι, εφόσον οι τελεστές μετατίθενται, τα γινόμενα των επιμέρους όρων των σειρών δεν διαφοροποιούνται φορμαλιστικά από τα αντίστοιχα γινόμενα που θα είχαμε, αν οι $\hat{A}$ και $\hat{B}$ ήταν αριθμοί. Επομένως, καταλήγουμε στην (64). Ειδικότερα έχουμε

$$e^{i\hat{A}}\, e^{-i\hat{A}} = 1. \tag{65}$$

(54) Πρόβλημα 12.

Αν ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, τότε οι τελεστές $e^{i\hat{A}}$ $e^{-i\hat{A}}$ είναι, επιπρόσθετα, ερμιτιανοί συζυγείς,[55] επομένως ο $e^{i\hat{A}}$ είναι μοναδιαίος. Αντίστροφα, οι μοναδιαίοι τελεστές γράφονται στη μορφή $\hat{U} = e^{i\hat{A}}$, όπου $\hat{A}$ κατάλληλος ερμιτιανός τελεστής.

4.9 Προβλήματα

1. Θεωρήστε ένα σωματίδιο που κινείται σε μία διάσταση, περιορισμένο στο διάστημα $[0, a]$. Οι κυματοσυναρτήσεις αυτού του προβλήματος είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες στο ίδιο διάστημα, $\int_0^a |\Psi|^2 dx = C < \infty$, και οι φυσικές καταστάσεις αντιστοιχούν σε κυματοσυναρτήσεις κανονικοποιημένες στη μονάδα: $C = 1$. Οι κατάλληλες συνοριακές συνθήκες μεταβάλλονται αναλόγως με το φυσικό πρόβλημα. Εξετάστε δύο διαφορετικές περιπτώσεις συνοριακών συνθηκών: α) επιτρέπονται όλες οι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες κυματοσυναρτήσεις, ή β) επιτρέπονται μόνον εκείνες, για τις οποίες $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$. • Εξετάστε στις δύο περιπτώσεις, (α) και (β), τον τελεστή ορμής $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ και τον τελεστή κινητικής ενέργειας $\hat{T} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, και χαρακτηρίστε το σύνολο των κυματοσυναρτήσεων, για τις οποίες είναι ερμιτιανοί. Θυμηθείτε ότι η δράση του τελεστή πρέπει να παράγει συναρτήσεις που ικανοποιούν τις συνοριακές συνθήκες, δηλαδή να παραμένει εντός του χώρου των φυσικών καταστάσεων. • Βρείτε, για τις περιπτώσεις (α) και (β), από ένα παράδειγμα κυματοσυνάρτησης, για την οποία η δράση του τελεστή παράγει συνάρτηση εκτός χώρου και η οποία, συνεπώς, δεν ανήκει στο πεδίο ορισμού του τελεστή. • Βρείτε κυματοσυναρτήσεις, για τις οποίες απλή δράση του τελεστή να μένει εντός του χώρου, ενώ διπλή να μην είναι επιτρεπτή, διότι οδηγεί εκτός του χώρου. • Βρείτε κυματοσυναρτήσεις, για τις οποίες απλή δράση του τελεστή να μένει εντός πεδίου ορισμού του τελεστή, ενώ διπλή να οδηγεί σε κυματοσυνάρτηση εντός χώρου, αλλά εκτός πεδίου ορισμού του τελεστή.

2. Δείξτε ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\sin(n\pi x)$ $(n = 1, 2, \ldots)$ αποτελούν ορθοκανονική βάση στον $\mathcal{L}^2([0, 1])$ με συνοριακές συνθήκες $\Psi(0) = \Psi(1) = 0$. (Χρησιμοποιήστε την ανάλυση Fourier τυχαίας $\Psi \in \mathcal{L}^2([0, 1])$ σε συναρτήσεις ημιτόνου.)

3. Βρείτε μια ορθοκανονική βάση στον $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. (Υπόδείξη: χρησιμοποιήστε μια διαμέριση σε άπειρα αριθμήσιμα διαστήματα. Εφαρμόστε ανάπτυγμα Fourier σε κάθε διάστημα.)

4. Δείξτε ότι οι συντελεστές αναπτύγματος $\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \, u_i$ (όπου $\{u_i\}$ ορθοκανονική βάση) ικανοποιούν τη σχέση $c_i = (u_i, \Psi)$.

5. Δείξτε ότι το εσωτερικό γινόμενο κυματοσυναρτήσεων (Ψ, Φ), με $\Psi = \sum_i c_i u_i$ και $\Phi = \sum_i c'_i u_i$, επάγει εσωτερικό γινόμενο των ακολουθιών $c \equiv \{c_i\}$ και $c' \equiv \{c'_i\}$, με τιμή $(c, c') = \sum_i c_i^* c'_i$. Δείξτε ότι αυτή η μορφή ικανοποιεί τις ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου των κυματοσυναρτήσεων [βλ. εξ. (13)]: αντιγραμμικότητα ως προς το πρώτο όρισμα (c), γραμμικότητα ως προς το δεύτερο (c'), θετική νόρμα $\|c\|^2 = (c, c)$, και $(c, c') = (c', c)^*$].

[55] Αν ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός, τότε $\hat{A}^n = (\hat{A}^\dagger)^n$, άρα $(i\hat{A})^n = (-i^* \hat{A}^\dagger)^n = [(-i\hat{A})^\dagger]^n$, από όπου προκύπτει, μέσω της δυναμοσειράς, $e^{-i\hat{A}} = [e^{i\hat{A}}]^\dagger$.

6. Θεωρήστε τον χώρο $\mathcal{L}^2([0,1])$ με συνοριακές συνθήκες $\Psi(0) = \Psi(1) = 0$ και τη βάση $u_n(x) = \sin(n\pi x)$ $(n = 1, 2, \ldots)$. Βρείτε τα στοιχεία πίνακα α) T_{nm} του τελεστή της κινητικής ενέργειας $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ και β) x_{nm} του τελεστή θέσης $\hat{x}$. (Υπόδειξη: θα σας χρησιμεύσει η ταυτότητα $2\sin\alpha\sin\beta = \cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)$. Θα χρειαστεί ολοκλήρωση κατά παράγοντες.)

7. Θεωρήστε ανάπτυγμα των κυματοσυναρτήσεων σε βάση. Δείξτε ότι ο πολλαπλασιασμός γραμμικών τελεστών αναπαρίσταται από γινόμενο πινάκων (ενδεχομένως άπειρης διάστασης): $\hat{C} = \hat{A}\hat{B} \longrightarrow C_{ij} = \sum_k A_{ik}B_{kj}$ (σχ. 51). [Υπόδειξη: Γράψτε το ανάπτυγμα της δράση του $\hat{B}$ σε μια $\Psi = \sum_i c_i u_i$ και προχωρήστε σε αναλογία με την απόδειξη της σχ. 50.]

8. Υποθέστε ότι, για κάποιον γραμμικό τελεστή $\hat{A}$, ισχύει $(u_i, \hat{A}\, u_j) = (u_j, \hat{A}\, u_i)^*$, όπου u_i και u_j διανύσματα βάσης. Δείξτε ότι ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός. (Υπόδειξη: αναπτύξτε τυχαία κυματοσυνάρτηση στη δεδομένη βάση, $\Psi = \sum_i c_i u_i$, και ελέγξτε ότι το εσωτερικό γινόμενο $(\Psi, \hat{A}\,\Psi)$ είναι πραγματικός αριθμός.)

9. Δείξτε τις ακόλουθες ιδιότητες ερμιτιανών συζυγών χρησιμοποιώντας την αναπαράστασή τους με πίνακες.

   - Ο $\hat{A}^\dagger$ είναι μοναδικός (δεν υπάρχουν δύο διαφορετικοί τελεστές που να είναι ερμιτιανοί συζυγείς του $\hat{A}$).
   - $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.
   - Ο $\hat{A}$ είναι ερμιτιανός τελεστής, αν και μόνο αν $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.
   - $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.
   - Οι τελεστές $\hat{A}\hat{A}^\dagger$ και $\hat{A}^\dagger\hat{A}$ είναι ερμιτιανοί.
   - Οι τελεστές $\frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$ και $\frac{1}{2i}(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$ είναι ερμιτιανοί.

10. Ξεκινώντας από τον ορισμό των μοναδιαίων τελεστών $\hat{U}$ (διατήρηση νόρμας, εξ. 58), αποδείξτε ότι η δράση τους διατηρεί και το εσωτερικό γινόμενο (εξ. 59). (Υπόδειξη: για δύο τυχαίες κυματοσυναρτήσεις, Ψ και Φ, εξετάστε τις ποσότητες $\|\hat{U}(\Psi + \Phi)\|^2$ και $\|\hat{U}(\Psi + i\Phi)\|^2$.)

11. Για τυχαίους μοναδιαίους τελεστές $\hat{U}$ και $\hat{U}'$, δείξτε τις ακόλουθες ιδιότητες:

    - Ο αντίστροφος ισούται με τον ερμιτιανό συζυγή: $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ (όπου $\hat{I}$ ο ταυτοτικός τελεστής).
    - Το γινόμενο $\hat{U}\hat{U}'$ είναι μοναδιαίος.
    - Οι ιδιοτιμές μοναδιαίων τελεστών έχουν μέτρο τη μονάδα, δηλαδή, αν $\hat{U}\Psi_{\hat{U}} = \alpha\Psi_{\hat{U}}$, τότε $\alpha = e^{i\gamma}$, $\gamma \in \mathbb{R}$.

12. Δείξτε ότι ο τελεστής μετασχηματισμού βάσης $\hat{U}$ (εξ. 62) είναι μοναδιαίος. (Υπόδειξη: εξετάστε τη νόρμα $\|\hat{U}\,\Psi\|$ για τυχαία $\Psi = \sum_i d_i v_i$.)

13. Θεωρήστε ένα σωματίδιο που κινείται σε μονοδιάστατα σε δακτύλιο μοναδιαίας περιφέρειας. Η θέση του στην περιφέρεια του δακτυλίου παραμετροποιείται, δηλαδή, από το $x \in [0, 1)$, ώστε το όριο $x = 1$ να ταυτίζεται με το $x = 0$. Επομένως, το σύστημα χαρακτηρίζεται από περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Γράψτε τον πίνακα που εκφράζει την αλλαγή βάσης στον $\mathcal{L}^2([0, 1])$ από

$$u_n = \begin{cases} \sqrt{2}\sin(2n\pi x), & n < 0 \\ 1, & n = 0 \\ \sqrt{2}\cos(2n\pi x), & n > 0 \end{cases}$$

σε $v_n = e^{2in\pi x}$, $n \in \mathbb{Z}$. Εξετάστε αν ο πίνακας είναι μοναδιαίος.

14. Θεωρήστε την κυματοσυνάρτηση (35) (κεφ. 3), $\Phi_{x_0,\varepsilon}(x)$. Στο όριο $\varepsilon \ll 1$: α) δείξτε ότι η μέση τιμή του τελεστή θέσης είναι x_0, ενώ η τυπική απόκλιση τείνει στο μηδέν. β) υπολογίστε τη νόρμα $\|\hat{x}\Phi_{x_0,\varepsilon} - x_0\Phi_{x_0,\varepsilon}\|$. Εξετάστε αν η νόρμα τείνει στο μηδέν. Δικαιολογείται να πούμε ότι η $\Phi_{x_0,\varepsilon}$ είναι, προσεγγιστικά, ιδιοκατάσταση του τελεστή θέσης με ιδιοτιμή x_0; γ) Εξετάστε αν η νόρμα $\|\Phi_{x_0,\varepsilon} - \Phi_{x_0,\varepsilon/2}\|$ τείνει στο μηδέν. Μια ακολουθία από κυματοσυναρτήσεις Φ_{x_0,ε_n} με ολοένα μειούμενο ε_n, έτσι ώστε $\lim_{n\to\infty} \varepsilon_n = 0$ (δηλαδή, με διασπορά να τείνει στο μηδέν), συγκλίνει στο χώρο Hilbert; Συγκρίνετε με το ερώτημα (β) και με το πρόβλημα 9 του κεφ. 3 και σχολιάστε.

5 Χρονική εξέλιξη των καταστάσεων: η εξίσωση Schrödinger

Ως τώρα μιλήσαμε για τις καταστάσεις, τα μετρήσιμα μεγέθη, και τη μαθηματική τους αναπαράσταση. Σε αυτό το κεφάλαιο θα εξετάσουμε τη χρονική εξέλιξη των καταστάσεων.

Έστω μια συλλογή, αναπαριστούμενη, σε χρόνο $t = t_1$, από μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(t_1)$ με $\|\Psi(t_1)\| = 1$. Αφήνουμε το σύστημα να εξελιχθεί σε χρόνο $t_2 > t_1$. Με αυτό τον τρόπο, αποκτούμε μια νέα συλλογή, $\Psi(t_2)$, η οποία αντιστοιχεί στην προετοιμασία «προετοιμάζω τη συλλογή στην κατάσταση $\Psi(t_1)$ και περιμένω χρόνο $t = t_2 - t_1$, πριν κάνω οποιαδήποτε μέτρηση».

Προφανώς, υπάρχει μια απεικόνιση της κατάστασης σε χρόνο t_1 στην κατάσταση σε χρόνο t_2. Στη μαθηματική περιγραφή, ονομάζουμε αυτή την απεικόνιση $\hat{\mathcal{U}}(t_2, t_1)$. Για την $\Psi(t_2) = \hat{\mathcal{U}}(t_2, t_1)\,\Psi(t_1)$ αξιώνουμε τα εξής. Πρώτον, $\|\Psi(t_2)\| = \|\Psi(t_1)\| = 1$, ώστε να αντιστοιχούν σε καταστάσεις. Δεύτερον, να ισχύει η αρχή της επαλληλίας, δηλαδή η απεικόνιση $\hat{\mathcal{U}}$ να είναι γραμμική: $\hat{\mathcal{U}}(t_2, t_1)\,(a\Phi + b\Psi) = a\hat{\mathcal{U}}(t_2, t_1)\,\Phi + b\hat{\mathcal{U}}(t_2, t_1)\,\Psi$. Από τα δύο αξιώματα προκύπτει ότι ο τελεστής $\hat{\mathcal{U}}$ είναι μοναδιαίος.[56] Το γινόμενο

$$\hat{\mathcal{U}}(t_3, t_1) = \hat{\mathcal{U}}(t_3, t_2)\hat{\mathcal{U}}(t_2, t_1) \tag{66}$$

είναι επίσης μοναδιαίος τελεστής (ως γινόμενο μοναδιαίων) και έχει εμφανή ερμηνεία: η αναμονή για χρόνο $(t_2 - t_1)$ και περαιτέρω αναμονή για χρόνο $(t_3 - t_2)$ (χωρίς ενδιάμεση μέτρηση ή άλλη αλληλεπίδραση με το σύστημα) δίνει το ίδιο αποτέλεσμα με την αναμονή για χρόνο $(t_3 - t_1)$.

Ο τελεστής χρονικής εξέλιξης ενδέχεται να μην εξαρτάται από τον αρχικό χρόνο, παρά μόνον από τη διαφορά $t_2 - t_1 = t$. Δηλαδή, είτε ξεκινήσουμε από μια κατάσταση Ψ σε χρόνο t_1 και κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο $t_1 + t$, είτε ξεκινήσουμε από την ίδια Ψ σε χρόνο $t_1' \neq t_1$ και κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο $t_1' + t$, να έχουμε τα ίδια στατιστικά αποτελέσματα. Από φυσικής πλευράς, αυτό απαιτεί να μη δρούμε στο σύστημα με χρονικά μεταβαλλόμενες δυνάμεις ή πεδία. Τότε, λέμε ότι έχουμε *συμμετρία χρονικής μετατόπισης*. Σε αυτή την περίπτωση, $\hat{\mathcal{U}}(t_2, t_1) = \hat{\mathcal{U}}(t_2 - t_1) \equiv \hat{\mathcal{U}}(t)$, δηλαδή, ο (μοναδιαίος) τελεστής χρονικής εξέλιξης εξαρτάται μόνο από μια χρονική παράμετρο. Τότε γράφεται στη μορφή (δίνουμε το αποτέλεσμα χωρίς απόδειξη)

$$\hat{\mathcal{U}}(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar}, \tag{67}$$

όπου $\hat{H}$ ερμιτιανός τελεστής που ονομάζεται Χαμιλτονιανή του συστήματος και ερμηνεύεται ως τελεστής της ενέργειας. Η σταθερά του Planck $\hbar$ υπεισέρχεται εδώ για την μετατροπή μονάδων μεταξύ χρόνου και ενέργειας.[57] Έχουμε, λοιπόν,

$$\Psi(t_1 + t) = \hat{\mathcal{U}}(t)\,\Psi(t_1) = e^{-it\hat{H}/\hbar}\,\Psi(t_1), \tag{68}$$

[56] Εξ' ορισμού, οι μοναδιαίοι τελεστές είναι γραμμικοί και διατηρούν τη νόρμα. Εδώ, αξιώσαμε τη διατήρηση της νόρμας για τα διανύσματα με μοναδιαία νόρμα, αλλά από τη γραμμικότητα προκύπτει η διατήρηση της νόρμας για όλα τα διανύσματα.

[57] Η σταθερά $\hbar$ θα μπορούσε να απορροφηθεί στον ορισμό του τελεστή $\hat{H}$. Η εκπεφρασμένη παρουσία της στην εξίσωση έχει ιστορικούς λόγους.

για αρχική συνθήκη $\Psi(t_1)$. Διαφορίζοντας ως προς το χρόνο, το εκθετικό προσεγγίζεται από τον πρώτο όρο της σειράς, $e^{-i\delta t\hat{H}/\hbar} = 1 - i\delta t\frac{1}{\hbar}\hat{H}$ $(\delta t \to 0)$. Λαμβάνουμε λοιπόν $\delta\Psi = \Psi(t_1 + \delta t) - \Psi(t_1) = -i\delta t\frac{1}{\hbar}\hat{H}\Psi(t_1)$, ή

$$i\hbar\frac{d\Psi(t)}{dt} = \hat{H}\,\Psi(t). \tag{69}$$

Αυτή ονομάζεται *εξίσωση του Schrödinger*, η οποία περιγράφει τη χρονική εξέλιξη των καταστάσεων στην κβαντική μηχανική.

Η ίδια εξίσωση (69) προκύπτει και αν δεν έχουμε συμμετρία χρονικής μετατόπισης, αλλά, τότε, ο τελεστής $\hat{\mathcal{U}}$ εξαρτάται από δύο παραμέτρους (t_2, t_1) και δεν συνδέεται με τη Χαμιλτονιανή $\hat{H}$ μέσω της εξ. (67). Ας δούμε τη γενική αυτή περίπτωση. Ξεκινώντας σε χρόνο t με μια κυματοσυνάρτηση $\Psi(t)$, έχουμε σε χρόνο $t+\delta t$ την $\Psi(t+\delta t) = \Psi(t)+\delta\Psi$. Αξιώνουμε τα ακόλουθα.

1. Διατήρηση της νόρμας $\|\Psi(t)\| = \|\Psi(t+\delta t)\| = 1$, διότι και οι δύο εκφράζουν φυσικές καταστάσεις.

2. Συνέχεια, διότι η χρονική εξέλιξη κατανομής πιθανότητας των παρατηρήσιμων μεγεθών είναι συνεχής.[(58)]

3. Διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης ως προς το χρόνο, διότι ο χαρακτηρισμός της $\Psi(t)$ ως κατάστασης, σημαίνει ότι περιέχει όλη τη δυνατή πληροφορία για το σύστημα και πρέπει να επαρκεί ως αρχική συνθήκη.[(59)] Από αυτή την απαίτηση προκύπτει ότι, για μικρά δt, η $\|\delta\Psi\|$ θα είναι επίσης μικρή, και θα μηδενίζεται γραμμικά στο όριο $\delta t \to 0$: $\delta\Psi \propto \delta t$.

4. Αρχή της επαλληλίας: Αν, σε διάστημα δt, η $\Psi_1(t)$ εξελίσσεται στην $\Psi_1(t) + \delta\Psi_1$ και η $\Psi_2(t)$ στην $\Psi_2(t)+\delta\Psi_2$, τότε η $\Phi(t) \equiv a\Psi_1(t)+b\Psi_2(t)$ πρέπει να εξελίσσεται στην $\Phi(t) + \delta\Phi \equiv a\Psi_1(t) + b\Psi_2(t) + a\,\delta\Psi_1 + b\,\delta\Psi_2$.

Από τα παραπάνω αξιώματα λαμβάνουμε:

$$\begin{aligned}
0 &= \|\Psi(t+\delta t)\|^2 - \|\Psi(t)\|^2 \\
&= (\Psi(t)+\delta\Psi, \Psi(t)+\delta\Psi) - (\Psi(t), \Psi(t)) \\
&= (\Psi(t), \Psi(t)) + (\delta\Psi, \Psi(t)) + (\Psi(t), \delta\Psi) + (\delta\Psi, \delta\Psi) - (\Psi(t), \Psi(t)) \\
&= (\Psi(t), \delta\Psi)^* + (\Psi(t), \delta\Psi) + (\delta\Psi, \delta\Psi) \\
&= 2\mathrm{Re}(\Psi(t), \delta\Psi) + \|\delta\Psi\|^2.
\end{aligned}$$

(58) Εδώ τονίζουμε την ερμηνεία αυτής της πρότασης. Ξεκινάμε με μια συλλογή και κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο t. Προετοιμάζουμε μια πανομοιότυπη συλλογή και κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο $t+\delta t$. Για επαρκώς μικρά δt, τα δύο σετ μετρήσεων τείνουν στην ίδια στατιστική. Ποια *δεν είναι* η ερμηνεία: κάνουμε μετρήσεις σε χρόνο t και, στα ήδη μετρημένα συστήματα, κάνουμε επιπλέον μετρήσεις σε χρόνο $t+\delta t$.

(59) Σε περίπτωση διαφορικής εξίσωσης ανώτερης τάξης, θα χρειαζόμασταν και την παράγωγο $\frac{d\Psi(t)}{dt}$, ή και ανώτερες παραγώγους, ως αρχική συνθήκη. Τότε, όμως, η Ψ δεν θα κωδικοποιούσε πλήρως την προετοιμασία του συστήματος: οι παράγωγοι εκφράζουν τη χρονική μεταβολή της $\Psi(t)$ σε προγενέστερους χρόνους και κωδικοποιούν επίσης την προετοιμασία. Σε σύγκριση, στην κλασική μηχανική, η κατάσταση δεν περιγράφεται μόνο από τη θέση, αλλά από το ζεύγος θέσης-ορμής, δηλαδή θέσης και χρονικής παραγώγου της, που απαιτούνται ως αρχικές συνθήκες. Δεν χρειάζεται, όμως, και η παράγωγος της ορμής ως αρχική συνθήκη.

Ο όρος $\|\delta\Psi\|^2$ γίνεται αμελητέος για μικρά δt (είναι ανάλογος του δt^2 λόγω της προαναφερθείσας γραμμικής σχέσης $\delta\Psi \propto \delta t$). Επομένως, $\mathrm{Re}(\Psi(t), \delta\Psi) = 0$.[(60)] Θέτοντας $\delta\Psi = \hat{A}(t)\,\Psi(t)$, και απαιτώντας ο $\hat{A}$ να είναι γραμμικός, λόγω της αξίωσης της αρχής της επαλληλίας, συμπεραίνουμε ότι η ποσοτητα $(\Psi, \hat{A}\,\Psi) \equiv (\Psi, \delta\Psi)$ είναι καθαρά φανταστικό μέγεθος, ή, αλλιώς, ότι η ποσότητα $i(\Psi, \hat{A}\,\Psi) = (\Psi, i\hat{A}\,\Psi) \in \mathbb{R}$. Αυτό σημαίνει ότι ο τελεστής $i\hat{A}$ είναι ερμιτιανός. Επίσης, λόγω του προαναφερθέντος αξιώματος 3 (πρωτοβάθμιας διαφορικής εξίσωσης), πρέπει $\hat{A}\,\Psi = \delta\Psi \propto \delta t$, οπότε πρέπει $\hat{A} \propto \delta t$. Με βάση αυτά, ο ερμιτιανός τελεστής $i\hat{A}$ γράφεται στη μορφή $i\hat{A}(t) = \frac{1}{\hbar}\hat{H}(t)\delta t$, όπου $\hat{H}(t)$ ερμιτιανός τελεστής, τον οποίο ερμηνεύουμε ως τη Χαμιλτονιανή. Καταλήγουμε: $\delta\Psi = -i\frac{1}{\hbar}\hat{H}(t)\,\Psi\,\delta t$, δηλ.

$$i\hbar\frac{d\Psi(t)}{dt} = \hat{H}(t)\,\Psi(t). \tag{70}$$

Αυτή είναι η εξ. Schrödinger (69), με τη διαφορά ότι εδώ η Χαμιλτονιανή επιτρέπεται να είναι συνάρτηση του χρόνου: $\hat{H} = \hat{H}(t)$. Στην ειδική περίπτωση, που η $\hat{H}$ είναι ανεξάρτητη του χρόνου, η (70) ταυτίζεται με την (69). Τότε, ολοκηρώνοντας ως προς το χρόνο με αρχική συνθήκη $\Psi(t_1)$, λαμβάνουμε ως φορμαλιστική λύση την εξ. (68).

Επομένως, η εξ. Schrödinger είναι ανεξάρτητη της συμμετρίας μετατόπισης ως προς το χρόνο, και βασίζεται σε αξιώματα συνέχειας, διαφορικής εξίσωσης πρώτης τάξης, και επαλληλίας.

5.1 Χρονική εξάρτηση μέσων τιμών. Διατηρούμενα μεγέθη

Από την εξίσωση του Schrödinger, που μας δίνει τη χρονική εξάρτηση των καταστάσεων, επάγεται προφανώς και η χρονική εξάρτηση των μέσων τιμών τελεστών, και επομένως των κατανομών πιθανότητας όλων των μετρήσιμων μεγεθών. Αν $\hat{A}$ ερμιτιανός τελεστής, τότε η μέση τιμή του σε χρόνο t είναι $\langle\hat{A}\rangle_t \equiv (\Psi(t), \hat{A}\,\Psi(t))$, όπου $\Psi(t)$ η κατάσταση της συλλογής. Διαφορίζοντας ώς προς το χρόνο, λαμβάνουμε:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_t &= \left(\frac{d}{dt}\Psi(t), \hat{A}\,\Psi(t)\right) + \left(\Psi(t), \hat{A}\,\frac{d}{dt}\Psi(t)\right) \\
&= \left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\,\Psi(t), \hat{A}\,\Psi(t)\right) + \left(\Psi(t), \hat{A}\,\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\,\Psi(t)\right) \qquad \text{[από εξ. Schrödinger]} \\
&= -\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\,\Psi(t), \hat{A}\,\Psi(t)) + \frac{1}{i\hbar}(\Psi(t), \hat{A}\,\hat{H}\,\Psi(t)) \quad \text{[ιδιότητες (13) εσ. γινομένου]} \\
&= -\frac{1}{i\hbar}(\Psi(t), \hat{H}\,\hat{A}\,\Psi(t)) + \frac{1}{i\hbar}(\Psi(t), \hat{A}\,\hat{H}\,\Psi(t)) \quad \text{[επειδή ο } \hat{H} \text{ είναι ερμιτιανός]} \\
&= \frac{1}{i\hbar}(\Psi(t), [\hat{A}, \hat{H}]\,\Psi(t)) \\
&\equiv \frac{1}{\hbar}\langle i[\hat{H}, \hat{A}]\rangle_t.
\end{aligned} \tag{71}$$

Εδώ βλέπουμε μια εφαρμογή της διαπίστωσης ότι, για δύο ερμιτιανούς τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{H}$, η ποσότητα $i[\hat{H}, \hat{A}]$ είναι ερμιτιανός τελεστής [βλ. συζήτηση μετά την εξ. (33)].

[(60)] Πρόβλημα 1.

Εάν το μερούμενο μέγεθος έχει εκπεφρασμένη χρονική εξάρτηση, δηλ. $\hat{A} = \hat{A}(t)$, τότε πρέπει να ληφθεί υπ' όψη και η παραγώγιση $(\Psi(t), \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi(t))$. Λαμβάνουμε:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle_t = \frac{1}{\hbar}\langle\, i[\hat{H}, \hat{A}]\,\rangle_t + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle_t \tag{72}$$

Αυτή ονομάζεται συχνά *σχέση του Ehrenfest.*

Ως εφαρμογή αυτού του αποτελέσματος, εξετάζουμε τη μεταβολή της θέσης ενός σωματιδίου, για το οποίο $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x})$ με $\hat{H}\,\Psi = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x))\Psi$ (δηλ. η Χαμιλτονιανή έχει όρο κινητικής ενέργειας και δυναμικού που εξαρτάται από τη θέση). Είναι εύκολο να υπολογίσουμε τους μεταθέτες $[\frac{1}{2m}\hat{p}^2, \hat{x}] = -i\hbar\frac{1}{m}\hat{p}$[(61)] και $[\hat{V}(\hat{x}), \hat{x}] = 0$. Αντικαθιστώντας στην (72), και λαμβάνοντας υπ' όψη ότι ο τελεστής $\hat{x}$ δεν έχει χρονική εξάρτηση, λαμβάνουμε

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle \hat{p} \rangle, \tag{73}$$

δηλαδή τη γνωστή, κλασική σχέση ταχύτητας-ορμής, $p = mv$. Επίσης είναι εύκολο να λάβουμε,[(62)] τη σχέση

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \rangle. \tag{74}$$

Ερμηνεύοντας την ποσότητα $F \equiv -\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \rangle$ ως δύναμη, σε αντιστοιχία με την κλασική μηχανική, η προηγούμενη εξίσωση αντιστοιχεί στο δεύτερο νόμο του Newton, $F = dp/dt = m\, d^2x/dt^2$.

Από τα παραπάνω προκύπτει και το ακόλουθο πολύ σημαντικό πόρισμα. *Εάν για κάποιο μετρήσιμο μέγεθος ο αντίστοιχος τελεστής μετατίθεται με τη Χαμιλτονιανή,* $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, *τότε η κατανομή πιθανότητας του μεγέθους δεν αλλάζει με το χρόνο.* Αυτό, διότι, από την $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ προκύπτει $[\hat{H}, \hat{A}^n] = 0$, δηλαδή, όλες οι δυνάμεις του $\hat{A}$ μετατίθενται με τη Χαμιλτονιανή. Από την εξ. (72) (με $\partial\hat{A}/\partial t = 0$) προκύπτει αμέσως

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A}^n \rangle = \frac{1}{\hbar}\langle\, i[\hat{H}, \hat{A}^n]\,\rangle = 0,$$

επομένως όλες οι ροπές της κατανομής είναι ανεξάρτητες του χρόνου.[(63)] Μεγέθη, για τα οποία $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, ονομάζονται *διατηρούμενα*.

5.2 Ρεύμα πιθανότητας και εξίσωση συνέχειας

Η χρονική εξέλιξη των κυματοσυναρτήσεων επάγει το νόμο χρονικής εξέλιξης της πυκνότητα πιθανότητας στο χώρο, $p(x) = \Psi^*(x)\Psi(x) = |\Psi(x)|^2$ (εξ. 2). Ας θεωρήσουμε την απλή περίπτωση της Χαμιλτονιανής

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \tag{75}$$

---

(61) Πρόβλημα 11 του κεφ. 3.
(62) Πρόβλημα 2.
(63) Πρόβλημα 3.

Εφόσον το δυναμικό είναι ερμιτιανός τελεστής, πρέπει $V(x) = V(x)^*$, δηλ. $V(x) \in \mathbb{R}$. Θεωρώντας την κυματοσυνάρτηση ως συνάρτηση του χώρου και του χρόνου, $\Psi = \Psi(x,t)$, η εξ. Schrödinger (69) γράφεται

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t)\right]. \tag{76}$$

Εξετάζουμε τώρα τη χρονική μεταβολή της πυκνότητας πιθανότητας:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} &\equiv \frac{\partial}{\partial t}[\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)] \\
&= \left[\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}\right]^* \Psi(x,t) + \Psi^*(x,t)\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \\
&= +\frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi^*(x,t)\right]\Psi(x,t) \\
&\quad -\frac{i}{\hbar}\Psi^*(x,t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t)\right] \qquad [\text{από εξ. (76)}] \\
&= \frac{1}{2}\left[-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial^2 \Psi^*(x,t)}{\partial x^2}\Psi(x,t) + \frac{i\hbar}{m}\Psi^*(x,t)\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right] \\
&= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left[\Psi(x,t)\frac{(-i\hbar)}{m}\,\frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} - \Psi^*(x,t)\frac{(-i\hbar)}{m}\,\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}\right] \\
&= -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left[\Psi^*(x,t)\,\frac{\hat{p}}{m}\,\Psi(x,t) - \Psi(x,t)\,\frac{\hat{p}}{m}\,\Psi^*(x,t)\right].
\end{aligned}$$

Ορίζοντας το αρνητικό της ποσότητας στο δεξιό μέλος ως *ρεύμα πιθανότητας*

$$j(x,t) \equiv \frac{1}{2}\left[\Psi^*(x,t)\,\frac{\hat{p}}{m}\,\Psi(x,t) - \Psi(x,t)\,\frac{\hat{p}}{m}\,\Psi^*(x,t)\right] \tag{77}$$

καταλήγουμε στην *εξίσωση συνέχειας*

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0. \tag{78}$$

Ολοκληρώνοντας σε διάστημα $[a,b]$ λαμβάνουμε για την πιθανότητα $P([a,b],t) = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2\,dx$:

$$\frac{d}{dt}P([a,b],t) = j(b) - j(a). \tag{79}$$

Σε τρεις διαστάσεις, το ρεύμα πιθανότητας και η εξίσωση συνέχειας λαμβάνουν τη διανυσματική μορφή[(64)]

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \equiv \frac{1}{2}\left[\Psi^*(\mathbf{r},t)\,\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\,\Psi(\mathbf{r},t) - \Psi(\mathbf{r},t)\,\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\,\Psi^*(\mathbf{r},t)\right] \tag{80}$$

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0. \tag{81}$$

[(64)] Πρόβλημα 4.

Ολοκληρώνοντας σε όγκο Ω περικλειόμενο σε επιφάνεια S, και κάνοντας χρήση του θεωρήματος απόκλισης (Gauss) λαμβάνουμε την ολοκληρωτική μορφή της εξ. συνέχειας:

$$\frac{d}{dt}P(\Omega,t) + \int_S \mathbf{n}\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t)\,dS = 0, \tag{82}$$

όπου $P(\Omega,t) \equiv \int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2\,d\Omega$ η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στον όγκο Ω τη στιγμή t και $\mathbf{n}$ το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στην επιφάνεια S στην κατεύθυνση προς το εξωτερικό του όγκου.

Η εξίσωση συνέχειας εκφράζει τη διατήρηση της πιθανότητας στο χρόνο, σε αναλογία με την εξίσωση συνέχειας στον ηλεκτρομαγνητισμό, η οποία εκφράζει τη διατήρηση του φορτίου. Ο πρώτος όρος αντιστοιχεί στην αύξηση της πιθανότητας να βρεθεί το σωματίδιο σε έναν όγκο (ή διάστημα, σε μια διάσταση) γύρω από τη θέση $\mathbf{r}$, ενώ ο δεύτερος όρος αντιστοιχεί στην έννοια της ροής πιθανότητας από τον όγκο προς τα έξω.

5.3 Ανάπτυγμα σε ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής

Έστω Φ μια ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμή E: $\hat{H}\,\Phi = E\,\Phi$. Από την εξ. (69) έχουμε:

$$i\hbar\frac{d\Phi}{dt} = \hat{H}\,\Phi = E\,\Phi, \tag{83}$$

η οποία έχει ως λύση

$$\Phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\,\Phi(0), \tag{84}$$

ως ειδική περίπτωση της (68). Δηλαδή, η κυματοσυνάρτηση μένει αμετάβλητη, με την εξαίρεση πολλαπλασιασμού με έναν παράγοντα φάσης με μέτρο τη μονάδα ($|e^{-i\frac{E}{\hbar}t}| = 1$, διότι $E \in \mathbb{R}$ ως ιδιοτιμή ερμιτιανού τελεστή), ο οποίος δεν παίζει ρόλο για τα παρατηρήσιμα μεγέθη.

Σε δεύτερο βήμα, έστω $\Phi_1, \Phi_2, \ldots$ ανεξάρτητες του χρόνου ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής (επίσης ανεξάρτητης του χρόνου) με ιδιοτιμές $E_1, E_2, \ldots$ και

$$\Psi(0) = \sum_n c_n(0)\Phi_n \tag{85}$$

ένας γραμμικός συνδυασμός τους σε χρόνο $t = 0$ με $c_n(0)$ κάποιους συντελεστές. Τότε, για $t > 0$ παίρνουμε[65]

$$\Psi(t) = e^{-it\frac{1}{\hbar}\hat{H}}\,\Psi(0) = \sum_n c_n(0)e^{-it\frac{1}{\hbar}\hat{H}}\,\Phi_n = \sum_n c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\,\Phi_n. \tag{86}$$

Ορίζοντας

$$c_n(t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\,c_n(0), \tag{87}$$

η τελευταία εξίσωση ξαναγράφεται

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t)\Phi_n. \tag{88}$$

[65] Χρησιμοποιούμε την εξ. (68). Βλ. και Πρόβλημα 5.

Επομένως, από τη χρονική εξέλιξη των συντελεστών $c_n(t)$, μπορούμε να ανασυνθέσουμε την κυματοσυνάρτηση σε οποιοδήποτε χρόνο t. Η εξ. (87) δίνει ισοδύναμα την αντίστοιχη διαφορική

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t). \tag{89}$$

με αρχική συνθήκη $c_n(0)$ για $t = 0$.

Συμπερασματικά, το ανάπτυγμα μιας κυματοσυνάρτησης σε ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής επιτρέπει τον υπολογισμό της χρονικής εξέλιξης με απλό τρόπο.

Θα συζητήσουμε τώρα κατά πόσον οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί στη μορφή (85), δηλαδή κατά πόσον οι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής αποτελούν ορθοκανονική βάση. Για να συμβαίνει αυτό πρέπει να πληρούνται δύο προϋποθέσεις. Η πρώτη είναι, οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής να ικανοποιούν πάντοτε τη σχέση ορθοκανονικότητας $(\Phi_m, \Phi_n) = \delta_{mn}$. Ειδικότερα, εφόσον πρόκειται για φυσικές καταστάσεις, θα ισχύει σίγουρα η συνθήκη κανονικοποίησης $(\Phi_n, \Phi_n) = 1$. Για τη συνθήκη ορθογωνιότητας, $(\Phi_m, \Phi_n) = 0$ για $n \neq m$, παρατηρούμε ότι ισχύει, αν $E_n \neq E_m$, δηλαδή αν οι ιδιοτιμές διαφέρουν. Αυτό το έχουμε δείξει για τις ιδιοκαταστάσεις διαφορετικών ιδιοτιμών κάθε ερμιτιανού τελεστή.[66] Αν ένα υποσύνολο ιδιοκαταστάσεων $\{\Phi_\lambda\}$ αντιστοιχεί στην ίδια ιδιοτιμή, E_λ, δηλαδή αν οι ιδιοκαταστάσεις είναι *εκφυλισμένες*,[67] τότε αυτές δεν είναι υποχρεωτικά ορθογώνιες, διότι, αν π.χ. οι $\Phi_\lambda, \Phi'_\lambda$ είναι ορθογώνιες, μπορούμε να κατασκευάσουμε την $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_\lambda + \Phi'_\lambda)$, η οποία είναι εμφανώς ιδιοκατάσταση με την ίδια ιδιοτιμή, αλλά δεν είναι ορθογώνια σε καμία από τις $\Phi_\lambda, \Phi'_\lambda$. Σε αυτή την περίπτωση, ωστόσο, το σύνολο εκφυλισμένων ιδιοκαταστάσεων με την ίδια ιδιοτιμή έχει δομή γραμμικού χώρου, υπόχωρου του χώρου Hilbert.[68] Τότε, μπορούμε να επιλέξουμε μια ορθοκανονική βάση $\Phi_{\lambda,1}, \Phi_{\lambda,2}, \ldots$ στον εκφυλισμένο υπόχωρο. Για οποιαδήποτε επιλεγμένη ορθοκανονική βάση του εκφυλισμένου υπόχωρου ισχύει προφανώς η ορθογωνιότητα μεταξύ των στοιχείων της και των ιδιοκαταστάσεων που αντιστοιχούν σε άλλες ιδιοτιμές.

Η δεύτερη προϋπόθεση είναι αυτή της πληρότητας, δηλαδή να επαρκούν οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής για να παράξουν το χώρο Hilbert. Η απάντηση εδώ είναι αρνητική στη γενική περίπτωση: για παράδειγμα, η Χαμιλτονιανή του ελεύθερου σωματιδίου, που περιέχει μόνο την κινητική ενέργεια στον $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, δεν έχει ιδιοκαταστάσεις (οι ιδιοσυναρτήσεις της δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες). Ωστόσο, υπάρχουν Χαμιλτονιανές, π.χ., αυτή της κινητικής ενέργειας στον $\mathcal{L}^2([0,1])$, ή του απλού αρμονικού ταλαντωτή (κεφάλαιο 9), οι οποίες όχι μόνον έχουν ιδιοκαταστάσεις, αλλά που οι ιδιοκαταστάσεις τους αποτελούν ορθοκανονική βάση.

Η εξίσωση ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής,

$$\hat{H}\,\Psi_n = E_n \Psi_n, \tag{90}$$

ονομάζεται και *χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger*. Σε πεπερασμένη διάσταση N, η εξίσωση δίνει ακριβώς N γραμμικά ανεξάρτητες ιδιοκαταστάσεις, οι οποίες, επομένως, αποτελούν βάση. Προκύπτει όμως ένα πρόβλημα στο όριο $N \to \infty$. Καθώς το N αυξάνεται, οι ιδιοτιμές ενδέχεται να ομαδοποιούνται και να πυκνώνουν στον

[66] Βλ. κεφ. 3, τελευταία παράγραφο του εδαφίου «Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές» σελ. 9.

[67] Ο αριθμός των γραμμικά ανεξάρτητων ιδιοκαταστάσεων με ίδια ιδιοτιμή ονομάζεται *εκφυλισμός* της ιδιοτιμής, και μπορεί να είνα απλός (=1), διπλός, κ.ο.κ., ή και άπειρος.

[68] Ο υπόχωρος ενδέχεται να έχει είτε πεπερασμένη είτε άπειρη διάσταση.

πραγματικό άξονα, ώστε να σχηματίζουν, στο όριο $N \to \infty$, πυκνό σύνολο σε συνεχές διάστημα. Εάν συμβαίνει αυτό, τότε αποκτούμε ένα συνεχές φάσμα, αλλά δεν ικανοποιείται πλέον η εξ. (90) με Ψ_n εντός του χώρου Hilbert: οι Ψ_n είναι ιδιοσυναρτήσεις, αλλά όχι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, άρα δεν αποτελούν βάση. Ωστόσο, με μια γενικευμένη έννοια, παράγουν το χώρο, και τις χρησιμοποιούμε φορμαλιστικά με ανάλογο τρόπο, όπως τα διανύσματα βάσης. Στα επόμενα δύο εδάφια θα συζητήσουμε αυτό το θέμα από φυσικής και μαθηματικής πλευράς.

5.4 Ελεύθερο σωματίδιο και συνεχές ενεργειακό φάσμα

Ας μελετήσουμε την περίπτωση που η Χαμιλτονιανή ταυτίζεται με τον τελεστή κινητικής ενέργειας

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \tag{91}$$

στο χώρο $\mathcal{L}^2([-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L])$ με περιοδικές συνοριακές συνθήκες, δηλαδή, σωματιδίου περιορισμένου στο διάστημα $[-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L]$, όμως με ταύτιση του σημείου $+\frac{1}{2}L$ με το σημείο $-\frac{1}{2}L$, σαν να κλείνει δακτύλιος. Οι ιδιοκαταστάσεις βρίσκονται εύκολα:

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\, e^{ikx}, \ \ \text{με } k = \frac{2\pi n}{L},\ n \in \mathbb{Z}. \tag{92}$$

και ονομάζονται *επίπεδα κύματα*. Η απαίτηση $k = \frac{2\pi n}{L}$ προκύπτει από τις συνοριακές συνθήκες $u_k(-L/2) = u_k(L/2)$. Οι ιδιοτιμές είναι

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m}\, k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 n^2, \tag{93}$$

όπως προκύπτει από τη δράση $\frac{\hat{p}^2}{2m} e^{ikx} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{ikx} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2\, e^{ikx}$. Κάθε ενεργειακή ιδιοτιμή, πλην αυτής για $k = 0$ ($E_0 = 0$), είναι διπλά εκφυλισμένη, διότι της αντιστοιχούν οι ιδιοκαταστάσεις u_k και u_{-k}.

Εύκολα βρίσκει κανείς ότι οι κυματοσυναρτήσεις $u_k(x)$ είναι ορθοκανονικές, δηλ. $(u_k, u_{k'}) = \delta_{kk'}$. Επίσης, παράγουν οποιαδήποτε συνάρτηση με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο $[-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L]$, όπως ξέρουμε από την ανάλυση Fourier. Συνεπώς, αποτελούν ορθοκανονική βάση στο χώρο Hilbert. Οι ενεργειακές ιδιοτιμές αποτελούν καταφανώς ένα διακριτό φάσμα.

Εξετάζουμε τώρα το όριο $L \to \infty$. Ας υποθέσουμε ότι η περιοχή στην οποία λαμβάνει χώρα το πείραμα βρίσκεται στο διάστημα $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$. Το b μπορεί να είναι μεγάλο, ακόμα και μακροσκοπικό (περιλαμβάνοντας τον εργαστηριακό χώρο όπου πραγματοποιείται το πείραμα), αλλά σταθερό και, τελικά, $b \ll L$. Οποιαδήποτε φυσικά πραγματοποιήσιμη συλλογή πρέπει να αναπαριστάται, στην πράξη, από κυματοσυνάρτηση Ψ που να είναι εντοπισμένη στο διάστημα $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$, δηλ. $\int_{-b/2}^{b/2} |\Psi|^2 dx = 1$ και άρα να μην είναι ιδιοσυνάρτηση (92) της κινητικής ενέργειας, για τις οποίες προκύπτει εύκολα $\int_{-b/2}^{b/2} |u_k(x)|^2 dx = \frac{b}{L} \ll 1$.

Το πρόβλημα αντιμετωπίζεται κατασκευάζοντας κυματοσυναρτήσεις εντοπισμένες στο $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$ μέσω επαλληλίας επίπεδων κυμάτων,

$$\Psi = \sum_k c_k\, u_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k c_k\, e^{ikx}. \tag{94}$$

Εδώ, το πλάτος της Ψ είναι μόνον φαινομενικά ανάλογο του $1/\sqrt{L}$. Στην πραγματικότητα, το μήκος L πρέπει να απαλείφεται και να μην υπεισέρχεται στα αποτελέσματα των υπολογισμών, μια και πρόκειται για βοηθητική παράμετρο που θέσαμε για μαθηματική διευκόλυνση. Προχωρούμε προς αυτή την κατεύθυνση εκφράζοντας το c_k συναρτήσει της Ψ:

$$\begin{aligned} c_k = (u_k, \Psi) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-ikx} \Psi(x)\, dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-b/2}^{b/2} e^{-ikx} \Psi(x)\, dx \;\propto\; \frac{1}{\sqrt{L}}. \end{aligned}$$

Στο πρώτο βήμα χρησιμοποιήσαμε την ορθοκανονικότητα των u_k, στο δεύτερο το ανάπτυγμα της Ψ και τον ορισμό των u_k και στο τρίτο το γεγονός ότι η Ψ περιγράφει σωματίδιο στο χώρο του εργαστηρίου, δηλαδή μηδενίζεται εκτός του διαστήματος $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$.

Δεδομένου ότι ο δείκτης $k = \frac{2\pi n}{L}$ δίνει μια πυκνή διαμέριση στο $\mathbb{R}$ στο όριο $L \to \infty$, μπορούμε να τον προσεγγίσουμε με μια συνεχή μεταβλητή και να μετατρέψουμε το άθροισμα (94) σε ολοκλήρωμα. Από τη σχέση $k = \frac{2\pi n}{L}$ προκύπτει ότι η διαφορά αλεπάλληλων σημείων k είναι $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$, δηλ. $\frac{L}{2\pi}\Delta k = 1$. Παίρνοντας το άθροισμα $\sum_k c_k\, e^{ikx} = \sum_k c_k\, e^{ikx} \frac{L}{2\pi}\Delta k$, λαμβάνουμε

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_k c_k\, u_k(x)\, L\, \Delta k \tag{95}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_k c_k\, e^{ikx}\, \sqrt{L}\, \Delta k. \tag{96}$$

Θέτουμε τώρα $f_k = \sqrt{L}\, c_k$, το οποίο είναι ανεξάρτητο του L, διότι ο συντελεστής c_k, όπως είδαμε μιο πάνω, είναι ανάλογος του $1/\sqrt{L}$. Στο όριο απειροστού $\Delta k \to dk$, το άθροισμα μετατρέπεται σε ολοκήρωμα:

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int f_k\, e^{ikx}\, dk. \tag{97}$$

Η σύμπτωση αυτής της έκφρασης με το μετασχηματισμό Fourier της f_k στην $\Psi(x)$ οφείλεται στην ειδική μορφή των συναρτήσεων βάσης $u_k(x)$. Η χρονική εξέλιξη της Ψ προκύπτει από τη χρονική εξέλιξη των συντελεστών c_k (ισοδύναμα f_k), σύμφωνα με τον κανόνα (86):

$$\Psi(x,t) = \int \frac{L}{2\pi} c_k\, u_k(x) e^{-iE_k t/\hbar}\, dk \tag{98}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int f_k\, e^{ikx} e^{-iE_k t/\hbar}\, dk. \tag{99}$$

Μια τέτοια κυματοσυνάρτηση, επαρκώς εντοπισμένη στο χώρο και αποτελούμενη από πολλές (άπειρες) συνιστώσες, ονομάζεται *κυματοπακέτο*. Λόγω του όρου $e^{ikx}e^{-iE_k t/\hbar} = e^{ik(x - \frac{E_k}{\hbar k}t)}$, το κυματοπακέτο εμφανίζεται να μετακινείται με το χρόνο. Λόγω της διαφορετικής χρονικής εξέλιξης διαφόρων συνιστωσών (διαφορετική τιμή του $\frac{E_k}{\hbar k}t$ για διαφορετικά k), το κυματοπακέτο αλλάζει μορφή με το χρόνο: μοιάζει να διασπείρεται. Γι αυτό το λόγο, η συνάρτηση E_k (βλ. εξ. 93) ονομάζεται *σχέση διασποράς*. Εάν η συνάρτηση c_k είναι ιδιαίτερα εντοπισμένη γύρω από ένα δεδομένο k_0, τότε οι συνιστώσες έχουν σχεδόν ίδια μεταβολή με το χρόνο και η διασπορά είναι αργή.

Από φυσικής πλευράς αναμένουμε ότι η συνοριακή συνθήκη στο $\pm\frac{1}{2}L$ δεν θα παίζει ρόλο, εάν δώσουμε στο L τιμές μεγαλύτερες από οποιοδήποτε πρακτικά μετρήσιμο μήκος. Πρόκειται για ένα μαθηματικό τέχνασμα, ώστε να προσεγγίσουμε τις συνοριακές συνθήκες και τη συνεπαγόμενη πυκνή κατανομή ιδιοτιμών, ενώ από φυσικής πλευράς το πείραμα περιορίζεται σε ένα πεπερασμένο διάστημα $[-\frac{1}{2}b, \frac{1}{2}b]$ γύρω από το 0. Με άλλα λόγια, οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες με $L \to \infty$ πρέπει να δίνουν τα ίδια αποτελέσματα με το πρόβλημα σωματιδίου στο χώρο $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Παρατηρούμε, επίσης, ότι οι συναρτήσεις e^{ikx} είναι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής (91), παρ' ότι δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες σε όλο το $\mathbb{R}$. Από την παραπάνω ανάλυση προκύπτει ότι μπορούμε να τις χρησιμοποιήσουμε για να σχηματίσουμε το γραμμικό συνδυασμό (97), αρκεί οι συντελεστές f_k να είναι κατάλληλοι, ώστε να σχηματιστεί τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση. Επομένως, η τιμή του L που υπεισέρχεται στις περιοδικές συνοριακές συνθήκες τελικά απαλείφεται από το πρόβλημα.

Από την άλλη, οι ενεργειακές ιδιοτιμές (93) πυκνώνουν στο όριο $L \to \infty$, παρ' ότι παραμένουν αριθμήσιμες όπως και τα k. Εάν θέσουμε ένα πειραματικό όριο δE ευκρίνειας στην ενέργεια, οσοδήποτε μικρό, οι ιδιοτιμές θα πυκνώσουν τελικά τόσο, ώστε να περιέχεται αυθαίρετα μεγάλος (εξαρτώμενος από το L) αριθμός ιδιοτιμών στο δE. Τότε, μπορούμε να προσεγγίσουμε το πρόβλημα με μια συνεχή κατανομή ενεργειακού φάσματος, όπως προσεγγίσαμε τα διακριτά k με μια συνεχή κατανομή.

Τέλος, σημειώνουμε ότι οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες δεν είναι απαραίτητες για την παραπάνω ανάλυση, παρά μόνο διευκολύνουν λόγω της χρήσης των επίπεδων κυμάτων ως ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής. Θα καταλήγαμε στα ίδια συμπεράσματα χρησιμοποιώντας συνοριακές συνθήκες μηδενισμού της κυματοσυνάρτησης στα όρια $\pm\frac{1}{2}L$, μόνο που τότε οι ιδιοσυναρτήσεις θα ήταν $u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{n\pi x}{L}$ και $\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}$ για n περιττό και άρτιο, αντίστοιχα ($n \in \mathbb{N}$).

5.5 Προβολικοί τελεστές στο συνεχές φάσμα. Αναπαράσταση ορμής

Χρησιμοποιώντας την έννοια του προβολικού τελεστή, έχουμε μια ένα-προς-ένα αντιστοιχία των ορθογώνιων ιδιοκαταστάσεων μιας Χαμιλτονιανής, Φ_n, με τους αντίστοιχους προβολικούς τελεστές $\hat{P}_{\Phi_n}$. Εάν οι Φ_n επαρκούν για να αποτελέσουν ορθοκανονική βάση, τότε θα ισχύει η εξ. πληρότητας (44): $\sum_n \hat{P}_{\Phi_n} = \hat{I}$. Σε αυτή την περίπτωση, η Χαμιλτονιανή παίρνει, φορμαλιστικά, τη μορφή $\hat{H} = \sum_n E_n \hat{P}_{\Phi_n}$.[69]

Θυμόμαστε, τώρα, ότι οι προβολικοί τελεστές ορίζονται και στην περίπτωση υπόχωρων διάστασης μεγαλύτερης του 1. Π.χ., αν μονοδιάστατοι προβολικοί τελεστές μετατίθενται (δηλαδή, αν προβάλλουν σε ορθογώνιες κυματοσυναρτήσεις $\{\Phi_n\}$), τότε το άθροισμά τους είναι προβολικός τελεστής στον υπόχωρο μεγαλύτερης διάστασης ο οποίος παράγεται από τις $\{\Phi_n\}$ (βλ. συζήτηση μετά την εξ. 22). Καθώς το n αυξάνει στη σειρά $\sum_n \hat{P}_{\Phi_n}$, το άθροισμα προβάλλει σε ολοένα ευρύτερους υπόχωρους: ο υπόχω-

[69] Διότι υποθέσαμε πληρότητα των Φ_n, επομένως η τυχαία κατάσταση αναλύεται ως $\Psi = \sum_n c_n \Phi_n \Psi = \sum_n (\Phi_n, \Psi)\Phi_n = \sum_n \hat{P}_{\Phi_n}\Psi$. Άρα, $\hat{H}\Psi = \sum_n E_n \hat{P}_{\Phi_n}\Psi$, δηλ. $\hat{H} = \sum_n E_n \hat{P}_{\Phi_n}$.

ρος, όπου προβάλλει ο $\hat{P}_{\Phi_1}$ περιέχεται σε εκείνον, στον οποίο προβάλλει ο $\hat{P}_{\Phi_1} + \hat{P}_{\Phi_2}$, κ.ο.κ., ώσπου καταλήγουμε στον ταυτοτικό τελεστή $\hat{I}$, ο οποίος απλώς αναπαράγει οποιοδήποτε διάνυσμα και είναι προβολικός τελεστής με την τετριμμένη έννοια.

Εάν το σύνολο όλων των ιδιοκαταστάσων Φ_n της Χαμιλτονιανής δεν είναι επαρκεί ώστε αυτές να αποτελούν βάση, τότε ισχύει κάτι αντίστοιχο, στο οποίο θα αναφερθούμε εδώ μόνο περιγραφικά. Οι ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής πυκνώνουν στο συνεχές, δηλ. σε διαστήματα του $\mathbb{R}$, με τρόπο αντίστοιχο με αυτόν που περιγράψαμε στο εδάφιο 5.4 για τον $\mathcal{L}^2([-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L])$ $(L \to \infty)$. Ταυτόχρονα με τις πυκνές ιδιοτιμές, η Χαμιλτονιανή ενδέχεται να έχει και διακριτές (μη πυκνές) ιδιοτιμές E_n. Προκύπτει μια οικογένεια μετατιθέμενων προβολικών τελεστών, $\hat{P}_E$, η οποία χαρακτηρίζεται από συνεχή παράμετρο E, ως επέκταση της οικογένειας προβολικών τελεστών στις ιδιοκαταστάσεις Φ_n που χαρακτηρίζονται από τη διακριτή παράμετρο E_n. Η σχέση πληρότητας $\sum_n \hat{P}_{\Phi_n} = \hat{I}$ αντικαθίσταται από την ακόλουθη:

$$\sum_n \hat{P}_{\Phi_n} + \int_{\text{cont}} d\hat{P}_E = \hat{I}, \tag{100}$$

όπου συνυπάρχουν οι διακριτές ιδιοκαταστάσεις με το συνεχές φάσμα, και όπου το ολοκλήρωμα λαμβάνεται στο συνεχές φάσμα. Η τελευταία σχέση είναι συμβολικός τρόπος γραφής της ακόλουθης πρότασης: για τυχαίες Ψ_1, Ψ_2 τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, ισχύει

$$\begin{aligned} \sum_n (\Psi_1, \hat{P}_{\Phi_n}\, \Psi_2) + \int_{\text{cont}} d(\Psi_1, \hat{P}_E\, \Psi_2) &= \sum_n (\Psi_1, \hat{P}_{\Phi_n}\, \Psi_2) + \int_{\text{cont}} \frac{d(\Psi_1, \hat{P}_E\, \Psi_2)}{dE} dE \\ &= (\Psi_1, \hat{I}\Psi_2) \\ &= (\Psi_1, \Psi_2). \end{aligned}$$

Η Χαμιλτονιανή γράφεται όμοια: $\hat{H} = \sum_n E_n \hat{P}_{\Phi_n} + \int_{\text{cont}} E\, d\hat{P}_E$, με αντίστοιχη σημασία:

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \hat{H}\, \Psi_2) &= \sum_n E_n (\Psi_1, \hat{P}_{\Phi_n}\, \Psi_2) + \int_{\text{cont}} E\, d(\Psi_1, \hat{P}_E\, \Psi_2) \\ &= \sum_n E_n (\Psi_1, \hat{P}_{\Phi_n}\, \Psi_2) + \int_{\text{cont}} E\, \frac{d(\Psi_1, \hat{P}_E\, \Psi_2)}{dE}\, dE. \end{aligned} \tag{101}$$

Το σύνολο των διακριτών ιδιοτιμών E_n μαζί με τις συνεχείς τιμές E, οι οποίες απαιτούνται για να γραφεί η σχέση πληρότητας και η ανάλυση της Χαμιλτονιανής σε προβολικούς τελεστές, ονομάζεται *φάσμα* του τελεστή $\hat{H}$. Η ύπαρξη τέτοιας οικογένειας τελεστών προκύπτει από το θεώρημα φασματικής ανάλυσης.[(70)]

Στο παράδειγμα του προηγούμενου εδαφίου (ελεύθερο σωμάτιο), προσεγγίσαμε το συνεχές φάσμα μέσω του ορίου $L \to \infty$. Οι προβολικοί τελεστές που συνθέτουν τη Χαμιλτονιανή, για πεπερασμένο L και διακριτές ιδιοτιμές, είναι της μορφής $\hat{P}_k \Psi(x) = (u_k, \Psi)\, u_k(x)$, και η δράση της Χαμιλτονιανής γράφεται $\hat{H}\Psi(x) = \sum_k E_k\, (u_k, \Psi)\, u_k(x)$. Παίρνοντας το όριο $L \to \infty$, και μετατρέποντας το άθροισμα σε ολοκλήρωμα, έχουμε

[(70)] Βλ. π.χ. J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press (1955).

$\hat{H}\Psi(x) = \frac{L}{2\pi}\int E_k\,(u_k,\Psi)\,u_k(x)\,dk$, το οποίο φαινομενικά μόνο εξαρτάται από την τιμή του L. Εφόσον οι ιδιοσυναρτήσεις είναι $u_k = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$, λαμβάνουμε

$$\hat{H}\Psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int E_k\left[\int e^{-ikx'}\Psi(x')dx'\right]e^{ikx}\,dk$$

οπότε, η τιμή του L απαλείφεται από την έκφραση. Στο επόμενο βήμα, μετατρέπουμε το ολοκλήρωμα ως προς k σε ολοκλήρωμα ως προς E. Έχουμε $dk = d[(2mE/\hbar^2)^{1/2}] = (m/2\hbar^2)^{1/2}E^{-1/2}dE$. Επίσης, πρέπει να λάβουμε υπ΄ όψη ότι σε κάθε E αντιστοιχούν δύο ιδιοτιμές, $\pm k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$, δηλαδή ο προβολικός τελεστής που αντιστοιχεί σε ενέργεια E προβάλλει σε υπόχωρο δύο διαστάσεων. Καταλήγουμε, για το εσωτερικό γινόμενο $(\Psi_1, \hat{H}\Psi_2)$ δύο τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων, στο εξής:

$$\begin{aligned}(\Psi_1,\hat{H}\Psi_2) \;=\; \int E\Bigg[&\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}}\frac{1}{\sqrt{E}}\\ &\times\iint \Psi_1^*(x)\left(e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}(x-x')}+e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}(x-x')}\right)\Psi_2(x')dx'dx\Bigg]dE\end{aligned}$$

Επομένως, η οικογένεια προβολικών τελεστών $\hat{P}_E$ ορίζεται εδώ από την έκφραση μέσα στις αγκύλες παρενθέσεις. Το διπλό ολοκλήρωμα προκύπτει από το εσωτερικό γινομένο $(\Psi_1, \hat{P}_E\Psi_2)$ της εξ. (101).

Ένας άλλος τρόπος να δούμε το αποτέλεσμα είναι να πάρουμε: $(\Psi_1, \hat{P}_k\Psi_2) = (\Psi_1, (u_k,\Psi_2)u_k) = (\Psi_1, u_k)(u_k, \Psi_2)$, από όπου και το διπλό ολοκλήρωμα. Προσθέτοντας τον αντίστοιχο όρο για το $-k$, καταλήγουμε στο $(\Psi_1, \hat{P}_E\Psi_2) = (\Psi_1, (\hat{P}_k+\hat{P}_{-k})\Psi_2)$. Ολοκληρώνοντας ως προς E και μετατρέποντας το dE σε dk, φτάνουμε στην ίδια εξίσωση.

Η ποσότητα $n(E) \equiv \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}}\frac{1}{\sqrt{E}}$ που περιλαμβάνεται στην παραπάνω έκφραση ονομάζεται *πυκνότητα καταστάσεων* και το ολοκήρωμα $\int_{E_1}^{E_2} n(E)dE$ δίνει τον αριθμό των ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής μεταξύ E_1 και E_2 ανά μονάδα μήκους στον άξονα x (ή ανά μονάδα όγκου στις τρεις διαστάσεις).

Στην παραπάνω φασματική ανάλυση δεν εμφανίζεται το L. Με αντίστοιχο τρόπο απαλείφεται το L, εάν δεν έχουμε ελεύθερο σωματίδιο με συναρτήσεις βάσης επίπεδων κυμάτων, αλλά σωματίδιο που αλληλεπιδρά με δυναμικό και έχει διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής. Θα μελετήσουμε μια τέτοια περίπτωση, με συνύπαρξη συνεχούς και διακριτού φάσματος, στο κεφάλαιο 6.

Ανάπτυγμα του τύπου (100) σε προβολικούς τελεστές μπορεί να βρεθεί όχι μόνο για τη Χαμιλτονιανή, αλλά γενικότερα για ερμιτιανούς τελεστές. Σε αντιστοιχία με την (100), οι ϕ_n αντικαθίστανται από τις ιδιοκαταστάσεις του αντίστοιχου τελεστή, και η μεταβλητή ολοκλήρωσης E αντικαθίσταται από την αντίστοιχη φυσική ποσότητα στο συνεχές φάσμα. Για παράδειγμα, για τον τελεστή της ορμής έχουμε την ιδιοτιμή $p = \hbar k$ ως συνεχή μεταβλητή, με (μη κανονικοποιήσιμες) ιδιοσυναρτήσεις τις e^{ikx} $(x \in (-\infty,\infty))$. Προκύπτει η συνεχής οικογένεια προβολικών τελεστών $\hat{P}_k$ με

$$\hat{P}_k\Psi(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx},\Psi\right) = \left[\int dx'\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx'}\Psi(x')\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \tag{102}$$

και

$$\left(\Psi_1,\hat{P}_k\Psi_2\right) = \int dx\,\Psi_1^*(x)\left[\int dx'\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx'}\Psi_2(x')\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} = \frac{1}{2\pi}\left(\Psi_1,e^{ikx}\right)\left(e^{ikx},\Psi_2\right) \tag{103}$$

όπου, αντί τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων βάσης, χρησιμοποιούνται οι μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις της ορμής, οι οποίες ονομάζονται και *γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις*. Η απαίτηση τετραγωνικής ολοκληρωσιμότητας των συναρτήσεων βάσης αντικαθίσταται εδώ από την απαίτηση $|\left(e^{ikx},\Psi\right)| < \infty$, για κάθε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση Ψ. Ο παράγοντας $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ που συνοδεύει τα εκθετικά οφείλεται στην κανονικοποίηση $\int \hat{P}_k\, dk = \hat{I}$.

Εάν γνωρίζουμε τους συντελεστές $\tilde{\Psi}(k) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx},\Psi\right)$ (οι οποίοι ταυτίζονται με το μετασχημετισμό Fourier της κυματοσυνάρτησης Ψ), μπορούμε προφανώς να ανασυνθέσουμε την Ψ. Γι αυτό το λόγο, ο μετασχηματισμός Fourier $\tilde{\Psi}(k)$ ονομάζεται *κυματοσυνάρτηση σε αναπαράσταση ορμής*, σε αναλογία με τη συνήθη *κυματοσυνάρτηση σε αναπαράσταση θέσης* $\Psi(x)$. Από την ταυτότητα Parseval, προκύπτει ότι η κυματοσυνάρτηση σε αναπαράσταση ορμής ικανοποιεί την ίδια συνθήκη κανονικοποίησης όπως η $\Psi(x)$, δηλ. $\int dk|\tilde{\Psi}(k)|^2 = 1$.[71]

Στη γενική περίπτωση ερμιτιανού τελεστή $\hat{A}$, η οικογένεια προβολικών τελεστών δεν δίνεται από εκθετικές συναρτήσεις, αλλά προσδιορίζεται από την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{A}\,u = \lambda\,u$.

5.6 Προβλήματα

1. Θεωρήστε μια απειροστή στροφή στον τρισδιάστατο ευκλείδιο χώρο (και γενικότερα στον $\mathbb{R}^n$, $n \geq 2$), κατά την οποία ένα αρχικό διάνυσμα $\mathbf{r}$ στρέφεται στο $\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}$. Στο όριο $\delta\mathbf{r} \to 0$ δείξτε ότι τα $\mathbf{r}$ και $\delta\mathbf{r}$ είναι ορθογώνια. Εξετάστε αν ισχύει το ίδιο και σε απειροστές στροφές στο χώρο Hilbert. Αν όχι, ποια η διαφορά;

2. Η Χαμιλτονιανή, για σωματίδιο που κινείται σε δυναμικό $V(x)$, είναι $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$. Δείξτε τη σχέση $\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\langle\frac{\partial V(x)}{\partial x}\rangle$. (Υπόδειξη: Δείξτε ότι ο μεταθέτης της ορμής με μια συνάρτηση της θέσης είναι $[\hat{p},\hat{V}(\hat{x})] = -i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}$.)

3. α) Ξεκινάμε με μια συλλογή σε χρόνο $t = 0$ και κάνουμε μετρήσεις ενέργειας σε χρόνο t. Λαμβάνουμε μια κατανομή πιθανότητας της ενέργειας. Δείξτε ότι η κατανομή είναι ανεξάρτητη από το χρόνο (υποθέτοντας ότι η Χαμιλτονιανή δεν έχει εξάρτηση από το χρόνο). β) Για σύστημα ελεύθερου σωματιδίου, ξεκινάμε με μια συλλογή σε χρόνο $t = 0$ και κάνουμε μετρήσεις ορμής σε χρόνο t. Δείξτε ότι η κατανομή της ορμής είναι ανεξάρτητη από το χρόνο.

4. Δείξτε τη μορφή της εξ. συνέχειας στη διαφορική της μορφή (81) και στην ολοκληρωτική της μορφή (79) σε τρεις διαστάσεις.

5. Δείξτε ότι $e^{-it\hat{H}/\hbar}\sum_n c_n(0)\Phi_n = \sum_n e^{-itE_n/\hbar}c_n(0)\Phi_n$, εάν η Χαμιλτονιανή δεν εξαρτάται από το χρόνο και εάν οι Φ_n είναι ιδιοκαταστάσεις της $\hat{H}$ με ιδιοτιμές E_n. (Υπόδειξη: σε πρώτο βήμα δείξτε ότι οι Φ_n είναι και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $e^{-it\hat{H}/\hbar}$ με ιδιοτιμή $e^{-itE_n/\hbar}$. Χρησιμοποιήστε προς τούτο το ανάπτυγμα της εκθετικής συνάρτησης.)

[71] Για την απόδειξη μπορεί να χρησιμοποιηθεί η σχέση $\frac{1}{2\pi}\int dx\, e^{i(k-k')x} = \delta(x-x')$.

6. Δείξτε ότι η πρόσθεση μιας σταθεράς στη Χαμιλτονιανή, δηλαδή $\hat{H} \to \hat{H} + \lambda \hat{I}$, με $\hat{I}$ τον ταυτοτικό τελεστή και $\lambda \in \mathbb{R}$ σταθερά ανεξάρτητη του χρόνου, δεν επιφέρει αλλαγές στα μετρήσιμα μεγέθη και επομένως δεν έχει φυσική σημασία.

7. Για Χαμιλτονιανή της μορφής $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(x)$, και υπό την προϋπόθεση πως η συνάρτηση $V(x)$ έχει ελάχιστο $V_{\min}$, δείξτε ότι: α) η μέση τιμή της ενέργειας $\left(\Psi, \hat{H}\Psi\right)$ σε οποιαδήποτε Ψ δεν μπορεί να είναι μικρότερη από $V_{\min}$, β) οποιαδήποτε ιδιοτιμή της Χαμιλτονιανής δεν μπορεί να είναι μικρότερη από $V_{\min}$. (Βλ. και κεφ. 3 πρόβλημα 15.)

6 Συνύπαρξη διακριτού και συνεχούς φάσματος: πηγάδι δυναμικού

6.1 Περιγραφή του προβλήματος

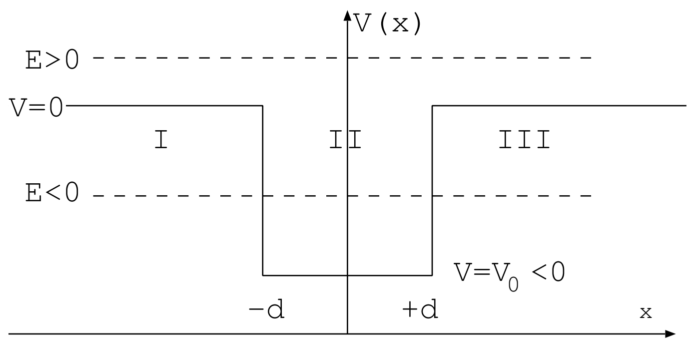
Θα λύσουμε τώρα το εξής πρόβλημα: σωματίδιο κινείται σε μια διάσταση υπό την επίδραση Χαμιλτονιανής της μορφής

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \qquad (104)$$

με

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \ \ (< 0), & \text{αν } -d < x < d \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases} \qquad (105)$$

Δηλαδή, το δυναμικό σχηματίζει ένα πηγάδι, βάθους V_0 και πλάτους $2d$, γύρω από το $x = 0$ (βλ. σχ. 1). Αυτό μπορεί να ιδωθεί και ως μοντέλο ατόμου σε μια ιδιαίτερα απλοϊκή μορφή.



Σχήμα 1: Πηγάδι δυναμικού σε μία διάσταση.

Αναζητούμε λύσεις της χρονικά ανεξάρτητης εξ. Schrödinger, η οποία γράφεται:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi &= 0, & x < -d \ (\text{περιοχή I}) \\
\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\Psi &= 0, & -d < x < d \ (\text{περιοχή II}) \\
\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi &= 0, & d < x \ (\text{περιοχή III})
\end{aligned}$$

Ολοκληρώνοντας την εξ. Schrödinger σε ένα μικρό διάστημα πάχους 2ϵ γύρω από το $-d$, έχουμε

$$\begin{aligned}
0 &= \int_{-d-\epsilon}^{-d+\epsilon}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\,\Psi\right]dx \\
&= \left[\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right]_{-d-\epsilon}^{-d+\epsilon} + \frac{2m}{\hbar^2}E\int_{-d-\epsilon}^{-d+\epsilon}\Psi(x)\,dx - \frac{2m}{\hbar^2}V_0\int_{-d-\epsilon}^{-d+\epsilon}\Psi(x)\,dx \\
&\to \left[\left.\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right|_{-d+} - \left.\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right|_{-d-}\right] + 0, \quad \text{για } \epsilon \to 0.
\end{aligned}$$

Στο τελευταίο βήμα δεχθήκαμε ότι η Ψ δεν απειρίζεται στο $-d$. Εντελώς ανάλογα είναι και τα αποτελέσματα στη θέση $+d$. Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε τα εξής. Σε σημείο πεπερασμένης ασυνέχειας δυναμικού κατά V_0:

- η δεύτερη παράγωγος της Ψ παρουσιάζει ασυνέχεια $\frac{2m}{\hbar^2}V_0$,
- η πρώτη παράγωγος είναι συνεχής, και
- η Ψ είναι συνεχής.

Αυτά συνδέονται με το γεγονός ότι η διαφορική εξίσωση είναι δεύτερης τάξης. Η γενική λύση σε κάθε περιοχή $\mu \in \{\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}\}$ και η παράγωγός της δίνονται, όπως είναι γνωστό, από τις σχέσεις

$$\Psi_\mu = a_\mu\, e^{ik_\mu x} + b_\mu\, e^{-ik_\mu x} \tag{106}$$

$$\frac{d\Psi_\mu}{dx} = ik_\mu(a_\mu\, e^{ik_\mu x} - b_\mu\, e^{-ik_\mu x}) \tag{107}$$

με $k_{\mathrm{I}}^2 = k_{\mathrm{III}}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \equiv q^2$ και $k_{\mathrm{II}}^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \equiv k^2$, όπου απλοποιήσαμε το συμβολισμό εισάγοντας τα q και k. Οι συντελεστές a_μ και b_μ και οι ενέργεια E (συνολικά επτά άγνωστοι) προσδιορίζονται από τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου στα $-d$ και $+d$, από τις συνοριακές συνθήκες της κυματοσυνάρτησης στο $\pm\infty$, και από τη συνθήκη κανονικοποίησης (επτά εξισώσεις).

Πριν προχωρήσουμε στην επίλυση του συστήματος επτά εξισώσεων με επτά αγνώστους, παρατηρούμε ότι το πρόβλημα χαρακτηρίζεται από συμμετρία, η οποία απλοποιεί τις εξισώσεις.

6.2 Συμμετρία ομοτιμίας (αντιστροφής χώρου)

Η Χαμιλτονιανή (104) με το δυναμικό (105) είναι αναλλοίωτη υπό το μετασχηματισμό $x \to -x$. Αυτό μας οδηγεί στο να ορίσουμε τον τελεστή της *ομοτιμίας (parity)* ή *αντιστροφής χώρου (space inversion)* $\hat{\mathcal{P}}$, με

$$\hat{\mathcal{P}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r}) \tag{108}$$

ή, σε μία διάσταση, $\hat{\mathcal{P}}\Psi(x) = \Psi(-x)$. Ο τελεστής είναι ερμιτιανός: πρώτον, είναι πρόδηλα γραμμικός, και δεύτερον, εύκολα βρίσκουμε ότι $(\Psi, \hat{\mathcal{P}}\Psi) \in \mathbb{R}$. Επίσης, εύκολα βρίσκουμε ότι $\hat{\mathcal{P}}^2 = 1$, ότι οι ιδιοκαταστάσεις του είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις και ότι οι ιδιοτιμές του είναι το 1 (για άρτιες συναρτήσεις) και το -1 (για περιττές).[(72)]

Δρούμε με τον $\hat{\mathcal{P}}$ στη συνάρτηση $\hat{H}\Psi(x)$: $\hat{\mathcal{P}}\hat{H}\Psi(x) = \hat{\mathcal{P}}[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x}^2\Psi(x) + V(x)\Psi(x)]$. Η δεύτερη παραγώγιση ως προς τη θέση μένει αναλλοίωτη από το μετασχηματισμό $x \to -x$: $\frac{\partial^2}{\partial(-x)^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Το δυναμικό είναι άρτια συνάρτηση του x: $V(-x) = V(x)$. Επομένως, $\hat{\mathcal{P}}\hat{H}\,\Psi(x) = \hat{H}\Psi(-x) = \hat{H}\,\hat{\mathcal{P}}\,\Psi(x)$, δηλαδή $[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0$: ο τελεστής ομοτιμίας μετατίθεται με την άρτια Χαμιλτονιανή.

Από εδώ προκύπτει ότι οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής μπορούν να επιλεγούν με τέτοιο τρόπο, ώστε να είναι και ιδιοκαταστάσεις της ομοτιμίας. Αν Φ ιδιοκατάσταση

(72) Πρόβλημα 4.10.

της Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμή E, τότε $\hat{H}(\hat{\mathcal{P}}\,\Phi) = \hat{\mathcal{P}}\hat{H}\,\Phi = E\hat{\mathcal{P}}\Phi$ (στο πρώτο βήμα χρησιμοποιήσαμε τη μεταθετική ιδιότητα των $\hat{\mathcal{P}}$ και $\hat{H}$), δηλαδή η $\hat{\mathcal{P}}\Phi$ είναι επίσης ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής με την ίδια ιδιοτιμή (η $\hat{\mathcal{P}}\Phi$ ενδέχεται και να ταυτίζεται με την Φ). Επομένως, οι κυματοσυναρτήσεις

$$\Phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi + \hat{\mathcal{P}}\Phi) \quad \text{και} \quad \Phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi - \hat{\mathcal{P}}\Phi) \tag{109}$$

είναι επίσης ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής, αλλά, ταυτόχρονα, είναι και ιδιοκαταστάσεις της ομοτιμίας: $\hat{\mathcal{P}}\Phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathcal{P}}\Phi + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathcal{P}}^2\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathcal{P}}\Phi + \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi = \Phi_+$ και $\hat{\mathcal{P}}\Phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathcal{P}}\Phi - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathcal{P}}^2\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\mathcal{P}}\Phi - \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi = -\Phi_-$. (Σε περίπτωση που $\hat{\mathcal{P}}\Phi = \Phi$, η Φ_- μηδενίζεται.)

Εκμεταλλευόμενοι τα παραπάνω συμπεράσματα, θα αναζητήσουμε λύσεις της εξ. Schrödinger οι οποίες να είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις. Με αυτό τον τρόπο μειώνεται ο αριθμός των αγνώστων στις εξισώσεις προς επίλυση.

Γενικότερα, αν η Χαμιλτονιανή μετατίθεται με κάποιον ερμιτιανό τελεστή, μπορούμε να αναζητήσουμε κοινές ιδιοσυναρτήσεις, απλοποιώντας την επίλυση του προβλήματος. Π.χ. η κινητική ενέργεια μετατίθεται με τον τελεστή της ορμής, οπότε επιλέγουμε τις ιδιοσυναρτήσεις της ορμής $c\,e^{ikx}$ ως λύσεις. Όμοια, σε τρεις διαστάσεις, εάν η Χαμιλτονιανή να μετατίθεται με τον τελεστή της στροφορμής, τότε επιλέγουμε να λύσουμε το πρόβλημα σε βάση ιδιοκαταστάσεων της στροφορμής. Σε αυτές τις περιπτώσεις, λέμε ότι η Χαμιλτονιανή υπακούει σε μια συμμετρία (εδω, τη συμμετρία της ομοτιμίας), η οποία επίσης επάγει ένα διατηρούμενο μέγεθος (εδώ, την ομοτιμία των κυματοσυναρτήσεων: άρτιες εξελίσσονται χρονικά σε άρτιες, περιττές σε περιττές), όπως συζητήσαμε στο κεφάλαιο 5. Το πλεονέκτημα της χρήσης των συμμετριών είναι ότι οι ιδιοκαταστάσεις τους μπορούν συνήθως να βρεθούν με απλά επιχειρήματα, σε αντίθεση με τη Χαμιλτονιανή, της οποίας το πρόβλημα ιδιοτιμών είναι συνήθως πιο περίπλοκο. Για παράδειγμα, οποιαδήποτε Χαμιλτονιανή με κινητική ενέργεια και άρτια συνάρτηση δυναμικού έχει συμμετρία ομοτιμίας, ανεξάρτητα της ακριβούς μορφής του δυναμικού. Η αναζήτηση ιδιοσυναρτήσεων της Χαμιλτονιανής ξεχωριστά στον υπόχωρο των άρτιων και ξεχωριστά των περιττών συναρτήσεων μειώνει την πολυπλοκότητα του προβλήματος.

6.3 Δέσμιες καταστάσεις

Προχωρούμε, τώρα, στην εύρεση των συντελεστών a_μ, b_μ και της ενέργειας E (βλ. εξ. 106,107 και την παράγραφο που ακολουθεί). Πρώτα εξετάζουμε λύσεις *δέσμιων καταστάσεων (bound states)* εκμεταλλευόμενοι τη συμμετρία των κυματοσυναρτήσεων. Δέσμιες ονομάζονται εκείνες οι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής, οι οποίες είναι ουσιαστικά εντοπισμένες σε πεπερασμένο χώρο (μηδενίζονται ή πέφτουν εκθετικά για μεγάλα $|x|$).

Ήδη καταλήξαμε $k_I^2 = k_{III}^2 \equiv q^2$. Από τη συμμετρία ομοτιμίας, $\Psi(-x) = \pm\Psi(x)$, έχουμε $a_I = \pm b_{III}$ και $b_I = \pm a_{III}$ ($+$ για άρτιες συναρτήσεις, $-$ για περιττές). Επίσης, $a_{II} = \pm b_{II} \equiv c/2$, δηλαδή, στην περιοχή II έχουμε ή $\Psi = c\cos(kx)$ ή $c\sin(kx)$. Επομένως, η εξίσωση (106) γράφεται

$$\Psi_+ = \begin{cases} ae^{iqx} + be^{-iqx} \\ c\cos(kx) \\ be^{iqx} + ae^{-iqx} \end{cases} \quad \text{και} \quad \Psi_- = \begin{cases} ae^{iqx} + be^{-iqx} & x < -d \\ c\sin(kx) & -d < x < d \\ -(be^{iqx} + ae^{-iqx}) & d < x \end{cases} \tag{110}$$

για τις άρτιες (Ψ_+) και τις περιττές (Ψ_-) λύσεις. Το επόμενο βήμα είναι να θέσουμε τη συνοριακή συνθήκη $|\Psi(x)|^2 \to 0$ για $x \to \pm\infty$, η οποία πρέπει να ικανοποιείται από δέσμιες καταστάσεις. Θυμόμαστε ότι $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, επομένως, το q θα είναι πραγματικό για $E > 0$ και φανταστικό για $E < 0$. Αν $q \in \mathbb{R}$, τότε βλέπουμε αμέσως ότι δεν μηδενίζεται η κυματοσυνάρτηση για μεγάλα x: Για $x > d$ και $< -d$, έχουμε $|\Psi(x)|^2 = |a|^2 + |b^2| + 2\mathrm{Re}[a\, b e^{2iqx}]$, η οποία είναι ταλαντούμενη περιοδική συνάρτηση. Επομένως, πρέπει αναγκαστικά $E < 0$, ώστε το q να είναι φανταστικός αριθμός, έστω $iq = \gamma$, $\gamma \in \mathbb{R}$. Θέτουμε $\gamma > 0$ χωρίς βλάβη της γενικότητας, εφόσον εμφανίζεται και το γ και το $-\gamma$ στην εξίσωση. Τότε, πρέπει να έχουμε $b = 0$, διότι, διαφορετικά, για $x > d$ θα κυριαρχούσε ο όρος $be^{iqx} = be^{\gamma x} \to \infty$ για $x \to \infty$. Ανάλογο συμπέρασμα βγάζουμε για $x < -d$: και πάλι πρέπει $b = 0$. Έχουμε λοιπόν το ενδιάμεσο αποτέλεσμα:

$$\Psi_+ = \begin{cases} ae^{\gamma x} \\ c\cos(kx) \\ ae^{-\gamma x} \end{cases} \quad \text{και} \quad \Psi_- = \begin{cases} ae^{\gamma x} & x < -d \\ c\sin(kx) & -d < x < d \\ -ae^{-\gamma x} & d < x \end{cases} \tag{111}$$

με $\gamma = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ και $k = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$. Οι τρεις παράμετροι που απομένουν, a, c και E, πρέπει να προσδιοριστούν από τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας κυματοσυνάρτησης, συνέχειας παραγώγου και κανονικοποίησης. Λόγω της συμμετρίας $\Psi(x) = \pm\Psi(-x)$, η απαίτηση συνέχειας στα σημεία $\pm d$ εμπεριέχει την ίδια πληροφορία, επομένως αρκεί να εφαρμοστεί σε ένα από τα δύο. Έχουμε, στο σημείο $x = d$,

$$\begin{array}{cc} \text{για την } \Psi_+: & \text{για την } \Psi_-: \\ c\,\cos(kd) = a\,e^{-\gamma d} & c\,\sin(kd) = -ae^{-\gamma d} \\ k\,c\sin(kd) = \gamma\,a\,e^{-\gamma d} & k\,c\cos(kd) = \gamma\,a\,e^{-\gamma d} \end{array} \tag{112}$$

Η άνω σειρά προκύπτει από τη συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και η κάτω από τη συνέχεια της παραγώγου. Διαιρώντας κατά μέλη, λαμβάνουμε

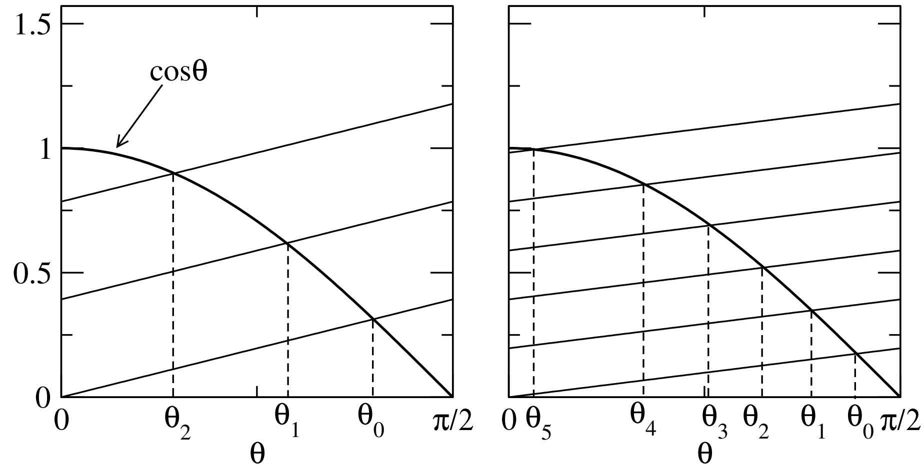
$$\begin{array}{cc} \text{για την } \Psi_+: & \text{για την } \Psi_-: \\ \tan(kd) = \frac{\gamma}{k} & \tan(kd) = -\frac{k}{\gamma} \end{array} \tag{113}$$

Δεδομένου ότι τα γ και k είναι συναρτήσεις της ενέργειας, οι παραπάνω εξισώσεις, αν λυθούν ως προς E, δίνουν τις δυνατές ιδιοτιμές της ενέργειας για άρτιες και περιττές δέσμιες καταστάσεις. Στη συνέχεια, με αντικατάσταση των ιδιοτιμών στην (112) λαμβάνουμε το λόγο a/c και σε τελευταίο βήμα, με χρήση της εξίσωσης κανονικοποίησης, $\int |\Psi(x)|^2 dx = 1$, λαμβάνουμε τις τιμές των a και c.

Προχωρούμε σε επίλυση των εξ. (113).[(73)] Παρατηρούμε ότι $(kd)^2 + (\gamma d)^2 = [\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) + \frac{2m}{\hbar^2}(-E)]d^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|V_0|d^2 = \lambda^2$ (είναι $E < 0$ και $V_0 < 0$), όπου, για συντομία στο συμβολισμό, ορίσαμε την αδιάστατη παράμετρο $\lambda^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}|V_0|d^2$, $\lambda > 0$. Κάνουμε τώρα το μετασχηματισμό $kd = \lambda\cos\theta$, $\gamma d = \lambda\sin\theta$, που δίνει $k/\gamma = \cot\theta$ και $\gamma/k = \tan\theta$, ορίζοντας έτσι το $\theta(E) \equiv \arcsin(\gamma(E)d/\lambda) \equiv \arcsin(\sqrt{|E/V_0|})$. Οι εξ. (113) γίνονται

$$\begin{array}{cc} \text{για την } \Psi_+: & \text{για την } \Psi_-: \\ \tan(kd) = \tan\theta & \tan(kd) = -\cot\theta = \tan(\theta - \frac{\pi}{2}) \end{array} \tag{114}$$

[(73)] Ακολουθούμε τη μέθοδο που παρουσιάζεται στο βιβλίο του Στέφανου Τραχανά, *Κβαντομηχανική I*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (1991) (κεφ. 3).



Σχήμα 2: Γραφική λύση της εξ. (117) για $\lambda = \frac{\sqrt{2m|V_0|}}{\hbar}d = 4$ (αριστερά) και $\lambda = 8$ (δεξιά). Τα σημεία τομής των ευθειών με την καμπύλη $\cos\theta$ αντιστοιχούν στις λύσεις θ_n στον άξονα των θ.

Αυτές οι εξισώσεις έχουν τις λύσεις (δεδομένου ότι $\cos\theta = kd/\lambda > 0$, $\sin\theta = \gamma d/\lambda > 0$, προκύπτει $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$)

$$\begin{array}{cc} \text{για την } \Psi_+: & \text{για την } \Psi_-: \\ kd = \theta + n\pi = \theta + 2n\frac{\pi}{2}, & kd = \theta - \frac{\pi}{2} + n\pi = \theta + (2n-1)\frac{\pi}{2}, \\ (n = 0, 1, 2, \ldots) & (n = 1, 2, \ldots) \end{array} \tag{115}$$

που συνοψίζονται στην

$$kd = \theta + n\frac{\pi}{2}, \quad (n = 0, 1, 2, \ldots) \quad \begin{cases} \text{άρτια } n \text{ για την } \Psi_+ \\ \text{περιττά } n \text{ για την } \Psi_-. \end{cases} \tag{116}$$

Αλλά, $kd = \lambda\cos\theta$, επομένως

$$\begin{aligned} \cos\theta(E) &= \frac{1}{\lambda}\theta(E) + \frac{1}{\lambda}\frac{\pi}{2}n \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m|V_0|}\,d}\theta(E) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m|V_0|}\,d}\frac{\pi}{2}n \end{aligned} \tag{117}$$

Οι λύσεις ως προς $\theta = \theta_n$ της τελευταίας εξίσωσης μπορούν να βρεθούν γραφικά με απλό τρόπο, ως σημεία τομής της καμπύλης $\cos\theta$ με την ευθεία $\frac{1}{\lambda}\theta(E) + \frac{1}{\lambda}\frac{n\pi}{2}$. Από τις θ_n (βλ. Σχ. 2) υπολογίζονται οι ιδιοτιμές της ενέργειας:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\gamma^2 = -|V_0|\sin^2\theta_n = -|V_0| + |V_0|\cos^2\theta_n. \tag{118}$$

Παρατηρούμε τα ακόλουθα:

- Υπάρχει τουλάχιστον μία λύση (για $n = 0$).
- Όλες οι λύσεις έχουν ενέργεια μεγαλύτερη από V_0.
- Η ενέργεια των λύσεων αυξάνεται με το n.

- Ο αριθμός λύσεων είναι πεπερασμένος. Δεδομένου ότι $\cos\theta \leq 1$, έχουμε $n_{\max}+1$ λύσεις, με $n_{\max}$ το ακέραιο μέρος του $2\lambda/\pi$.

- Ο αριθμός των λύσεων εξαρτάται από το $1/\lambda$ μέσω του γινομένου των παραμέτρων $1/(\sqrt{|V_0|}d)$. Καθώς το λ αυξάνεται, δηλαδή για μεγαλύτερο $\sqrt{|V_0|}\,d$ (βαθύτερα ή πλατύτερα πηγάδια), ο αριθμός των λύσεων επίσης αυξάνεται.

Για μεγάλα λ (στο όριο $\sqrt{|V_0|}d \gg \hbar/\sqrt{2m}$), οι χαμηλότερες ενεργειακά λύσεις δίνονται από $\theta_n = \frac{\pi}{2} - \delta\theta_n$, με $\delta\theta_n \ll 1$. Προσεγγίζοντας $\cos(\frac{\pi}{2} - \delta\theta_n) = \sin\delta\theta_n \approx \delta\theta_n$, η εξ. (117) γράφεται $\delta\theta_n = \frac{1}{\lambda}(\frac{\pi}{2} - \delta\theta_n) + \frac{1}{\lambda}\frac{\pi}{2}n$, ή $\delta\theta_n = \frac{1}{\lambda}\frac{1+n}{1+1/\lambda}\frac{\pi}{2} \approx \frac{1}{\lambda}\frac{\pi}{2}(n+1)$. Αντικαθιστώντας στην (118) το $\cos^2\theta_n = \sin^2\delta\theta_n \approx (\delta\theta_n)^2$, προκύπτει

$$E_n - V_0 \approx \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2d}\right)^2 (n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{119}$$

Η απόσταση των E_n από το ελάχιστο του δυναμικού, V_0, είναι η ίδια με τις γνωστές λύσεις για το σωματίδιο στον $\mathcal{L}^2([-d,d])$ με συνοριακές συνθήκες $\Psi(-d) = \Psi(d) = 0$.

Η κατώτατη ιδιοτιμή ενέργειας ονομάζεται *θεμελιώδης ή βασική στάθμη* και η αντίστοιχη κατάσταση *θεμελιώδης ή βασική κατάσταση (ground state)*. Παρατηρούμε ότι η θεμελιώδης στάθμη είναι υψηλότερη του ελάχιστου του δυναμικού: $E_0 > V_0$. Αυτό οφείλεται στην αναγκαστική ύπαρξη κινητικής ενέργειας.[74]

Οι δέσμιες καταστάσεις διεισδύουν στις περιοχές Ι,ΙΙΙ όπου το δυναμικό $V = 0$ υπερβαίνει την ενέργεια $E_n < 0$. Αυτό το φαινόμενο δεν παρουσιάζεται στην κλασική μηχανική. Όπως φαίνεται από την εξ. (111) η ιδιοσυνάρτηση φθίνει εκθετικά σε αυτές τις περιοχές, $ae^{\pm\gamma x}$. Ένα μέτρο της διείσδυσης είναι η ποσότητα $1/\gamma$, η οποία έχει διαστάσεις μήκους και ονομάζεται *βάθος διείσδυσης*. Στο όριο ($\sqrt{|V_0|}d \gg \hbar/\sqrt{2m}$), το βάθος διείσδυσης των ενεργειακά χαμηλών κυματοσυναρτήσεων (μικρό n) γίνεται απειροστό ($1/\gamma \ll d$), και οι κυματοσυναρτήσεις παίρνουν, προσεγγιστικά, τη μορφή της λύσης για το πρόβλημα σωματιδίου περιορισμένου στο $[-d,d]$.[75]

6.4 Δύο θεωρήματα για δέσμιες καταστάσεις σε μονοδιάστατα προβλήματα

Παρατηρούμε από τα προηγούμενα ότι για το πρόβλημα των δέσμιων καταστάσεων στο πηγάδι δυναμικού δεν υπάρχει εκφυλισμός. Αυτό το συμπέρασμα γενικεύεται.

• Σε μονοδιάστατα προβλήματα, για οποιοδήποτε δυναμικό, οι ιδιοτιμές των δέσμιων καταστάσεων δεν έχουν εκφυλισμό (δεν υπαρχουν δύο δέσμιες καταστάσεις με την ίδια ιδιοτιμή ενέργειας.)

Για να το δείξουμε αυτό,[76] θεωρούμε την ορίζουσα Wronski δύο συναρσήσεων $\Psi_1(x)$ και $\Psi_2(x)$, $W(x) = \Psi_1(x)\Psi_2'(x) - \Psi_1'(x)\Psi_2(x)$. Αν $W(x) = 0$, τότε $\Psi_1'/\Psi_1 = \Psi_2'/\Psi_2$, από όπου προκύπτει $\frac{d}{dx}\ln\Psi_1(x) = \frac{d}{dx}\ln\Psi_2(x)$, δηλαδή $\Psi_1 = c\Psi_2$, όπου c σταθερά, δηλαδή οι δύο συναρτήσεις είναι γραμμικά εξαρτημένες. Για το πρόβλημά μας, αν οι $\Psi_{1,2}$ ικανοποιούν τη χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger με κοινή ιδιοτιμή E, τότε $\Psi_{1,2}'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\Psi_{1,2}(x)$. Τότε, προκύπτει $\Psi_1''\Psi_2 - \Psi_1\Psi_2'' = 0$. Αλλά η έκφραση στο αριστερό μέλος ταυτίζεται με την παράγωγο της ορίζουσας Wronski, άρα $W'(x) =$

[74] Βλ. κεφ. 5 πρόβλημα 7.
[75] Προβλήματα 2 και 3.
[76] Βλ., π.χ., Στέφανος Τραχανάς, *Κβαντομηχανική Ι*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (1991).

0, άρα $W(x) = \Psi_1(x)\Psi_2'(x) - \Psi_1'(x)\Psi_2(x) =$ σταθ.. Παρατηρώντας ότι οι δέσμιες καταστάσεις μηδενίζονται για $x \to \pm\infty$, πρέπει η σταθερά να μηδενίζεται, δηλ. $W(x) = 0$. Άρα, οι $\Psi_{1,2}$ είναι γραμμικά εξαρτημένες και αντιστοιχούν στην ίδια κατάσταση.

Προκύπτει το ακόλουθο πόρισμα:

• Σε μονοδιάστατα προβλήματα, για οποιοδήποτε δυναμικό, οι κυματοσυναρτήσεις των δέσμιων καταστάσεων μπορούν να γραφούν σε πραγματική μορφή.

Για την απόδειξη, παρατηρούμε ότι αν $\Psi(x)$ ιδιοσυνάρτηση της Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμή E, τότε και η $\Psi^*(x)$ είναι ιδιοσυνάρτηση με την ίδια ιδιοτιμή. Αυτό προκύπτει από την εξίσωση ιδιοτιμών και τη μιγαδική συζυγή της:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x) &= E\,\Psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^{*\prime\prime}(x) + V(x)\Psi^*(x) &= E\,\Psi^*(x). \end{aligned}$$

Η δεύτερη προκύπτει από την πρώτη δεδομένου ότι $V(x) \in \mathbb{R}$ και $E \in \mathbb{R}$. Από το παραπάνω θεώρημα (απουσίας εκφυλισμού σε δέσμιες καταστάσεις σε μία διάσταση) προκύπτει ότι οι Ψ και Ψ^* είναι γραμμικά εξαρτημένες, δηλαδή $\Psi^* = c\Psi$, όπου $c \in \mathbb{C}$ σταθερά. Εάν $c \neq -1$, θέτουμε ως Φ το πραγματικό μέρος της Ψ: $\Phi = \frac{1}{2}(\Psi + \Psi^*) = (1+c)\Psi \in \mathbb{R}$, η οποία είναι ιδιοσυνάρτηση της $\hat{H}$ με ιδιοτιμή E, ως πολλαπλάσιο της Ψ, άρα είναι η ζητούμενη. Εάν $c = -1$, θέτουμε ως Φ το φανταστικό μέρος της Ψ: $\Phi = \mathrm{Im}\Psi = \frac{1}{2i}(\Psi - \Psi^*) = \frac{1}{2i}2\Psi = -i\Psi \in \mathbb{R}$, η οποία είναι ιδιοσυνάρτηση της $\hat{H}$ με ιδιοτιμή E, ως πολλαπλάσιο της Ψ, άρα είναι η ζητούμενη.

6.5 Καταστάσεις σκέδασης

Εξετάζουμε τώρα λύσεις της εξ. Schrödinger για ενέργειες $E > 0$. Αυτές ανήκουν στο συνεχές φάσμα της Χαμιλτονιανής και ονομάζονται *καταστάσεις σκέδασης (scattering states)*. Η θεμελιώδης διαφορά των δέσμιων καταστάσεων από τις καταστάσεις σκέδασης είναι η εξής. Θεωρούμε Χαμιλτονιανή με δυναμικό το οποίο είναι εντοπισμένο στο χώρο, δηλαδή, μηδενίζεται έξω από ένα διάστημα. Στο μοντέλο του σωματιδίου που κινείται στο διάστημα $(-\infty, \infty)$, με χώρο καταστάσεων τον $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, οι δέσμιες καταστάσεις είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής, ενώ οι καταστάσεις σκέδασης είναι ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής που δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες (η νόρμα τους απειρίζεται), και, επομένως, ονομάζονται καταχρηστικά μόνον καταστάσεις. Προσεγγίζονται, όμως, με μια έννοια, από τετραγωνικά ολοκληρώσιμες συναρτήσεις. Στο μοντέλο του σωματιδίου που κινείται στο διάστημα $[-\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L]$, με το L να γίνεται αυθαίρετα μεγάλο, οι δέσμιες καταστάσεις είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής που δεν αλλάζουν καθώς το L αυξάνει πέρα από μια μεγάλη τιμή (πέρα από το όριο b που είχαμε ορίσει στη συζήτηση του κεφ. 5 για το συνεχές φάσμα), ενώ οι καταστάσεις σκέδασης αλλάζουν συνεχώς με το L, με την τιμή τους να φθίνει ως $\Psi(x) \propto 1/\sqrt{L}$.

Προτού προχωρήσουμε στην εξέταση των λύσεων, θα συζητήσουμε τα πειράματα που συνήθως αφορούν οι καταστάσεις σκέδασης και τις αντίστοιχες αρχικές και συνοριακές συνθήκες. Σε ένα πείραμα σκέδασης, σωματίδια προετοιμασμένα με ορισμένη ορμή κατευθύνονται προς ένα στόχο, από τον οποίο σκεδάζονται. Η αρχική και η τελική κατάσταση των σωματιδίων βρίσκεται μακριά από το στόχο, εκεί όπου τα σωματίδια κινούνται στον ελεύθερο χώρο. Κατά τη διάρκεια της σκέδασης, τα σωματίδια δέχονται την επίδραση του δυναμικού του στόχου. Από την κατανομή των σκεδασμένων σωματιδίων ως προς θέση, ορμή, κλπ., βγάζει κανείς συμπεράσματα για το δυναμικό και γενικότερα για τη δομή του στόχου. Η θεωρητική αντιμετώπιση είναι συνήθως αντίστροφη: υποθέτοντας μια μορφή του δυναμικού, και γνωρίζοντας την αρχική προετοιμασία του συστήματος (την αρχική κυματοσυνάρτηση), υπολογίζουμε την τελική κατανομή, και συγκρίνουμε με τη μετρημένη κατανομή. Αν τα αποτελέσματα συμφωνούν, τότε έχουμε ισχυρή ένδειξη ότι το δυναμικό που υποθέσαμε ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα.

Η φύση του προβλήματος επιβάλλει να εξετάσουμε κυματοσυναρτήσεις που κινούνται προς το στόχο, εισερχόμενες από μακριά, και στο μακρινό παρελθόν δεν αλληλεπιδρούν με το δυναμικό (δηλαδή, στο συγκεκριμένο πρόβλημα του πηγαδιού δυναμικού, είναι αρχικά εντοπισμένες π.χ. σε μια περιοχή $x \ll -d$ και κινούνται προς το $x = 0$). Τέτοιες κυματοσυναρτήσεις είναι τα κυματοπακέτα στα οποία αναφερθήκαμε στο κεφ. 5 (εξ. 99):

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int f_q\, e^{i(qx - E_q t/\hbar)}\, dq,$$

Ας υποθέσουμε ότι οι συντελεστές f_q είναι εντοπισμένοι γύρω από κάποιο q_0 σε διάστημα $(q_0 - \delta q, q_0 + \delta q)$ και μηδενίζονται για τιμές του q εκτός του διαστήματος. Με αυτό τον τρόπο, περιγράφουμε ένα κυματοπακέτο που είναι σχεδόν ιδιοσυνάρτηση της ορμής με ιδιοτιμή $\hbar q_0/m$ (έχει διασπορά στην ορμή της τάξης του $\delta p = \hbar\delta q$) και είναι εκτεταμένο ως προς τη θέση σε αρκετά μεγάλο διάστημα (έχει διασπορά ως προς τη θέση της τάξης του $\Delta x \geq \hbar/2\delta p = 1/2\delta q$, όπως προκύπτει από τη σχέση απροσδιοριστίας του Heisenberg). Η μορφή του μοιάζει με ένα επίπεδο κύμα περιορισμένο σε διάστημα Δx γύρω από κάποιο x, το οποίο σβήνει εκτός του διαστήματος, π.χ. ένα επίπεδο κύμα πολλαπλασιασμένο με μια γκαουσιανή συνάρτηση εύρους Δx.

Η φορά κίνησης του κυματοπακέτου συμφωνεί με το πρόσημο του q, όπως φαίνεται εκ πρώτης όψεως από τον όρο $e^{i(kx-Et/\hbar)}$ και όπως βρίσκουμε υπολογίζοντας το ρεύμα πιθανότητας για κάθε επίπεδο κύμα (77):[77]

$$\begin{aligned} j_q(x,t) &= \frac{(-i\hbar)}{2m}\left(e^{-i(qx-Et/\hbar)}\frac{\partial}{\partial x}e^{i(qx-Et/\hbar)} - e^{i(qx-Et/\hbar)}\frac{\partial}{\partial x}e^{-i(qx-Et/\hbar)}\right) \\ &= \frac{\hbar}{m}\,q. \end{aligned} \tag{120}$$

Όσο το κυματοπακέτο βρίσκεται μακριά από το στόχο, σε περιοχή όπου $V(x) = 0$, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε για τη χρονική του εξέλιξη είτε την ελεύθερη Χαμιλτονιανή ($\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$) είτε τη Χαμιλτονιανή που περιέχει το δυναμικό του στόχου: το αποτέλεσμα θα είναι το ίδιο, όσο έχουμε $V(x)\Psi(x,t) = 0$. Από τη χρονική στιγμή, όμως, που θα ξεκινήσει να ισχύει $V(x)\Psi(x,t) \neq 0$, καθώς το κυματοπακέτο πλησιάζει το στόχο, πρέπει να χρησιμοποιήσουμε την πλήρη Χαμιλτονιανή $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(x)$. Τότε, η έκφραση της χρονικής εξέλιξης του κυματοπακέτου πρέπει να περιλαμβάνει τις ιδιοσυναρτήσεις Ψ_q και αντίστοιχες ιδιοτιμές ενέργειας E_q της $\hat{H}$:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int f_q\,\Psi_q(x)\,e^{-iE_q t/\hbar}\,dq, \tag{121}$$

[77] Σε μια ακριβή αντιμετώπιση, πρέπει να πάρουμε το ρεύμα που αντιστοιχεί στην $\Psi(x,t)$ του κυματοπακέτου στο όριο της εντοπισμένης κατανομής f_q γύρω από το q_0 και να καταλήξουμε στην ταχύτητα ομάδας, $v_{q_0} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE_q}{dq}|_{q_0} = \frac{\hbar}{m}\,q_0$.

Για την περίπτωση που εξετάζουμε, τυχαίνει το συνεχές μέρος του ενεργειακού ενεργειακό φάσματος ($E > 0$) να ταυτίζεται με εκείνο του ελεύθερου σωματιδίου, αλλά οι κυματοσυναρτήσεις αλλάζουν, σύμφωνα με την εξ. (106):

$$\Psi_q = \begin{cases} a_{\mathrm{I}} e^{iqx} + b_{\mathrm{I}} e^{-iqx}, & x < -d \\ a_{\mathrm{II}} e^{ikx} + b_{\mathrm{II}} e^{-ikx}, & -d < x < d \\ a_{\mathrm{III}} e^{iqx} + b_{\mathrm{III}} e^{-iqx}, & d < x \end{cases}$$

με $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ και $q^2 = 2mE/\hbar^2 > 0$. Σε αντίθεση με το πρόβλημα δέσμιων καταστάσεων, εδώ έχουμε λύσεις για κάθε ενέργεια E στο συνεχές φάσμα. Το q και κατά συνέπεια η ενέργεια E_q δεν είναι άγνωστες παράμετροι προς προσδιορισμό μέσω των εξισώσεων, αλλά δεδομένες παράμετροι από την αρχική συνθήκη, οι οποία, τελικά, προσδιορίζει και κάποιους από τους συντελεστές της παραπάνω εξίσωσης.

Λόγω της φύσης του προβλήματος σκέδασης, δεν προχωρούμε στην κατασκευή συμμετρικών και αντισυμμετρικών λύσεων, όπως κάναμε στις δέσμιες καταστάσεις, αλλά στην κατασκευή λύσεων που να ικανοποιούν την αρχική συνθήκη εισερχόμενου κυματοπακέτου προς το $x = 0$ από το $x \ll -d$. Αυτή η αρχική συνθήκη κατασκευάζεται από επαλληλία των κυμάτων e^{iqx}, $q > 0$, διότι εύκολα βρίσκουμε ότι το ρεύμα πιθανότητας που αντιστοιχεί στην $a_{\mathrm{I}} e^{iqx}$ ($x < -d$) είναι $j(x) = |a_{\mathrm{I}}|^2 \frac{\hbar}{m} q > 0$. (Ισοδύναμα θα μπορούσαμε να είχαμε διαλέξει τα κύματα $b_{\mathrm{I}} e^{-iqx}$, αλλά με $q < 0$.) Έχουμε, επίσης, αυτόματα $b_{\mathrm{III}} = 0$, που εκφράζει το γεγονός ότι δεν εισέρχεται κύμα από το $x \gg d$. Αυτό προκύπτει, διότι το ρεύμα πιθανότητας που αντιστοιχεί στη συνάρτηση $b_{\mathrm{III}} e^{-iqx}$ ($x > d$) υπολογίζεται εύκολα πως είναι $j(x) = |b_{\mathrm{III}}|^2 \left(-\hbar \frac{q}{m}\right) < 0$.

Υπάρχει, επίσης, η οικογένεια λύσεων με αρχική συνθήκη εισερχόμενου κύματος από το $x \gg d$ προς το $x = 0$, για την οποία θέτουμε, αντίστοιχα, $q < 0$, $b_{\mathrm{I}} = 0$. Το ποια από τις δύο επιλέγουμε, εξαρτάται από το πείραμα που θέλουμε να περιγράψουμε: από ποια πλευρά προσπίπτουν τα σωματίδια στο στόχο.

Συνεχίζουμε με την πρώτη οικογένεια λύσεων ($q > 0$, $b_{\mathrm{III}} = 0$). Θα προσδιορίσουμε την κυματοσυνάρτηση μέσω των συνοριακών συνθηκών στα $x = \pm d$, θέτοντας $a_{\mathrm{I}} = 1$. Αυτό μπορούμε να το κάνουμε, διότι το a_{I} θα μείνει στο τέλος ως ελεύθερη μεταβλητή, η οποία βρίσκεται από την αρχική μορφή του κυματοπακέτου: το a_{I} ταυτίζεται με το συντελεστή $f_q/2\pi$ της εξ. (121). Ο συντελεστής $r \equiv b_{\mathrm{I}}$ ονομάζεται *πλάτος ανάκλασης (reflection amplitude)* και ο συντελεστής $t \equiv a_{\mathrm{III}}$ ονομάζεται *πλάτος διέλευσης (transmission amplitude)*, διότι ο πρώτος δίνει το πλάτος του ανακλώμενου κύματος από το στόχο ($r\, e^{-iqx}$, με $j(x) = |r^2| \left(-\frac{\hbar}{m} q\right) < 0$ για $x < -d$), ενώ ο δεύτερος δίνει το πλάτος του διερχόμενου κύματος ($t\, e^{-iqx}$, με $j(x) = |t^2| \frac{\hbar}{m} q < 0$ για $x > d$). Συνοψίζοντας:

$$\Psi_q = \begin{cases} e^{iqx} + r\, e^{-iqx}, & x < -d \\ a e^{ikx} + b e^{-ikx}, & -d < x < d \\ t\, e^{iqx}, & d < x \end{cases} \tag{122}$$

Απλοποιήσαμε λίγο το συμβολισμό, θέτοντας $a = a_{\mathrm{II}}$ και $b = b_{\mathrm{II}}$. Έχουμε τέσσερις αγνώστους (r, t, a, b) οι οποίοι καθορίζονται από τέσσερις εξισώσεις (συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και συνέχεια της παραγώγου στα σημεία $\pm d$):

$$\begin{array}{lrcl} \text{Συνεχεια της } \Psi \text{ στο } -d: & e^{-iqd} + r\, e^{iqd} & = & a\, e^{-ikd} + b\, e^{ikd} \\ \text{Συνεχεια της } \Psi' \text{ στο } -d: & q\,(e^{-iqd} - r\, e^{iqd}) & = & k\,(a\, e^{-ikd} - b\, e^{ikd}) \\ \text{Συνεχεια της } \Psi \text{ στο } +d: & a\, e^{ikd} + b\, e^{-ikd} & = & t\, e^{iqd} \\ \text{Συνεχεια της } \Psi' \text{ στο } +d: & k\,(a\, e^{ikd} - b\, e^{-ikd}) & = & q\, t\, e^{iqd} \end{array} \tag{123}$$

Παρ΄ ότι η λύση του συστήματος δίνει όλους τους συντελεστές, στα πειράματα μετράται συνήθως το ποσοστό των σωματιδίων που διέρχεται και το ποσοστό που ανακλάται. Αυτά δίνονται από τις ποσότητες είναι οι $|t|^2$ και $|r|^2$, αντίστοιχα. Δίνουμε εδώ μόνο το τελικό αποτέλεσμα για τα r και t:[78]

$$r = ie^{-2iqd}\frac{(k^2-q^2)\sin(2kd)}{2qk\cos(2kd)-i(k^2+q^2)\sin(2kd)} \tag{124}$$

$$t = e^{-2iqd}\frac{2kq}{2qk\cos(2kd)-i(k^2+q^2)\sin(2kd)} \tag{125}$$

Η ποσότητα $|t|^2\frac{\hbar q}{m}$ δίνει το ρεύμα πιθανότητας που απομακρύνεται από την περιοχή του δυναμικού προς τα $x \gg d$. Αντίστοιχα, η ποσότητα $-|r|^2\frac{\hbar q}{m}$ δίνει το ρεύμα που απομακρύνεται προς τα $x \ll -d$, ενώ η ποσότητα $\frac{\hbar q}{m}$ το προσπίπτον ρεύμα προερχόμενο από τα $x \ll -d$. Αυτό φαίνεται εύκολα, αν υπολογίσουμε την τιμή του ρεύματος $j(x)$ στις συναρτήσεις e^{iqx}, te^{iqx} και re^{-iqx}. Επίσης, λόγω του ότι έχουμε στάσιμη κατάσταση (ιδιοσυνάρτηση της εξ. Schrödinger) η οποία δεν μεταβάλλεται με το χρόνο παρά μόνο μέσω του παράγοντα φάσης $e^{-iEt/\hbar}$ με μέτρο τη μονάδα, η πιθανότητα να βρίσκεται το σωματίδιο στο διάστημα $[-d, d]$ είναι σταθερή στο χρόνο.[79] Η εξίσωση συνέχειας στην ολοκληρωτική μορφή της (79) μας δίνει λοιπόν

$$|t|^2 + |r|^2 = 1, \tag{126}$$

το οποίο ελέγχεται και με απ΄ ευθείας υπολογισμό και εκφράζει τη διατήρηση της πιθανότητας. Ο συντελεστής διέλευσης $|t|^2$ προκύπτει (εφόσον $V_0 < 0$, δηλ. $k^2 > 0$):

$$|t|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (k^2-q^2)^2\sin^2(2kd)} = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2\sin^2(2kd)}. \tag{127}$$

Ο συντελεστής διέλευσης δεν ταυτίζεται με τη μονάδα. Αυτό είναι αντίθετο στην κλασική φυσική, όπου ένα αντίστοιχο πηγάδι δυναμικού θα επέτρεπε σε οποιοδήποτε σωματίδιο με $E > 0$ να διέλθει με βεβαιότητα, και πηγάζει από την κυματική φύση των κβαντικών καταστάσεων. Ωστόσο, στο όριο υψηλών ενεργειών, ο όρος $\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\sin^2(2kd)\right)^2$ στον παρονομαστή γίνεται αμελητέος σε σχέση με τον όρο $4k^2q^2 \to 16m^2E^2/\hbar^4$, οπότε για το συντελεστή διέλευσης προκύπτει $|t|^2 \to 1$.

Παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον ότι οι συντελεστές $|t|^2$ και $|r|^2$ δεν είναι μονότονες συναρτήσεις της ενέργειας (ή του q). Μάλιστα, για $2kd = \nu\pi$ ($\nu = 1, 2, 3, \ldots$), ο αριθμητής της (124) μηδενίζεται και ο παρονομαστής της (125) εξισώνεται με τον αριθμητή. Τότε, έχουμε $|r|^2 = 0$ και $|t|^2 = 1$, δηλαδή πλήρη διέλευση. Αυτή η κατάσταση ονομάζεται *συντονισμός σκέδασης (scattering resonance)*. Εμφανίζεται σε ενέργειες $E_\nu = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2d}\right)^2\nu^2$ (υπό την προϋπόθεση $E_\nu > 0$), δηλαδή, η απόσταση των οποίων από το ελάχιστο του δυναμικού είναι ίδια με τις ιδιοενέργειες των καταστάσεων του πηγαδιού με πλήρως ανακλαστικά τοιχώματα (σωματίδιο περιορισμένο στο $[-d, d]$). Θα ξαναδούμε το φαινόμενο στο επόμενο κεφάλαιο.

[78] Βλ. S. Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015) (κεφ. 4). Στο συμβολισμό εδώ, τα k και q έχουν ανταλλαγεί σε σχέση με το συμβολισμό του Gasiorowicz.

[79] Αυτό ισχύει μεν για την ιδιοσυνάρτηση της εξ. Schrödinger, αλλά όχι για το κυματοπακέτο, το οποίο προκύπτει από επαλληλία ιδιοσυναρτήσεων (εξ. 121) και χαρακτηρίζεται από χρονικά μεταβαλλόμενη πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε οποιοδήποτε πεπερασμένο διάστημα.

6.6 Προβλήματα

1. Για τον τελεστή ομοτιμίας $\hat{\mathcal{P}}\Psi(x) = \Psi(-x)$ δείξτε τα ακόλουθα: α) είναι ερμιτιανός, β) $\hat{\mathcal{P}}^2 = 1$, γ) οι ιδιοκαταστάσεις του είναι είτε άρτιες είτε περιττές συναρτήσεις και δ) οι ιδιοτιμές του είναι το 1 (για άρτιες συναρτήσεις) και το -1 (για περιττές).

2. Θεωρήστε το πρόβλημα που ορίζεται από τις σχέσεις (104) και (105) στο όριο $|V_0|d^2 \gg \hbar^2/2m$. Δείξτε ότι οι ιδιοκαταστάσεις χαμηλών ενεργειών E_n προσεγγίζουν εκείνες του προβλήματος σωματιδίου εγκλωβισμένου στο διάστημα $[-d, d]$, δηλαδή σε απειρόβαθο πηγάδι.

3. Εξετάστε το λεγόμενο *κλασικό όριο* στο πηγάδι δυναμικού: όταν η μάζα του σωματιδίου γίνεται πολύ μεγάλη, ή όταν το $\hbar$ μπορεί να θεωρηθεί πολύ μικρό, δείξτε ότι οι ιδιοτιμές ενέργειας των δέσμιων καταστάσεων γίνονται πυκνές και επομένως χάνεται ο κβαντισμένος χαρακτήρας τους. Προσδιορίστε, σε σχέση με ποια ποσότητα πρέπει να γίνει πολύ μεγάλη η μάζα, ή ποια ποσότητα πρέπει να γίνει πολύ μεγάλη σε σχέση με το $\hbar$, για να ισχύουν τα παραπάνω.

4. Προσδιορίστε τη θεμελιώδη στάθμη και το βάθος διείσδυσης στην περίπτωση πηγαδιού δυναμικού πλάτους $2d = 1\text{nm}$ (10^{-9}m) και βάθους $V_0 = -1\text{eV}$ ($1.6 \times 10^{-19}\text{J}$) για α) ένα ηλεκτρόνιο ($m_e = 9.1 \times 10^{-31}\text{kg}$), β) ένα πρωτόνιο ($m_p \approx 1840 m_e$), γ) ένα άτομο Ηλίου ($m_{\text{He}} \approx 4m_p$), δ) ένα άτομο Ρουβιδίου ($m_{\text{Rb}} \approx 85m_p$). Πόσο απέχει σε κάθε περίπτωση η θεμελιώδης στάθμη από το ελάχιστο του δυναμικού και πόσο από τη δεύτερη στάθμη;

5. Σε πηγάδι δυναμικού πλάτους $2d = 1\text{nm}$ (10^{-9}m) και μεγάλου βάθους εντοπίζουμε ένα σωματίδιο στο αριστερό μισό του πηγαδιού. Δείξτε ότι αυτό μπορεί να επιτευχθεί, κατά προσέγγιση, με κατάλληλη επαλληλία της βασικής και της πρώτης διεγερμένης κατάστασης, Ψ_0 και Ψ_1. Εάν πριν τον εντοπισμό το σωματίδιο βρίσκεται στη θεμελιώδη στάθμη, προσδιορίστε την ενέργεια που απαιτείται για να επιτευχθεί ο εντοπισμός στην περίπτωση που το σωματίδιο είναι α) ένα ηλεκτρόνιο, β) ένα πρωτόνιο, γ) ένα άτομο Ηλίου, δ) ένα άτομο Ρουβιδίου. (Υπόδειξη: γράψτε $\Psi = a\Psi_0 + b\Psi_1$ με $|a^2| + |b^2| = 1$ για κανονικοποίηση και υπολογίστε κατάλληλο συνδυασμό a και b, ώστε η $|\Psi(x)|^2$ να είναι μέγιστα εντοπισμένη στην περιοχή $x < 0$ και ελάχιστα στην περιοχή $x > 0$, δηλαδή, το $\int_{-d}^{0} |\Psi(x)|^2 dx$ να γίνεται μέγιστο.)

7 Φραγμός δυναμικού και φαινόμενο σήραγγας

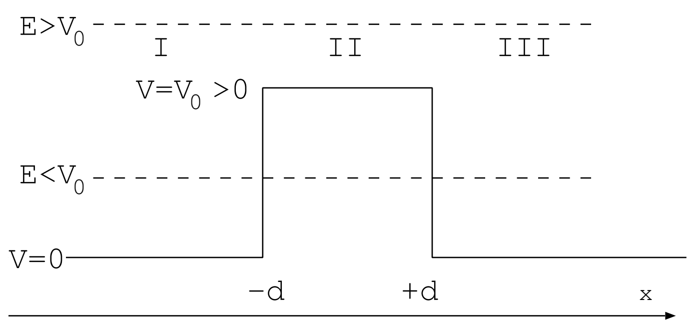
Θα μελετήσουμε τώρα το πρόβλημα σκέδασης σωματιδίου που κινείται σε μια διάσταση στο $(-\infty,\infty)$ και υπόκειται σε ορθογώνιο φραγμό δυναμικού:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{128}$$

με

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \quad (>0), & \text{αν } -d < x < d \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases} \tag{129}$$

Η Χαμιλτονιανή είναι ίδια με εκείνη του πηγαδιού δυναμικού (εξ. 104 και 105), με τη διαφορά ότι εδώ $V_0 > 0$ (βλ. σχ. 3). Οι λύσεις δίνονται από την εξ. (122), την οποία



Σχήμα 3: Φραγμός δυναμικού σε μία διάσταση.

επαναλαμβάνουμε εδώ:

$$\Psi_q = \begin{cases} e^{iqx} + r\,e^{-iqx}, & x < -d \\ ae^{ikx} + be^{-ikx}, & -d < x < d \\ t\,e^{iqx}, & d < x \end{cases}$$

με $q^2 = 2mE/\hbar^2$ και $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Σε αντίθεση με εκείνη την περίπτωση, εδώ έχουμε πάντα $E > 0$: όπως εύκολα μπορεί να διαπιστώσει κανείς οι λύσεις με $E < 0$ απειρίζονται στο $x \to \pm\infty$, και ως εκ τούτου απορρίπτονται. Οι λύσεις για τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης δίνονται από τις εξ. (124) και (125), αντίστοιχα. Διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

α) Για $E > V_0$ ($k \in \mathbb{R}$) απλώς επαναλαμβάνονται οι εξισώσεις (124), (125) και (127):

$$r = ie^{-2iqd}\frac{(k^2 - q^2)\sin(2kd)}{2qk\cos(2kd) - i(k^2+q^2)\sin(2kd)} \tag{130}$$

$$t = e^{-2iqd}\frac{2kq}{2qk\cos(2kd) - i(k^2+q^2)\sin(2kd)} \tag{131}$$

$$|t|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (k^2-q^2)^2\sin^2(2kd)} = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2\sin^2(2kd)}. \tag{132}$$

Όπως στην περίπτωση $V_0 < 0$, έτσι και εδώ συναντάμε συντονισμούς σκέδασης, δηλ. $|t|^2 = 1$, για $2kd = \nu\pi$, δηλ. σε ενέργειες

$$E_\nu = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2d}\right)^2 \nu^2 \tag{133}$$

η απόσταση των οποίων από το ελάχιστο του δυναμικού είναι ίδια με τις ιδιοενέργειες των καταστάσεων του πηγαδιού με πλήρως ανακλαστικά τοιχώματα.

β) Για $E < V_0$ έχουμε $k^2 < 0$. Για απλότητα θέτουμε τότε $ik = \gamma \in \mathbb{R}$. Οι εξ. (130) και (131) δεν αλλάζουν, παρά μετασχηματίζονται με την αλλαγή μεταβλητής $[\cos(2kd) \to \cosh(2\gamma d), \sin(2kd) \to i\sinh(2\gamma d)]$. Ο συντελεστής διέλευσης γράφεται

$$|t|^2 = \frac{4q^2\gamma^2}{4q^2\gamma^2 + (q^2+\gamma^2)^2\sinh^2(2\gamma d)} = \frac{4q^2\gamma^2}{4q^2\gamma^2 + (\frac{2m}{\hbar^2}V_0)^2\sinh^2(2\gamma d)}. \tag{134}$$

Βλέπουμε ότι υπάρχει διέλευση ακόμα και για ενέργειες $E < V_0$, πράγμα αδύνατον στην κλασική μηχανική. Αυτή η δυνατότητα ονομάζεται *φαινόμενο σήραγγας (tunnel effect)*. Η παρουσία του όρου $\sinh^2(2\gamma d) = \sinh^2(2\sqrt{2m|E-V_0|}d/\hbar)$ στον παρονομαστή αναδεικνύει ότι ο συντελεστής διέλευσης έχει εκθετική εξάρτηση από την ενέργεια και είναι μικρή ποσότητα. Στο όριο $\gamma d \gg 1$ ($\sqrt{|E-V_0|}d \ll \hbar/\sqrt{m}$) έχουμε $\sinh(2\gamma d) \approx \frac{1}{2}e^{2\gamma d}$ και ο όρος $4q^2\gamma^2$ στον παρονομαστή γίνεται αμελητέος σε σχέση με το $\frac{1}{2}e^{2\gamma d}$. Τότε έχουμε:

$$|t|^2 \approx \left(\frac{\hbar^2\gamma q}{mV_0}\right)^2 e^{-4\gamma d}, \quad \text{για} \quad \sqrt{|E-V_0|}d \ll \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \tag{135}$$

Το σημαντικό σε αυτόν τον τύπο είναι η εκθετική εξάρτηση του $|t|^2$ από το πάχος και το ύψος του φράγματος ($\gamma d = \sqrt{2m|E-V_0|}d/\hbar$). Ο όρος στην παρένθεση έχει, συγκριτικά, ασθενή εξάρτηση από τα d και V_0. Η εκθετική εξάρτηση κάνει το φαινόμενο σήραγγας εξαιρετικά ευαίσθητο σε μεταβολές των παραμέτρων του φράγματος και της μάζας του σωματιδίου.[80] Παράδειγμα της ευαισθησίας είναι ο χρόνος ζωής των πυρήνων που διασπώνται εκπέμποτας σωματίδια α.

7.1 Βήμα δυναμικού. Πολλαπλή σκέδαση

Θα μελετήσουμε το πρόβλημα σκέδασης σωματιδίου που κινείται σε μία διά-σταση στο $(-\infty, \infty)$ και προσπίπτει σε βήμα δυναμικού (βλ. σχ. 4):

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{136}$$

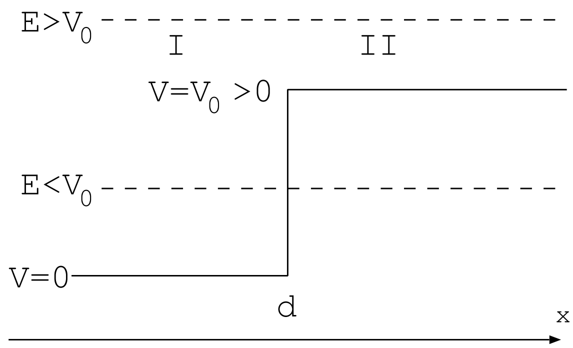
με

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{αν } x < d \\ V_0, & \text{αν } x \geq d \end{cases} \tag{137}$$

Η χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger έχει τη γενική λύση

$$\Psi(x) = \begin{cases} ae^{iqx} + re^{-iqx}, & \text{αν } x < d \\ te^{ikx} + be^{-ikx}, & \text{αν } x \geq d \end{cases} \tag{138}$$

[80] Πρόβλημα 1.



Σχήμα 4: Βήμα δυναμικού με $V_0 > 0$.

με $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ και $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$. Μπορούμε εύκολα να πειστούμε ότι το δυναμικό δεν επιδέχεται δέσμιες καταστάσεις, και ότι αντιμετωπίζουμε μόνο ένα πρόβλημα σκέδασης. Εξετάζουμε πρόσπτωση από τα $x < d$, οπότε θέτουμε ήδη $a = 1$, $b = 0$, και καλούμαστε να υπολογίσουμε τα πλάτη ανάκλασης και διέλευσης, r και t. Η συνέχεια της ιδιοσυνάρτησης και της παραγώγου στο $x = d$ δίνουν

$$\begin{aligned} e^{iqd} + r\,e^{-iqd} &= t\,e^{ikd} \\ q(e^{iqd} - r\,e^{-iqd}) &= kt\,e^{ikd} \end{aligned}$$

οι οποίες έχουν τη λύση

$$t = e^{i(q-k)d}\,\frac{2q}{q+k} = e^{i(q-k)d}\,t_0 \tag{139}$$

$$r = e^{2iqd}\,\frac{q-k}{q+k} = e^{2iqd}\,r_0 \tag{140}$$

όπου $t_0 = 2q/(q+k)$ και $r_0 = (q-k)/(q+k)$ οι αντίστοιχες ποσότητες για βήμα δυναμικού στη θέση $d = 0$. Διακρίνουμε τις περιπτώσεις α) $V_0 > 0$ και $E > V_0$, β) $V_0 > 0$ και $E < V_0$. Η περίπτωση $V_0 < 0$ αντιμετωπίζεται εντελώς ανάλογα.

α) $V_0 > 0$ και $E > V_0$. Σε αυτή την περίπτωση, $q \in \mathbb{R}$ και $k \in \mathbb{R}$. Έχουμε εν μέρει ανάκλαση και εν μέρει διέλευση. Από τους συντελεστές προκύπτει

$$|r|^2 q + |t|^2 k = q \rightsquigarrow |r|^2 + |t|^2\frac{k}{q} = 1, \tag{141}$$

η οποία σχέση επάγεται και από την εξ. συνέχειας: το ρεύμα της e^{iqx} είναι $\frac{\hbar}{m}q$, το ρεύμα της $r\,e^{-iqx}$ είναι $\frac{\hbar}{m}(-q)|r|^2$, και το ρεύμα της $t\,e^{ikd}$ είναι $\frac{\hbar}{m}(k)|t|^2$.

β) $V_0 > 0$ και $E < V_0$. Σε αυτή την περίπτωση, $q \in \mathbb{R}$ και $ik \in \mathbb{R}$. Έχουμε πλήρη ανάκλαση: εύκολα βλέπει κανείς ότι $|r|^2 = 1$. Η κυματοσυνάρτηση για $x > d$ είναι $te^{-\gamma x}$, $\gamma > 0$, και το αντίστοιχο ρεύμα μηδενίζεται.

Η πρόσπτωση από δεξιά (από τα $x > d$ προς $x < d$) αντιμετωπίζεται με τον ίδιο τρόπο. Προκύπτουν οι ίδιες εξισώσεις (139 και 140), με τη διαφορά ότι τα k και q πρέπει να ανταλλαγούν, διότι το e^{ikx} (δηλ. το κύμα στην περιοχή, όπου $V_0 \neq 0$) είναι πλέον προσπίπτον, το $r\,e^{-ikx}$ ανακλώμενο, και το $t\,e^{iqx}$ (δηλ. το κύμα στην περιοχή, όπου $V_0 = 0$) διερχόμενο. Αντίστοιχα, πρέπει να τεθεί $\mathrm{Re}\,k < 0$ και $\mathrm{Re}\,q < 0$, λόγω της απαίτησης για πρόσπτωση από δεξιά.

Έχει ενδιαφέρον να δει κανείς το πρόβλημα του φραγμού δυναμικού (βλ. εξ. 131) ως ένα πρόβλημα πολλαπλής σκέδασης μεταξύ δύο βημάτων δυναμικού, ενός στο $-d$ από $V = 0$ σε $V = V_0$ και ενός στο d από $V = V_0$ σε $V = 0$. Έστω ότι το πρώτο βήμα έχει πλάτη διέλευσης t_1' και ανάκλασης r_1' για πρόσπτωση από τα αριστερά και t_1, r_1 για πρόσπτωση από δεξιά, ενώ το δεύτερο έχει πλάτη διέλευσης t_2 και ανάκλασης r_2 για πρόσπτωση από αριστερά. Τότε η κυματοσυνάρτηση που εξέρχεται στα δεξιά του βήματος στο $+d$ προκύπτει από επαλληλία των ακόλουθων βημάτων:

1. διέλευση από αριστερά στο $-d$, διάδοση και διέλευση στο $+d$
2. διέλευση από αριστερά στο $-d$, διάδοση και ανάκλαση στο $+d$, διάδοση προς τα αριστερά και ανάκλαση στο $-d$, διάδοση προς τα δεξιά και διέλευση στο $+d$

κ.ο.κ., λαμβάνοντας υπ΄ όψη τη διπλή, τετραπλή, κλπ., ανάκλαση. Αν t το συνολικό πλάτος διέλευσης, με $\Psi(x) = t\, e^{iqx}$ για $x > d$, λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} t &= t_1'\, t_2 + t_1'\,(r_2\, r_1)\, t_2 + t_1'\,(r_2\, r_1\, r_2\, r_1)\, t_2 + \cdots \\ &= t_1'\, \left[1 + (r_2\, r_1) + (r_2\, r_1)^2 + \cdots\right]\, t_2 \\ &= t_1'\, [1 - r_1\, r_2]^{-1}\, t_2 \end{aligned} \tag{142}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τον τύπο άθροισης γεωμετρικής σειράς, $\sum_n \lambda^n = [1 - \lambda]^{-1}$. Στους συντελεστές $r_{1,2}$ περιέχονται παράγοντες φάσης της μορφής e^{i2kd} οι οποίοι προκύπτουν από τη διάδοση μεταξύ $-d$ και $+d$, σε αναλογία με την εξ. (140), αλλά με το k στη θέση του q, διότι εδώ το x είναι εντός του βήματος δυναμικού, οπότε $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Όμοια, στους συντελεστές t_1' και $t_{1,2}$ περιλαμβάνονται παράγοντες φάσης της μορφής $e^{2i(q-k)d}$. Εδώ λοιπόν πρέπει να αντικαταστήσουμε τα t_1', $r_{1,2}$ και $t_{1,2}$ για το βήμα δυναμικού που προκύπτουν από τις εξ. (139,140), λαμβάνοντας υπ΄ όψη την πρόσπτωση από δεξιά ή αριστερά στα d και $-d$. Μετά από λίγες πράξεις καταλήγουμε στο πλάτος διέλευσης του τετραγωνικού φραγμού.[81]

7.2 Προσέγγιση στο φαινόμενο σήραγγας για υψηλό ή πλατύ φραγμό

Η εξ. (142) μάς δίνει τη δυνατότητα προσέγγισης του συντελεστή διέλευσης στο φαινόμενο σήραγγας από μη τετραγωνικό φραγμό, αρκεί να είναι επαρκώς υψηλός ή πλατύς και να περιγράφεται από επαρκώς ομαλή συνάρτηση.

Σε πρώτο βήμα, παρατηρούμε ότι το γινόμενο $r_1\, r_2$ γίνεται αμελητέο, εάν το γινόμενο $(V_0 - E)\, d^2$ είναι μεγάλο. Αυτό προκύπτει από την έκφραση (140), προσαρμοσμένη για την περίπτωση όπου το προσπίπτον κύμα είναι εντός του φραγμού με $E < V_0$. Τότε, το προσπίπτον κύμα έχει κυματαριθμό k και το διερχόμενο q, οπότε ανταλλάσσουμε τα q και k στην (140) και θέτουμε $k = i\gamma$, $\gamma \in \mathbb{R}$. Βρίσκουμε $r_1 = e^{-2\gamma d}(i\gamma + q)/(i\gamma - q)$. Όμοια, το πλάτος r_2 πέφτει εκθετικά ως $e^{-2\gamma d}$, άρα $r_1\, r_2 \propto e^{-4\gamma d}$, που γίνεται αμελητέο. Ως αποτέλεσμα, $t \approx t_1' t_2$, οπότε το $|t|^2 = |t_1' t_2|^2$ δίνεται από τον τύπο (135).

Σε δεύτερο βήμα, προσεγγίζουμε το δυναμικό $V(x)$ με άθροισμα φραγμών δυναμικού σε N αλλεπάλληλα εφαπτόμενα διαστήματα $[x_i, x_i + d_i)$ μήκους d_i το καθένα: $V(x) = \sum_i V_i \chi_i(x)$, όπου V_i σταθερά και $\chi_i(x) = 1$, αν $x_i \leq x < x_i + d_i$ και $= 0$, αλλιώς.[82]

[81] Πρόβλημα 2.

[82] Η $\chi_i(x)$ λέγεται χαρακτηριστική συνάρτηση του διαστήματος $[x_i, x_i + 2d_i)$.

Ως x_0 παίρνουμε το σημείο όπου ξεκινά η συνθήκη φαινόμενου σήραγγας, $V(x) > E$, και ως x_N το σημείο στο οποίο σταματά η συνθήκη. Δηλαδή κάνουμε μια διαμέριση του διαστήματος στο οποίο $V(x) > E$ και προσεγγίζουμε τη συνάρτηση $V(x)$ με μια κατά διαστήματα σταθερή συνάρτηση. Η διαμέριση, όμως, δεν γίνεται ολοένα και πυκνότερη, αλλά είναι τέτοια, ώστε τα διαστήματα να είναι επαρκώς πλατιά, ή η διαφορά $V(x) - E$ επαρκώς μεγάλη, ώστε να ισχύει, ανά διάστημα, ο τύπος (135). Προφανώς, αυτή η προσέγγιση δεν μπορεί να γίνει σε οποιαδήποτε συνάρτηση $V(x)$, παρά μόνο σε αργά μεταβαλλόμενες συναρτήσεις.

Σε τρίτο βήμα εφαρμόζουμε το ανάπτυγμα πολλαπλής σκέδασης, σε αντιστοιχία με την εξ. (142), στα αλλεπάλληλα $N + 1$ βήματα δυναμικού. Τα πλάτη ανάκλασης έχουν αμελητέα συνεισφορά, διότι το γινόμενο $V_i d_i^2$ είναι από υπόθεση μεγάλο, οπότε καταλήγουμε για το πλάτος διέλευσης t όλου του φραγμού: $t \approx t_0\, t_2 \cdots t_N$. Για το t_i εφαρμόζουμε τον τύπο (139), κατάλληλα προσαρμοσμένο για σκέδαση σε βήμα δυναμικού στη θέση x_i. Αντικαθιστώντας τον κυματαριθμό του προσπίπτοντος με k_{i-1} και του διερχόμενου με k_i, λαμβάνουμε $t_i = e^{i(k_{i-1}-k_i)x_i}(2k_{i-1})/(k_{i-1}+k_i)$. Εδώ όμως έχουμε πάντα $V_i < E$, επομένως θέτουμε $k_i = i\gamma_i$, $\gamma_i \in \mathbb{R}$, $\gamma_i > 0$. Εξαίρεση αποτελούν τα $k_{-1} = k_N \equiv q \in \mathbb{R}$ (δηλαδή οι κυματαριθμοί εκτός φράγματος, για $x < x_0$ και $x > x_N$). Επομένως, η πιθανότητα διέλευσης γράφεται (παρατηρώντας ότι ο πρώτος και τελευταίος όρος του παρονομαστή γράφονται $|q + i\gamma_0|^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ και $|q + i\gamma_{N-1}|^2 = \frac{2mV_{N-1}}{\hbar^2}$):

$$
\begin{aligned}
|t|^2 &\approx |t_0|^2\,|t_2|^2 \cdots |t_N|^2 \\
&= \frac{(2q\, 2\gamma_0 \cdots\, 2\gamma_{N-1})^2}{\frac{2mV_0}{\hbar^2}(\gamma_0+\gamma_1)^2\cdots(\gamma_{N-2}+\gamma_{N-1})^2\,\frac{2mV_{N-1}}{\hbar^2}} \\
&\quad \times e^{-2\gamma_0 x_0} e^{-2(\gamma_1-\gamma_0)x_1} \cdots e^{-2\gamma_{N-1}(x_N - x_{N-1})} \\
&= C(E) e^{-2[\gamma_0(x_1-x_0)+\gamma_1(x_2-x_1)\cdots+\gamma_N(x_N-x_{N-1})]} \\
&= C(E) e^{-2\sum \gamma_i\, d_i} \\
&\approx C(E) \exp\left[-2\int_{x_0}^{x_N} \gamma(x)\, dx\right] \\
&\equiv C(E) \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_0}^{x_N} \sqrt{2m(V(x)-E)}\, dx\right]
\end{aligned}
\tag{143}
$$

Η έκφραση αναδεικνύει την εκθετική συμπεριφορά του συντελεστή διέλευσης ως προς την ενέργεια στο φαινόμενο σήραγγας. Ο παράγοντας $C(E)$ (το κλάσμα αριστερά του εκθετικού) εξαρτάται μεν από την ενέργεια, αλλά πολύ ασθενέστερα από το εκθετικό. Στην πράξη, η έκφραση χρησιμεύει ως πρώτη προσέγγιση σε προβλήματα όπου γνωρίζει κανείς τη γενική μορφή του δυναμικού, αλλά αγνοεί τις λεπτομέρειες. Τέτοιο παράδειγμα είναι ο τύπος Fowler-Nordheim για την εκπομή ηλεκτρονίων από μέταλλα υπό την επίδραση εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου.[83]

7.3 Προβλήματα

1. Στο φαινόμενο σήραγγας, εξετάστε την κυματοσυνάρτηση εντός του φραγμού δυναμικού. Βρείτε το βάθος διείσδυσης. Εξετάστε το συντελεστή διέλευσης σε σύγκριση με το βάθος διείσδυσης. Στη συνέχεια, εξετάστε την εξάρτηση του συ-

[83] Βλ. π.χ. Stephen Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015) (κεφ. 4).

ντελεστή διέλευσης, $|t|^2$, από τη μάζα του σωματιδίου. Συγκρίνετε το αποτέλεσμα για ηλεκτρόνια με εκείνο για πρωτόνια ($m_p \approx 1840 m_e$).

2. Βρείτε τα πλάτη t_1', t_2 και $r_{1,2}$ και το τελικό πλάτος διέλευσης t της εξ. (142). Συγκρίνετε με την εξ. (131).

8 Δυναμικά συνάρτησης δ

8.1 Η συνάρτηση δ

Εισάγουμε τη συνάρτηση δ του Dirac ως όριο κατανομών $\delta_\varepsilon(x)$ με τις εξής ιδιότητες:

1. Για τυχαία συνάρτηση f, $\lim_{\varepsilon\to 0}\int f(x)\delta_\varepsilon(x)\,dx = f(0)$.

2. Η $\delta_\varepsilon(x)$ είναι αυθαίρετα πολλές φορές διαφορίσιμη.

Από την πρώτη ιδιότητα αναγνωρίζουμε ότι η $\delta_\varepsilon(x)$ πρέπει να μηδενίζεται πρακτικά έξω από ένα πολύ στενό διάστημα $(-\varepsilon,\varepsilon)$ γύρω από το μηδέν και να λαμβάνει υψηλές τιμές εντός αυτού του διαστήματος. Στην ειδική περίπτωση $f(x) = 1$, έχουμε $\lim_{\varepsilon\to 0}\int \delta_\varepsilon(x)\,dx = 1$. Μια συνάρτηση που ικανοποιεί τα προηγούμενα είναι η Γκαουσιανή

$$\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon^2}}e^{-\frac{x^2}{2\varepsilon^2}}. \tag{144}$$

Συνήθως παραλείπουμε, χάριν συντομίας, να γράφουμε το δείκτη ε και το σύμβολο $\lim_{\varepsilon\to 0}$, και αναφερόμαστε απλώς στη συνάρτηση $\delta(x)$. Ωστόσο, η συνάρτηση αποκτά νόημα όταν περιλαμβάνεται σε ολοκλήρωμα με το προαναφερθέν όριο, δηλ. $\int \delta(x)f(x)\,dx \equiv \lim_{\varepsilon\to 0}\int f(x)\delta_\varepsilon(x)\,dx$. Από τον ορισμό προκύπτουν τα ακόλουθα:[84]

$$\begin{aligned}
\int \delta(x-x_0)f(x)\,dx &= f(x_0) && (145)\\
\int \delta'(x-x_0)f(x)\,dx &= -f'(x_0) \quad \text{(προκύπτει με παραγοντική ολοκλήρωση)} && (146)\\
\int \delta''(x-x_0)f(x)\,dx &= +f''(x_0) && (147)\\
x\,\delta(x) &= 0 && (148)\\
\delta(a\,x) &= \frac{1}{|a|}\delta(x) && (149)\\
\delta(f(x)) &= \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i) && (150)
\end{aligned}$$

όπου x_i οι ρίζες της εξίσωσης $f(x) = 0$ (υποθέτοντας ότι πρόκειται για απλές ρίζες) και όπου η f είναι επαρκώς ομαλή συνάρτηση. Η διαφορισιμότητα της κατανομής δ_ε δεν απαιτείται για όλες τις ιδιότητες, παρά μόνον για εκείνες που περιλαμβάνουν παραγώγους. Οι μονάδες της συνάρτησης $\delta(x)$ είναι $1/[x]$ (όπου $[x]$ οι μονάδες του μεγέθους x), όπως προκύπτει από την απαίτηση το ολοκλήρωμα $\int \delta(x)\,dx = 1$ να είναι αδιάστατο.

8.2 Δυναμικό συνάρτησης δ

Θεωρούμε τώρα το δυναμικό $V(x) = V_0\,\delta(x)$.[85] Αυτό μπορεί να εκληφθεί ως όριο του τετραγωνικού πηγαδιού δυναμικού, αν $V_0 < 0$, ή φραγμού δυναμικού, αν $V_0 > 0$,

[84] Πρόβλημα 1

[85] Εφόσον το $V(x)$ έχει μονάδες ενέργειας και η $\delta(x)$ μονάδες αντίστροφου μήκους, το V_0 πρέπει να έχει μονάδες [ενέργεια]×[μήκος].

όταν εκείνο περιορίζεται σε ολοένα μικρότερο διάστημα $[-d, d]$ και λαμβάνει αντίστοιχα υψηλή τιμή. Η χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + V_0\delta(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \tag{151}$$

Η συνοριακή συνθήκη στο $x = 0$ βρίσκεται αν ολοκληρώσουμε την εξίσωση σε ένα στενό διάστημα $[-\eta, \eta]$ γύρω από το μηδέν και πάρουμε το όριο $\eta \to 0$.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\eta}^{\eta}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}\,dx + V_0\int_{-\eta}^{\eta}\delta(x)\Psi(x)\,dx &= E\int_{-\eta}^{\eta}\Psi(x)\,dx, \quad \rightsquigarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left.\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}\right|_{-\eta}^{\eta} dx + V_0\Psi(0) &= E\int_{-\eta}^{\eta}\Psi(x)\,dx. \end{aligned}$$

Εφόσον η Ψ δεν απειρίζεται, το όριο $\eta \to 0$ μηδενίζει το δεξιό μέλος και δίνει

$$\frac{2mV_0}{\hbar^2}\Psi(0) + \left.\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}\right|_{0-} = \left.\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}\right|_{0+}, \tag{152}$$

δηλαδή, η παράγωγος της ιδιοσυνάρτησης παρουσιάζει πεπερασμένη ασυνέχεια στο $x = 0$. Ολοκληρώνοντας την παράγωγο με πεπερασμένη ασυνέχεια, βρίσκουμε ότι η ιδιοσυνάρτηση είναι συνεχής στο $x = 0$.[86]

Θεωρούμε την περίπτωση $V_0 < 0$ και αναζητούμε δέσμιες καταστάσεις. Η γενική λύση της (151) γράφεται

$$\Psi(x) = \begin{cases} a_I\, e^{iqx} + b_I\, e^{-iqx} & x < 0 \\ a_{II}\, e^{iqx} + b_{II}\, e^{-iqx} & x > 0 \end{cases} \tag{153}$$

με $q^2 \equiv 2mE/\hbar^2$. Αν $E > 0$, τότε $q \in \mathbb{R}$, οπότε για $x < 0$ $|\Psi(x)|^2 = |a_I|^2 + |b_I|^2 + 2\mathrm{Re}[a_I b_I^* e^{2iqx}]$, η οποία είναι περιοδική συνάρτηση του x με θετικές τιμές και το ολοκλήρωμά της στο $(-\infty, 0)$ αποκλίνει. Άρα, για $E > 0$ δεν έχουμε δέσμιες καταστάσεις, όπως είχαμε βρει και στο πηγάδι δυναμικού. Αν $E < 0$, τότε θέτουμε $iq = \gamma \in \mathbb{R}$, $\gamma > 0$, και η απαίτηση για μηδενισμό της $\Psi(x)$ στο $\pm\infty$ επιβάλλει $b_I = a_{II} = 0$. Δεδομένου αυτού, η συνέχεια της κυματοσυνάρτησης στο $x = 0$ επιβάλλει $b_{II} = a_I \equiv a$. Επομένως:

$$\Psi(x) = \begin{cases} a\, e^{\gamma x} & x < 0 \\ a\, e^{-\gamma x} & x > 0. \end{cases} \tag{154}$$

Το γ προσδιορίζεται εφαρμόζοντας τη συνθήκη ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου:

$$\frac{2mV_0}{\hbar^2}a + a\gamma = -a\gamma,$$

δηλ. $\gamma = \frac{mV_0}{\hbar^2}$. Άρα έχουμε μία μόνο δέσμια κατάσταση με ενέργεια $E = -\hbar^2\gamma^2/2m$:

$$E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}. \tag{155}$$

[86] Οι ιδιότητες συνέχειας της κυματοσυνάρτησης διαφοροποιούνται, επομένως, από εκείνες της περίπτωσης δυναμικού με πεπερασμένη μόνον ασυνέχεια.

Τέλος, η παράμετρος a προσδιορίζεται εύκολα μέσω της συνθήκης κανονικοποίησης: $1 = \int_{-\infty}^{0} |a|^2 (e^{\gamma x})^2 dx + \int_0^\infty |a|^2 (e^{-\gamma x})^2 dx = 2|a|^2 \int_0^\infty e^{-2\gamma x} dx = |a|^2/\gamma$, δηλ. $a = \sqrt{\gamma}$.

Η εύρεση των καταστάσεων σκέδασης είναι απλή και βασίζεται στην ίδια συνοριακή συνθήκη συνέχειας της ιδιοσυνάρτησης και ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου στο $x = 0$.[87]

8.3 Δέσμιες καταστάσεις σε δύο δυναμικά δ

Εξετάζουμε τώρα δύο δυναμικά δ σε απόσταση $2d$ μεταξύ τους,

$$V(x) = V_0\, \delta(x+d) + V_0\, \delta(x-d) \tag{156}$$

με $V_0 < 0$ και αναζητούμε τις δέσμιες καταστάσεις. Εκμεταλλευόμαστε τη συμμετρία ομοτιμίας του δυναμικού, $V(x) = V(-x)$, και αναζητούμε ξεχωριστά άρτιες και περιττές ιδιοσυναρτήσεις, Ψ_+ και Ψ_-. Σε αναλογία με την προηγούμενη περίπτωση γράφουμε τη γενική λύση και συμπεραίνουμε ότι η δέσμια κυματοσυνάρτηση πρέπει να πέφτει εκθετικά στο $\pm\infty$, επομένως $E < 0$, και ότι η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι συνεχής στο $x = \pm d$ ενώ η παράγωγος πρέπει να έχει ασυνέχεια $\hbar^2 V_0/2m$ σε κάθε ένα από τα δύο σημεία. Γράφουμε

$$\Psi_+ = \begin{cases} a_+\, e^{\gamma_+ x} \\ b_+\, \cosh(\gamma_+ x) \\ a_+\, e^{-\gamma_+ x} \end{cases} \quad \text{και} \quad \Psi_- = \begin{cases} a_-\, e^{\gamma_- x}, & x < -d \\ b_-\, \sinh(\gamma_- x), & -d \le x < d \\ -a_-\, e^{-\gamma_- x}, & x > d \end{cases} \tag{157}$$

με $\gamma_\pm \equiv \sqrt{2m(-E_\pm)}/\hbar$. Η συνθήκη συνέχειας στο d (ισοδύναμα, στο $-d$) δίνει $b_+ = a_+ e^{-\gamma_+ d}/\cosh(\gamma_+ d)$ και $b_- = -a_- e^{-\gamma_- d}/\sinh(\gamma_- d)$. Μένει να προσδιοριστούν τα $\gamma_\pm$ (μέσω της ασυνέχειας της παραγώγου είτε στο d είτε στο $-d$) και από αυτά οι ιδιοτιμές της ενέργειας και τα $a_\pm$ (μέσω της συνθήκη κανονικοποίησης). Η συνθήκη ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου στο d γράφεται, σε αντιστοιχία με την (152), $\frac{2mV_0}{\hbar^2}\Psi(d) + \Psi'(d^-) = \Psi'(d^+)$, δηλ.

$$\frac{2mV_0}{\hbar^2} + \gamma_+ \tanh(\gamma_+ d) = -\gamma_+ \quad \text{και} \quad -\frac{2mV_0}{\hbar^2} - \gamma_- \coth(\gamma_- d) = \gamma_-,$$

ή (εφόσον $V_0 < 0$)

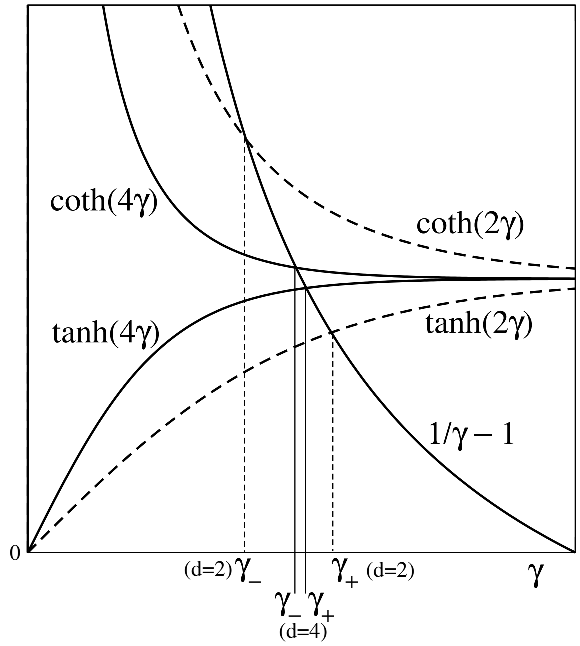
$$\tanh(\gamma_+ d) = \frac{2m|V_0|}{\hbar^2}\frac{1}{\gamma_+} - 1 \quad \text{και} \quad \coth(\gamma_- d) = \frac{2m|V_0|}{\hbar^2}\frac{1}{\gamma_-} - 1 \tag{158}$$

Αυτές οι εξισώσεις επιδέχονται αριθμητική ή γραφική λύση (βλ. σχ. 5). Παρατηρούμε ότι υπάρχει πάντα (για όλες τις τιμές του d) ακριβώς μία λύση γ_+ για την άρτια κυματοσυνάρτηση, ενώ το πολύ μία λύση γ_- για την περιττή κυματοσυνάρτηση. [88]

Για επαρκώς μεγάλα d, $\tanh(\gamma_+ d) \approx \coth(\gamma_- d) \approx 1$, οπότε $\gamma_+ \approx \gamma_- \approx m|V_0|/\hbar^2$ και οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι $E_\pm = -\frac{\hbar^2}{2m}\gamma_\pm^2 \approx -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \equiv E_0$. Δηλαδή, αν τα σημεία $\pm d$ είναι σε μεγάλη απόσταση, έχουμε δύο ιδιοτιμές σχεδόν ίσες με την ιδιοτιμή της ενέργειας E_0 (εξ. 155) του απλού δυναμικού: τα δύο δυναμικά είναι πρακτικά ανεξάρτητα

[87] Πρόβλημα 2.

[88] Πρόβλημα 3



Σχήμα 5: Γραφική λύση των εξ. (158) για $d = 2$ και $d = 4$.

μεταξύ τους. Σε αυτή την περίπτωση, αν συμβολίσουμε με Φ την ιδιοσυνάρτηση (154) της περίπτωσης απλού δυναμικού, βρίσκουμε εύκολα ότι

$$\Psi_\pm \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi(x+d) \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi(x-d), \tag{159}$$

όπου ο παράγοντας $1/\sqrt{2}$ φροντίζει για κανονικοποίηση.[89] Σε αυτή την περίπτωση, οι $\Phi(x+d)$ και $\Phi(x-d)$ είναι σχεδόν ορθογώνιες, λόγω της μεγάλης απόστασης των κέντρων τους και της εκθετικής πτώσης κάθε μιας μακριά από το κέντρο της: εκεί, όπου αποκτά σημαντικό πλάτος η μία, μηδενίζεται πρακτικά η άλλη. Υπό αυτή την προσέγγιση, οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμό των $\Phi(x+d)$ και $\Phi(x-d)$ παραμένει ιδιοσυνάρτηση. Η επιλογή (159) αντιστοιχεί στους δύο γραμμικούς συνδυασμούς που είναι, ταυτόχρονα, ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή ομοτιμίας.

Καθώς η απόσταση $2d$ μειώνεται, η προσέγγιση παύει να ισχύει και έχουμε $E_+ < E_0$, $E_- > E_0$. Οι $\Phi(x+d)$ και $\Phi(x-d)$ παύουν να είναι ορθογώνιες και οι συναρτήσεις (159) δεν αποτελούν πλέον ιδιοσυναρτήσεις, όμως δίνουν μια πρώτη προσέγγιση στην ακριβή μορφή των $\Psi_\pm$. Η E_+ είναι αύξουσα συνάρτηση του d ενώ η E_- φθίνουσα. Κάτω από κάποια κρίσιμη τιμή του d, για την οποία $E_- = 0$, παύουμε να έχουμε αντιδεσμική (Ψ_-) δέσμια κατάσταση: επιβιώνει μόνο η δεσμική (Ψ_+).

Η παραπάνω περιγραφή είναι ένα πρώτο βήμα για την κατανόηση του χημικού δεσμού. Ας υποθέσουμε ότι το δυναμικό (156) περιγράφει την αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων με τους πυρήνες δύο ατόμων σε μία διάσταση και σε απόσταση $2d$ μεταξύ των ατόμων. Ας υποθέσουμε, επίσης, ότι σε κάθε άτομο αντιστοιχεί ένα ηλεκτρόνιο. Από την αρχή του Pauli γνωρίζουμε ότι τα δύο ηλεκτρόνια μπορούν να τοποθετηθούν στην ίδια κατάσταση, υπό την προϋπόθεση ότι έχουν διαφορετικό σπιν. Τότε, η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος θα είναι αυτή, στην οποία τα δύο ηλεκτρόνια τοποθετούνται

[89] Η Ψ_+ ονομάζεται *δεσμική* και η Ψ_- *αντιδεσμική* κατάσταση.

στην Ψ_+ με αντίθετα σπιν. Η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης θα είναι $2E_+ < 0$. Εφόσον το E_+ είναι αύξουσα συνάρτηση της απόστασης, το σύστημα μειώνει την ενέργειά του όσο πλησιάζουν τα άτομα μεταξύ τους. Με αυτό τον τρόπο δημιουργείται μια ελκτική τάση, η οποία οδηγεί στη διαμόρφωση σταθερού μορίου. Προφανώς, στην πραγματικότητα το πρόβλημα είναι εξαιρετικά πιο περίπλοκο: υπάρχει η άπωση μεταξύ των ηλεκρονίων και των πυρήνων, η οποία θα εξισορροπήσει κάποια στιγμή την τάση για προσέγγιση. Το πρόβλημα πρέπει να αντιμετωπιστεί στο χώρο Hilbert δύο ηλεκτρονίων και δύο πυρήνων. Τέλος, το δυναμικό της συνάρτησης δ δεν αποτελεί ικανοποιητική προσέγγιση του δυναμικό Coulomb. Ωστότο, η τάση για δημιουργία δεσμικών και αντιδεσμικών κυματοσυναρτήσεων και η επακόλουθη μείωση της ενέργειας επιβιώνει ανεξάρτητα από την προσέγγιση και αποτελεί βασικό στοιχείο κατανόησης του ομοιοπολικού χημικού δεσμού.

8.4 Προβλήματα

1. Αποδείξτε τις ιδιότητες (145-150) της συνάρτησης δέλτα. Επαληθεύστε ότι $\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|}[\delta(x-a) + \delta(x+a)]$.

2. Λύστε το πρόβλημα σκέδασης για δυναμικό $V_0\delta(x)$. α) Βρείτε τα πλάτη και τους συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης. β) Κατά πόσον διαφοροποιείται η περίπτωση $V_0 > 0$ από την περίπτωση $V_0 < 0$; γ) Προκύπτουν συντονισμοί σκέδασης; δ) Ποια η μορφή της $|\Psi(x)|^2$ για $x < 0$ και $x > 0$; Σχολιάστε τις διαφορές.

3. Εξετάστε τις ιδιοτιμές της ενέργειας $E_\pm$ για το διπλό δυναμικό δ (εξ. 156). α) Δείξτε ότι η E_+ είναι αύξουσα συνάρτηση και η E_- φθίνουσα συνάρτηση της απόστασης $2d$. β) Λύστε γραφικά το πρόβλημα της ιδιοτιμής E_-. Δείξτε ότι η E_- μηδενίζεται για d μικρότερο ή ίσο κάποιου d_{crit}. Τι συμβαίνει τότε με τον συντελεστή γ_-; Τι συμβαίνει με το μήκος διείσδυσης;
   Υπόδειξη για το (β): Το σχ. 5 δεν εξυπηρετεί στην εύρεση της γ_- για μικρά d, διότι το σημείο τομής των καμπύλων $\coth(\gamma_- d)$ και $\frac{2m|V_0|}{\hbar^2}\frac{1}{\gamma_-} - 1$ λαμβάνει πολύ υψηλές τιμές στον άξονα y. Γι αυτό, ξαναγράψτε τη δεύτερη των (158) στη μορφή $\tanh(\gamma_- d) = f(\gamma_-)$, με $f(\gamma_-) = \frac{\hbar^2}{2m|V_0|}\gamma_- / \left(1 - \frac{2m|V_0|}{\hbar^2}\gamma_-\right)$. Σχεδιάστε τις καμπύλες του αριστερού και δεξιού μέλους και εξετάστε σε ποιο διάστημα ενδέχεται να τέμνονται, υπό την προϋπόθεση $\gamma_- > 0$. Εξετάστε την παράγωγο των δύο καμπύλων στο $\gamma_- = 0$ και υπολογίστε την $d_{\text{crit}} = \frac{\hbar^2}{2m|V_0|}$.

9 Ο αρμονικός ταλαντωτής

9.1 Εισαγωγικά

Ο αρμονικός ταλαντωτής είναι μαθηματικό υπόδειγμα φυσικών συστημάτων που βρίσκονται πλησίον κατάστασης ισορροπίας. Έχει εφαρμογές στην κλασική και κβαντική μηχανική, σε θεωρίες πεδίου, κλπ. Αν υποθέσουμε ότι ένα σωματίδιο μάζας m υπόκειται σε δυναμικό $W(x)$ και κινείται πλησίον ενός τοπικού ελάχιστου, έστω στο x_0, τότε $W'(x_0) = 0$, $W''(x_0) > 0$ και ένα ανάπτυγμα σε μικρά $(x - x_0)$ δίνει $W(x) = W(x_0) + \frac{1}{2}(x-x_0)^2 W''(x_0) + O((x-x_0)^3)$. Μετατοπίζοντας την αρχή του άξονα x στο x_0, αφαιρώντας τη σταθερά $W(x_0)$ από το δυναμικό, και αγνοώντας όρους ανώτερης τάξης από την τετραγωνική, θέτουμε $V(x) = W(x - x_0) - W(x_0)$ και λαμβάνουμε

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \tag{160}$$

το οποίο είναι το δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή. Η γενικότητα εφαρμογής του υποδείγματος του αρμονικού ταλαντωτή οφείλεται στην ευρεία δυνατότητα χρήσης αυτής της προσέγγισης. Η ποσότητα $K \equiv V''(0) > 0$ ονομάζεται *σταθερά ελατηρίου*, λόγω της προέλευσης της θεωρίας από το νόμο του Hooke. Ένα χαρακτηριστικό του κλασικού αρμονικού ταλαντωτή είναι ότι το σωματίδιο εκτελεί περιοδική κίνηση, με την περίοδο $T = 2\pi\sqrt{m/K}$ να είναι ανεξάρτητη του πλάτους (μέγιστης απομάκρυνσης). Από εκεί προκύπτει και η δεύτερη γραφή του δυναμικού, με $\omega = 2\pi/T$ την κυκλική συχνότητα.

9.2 Αναλυτική μέθοδος επίλυσης

Ο κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής ορίζεται από τη Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \tag{161}$$

με εξίσωση ιδιοτιμών

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\,\Psi = E\Psi. \tag{162}$$

Για ευκολία εφαρμόζουμε την αλλαγή μεταβλητής[(90)]

$$\begin{aligned} \overline{x} &= x\sqrt{m\omega/\hbar} \\ \overline{E} &= E/\hbar\omega \end{aligned} \tag{163}$$

οπότε η εξίσωση (162) γίνεται αδιάστατη:

$$\Psi''(\overline{x}) + (2\overline{E} - \overline{x}^2)\Psi(\overline{x}) = 0. \tag{164}$$

Θα αναζητήσουμε δέσμιες καταστάσεις. Για μεγάλα $\overline{x}^2$, η ενέργεια $\overline{E}$ στην (164) γίνεται αμελητέα σε σύγκριση με το $\overline{x}^2$, οπότε έχουμε την ακόλουθη διαφορική εξίσωση που καθορίζει την ασυμπτωτική συμπεριφορά της κυματοσυνάρτησης:

$$\Psi''(\overline{x}) - \overline{x}^2\,\Psi(\overline{x}) = 0, \quad (\overline{x} \gg \overline{E}).$$

[(90)] Για την επίλυση ακολουθούμε το βιβλίο του Στέφανου Τραχανά *Κβαντομηχανική Ι*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (1991).

Αυτή έχει λύσεις της μορφής $\Psi = c\,e^{\pm\overline{x}^2/2}$, c σταθερά. Η λύση $ce^{+\overline{x}^2/2}$ απορρίπτεται για δέσμιες καταστάσεις, διότι απειρίζει την κυματοσυνάρτηση στο $\pm\infty$. Επομένως, η ασυμπτωτική συμπεριφορά πρέπει να είναι $\Psi = c\,e^{-\overline{x}^2/2}$. Γράφουμε λοιπόν

$$\Psi(\overline{x}) = c\,e^{-\overline{x}^2/2}h(\overline{x}) \tag{165}$$

όπου c σταθερά κανονικοποίησης και $h(\overline{x})$ συνάρτηση προς προσδιορισμό. Αντικαθιστώντας στην (164) λαμβάνουμε την ακόλουθη διαφορική εξίσωση για την $h(\overline{x})$:

$$h''(\overline{x}) - 2\overline{x}h'(\overline{x}) + (2\overline{E} - 1)h(\overline{x}) = 0, \tag{166}$$

γνωστή και ως εξίσωση του Hermite. Επιχειρούμε επίλυση μέσω αναπτύγματος σε σειρά:

$$h(\overline{x}) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\overline{x}^k.$$

Παραγωγίζοντας τους όρους της σειράς και αντικαθιστώντας στην (166), βρίσκουμε:

$$\sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1)\overline{x}^{k-2} - 2\overline{x}\sum_{k=1}^{\infty} a_k k\overline{x}^{k-1} + (2\overline{E} - 1)\sum_{k=0}^{\infty} a_k\overline{x}^k = 0.$$

Αναδεικτοδοτούμε τον πρώτο όρο με $k \to k+2$. Στον δεύτερο όρο, ο παράγοντας $\overline{x}$ ενσωματώνεται στο άθροισμα δίνοντας $-2\sum_{k=1}^{\infty} k\overline{x}^k$, ενώ το άθροισμα μπορεί να αρχίσει από $k = 0$, δεδομένου ότι ο όρος $k = 0$ θα μηδενίζεται ούτως ή άλλως. Λαμβάνουμε:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}(k+2)(k+1)\overline{x}^k - 2\sum_{k=0}^{\infty} a_k k\overline{x}^k + (2\overline{E} - 1)\sum_{k=0}^{\infty} a_k\overline{x}^k = 0.$$

Οι συναρτήσεις $\overline{x}^k$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες, επομένως οι συντελεστές τους πρέπει να εξισωθούν δύναμη προς δύναμη:

$$a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2a_k k + (2\overline{E} - 1)a_k = 0.$$

Καταλήξαμε λοιπόν στην αναδρομική σχέση

$$a_{k+2} = \frac{2k - 2\overline{E} + 1}{(k+2)(k+1)}a_k \tag{167}$$

Αυτή συνδέει μεταξύ τους τους όρους με $k = 0, 2, 4, \ldots$ και, ξεχωριστά, εκείνους με $k = 1, 3, 5, \ldots$, δηλαδή απεμπλέκει τους συντελεστές των άρτιων δυνάμεων από εκείνους των περιττών δυνάμεων. Αυτό είναι σε συμφωνία με το ότι το δυναμικό είναι άρτιο, επομένως οι ιδιοσυναρτήσεις θα είναι άρτιες ή περιττές, όπως είχε συζητηθεί στην παράγραφο 6.2, με συντελεστές τους $a_0, a_2, a_4, \ldots$ και $a_1, a_3, a_5, \ldots$, αντίστοιχα. Για να οριστεί η ακολουθία a_k, πρέπει να επιλέξουμε μια αρχική τιμή a_0 για τις άρτιες συναρτήσεις και, ξεχωριστά, a_1 για τις περιττές. Δεδομένης της αναδρομικής σχέσης, όλοι οι συντελεστές εξαρτώνται γραμμικά από τον αρχικό. Επομένως, η επιλογή του αρχικού συντελεστή αντιστοιχεί σε πολλαπλασιασμό της συνάρτησης με μια σταθερά, η οποία δεν παίζει ρόλο διότι μπορεί να απορροφηθεί στον ολικό συντελεστή κανονικοποίησης στο τέλος.

Από τη σχέση (167) προκύπτει ότι η ακολουθία a_k πρέπει να τερματίζεται για κάποιο $k = n$, δηλ. πρέπει να υπάρχει n, τέτοιο ώστε $a_{n+2} = 0$. Διαφορετικά, για μεγάλα k, έχουμε $a_{k+2}/a_k \approx 2/k$, και η σειρά $\sum_k a_k \overline{x}^k$ λαμβάνει ασυμπτωτικά τη μορφή $e^{\overline{x}^2}$,[91] η οποία, πολλαπλασιαζόμενη με τον παράγοντα $e^{-\overline{x}^2/2}$ της εξ. (165), δίνει $\Psi \to e^{+\overline{x}^2/2}$ στο $\overline{x} \to \pm\infty$ και είναι απαράδεκτη ως κυματοσυνάρτηση. Η συνθήκη τερματισμού της σειράς, $a_{n+2} = 0$, σημαίνει μηδενισμό του αριθμητή: $2n - 2\overline{E} + 1 = 0$. Επαναφέροντας τη μεταβλητή $E = \hbar\omega\overline{E}$, λαμβάνουμε την απαίτηση η ενέργεια να λαμβάνει ιδιοτιμές της μορφής

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \tag{168}$$

Αυτή είναι η ακολουθία ιδιοτιμών ενέργειας του κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή. Οι λύσεις τερματιζόμενης σειράς στο n, $h_n(\overline{x}) = \sum_{k=0}^{n} a_k \overline{x}^k$, ονομάζονται *πολυώνυμα Hermite* (όπου στο άθροισμα λαμβάνουμε είτε μόνον τα άρτια είτε μόνον τα περιττά k, όπως συζητήθηκε πιο πάνω). Ως αρχικές συνθήκες της αναδρομικής σχέσης (167) θέτουμε $a_0 = 1$ και $a_1 = 2$, δηλ. $h_0(\overline{x}) = 1$ και $h_1(\overline{x}) = 2\overline{x}$, οι οποίες εύκολα βλέπουμε ότι επαληθεύουν τη διαφορική εξ. (166) με $\overline{E}_0 = 1/2$ και $\overline{E}_1 = 3/2$. Οι ιδιοσυναρτήσεις δίνονται με αντικατάσταση των πολυωνύμων Hermite στην εξ. (165). Υπολογίζοντας και τη σταθερά κανονικοποίησης βρίσκουμε:[92]

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, h_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \tag{169}$$

Η θεμελιώδης κατάσταση είναι η

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \tag{170}$$

με ιδιοτιμή ενέργειας $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Η Ψ_0 έχει την ιδιότητα να ελαχιστοποιεί το γινόμενο αβεβαιότητας θέσης-ορμής: $(\Delta x)_{\Psi_0}(\Delta p)_{\Psi_0} = \frac{1}{2}\hbar$, δηλ. ικανοποιείται η ισότητα στη σχέση (32).

9.3 Αλγεβρική μέθοδος επίλυσης

Το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή επιδέχεται και αλγεβρική μέθοδο επίλυσης. Ορίζουμε τους *τελεστές καταστροφής και δημιουργίας*

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\,\hat{p} \tag{171}$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\,\hat{p} \tag{172}$$

οι οποίοι είναι ερμιτιανοί συζυγείς αλλήλων, όπως εύκολα φαίνεται από τις παραπάνω σχέσεις και από το γεγονός ότι οι $\hat{x}$ και $\hat{p}$ είναι ερμιτιανοί. Με βάση τους $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$, η

(91)Μπορούμε να πεισθούμε γι αυτό, αναπτύσσοντας σε σειρά το εκθετικό $e^{\overline{x}^2} = \sum_\nu \frac{1}{\nu!}(\overline{x}^\nu)^2 = \sum_\nu \frac{1}{\nu!}\overline{x}^{2\nu}$. Θέτοντας $k = 2\nu$ και $a_k = \frac{1}{(k/2)!}$, έχουμε $e^{\overline{x}^2} = \sum_{k\ \text{άρτιος}} a_k \overline{x}^k$. Τότε, $a_{k+2}/a_k = (k/2)!/(k/2+1)! \approx 2/k$ για μεγάλα k. Για περισσότερες λεπτομέρειες, βλ. Stephen Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015).

(92)Βλ. π.χ. A. Bohm, *Quantum Mechanics: Foundations and Applications*, 3rd ed., Springer 2003.

Χαμιλτονιανή (161) γράφεται

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \tag{173}$$

Εύκολα βρίσκουμε ότι η μέση τιμή της Χαμιλτονιανής (173) σε οποιαδήποτε κατάσταση Ψ είναι θετική:

$$\begin{aligned}
(\Psi, \hat{H}\Psi) &= \hbar\omega(\Psi, \hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi) + \frac{\hbar\omega}{2}(\Psi,\Psi) \\
&= \hbar\omega(\hat{a}\Psi, \hat{a}\Psi) + \frac{\hbar\omega}{2}(\Psi,\Psi) \quad \text{(διότι ο } \hat{a} \text{ είναι συζυγής ερμιτιανός του } \hat{a}^\dagger) \\
&= \hbar\omega\|\hat{a}\Psi\|^2 + \frac{\hbar\omega}{2}\|\Psi\|^2 > 0, \qquad (174)
\end{aligned}$$

διότι ο πρώτος όρος είναι ≥ 0 και ο δεύτερος > 0, εφόσον η Ψ δεν είναι το μηδενικό διάνυσμα.

Από τη μεταθετική σχέση $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ προκύπτει[93]

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1 & (175)\\
[\hat{H}, \hat{a}] &= -\hbar\omega\,\hat{a} & (176)\\
[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] &= \hbar\omega\,\hat{a}^\dagger. & (177)
\end{aligned}$$

Με τη βοήθεια των παραπάνω σχέσεων, μπορούμε να παράξουμε ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής, αν έχουμε δεδομένη μία, έστω την $\Psi_E \neq 0$, με ιδιοτιμή E. Δηλαδή, έστω $\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E$. Βρίσκουμε[94]

$$\begin{aligned}
\hat{H}\hat{a}\Psi_E &= (E - \hbar\omega)\hat{a}\Psi_E & (178)\\
\hat{H}\hat{a}^\dagger\Psi_E &= (E + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger\Psi_E & (179)
\end{aligned}$$

Δηλαδή, τα διανύσματα $\hat{a}\Psi_E$ και $\hat{a}^\dagger\Psi_E$ είναι ιδιοδιανύσματα (αλλά όχι απαραίτητα κανονικοποιημένα) της Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμή $(E-\hbar\omega)$ και $(E+\hbar\omega)$, αντίστοιχα. Η τιμή $\hbar\omega$ είναι το κβάντο ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή. Οι παραπάνω σχέσεις δικαιολογούν την ονομασία των τελεστών καταστροφής και δημιουργίας λόγω της μείωσης ή της αύξησης, αντίστοιχα, του αριθμού κβάντων ενέργειας κατά μία μονάδα.

Στη συνέχεια δείχνουμε την ύπαρξη θεμελιώδους στάθμης. Αν επαναλάβουμε περισσότερες φορές τη δράση του $\hat{a}$ στο διάνυσμα Ψ_E, θα λάβουμε νέα ιδιοδιανύσματα με ολοένα μειούμενη ιδιοτιμή ενέργειας. Δρώντας m φορές λαμβάνουμε το ιδιοδιάνυσμα $\hat{a}^m\Psi_E$ με ιδιοτιμή $(E - m\hbar\omega)$. Για m αρκετά μεγάλο, η ιδιοτιμή θα γίνει αρνητική. Άρα, για τέτοιο m θα έχουμε $(\hat{a}^m\Psi_E, \hat{H}\,\hat{a}^m\Psi_E) = (E - m\hbar\omega)(\hat{a}^m\Psi_E, \hat{a}^m\Psi_E) = (E - m\hbar\omega)\|\hat{a}^m\Psi_E\|^2 \leq 0$, με την ισότητα να ισχύει στην περίπτωση $\|\hat{a}^m\Psi_E\| = 0$. Αυτό έρχεται σε αντίφαση με τη σχέση (174), σύμφωνα με την οποία η μέση τιμή της Χαμιλτονιανής του αρμονικού ταλαντωτή σε οποιαδήποτε κατάσταση είναι αναγκαστικά θετική, εκτός εάν $\|\hat{a}^m\Psi_E\| = 0$. Συνεπώς, για αρκετά μεγάλο m, θα ισχύει αναγκαστικά $\|\hat{a}^m\Psi_E\| = 0$. Έστω n ο μέγιστος δυνατός ακέραιος για τον οποίο $\hat{a}^n\Psi_E \neq 0$, ενώ $\hat{a}^{n+1}\Psi_E = \hat{a}(\hat{a}^n\Psi_E) = 0$. Δηλαδή, το διάνυσμα $\Psi_0 \equiv \hat{a}^n\Psi_E$ έχει το χαρακτηριστικό

[93] Πρόβλημα 2.

[94] Πρόβλημα 2.

$\hat{a}\Psi_0 = 0$. Το ονομάζουμε θεμελιώδη κατάσταση. Η ιδιοτιμή ενέργειας $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ της θεμελιώδους κατάστασης ονομάζεται θεμελιώδης στάθμη και υπολογίζεται εύκολα:

$$\hat{H}\Psi_0 = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})\Psi_0 = \hbar\omega\frac{1}{2}\Psi_0,$$

όπου ο πρώτος όρος του αθροίσματος μηδενίζεται λόγω της υπόθεσης $\hat{a}\Psi_0 = 0$.

Η Ψ_0 είναι μοναδική. Δηλαδή, αν υπάρχει $\Phi_0 \neq 0$ τέτοια, ώστε $\hat{a}\Phi_0 = 0$, τότε αναγκαστικά $\Psi_0 = c\Phi_0$ με c σταθερά. Αυτό, το συμπεραίνουμε από το γεγονός ότι η ιδιοτιμή της ενέργειας της Φ_0 θα είναι ίδια με εκείνη της Ψ_0 (λόγω της παραπάνω απόδειξης) και στην ίδια ιδιοτιμή ενέργειας δεν αντιστοιχούν διαφορετικές δέσμιες καταστάσεις σε μονοδιάστατα προβλήματα (απουσία εκφυλισμού σε μία διάσταση).(95) Επίσης, από τα προηγούμενα είναι προφανές δεν υπάρχει ιδιοκατάσταση χαμηλότερης ενέργειας.

Έχοντας δείξει τη μοναδικότητα της θεμελιώδους κατάστασης, προχωρούμε αντίστροφα και παράγουμε όλες τις ιδιοκαταστάσεις Ψ_n $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ της Χαμιλτονιανής δρώντας στην Ψ_0 με τον τελεστή $(\hat{a}^\dagger)^n$. Πρώτον, δείχνουμε ότι η δράση του $\hat{a}^\dagger$ δεν μηδενίζει οποιοδήποτε (μη μηδενικό) διάνυσμα. Δηλαδή, αν $\|\Psi\| > 0$, τότε $\|\hat{a}^\dagger\Psi\| > 0$:

$$\begin{aligned}
\|\hat{a}^\dagger\Psi\|^2 &= (\hat{a}^\dagger\Psi, \hat{a}^\dagger\Psi) \\
&= (\Psi, \hat{a}\hat{a}^\dagger\Psi) \qquad \text{(διότι ο } \hat{a} \text{ είναι συζυγής ερμιτιανός του } \hat{a}^\dagger\text{)} \\
&= (\Psi, (\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)\Psi) \qquad \text{(από τη σχ. μετάθεσης 175)} \\
&= (\Psi, \hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi) + (\Psi, \Psi) \\
&= (\hat{a}\Psi, \hat{a}\Psi) + (\Psi, \Psi) \\
&= \|\hat{a}\Psi\|^2 + \|\Psi\|^2 > 0
\end{aligned}$$

δεδομένου ότι ο πρώτος όρος είναι ≥ 0 και ο δεύτερος > 0.

Δεύτερον, εφόσον η θεμελιώδης κατάσταση Ψ_0 είναι ιδιοδιάνυσμα της Χαμιλτονιανής, ισχύει γι αυτήν η εξ. (179), δηλαδή, το διάνυσμα $\Psi_1 \equiv \hat{a}^\dagger\Psi_0$ είναι ιδιοδιάνυσμα με ιδιοτιμή $E_1 = E_0 + \hbar\omega$. Εφαρμόζοντας το επιχείρημα διαδοχικά, βρίσκουμε το εξής σύνολο ιδιοδιανυσμάτων-ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\,\Psi_n \tag{180}$$

$$\Psi_n = (\hat{a}^\dagger)^n\Psi_0, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{181}$$

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{182}$$

(όπου υπονοούμε $(\hat{a}^\dagger)^0 \equiv 1$). Άρα, μπορούμε να παράξουμε άπειρα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονανής, ξεκινώντας από τη θεμελιώδη στάθμη, της οποίας η ύπαρξη προκύπτει από την υπόθεση ύπαρξης ενός τουλάχιστον ιδιοδιανύσματος. Αυτά είναι σίγουρα ορθογώνια μεταξύ τους, διότι αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές.(96)

Μπορούμε επίσης να πεισθούμε ότι το σύνολο είναι πλήρες, δηλαδή, ότι όλα τα ιδιοδιανύσματα γράφονται στη μορφή (181) (πλην πιθανού πολλαπλασιασμού με μια σταθερά). Έστω τυχαίο ιδιοδιάνυσμα Ψ_E με ιδιοτιμή E και n ο ακέραιος που δίνει $\hat{a}^n\Psi_E = \Psi_0$. Από την εξ. (178) προκύπτει ότι $E = E_0 + n\hbar\omega$, δηλ. $E = E_n$ με το συμβολισμό της εξ. (182). Εφόσον λοιπόν οι ιδιοτιμές των Ψ_E και Ψ_n ταυτίζονται και εφόσον σε μία

(95) Βλ. κεφ. 6.4, (σελ. 52).

(96) Βλ. κεφ. 3, τελευταία παράγραφο του εδαφίου «Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές» (σελ. 9).

διάσταση δεν υπαρχει εκφυλισμός, τα διανύσματα Ψ_E και Ψ_n είναι γραμμικά εξαρτημένα, δηλαδή το ένα πολλαπλάσιο του άλλου, και να εκφράζουν την ίδια κατάσταση. Συμπερασματικά, το σύνολο διανυσμάτων $\Psi_n \equiv \hat{a}^n\Psi_0$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, είναι γραμμικά ανεξάρτητο και περιέχει όλα τα ιδιοδιανύσματα, αλλά εκκρεμεί η κανονικοποίησή τους.

Εξυπηρετεί να ορίσουμε τον *τελεστή αρίθμησης (number operator)*, $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$, που εμφανίζεται στη Χαμιλτονιανή (173) και είναι πρόδηλα ερμιτιανός. Συγκρίνοντας με τις σχέσεις (180) και (182) προκύπτει αμέσως ότι τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής είναι και ιδιοδιανύσματα του τελεστή αρίθμησης:

$$\hat{n}\Psi_n \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi_n = n\Psi_n. \tag{183}$$

Επομένως, ο τελεστής $\hat{n}$ αριθμεί τα κβάντα ενέργειας ($\hbar\omega$) που περιέχονται στην κατάσταση του διανύσματος Ψ_n.

Τέλος, προχωρούμε στην κανονικοποίηση των διανυσμάτων Ψ_n. Εφόσον η αλγεβρική μέθοδος δεν δίνει τη μορφή των κυματοσυναρτήσεων, παρά μόνο την αλγεβρική τους σχέση μέσω της δράσης τελεστών, πρέπει να δεχθούμε ότι μία κατάσταση είναι κανονικοποιημένη και να προσδιορίσουμε τον συντελεστή κανονικοποίησης των υπόλοιπων σε σχέση με αυτή. Το απλούστερο είναι να αξιώσουμε την κανονικοποίηση της θεμελιώδους κατάστασης: $\|\Psi_0\|^2 = (\Psi_0, \Psi_0) = 1$. Τότε, εφαρμόζοντας τη σχέση (181), βρίσκουμε για $n \geq 1$:

$$\begin{aligned}
(\Psi_n, \Psi_n) &= ((\hat{a}^\dagger)^n\Psi_0, (\hat{a}^\dagger)^n\Psi_0) \\
&= (\hat{a}^\dagger\Psi_{n-1}, \hat{a}^\dagger\Psi_{n-1}) \\
&= (\Psi_{n-1}, \hat{a}\hat{a}^\dagger\Psi_{n-1}) \quad \text{(διότι ο } \hat{a} \text{ είναι ερμιτιανός συζυγής του } \hat{a}^\dagger) \\
&= (\Psi_{n-1}, (\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)\Psi_{n-1}) \quad \text{(από σχ. μετάθεσης 175)} \\
&= (\Psi_{n-1}, \hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi_{n-1}) + (\Psi_{n-1}, \Psi_{n-1}) \\
&= (n-1)(\Psi_{n-1}, \Psi_{n-1}) + (\Psi_{n-1}, \Psi_{n-1}) \quad \text{(από σχ. 183)} \\
&= n\,(\Psi_{n-1}, \Psi_{n-1}).
\end{aligned}$$

Καταλήξαμε λοιπόν στην αναδρομική σχέση $\|\Psi_n\|^2 = n\|\Psi_{n-1}\|^2$, η οποία, δεδομένης της παραδοχής $\|\Psi_0\| = 1$, δίνει $\|\Psi_n\|^2 = n!$. Δηλαδή, τα κανονικοποιημένα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής, που αποτελούν και ορθοκανονική βάση, είναι τα

$$\Phi_n \equiv \frac{1}{\sqrt{n!}}\,\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(\hat{a}^\dagger)^n\,\Psi_0. \tag{184}$$

Προκύπτει εύκολα η δράση των $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$ στα διανύσματα ορθοκανονικής βάσης:[97]

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger\Phi_n &= \sqrt{n+1}\,\Phi_{n+1} && (185)\\
\hat{a}\Phi_n &= \sqrt{n}\,\Phi_{n-1}. && (186)
\end{aligned}$$

9.4 Προβλήματα

1. Δείξτε ότι η μέση τιμή της ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή είναι υποχρεωτικά θετική. Χρησιμοποιήστε τη μορφή της Χαμιλτονιανής (161) και το γεγονός ότι οι τελεστές $\hat{p}$ και $\hat{x}$ είναι ερμιτιανοί, χωρίς να καταφύγετε στους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής.

[97] Πρόβλημα 3.

2. Αποδείξτε τη σχέση (173) και τις σχέσεις μετάθεσης (175-177) των τελεστών $\hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger$ του αρμονικού ταλαντωτή. Με βάση αυτές, δείξτε την ισχύ των εξισώσεων ιδιοτιμών (178) και (178).

3. Πεισθείτε για την ισχύ των σχέσεων (184-186).

4. Βρείτε τις ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές της ακόλουθης Χαμιλτονιανής:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x} - x_0)^2 + V_0,$$

με x_0, V_0 σταθερές. Χρησιμοποιήστε γι αυτό τη γνωστή θεωρία του αρμονικού ταλαντωτή με κατάλληλους μετασχηματισμούς, χωρίς να ξαναλύσετε το πρόβλημα από την αρχή.

10 Κίνηση σε τρεις διαστάσεις και στροφορμή

10.1 Εισαγωγικά

Στην περιγραφή της κίνησης σωματιδίων σε τρεις διαστάσεις, δεν διαφοροποιούνται τα αξιώματα της κβαντομηχανικής (χώρος καταστάσεων, παρατηρήσιμα μεγέθη, αρχές μέτρησης, χρονική εξέλιξη καταστάσεων), παρά μόνο αλλάζει επί της ουσίας το πεδίο ορισμού των κυματοσυναρτήσεων: είναι συναρτήσεις από το $\mathbb{R}^3$ στο $\mathbb{C}$, τετραγωνικά ολοκληρώσιμες. Δηλαδή:

$$\int_{\mathbf{R}^3} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \, d^3r = 1, \quad \mathbf{r} = (x, y, z). \tag{187}$$

Το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται επίσης σε αναλογία με τη μονοδιάστατη περίπτωση:

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi_1^*(\mathbf{r})\Psi_2(\mathbf{r}) \, d^3r. \tag{188}$$

Σε αναλογία με τη μονοδιάστατη περίπτωση, η ποσότητα $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ δίνει την πυκνότητα πιθανότητας να μετρηθεί το σωματίδιο στη θέση $\mathbf{r}$. Ο τελεστής θέσης, $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ είναι πλέον διάνυσμα με τρεις συνιστώσες. Η κάθε επιμέρους συνιστώσα δρα πολλαπλασιαστικά, π.χ., $\hat{x}\Psi(\mathbf{r}) = \hat{x}\Psi(x, y, z) = x\Psi(x, y, z)$. Ο τελεστής ορμής είναι επίσης διανυσματική ποσότητα:

$$\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}) = -i\hbar\nabla \tag{189}$$

.

Οι σχέσεις μετάθεσης προκύπτουν εύκολα. Συμβολίζοντας με $\hat{r}_\mu \in \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$ την μ-οστή συνιστώσα του $\mathbf{r}$, έχουμε

$$\begin{aligned} [\hat{r}_\mu, \hat{r}_\nu] &= 0 \\ [\hat{p}_\mu, \hat{p}_\nu] &= 0 \\ [\hat{r}_\mu, \hat{p}_\nu] &= i\hbar\,\delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu \in \{x, y, z\}. \end{aligned} \tag{190}$$

Οι πρώτη σχέση προκύπτει από την πολλαπλασιαστική δράση των $\hat{r}_\mu\hat{r}_\nu$, η δεύτερη από τη μεταθετικότητα των μερικών παραγωγίσεων ως προς διαφορετικές συντεταγμένες και η τρίτη από τη γνωστή αντίστοιχη σχέση σε μία διάσταση.

Η κινητική ενέργεια είναι

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \equiv \frac{1}{2m}\hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2. \tag{191}$$

Η χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger (εξίσωση ιδιοτιμών της ενέργειας) για το σωματίδιο απουσία δυναμικού γράφεται

$$\hat{T}\Psi_E(\mathbf{r}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_E(\mathbf{r}) = E\Psi_E(\mathbf{r}). \tag{192}$$

Για την επίλυση της εξίσωσης δοκιμάζουμε χωρισμό μεταβλητών. Γράφοντας $\Psi_E(x, y, z) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z)$, λαμβάνουμε

$$\Psi_1''(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z) + \Psi_1(x)\Psi_2''(y)\Psi_3(z) + \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3''(z) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z), \tag{193}$$

απ'όπου:
$$\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)}+\frac{\Psi_2''(y)}{\Psi_2(y)}+\frac{\Psi_3''(z)}{\Psi_3(z)}=-\frac{2mE}{\hbar^2} \tag{194}$$
Το δεξιό μέλος της εξίσωσης είναι μια σταθερά, ενώ το αριστερό μέλος είναι άθροισμα τριών συναρτήσεων διαφορετικών μεταβλητών. Ο μόνος τρόπος να ικανοποιείται η εξίσωση για κάθε τιμή των x, y, z είναι να είναι σταθερός ο κάθε όρος του αριστερού μέλους. Έτσι,

$$\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)}=-\frac{2mE_1}{\hbar^2},\quad \frac{\Psi_2''(y)}{\Psi_2(y)}=-\frac{2mE_2}{\hbar^2},\quad \frac{\Psi_3''(z)}{\Psi_3(z)}=-\frac{2mE_3}{\hbar^2},\quad \text{με } E_1+E_2+E_3=E \tag{195}$$

Οι λύσεις αυτών των εξισώσεων είναι

$$\Psi_1(x)=e^{ik_1x},\ \Psi_2(y)=e^{ik_2y},\ \Psi_3(z)=e^{ik_3z},\quad \text{με } k_\mu=\sqrt{2mE_\mu}/\hbar. \tag{196}$$

Από εδώ και πέρα, η γενική λύση γράφεται στη μορφή

$$\Psi=\sum_{k_1,k_2,k_3} c_{k_1,k_2,k_3}e^{i(k_1x+k_2y+k_3z)}\equiv\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{197}$$

υπό τη συνθήκη $k_1^2+k_2^2+k_3^2=k^2=2mE/\hbar^2$, με τις σταθερές $c_{\mathbf{k}}$ και τις επιτρεπτές τιμές των k_μ να καθορίζονται από τις συνοριακές συνθήκες.

Για παράδειγμα, εάν οι συνοριακές συνθήκες δίνονται από πλήρως ανακλαστικά τοιχώματα στα επίπεδα $x=0,L,\ y=0,L,\ z=0,L$, δηλαδή αν έχουμε το τριδιάστατο ανάλογο του απειρόβαθου πηγαδιού δυναμικού με $\Psi_E(x,y,z)=0$ σε αυτά τα επίπεδα, τότε λαμβάνουμε γραμμικούς συνδυασμούς των εκθετικών ώστε να σχηματίζονται συναρτήσεις $\Psi_{n_1}(x)=\sin(n_1\pi x/L)$, $\Psi_{n_2}(y)=\sin(n_2\pi y/L)$, $\Psi_{n_3}(z)=\sin(n_3\pi z/L)$, με τη γενική λύση

$$\Psi_E=\sum_{n_1n_2n_3} c_{n_1n_2n_3}\sin\left(\frac{n_1\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{n_3\pi z}{L}\right),\quad n_\mu=1,2,3,4,\ldots \tag{198}$$

υπό τη συνθήκη
$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right). \tag{199}$$
Η άθροιση στη γενική λύση υφίσταται εάν περισσότερες της μίας τριάδες (n_x,n_y,n_z) ικανοποιούν τη συνθήκη (199) για την ενέργεια, οπότε και έχουμε εκφυλισμένη ιδιοτιμή. (Η τιμή $n_\mu=0$ αποκλείεται διότι δίνει μηδενική κυματοσυνάρτηση, ενώ οι τιμές $n_\mu<0$ παραλείπονται, διότι δίνουν μόνο μια αλλαγή προσήμου, άρα συναρτήσεις γραμμικά εξαρτημένες από τις αντίστοιχες με $n_\mu>0$.)

Σε άλλο παράδειγμα, εάν υποθέσουμε ότι έχουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες στα $x=0,L,\ y=0,L,\ z=0,L$, τότε οι λύσεις γράφονται στη μορφή (196,197), υπό τη συνθήκη $k_\mu=2\pi n_\mu/L$, $n_\mu\in\mathbb{Z}$. (Εδώ επιτρέπεται η τιμή $n_\mu=0$, που δίνει $\Psi_\mu=1$, ενώ οι συναρτήσεις με $n_\mu<0$ και $n_\mu>0$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες.)

Τέλος, εξετάζουμε το παράδειγμα πλήρως ανακλαστικών τοιχωμάτων στα επίπεδα $x=0,L,\ y=0,L$ και ελεύθερης κίνησης για $z\in(-\infty,\infty)$. Αυτό είναι ένα μοντέλο για την κίνηση σε οδηγό τετραγωνικής διατομής $L\times L$ και άπειρου μήκους, π.χ. για την κίνηση ηλεκτρονίου σε πολύ λεπτό μεταλλικό αγωγό. Εδώ έχουμε λύσεις της μορφής $\Psi_{n_1}(x) = \sin(n_1\pi x/L)$, $\Psi_{n_2}(y) = \sin(n_2\pi y/L)$, $\Psi_3(z) = e^{ik_3 z}$, με τη γενική λύση

$$\Psi_E = \sum_{n_1 n_2} \sum_{n'=\pm 1} c_{n_1 n_2 n'}(k_3) \sin\left(\frac{n_1\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2\pi y}{L}\right) e^{in' k_3 z} dk_z, \quad n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots \tag{200}$$

με την ενέργεια να λαμβάνει τιμές

$$E_{n_1 n_2}(k_3) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \left(n_1^2 + n_2^2\right) + \frac{\hbar^2}{2m}k_3^2, \quad k_3 \in \mathbb{R}. \tag{201}$$

Εδώ, ο κυματαριθμός k_3 μπορεί να πάρει οποιαδήποτε πραγματική τιμή (όπως επιτρέπουν οι συνοριακές συνθήκες), σε αναλογία με τη περίπτωση ελεύθερου σωματιδίου κινούμενου σε μία διάσταση χωρίς άλλο περιορισμό πέραν της εξ. (201). Το n' θέτει το πρόσημο του εκθέτη, διότι πρέπει να ληφθούν υπ΄όψη οι δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις $e^{\pm ik_3 z}$. Η εξ. (201) δίνει μια παραβολή για κάθε ζεύγος (n_1, n_2), μετατοπισμένη στον άξονα των ενεργειών κατά την ποσότητα $\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2(n_1^2 + n_2^2)$. Η ελάχιστη δυνατή τιμή της ενέργειας είναι $E_0 \equiv E_{1,1}(0) = 2\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2$. Δεδομένης μιας ενέργειας $E > E_0$, παρουσιάζεται εκφυλισμός που αντιστοιχεί στον αριθμό των τριάδων (n_1, n_2, k_3) που ικανοποιούν τη σχέση (201).

10.2 Η στροφορμή

Ας θεωρήσουμε σύστημα ενός σωματιδίου στον τριδιάστατο χώρο στην κατάσταση Ψ_0. Εξετάζουμε μια στροφή του συστήματος συντεταγμένων κατά γωνία γ γύρω από άξονα $\mathbf{e}$, με τον αντίστοιχο 3×3 ορθογώνιο πίνακα στροφής $\mathcal{R}_{\gamma,\mathbf{e}}$, ώστε η θέση στο χώρο να μετασχηματίζεται ως $\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathcal{R}\mathbf{r}$. Τότε η συνάρτηση Ψ_0 μετασχηματίζεται, εκφρασμένη στο νέο σύστημα, ως $\Psi_\gamma(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathcal{R}_{\gamma,\mathbf{e}}\,\mathbf{r})$. Για ευκολία επιλέγουμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, τον άξονα z κατά μήκος του άξονα στροφής $\mathbf{e}$ και εκφράζουμε τις Ψ_0, Ψ σε σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, ϕ) με

$$x = r\,\sin\theta\,\cos\phi, \quad y = r\,\sin\theta\,\sin\phi, \quad z = r\,\cos\theta. \tag{202}$$

Υποθέτουμε ότι η συναρτήσεις $\Psi_0(r, \theta, \phi)$ και $\Psi_\gamma(r, \theta, \phi)$ είναι αναλυτικές συναρτήσεις[98] της ϕ. Τότε, δεδομένου ότι στο επιλεγμένο σύστημα συντεταγμένων η γωνία γ είναι στην κατεύθυνση της ϕ, κάνουμε ένα ανάπτυγμα Taylor:

$$\begin{aligned}
\Psi_\gamma(r,\theta,\phi) = \Psi_0(r,\theta,\phi+\gamma) &= \sum_n \frac{\gamma^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial\phi^n}\Psi_0(r,\theta,\phi) \\
&= \exp\left[\gamma\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\Psi_0(r,\theta,\phi) \\
&= \exp\left[i\frac{\gamma}{\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right]\Psi_0(r,\theta,\phi) \\
&\equiv \exp\left[i\frac{\gamma}{\hbar}\hat{L}_z\right]\Psi_0(r,\theta,\phi)
\end{aligned} \tag{203}$$

[98] Αυτός ο περιορισμός δεν είναι ουσιώδης, διότι μπορούμε να εκφράσουμε οποιαδήποτε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση ως όριο ακολουθίας αναλυτικών συναρτήσεων.

Στο δεύτερο βήμα χρησιμοποιήσαμε τον ορισμό του εκθετικού αναπτύγματος του διαφορικού τελεστή $\gamma(\partial/\partial\phi)$ και στο τελευταίο ορίσαμε τον *τελεστή στροφορμής ως προς τον άξονα* z

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{204}$$

Είναι απλό να δείξει κανείς ότι $\frac{\partial}{\partial\phi} = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}$. Ωστόσο, αυτή είναι η έκφραση της συνιστώσας z του διανύσματος $\mathbf{r}\times\nabla$, δηλαδή του εξωτερικού γινομένου των διανυσμάτων θέσης και βαθμίδας. Συμπεριλαμβάνοντας τη σταθερά $-i\hbar$, και χρησιμοποιώντας τον ορισμό της ορμής σε τρεις διαστάσεις (189), γράφουμε: $\hat{L}_z = (\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})_z$.

Αυτό το αποτέλεσμα γενικεύεται σε στροφές γύρω από οποιονδήποτε άξονα. Ένας τρόπος είναι να υπολογίσουμε το μετασχηματισμό του $\partial/\partial\phi$ μεταξύ του αρχικού και ενός στραμμένου συστήματος συντεταγμένων. Είναι απλούστερο να παρατηρήσουμε ότι η ποσότητα $(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})_z = \mathbf{e}_z\cdot(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})$ είναι το εσωτερικό γινόμενο του διανύσματος $(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})$ με το μοναδιαίο διάνυσμα στην κατεύθυνση z, $\mathbf{e}_z$. Το εσωτερικό γινόμενο είναι βαθμωτή ποσότητα, ως εκ τούτου δεν αλλάζει τιμή σε στροφή του συστήματος συντεταγμένων. Εάν το εκφράσουμε σε νέο σύστημα συντεταγμένων, ως προς το οποίο ο προηγούμενος άξονας z βρίσκεται πλέον στην κατεύθυνση $\mathbf{e}$, καταλήγουμε στη γενική έκφραση στροφής κατά γωνία γ γύρω από άξονα $\mathbf{e}$,

$$\Psi_0(\mathcal{R}_{\gamma,\mathbf{e}}\,\mathbf{r}) = \exp\left[i\frac{\gamma}{\hbar}\,\mathbf{e}\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\right]\Psi_0(\mathbf{r}) \equiv \exp\left[i\frac{\gamma}{\hbar}\,\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}\right]\Psi_0(\mathbf{r}). \tag{205}$$

Εδώ, ορίσαμε τον διανυσματικό τελεστή της στροφορμής

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}} \tag{206}$$

με συνιστώσες

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x = \hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\\
\hat{L}_y = \hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\\
\hat{L}_z = \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)
\end{aligned} \tag{207}$$

Ο μετασχηματισμός (205), $\Psi_0(\mathbf{r}) \to \Psi_0(\mathcal{R}_{\gamma,\mathbf{e}}\,\mathbf{r})$, είναι μια στροφή στο χώρο, ο οποίος αφήνει αναλλοίωτη τη νόρμα $\int|\Psi_0|d^3r = \|\Psi_0\|$. Επίσης, πρόκειται εμφανώς για γραμμική απεικόνιση. Επομένως, ο τελεστής μετασχηματισμού, $\exp\left[i\frac{\gamma}{\hbar}\,\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}\right]$, είναι μοναδιαίος. Δεδομένης της φανταστικής μονάδας στον εκθέτη, η ποσότητα $\frac{\gamma}{\hbar}\,\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}$ πρέπει να είναι ερμιτιανός τελεστής. Λαμβάνοντας το $\mathbf{e}$ στις κατευθύνσεις x, y, z, συμπεραίνουμε ότι οι τρεις συνιστώσες της στροφορμής είναι ερμιτιανοί τελεστές. Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουμε αν πάρουμε την εξίσωση (204) και ολοκληρώσουμε κατά παράγοντες στη γωνία ϕ:

$$\begin{aligned}
(\Psi, \hat{L}_z\Psi) &= \int_0^{2\pi} \Psi^*(r,\theta,\phi)\hat{L}_z\,\Psi(r,\theta,\phi)d\phi \\
&= \int_0^{2\pi} \Psi^*(r,\theta,\phi)\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi}\right)d\phi \\
&= -i\hbar\big[\Psi^*\Psi\big]_0^{2\pi} + i\hbar\int_0^{2\pi}\frac{\partial\Psi^*(r,\theta,\phi)}{\partial\phi}\Psi(r,\theta,\phi)d\phi \\
&= 0 + \int_0^{2\pi}\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi}\right)^*\Psi(r,\theta,\phi)d\phi \\
&= \left[\int_0^{2\pi}\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi}\right)\Psi^*(r,\theta,\phi)d\phi\right]^* \\
&= (\Psi, \hat{L}_z\Psi)^*
\end{aligned}$$

όπου ο πρώτος όρος της ολοκλήρωσης κατά παράγοντες μηδενίστηκε επειδή η Ψ πρέπει να είναι μονότιμη συνάρτηση της γωνίας ϕ ($\Psi(r,\theta,0) = \Psi(r,\theta,2\pi)$). Επομένως, $(\Psi, \hat{L}_z\Psi) \in \mathbb{R}$, δηλαδή ο $\hat{L}_z$ είναι ερμιτιανός τελεστής. Δεδομένου ότι οι $\hat{L}_x$ και $\hat{L}_y$ απλώς εκφράζουν τον $\hat{L}_z$ σε στραμμένο σύστημα συντεταγμένων στο χώρο, συμπεραίνουμε ότι είναι επίσης ερμιτιανοί, χωρίς να επαναλάβουμε τις πράξεις.

Περαιτέρω, ορίζουμε το μέτρο του τετραγώνου της στροφορμής ως

$$\hat{L}^2 = (\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})\cdot(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}}) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \tag{208}$$

Λόγω της ερμιτιανότητας των $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$, ο τελεστής $\hat{L}^2$ είναι επίσης ερμιτιανός.

Οι σχέσεις μετάθεσης των τελεστών στροφορμής (207) προκύπτουν απευθείας από τις σχέσεις μετάθεσης των συνιστοσών της θέσης και της ορμής (190). Χρησιμοποιώντας τον κανόνα μεταθετών $\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}$, βρίσκουμε

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= i\hbar\,\hat{L}_z \\
\left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] &= i\hbar\,\hat{L}_x \\
\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] &= i\hbar\,\hat{L}_y
\end{aligned} \tag{209}$$

που συνοψίζονται

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\,\epsilon_{ijk}\,\hat{L}_k \tag{210}$$

όπου εμφανίζεται το αντισυμμετρικό σύμβολο Levi-Civita,

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{αν τα } (i,j,k) \text{ είναι άρτια μετάθεση των } (x,y,z), \\ -1, & \text{αν τα } (i,j,k) \text{ είναι περιττή μετάθεση των } (x,y,z), \\ 0, & \text{αν κάποια από τα } (i,j,k) \text{ ταυτίζονται.} \end{cases} \tag{211}$$

Επίσης, βρίσκουμε εύκολα:

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0. \tag{212}$$

10.3 Συζήτηση περί των σχέσεων μετάθεσης των τελεστών στροφορμής

Από τα παραπάνω, συμπεραίνουμε ότι οι συνιστώσες του διανύσματος της στροφορμής είναι ασύμβατες ποσότητες. Σύμφωνα με το εδάφιο 4.4, αυτό συνεπάγεται ότι δεν υπάρχει κοινό σύστημα ιδιοδιανυσμάτων που να αποτελεί βάση στο χώρο Hilbert, αν και μπορεί να υπάρχουν κάποια κοινά ιδιοδιανύσματα (μάλιστα, οι κυματοσυναρτήσεις μηδενικής στροφορμής προκύπτει ότι είναι κοινά ιδιοδιανύσματα των τριών τελεστών με ιδιοτιμή μηδέν). Κατά συνέπεια, αν σε ένα πείραμα φιλτράρουμε τη συλλογή, για παράδειγμα, σε κατάσταση δεδομένης τιμής της προβολής $\hat{L}_z$, τότε αναμένουμε (πλην εξαιρέσεων) διασπορά στις μετρήσεις των $\hat{L}_x$ και $\hat{L}_y$.

Αντίθετα, η μεταθετικότητα των τριών συνιστωσών του $\hat{L}^2$ με οποιαδήποτε των τριών συνιστωσών (εξ. 212) σημαίνει ότι υπάρχει βάση κοινών ιδιοδιανυσμάτων του $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_x$, άλλη βάση κοινών ιδιοδιανυσμάτων του $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_y$, και άλλη βάση κοινών ιδιοδιανυσμάτων του $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ (οι τρεις βάσεις δεν είναι δυνατόν να ταυτίζονται). Ας θεωρήσουμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, την περίπτωση κοινής βάσης $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$. Όπως θα δούμε, με εξαίρεση την ιδιοτιμή μηδενικής στροφορμής, κάθε ιδιοτιμή του $\hat{L}^2$ αντιστοιχεί σε περισσότερες της μίας ιδιοτιμές του $\hat{L}_z$. Επομένως, εάν μια συλλογή φιλτραριστεί ως προς ιδιοτιμή του $\hat{L}^2$, το φιλτράρισμα είναι ατελές (δεν δίνει κυματοσυνάρτηση), και απαιτείται επιπλέον φιλτράρισμα ως προς το μέγεθος $\hat{L}_z$ για να προσδιοριστεί πλήρως η κατάσταση. Αλλά και αντίστροφα, αν φιλτραριστεί μια συλλογή ως προς ιδιοτιμή του $\hat{L}_z$, το φιλτράρισμα είναι επίσης ατελές, διότι υπάρχουν πολλές (άπειρες, όπως θα δούμε) ιδιοτιμές του $\hat{L}^2$ που αντιστοιχούν σε δεδομένη ιδιοτιμή του $\hat{L}_z$. Θα χρειαστεί τότε επιπλέον φιλτράρισμα ως προς το μέγεθος $\hat{L}^2$ για να προσδιοριστεί πλήρως μια κυματοσυνάρτηση. Συνεπώς, οι τελεστές $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ ανήκουν σε πλήρες σύστημα μετατιθεμένων μεγεθών.

Στην πραγματικότητα, βέβαια, η ταυτόχρονη γνώση των ιδιοτιμών των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ δεν αρκεί για πλήρη προσδιορισμό της κυματοσυνάρτησης, διότι η ακτινική εξάρτηση της κυματοσυνάρτησης δημιουργεί επιπλέον εκφυλισμό (γραμμικά ανεξάρτητες κυματοσυναρτήσεις ενδέχεται να ταυτίζονται ως προς την ιδιοτιμή τόσο του $\hat{L}^2$ όσο και του $\hat{L}_z$, δεδομένου ότι η στροφορμή χαρακτηρίζει το σύστημα μόνον ως προς τη γωνιακή συμπεριφορά). Τότε απαιτούνται επιπλέον μεγέθη (π.χ., η ενέργεια) για να συμπληρωθεί το πλήρες σύστημα. Αυτές οι έννοιες θα διασαφηνιστούν περισσότερο στη μελέτη του ατόμου του Υδρογόνου.

10.4 Ιδιοδιανύσματα και ιδιοτιμές της στροφορμής

Θα αναζητήσουμε τις ιδιοτιμές και τα κοινά ιδιοδιανύσματα των τελεστών $\hat{L}_z$ και $\hat{L}^2$. Τα ιδιοδιανύσματα των $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ προκύπτουν από εκείνα του $\hat{L}_z$, φέρνοντας τον άξονα z στον x ή στον y με χρήση της σχέσης (205), ενώ οι αντίστοιχες ιδιοτιμές παραμένουν αναλλοίωτες, καθώς πρόκειται απλώς για έκφραση της ίδιας ποσότητας σε άλλο σύστημα συντεταγμένων.

Για την εξίσωση ιδιοτιμών του $\hat{L}_z$ χρησιμοποιούμε τη μορφή (204). Δεδομένου ότι ο τελεστής περιέχει τη σταθερά $\hbar$, εξυπηρετεί να ορίσουμε την ιδιοτιμή ως $m\hbar$. Έχουμε

$$\hat{L}_z\, f_m(\phi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}f_m(\phi) = \hbar\, m\, f_m(\phi), \tag{213}$$

η οποία έχει ως λύση την $f_m(\phi) = e^{im\phi}$. Δεδομένου ότι $f(2\pi) = f(0)$, πρέπει $m \in \mathbb{Z}$. Γενικά, αν μια συνάρτηση Ψ γράφεται στη μορφή $\Psi(r,\theta,\phi) = \Psi_1(r,\theta)e^{im\phi}$, $m \in \mathbb{Z}$, τότε είναι ιδιοδιάνυσμα του $\hat{L}_z$.

Η εύρεση των ιδιοτιμών του $\hat{L}^2$ είναι πιο περίπλοκη.[99] Για λόγους όμοιους με πριν, εξυπηρετεί να ορίζουσε τις ιδιοτιμές ως $\lambda\hbar^2$ με το λ άγνωστο προς εύρεση. Γράφοντας την εξίσωση ιδιοτιμών ως

$$\hat{L}^2\, Y = \hat{L}_x^2 Y + \hat{L}_y^2 Y + \hat{L}_z^2 Y = \lambda\hbar^2\, Y, \tag{214}$$

όπου Y η ιδιοσυνάρτηση, βλέπουμε εύκολα ότι $\lambda \geq 0$: $\lambda\hbar^2\|Y\|^2 = \lambda\hbar^2(Y,Y) = (Y,\hat{L}^2\,Y) = (Y,\hat{L}_x^2\,Y)+(Y,\hat{L}_y^2\,Y)+(Y,\hat{L}_z^2\,Y) = (\hat{L}_x\,Y,\hat{L}_x\,Y)+(\hat{L}_y\,Y,\hat{L}_y\,Y)+(\hat{L}_z\,Y,\hat{L}_z\,Y) = \|\hat{L}_x\,Y\|^2 + \|\hat{L}_z\,Y\|^2 + \|\hat{L}_z\,Y\|^2 \geq 0$, όπου χρησιμοποιήσαμε την ερμιτιανή ιδιότητα των $\hat{L}_i$.

Μετασχηματίζοντας το $\hat{L}^2$ από καρτεσιανές σε σφαιρικές συντεταγμένες, και συγκρίνοντας με το ∇^2 επίσης σε σφαιρικές συντεταγμένες, προκύπτει ότι η δράση του $\hat{L}^2$ είναι η ίδια με αυτή του γωνιακού μέρους ∇^2 (πλέον του πολλαπλασιαστικού παράγοντα $-\hbar^2$ και ενός παράγοντα r^2). Η έκφραση για το ∇^2 είναι:

$$\begin{aligned}
\nabla^2\Psi &= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Psi) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right] && (215)\\
&= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Psi) + \frac{(-1)}{\hbar^2}\frac{1}{r^2}\hat{L}^2\Psi && (216)
\end{aligned}$$

Γράφουμε λοιπόν την εξίσωση ιδιοτιμών του $\hat{L}^2$ σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\hat{L}^2\, Y = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] = \lambda\hbar^2\, Y, \tag{217}$$

όπου πλέον είναι φανερό ότι $Y = Y(\theta,\phi)$. Ο κανόνας της αλυσίδας μαζί με τριγωνομετρικές σχέσεις μάς δίνουν $\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} = -\frac{\partial}{\partial\cos\theta}$ και $\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} = (\cos^2\theta - 1)\frac{\partial}{\partial\cos\theta}$, οπότε η παραπάνω εξίσωση μετασχηματίζεται στην εξής μορφή:

$$\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\left[(1-\cos^2\theta)\frac{\partial Y}{\partial\cos\theta}\right] + \frac{1}{1-\cos^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} = -\lambda Y. \tag{218}$$

Εδώ γινεται φανερό ότι η Y εξαρτάται από τη θ μόνο μέσω του $\cos\theta$. Για συντομία στη γραφή, ορίζουμε τη μεταβλητή $u = \cos\theta$. Προχωρούμε με χωρισμό μεταβλητών,

$$Y(\theta,\phi) = P(\cos\theta)f(\phi) = P(u)f(\phi), \quad -1 < u < 1. \tag{219}$$

[99] Εδώ ακολουθούμε την αναλυτική μέθοδο επίλυσης της αντίστοιχης διαφορικής εξίσωσης, ενώ υπάρχει και η αλγεβρική μέθοδος. Οι μέθοδοι παρουσιάζονται π.χ. στο βιβλίο του Stephen Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015).

Πολλαπλασιάζοντας τα δύο μέλη της (218) με $(1-u^2)$ και διαιρώντας με $Y = Pf$, λαμβάνουμε

$$(1-u^2)\frac{1}{P}\frac{\partial}{\partial u}\left[(1-u^2)\frac{\partial P}{\partial u}\right] + \lambda(1-u^2) = -\frac{1}{f}\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}. \tag{220}$$

Το αριστερό μέλος αυτής της εξίσωσης είναι συνάρτηση μόνο από του u, ενώ το δεξιό μόνο του ϕ. Για να ισούνται τα δύο μέλη για κάθε (u,ϕ) πρέπει να είναι ίσα με μια σταθερά λ_1. Από το δεξιό μέλος έχουμε

$$\frac{1}{f(\phi)}\frac{\partial^2 f(\phi)}{\partial \phi^2} = -\lambda_1 \tag{221}$$

που έχει ως λύση $f(\phi) = e^{\pm i\sqrt{\lambda_1}\phi}$, για $\lambda_1 \neq 0$, και $f(\phi) = a\phi + b$, για $\lambda_1 = 0$. Αλλά πρέπει $f(2\pi) = f(\phi)$, επομένως μένει μόνο η δυνατότητα $e^{\pm i\sqrt{\lambda_1}\phi}$ με $\sqrt{\lambda_1} = 0, 1, 2, \ldots$. Υιοθετώντας το συμβολισμό της (213), θέτουμε $\pm\sqrt{\lambda_1} = m \in \mathbb{Z}$. Για δεδομένο m, από τις δύο ορθογώνιες συναρτήσεις $e^{\pm im\phi}$ μέσω γραμμικών συνδυασμών μπορούμε να φτιάξουμε άπειρα ζεύγη ορθογώνιων συναρτήσεων που να ικανοποιούν την (221) (π.χ., τις $\cos m\phi$ και $\sin m\phi$), αλλά παρατηρούμε ότι ειδικά η επιλογή του ζεύγους $e^{\pm im\phi}$ ικανοποιεί ταυτόχρονα και την (213), δηλαδή δίνει ιδιοσυναρτήσεις των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ ταυτόχρονα. Συνεπώς, υιοθετούμε τις

$$f_m(\phi) = e^{im\phi}, \quad m \in \mathbb{Z} \tag{222}$$

με την (220) να γίνεται (αντικαθιστώντας $\lambda_1 = m^2$ στο δεξιό μέλος και διαιρώντας με $(1-u^2)$)

$$\frac{\partial}{\partial u}\left[(1-u^2)\frac{\partial P(u)}{\partial u}\right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-u^2}\right)P(u) = 0. \tag{223}$$

Έχουμε λοιπόν, για κάθε ιδιοτιμή m του $\hat{L}_z$, μια εξίσωση για τις ιδιοσυναρτήσεις $Y(\theta,\phi) = P(\cos\theta)e^{im\phi}$ και τις ιδιοτιμές λ του $\hat{L}^2$. Θα συζητήσουμε την επίλυση της (223) για $m = 0$ και θα δώσουμε τις λύσεις για $m \neq 0$.[100]

Για $m = 0$, η (223) γράφεται

$$\frac{\partial}{\partial u}\left[(1-u^2)\frac{\partial P(u)}{\partial u}\right] + \lambda P(u) = 0, \quad -1 < u < 1. \tag{224}$$

Επιχειρώντας λύση εκφρασμένη σε δυναμοσειρά, θέτουμε

$$P(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k u^k. \tag{225}$$

Με αντικατάσταση στην (224) και επαναρίθμηση του πρώτου όρου, λαμβάνουμε

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left[(k+1)(k+2)a_{k+2} - (k(k+1)+\lambda)a_k\right]u^k = 0. \tag{226}$$

[100] Ακολουθούμε το βιβλίο του Stephen Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015).

Για να ισχύει η σχέση για κάθε u, πρέπει να μηδενίζεται ο συντελεστής κάθε δύναμης u_k. Αυτή η απαίτηση δίνει την αναδρομική σχέση

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1)-\lambda}{(k+1)(k+2)}\, a_k. \tag{227}$$

Για $k \gg \lambda$ και $k \gg 1$, η σχέση δίνει $a_{k+2}/a_k \to 1$. Τότε, για $u \to \pm 1$, η σειρά θα συμπεριφέρεται ως $\sum_k u^k$ και θα αποκλίνει. Αλλά το όριο του $P(u)$ για $u = \cos\theta \to \pm 1$ είναι ουσιώδες να υπάρχει, διαφορετικά το αποτέλεσμα δεν θα ορίζεται για $\theta = 0$, $\theta = \pi$. Το πρόβλημα λύνεται εάν απαιτήσουμε να τερματίζεται η σειρά, δηλαδή να υπάρχει κάποιο $k \equiv l$ τέτοιο ώστε $a_{l+2} = 0$. Σε αυτή την περίπτωση, ο αριθμητής θα πρέπει να μηδενίζεται, δηλαδή θα υπάρχει l τέτοιο ώστε

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{228}$$

Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι οι ιδιοτιμές του $\hat{L}^2$ για $m = 0$ είναι της μορφής $\hbar^2\, l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \ldots$. Εξάλλου, παρατηρούμε ότι η σχέση (227) συνδέει κάθε δεύτερο k, δηλαδή είτε τα άρτια k μεταξύ τους είτε τα περιττά k μεταξύ τους. Αυτό συμφωνεί με την ιδιότητα των συντελεστών της διαφορικής εξίσωσης (224) να είναι άρτιες συναρτήσεις του u, επομένως οι λύσεις θα είναι είτε άρτιες είτε περιττές, περιλαμβάνοντας είτε μόνον άρτιες είτε μόνον περιττές δυνάμεις του u.

Ο τερματισμός της σειράς σημαίνει πολυωνυμικές λύσεις, οι οποίες ονομάζονται *πολυώνυμα Legendre*. Ο συντελεστής a_0 (για τα άρτια πολυώνυμα) και a_1 (για τα περιττά) μπορεί να επιλεγεί αυθαίρετα να είναι μονάδα, διότι η επιλογή οποιασδήποτε άλλης τιμής αντιστοιχεί απλώς σε πολλαπλασιασμό του πολυωνύμου με μια σταθερά, όπως φαίνεται από την αναδρομική σχέση. Τα πρώτα πολυώνυμα Legendre (για $l = 0, 1, 2, 3$) είναι

$$\begin{aligned} P_0(u) &= 1 \\ P_1(u) &= x \\ P_2(u) &= \frac{1}{2}(3u^2 - 1) \\ P_3(u) &= \frac{1}{2}(5u^3 - 3u) \end{aligned} \tag{229}$$

Τα πολυώνυμα Legendre μπορούν να παραχθούν από τη σχέση του Rodriguez

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{du^l}(u^2-1)^l \tag{230}$$

και υπακούν την ακόλουθη σχέση ορθογωνιότητας:

$$\int_{-1}^{1} P_l(u) P_{l'}(u)\, du = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}. \tag{231}$$

Επομένως, οι αντίστοιχες κανονικοποιημένες συναρτήσεις είναι οι

$$\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\, P_l(u) \tag{232}$$

οι οποίες αποτελούν ορθοκανονική βάση στον χώρο των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων στο $[-1,1]$. Η σχέση πληρότητας είναι η

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2}{2l+1}\, P_l(u)\, P_{l'}(u) = \delta(u-u') = \delta(\cos\theta - \cos\theta'). \tag{233}$$

Για $m \neq 0$, οι λύσεις της διαφορικής εξίσωσης (223) είναι τα *συναφή πολυώνυμα Legendre*,

$$\begin{aligned} P_{l,m}(u) &= (-1)^m (1-u^2)^{m/2}\, \frac{d^m}{du^m} P_l(u) \\ P_{l,-m}(u) &= (-1)^m\, \frac{(l-m)!}{(l+m)!}\, P_{l,m}(u) \end{aligned} \qquad m>0,\ m\le l \tag{234}$$

Ο περιορισμός $|m| \le l$ προκύπτει από το γεγονός ότι η m-οστή παραγώγιση στην πρώτη εξίσωση μηδενίζει το αποτέλεσμα για $m > l$, μια και το $P_l(u)$ είναι πολυώνυμο βαθμού l. (Για $m=0$, $P_{l,0}(u) = P_l(u)$.)

Οι κοινές ιδιοσυναρτήσεις $Y = P(\cos\theta) f(\phi)$ των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ μπορούν πλέον να γραφούν ως εξής:

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_{l,m}(\cos\theta)\, e^{im\phi}, \quad l = 0,1,2,\ldots, \quad -l \le m \le l \tag{235}$$

Αυτές οι συναρτήσεις ονομάζονται *σφαιρικές αρμονικές*. Ικανοποιούν την ταυτότητα $Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}$. Για κάθε ιδιοτιμή $l(l{+}1)\hbar^2$ του $\hat{L}^2$ έχουμε $2l{+}1$ ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{L}_z$, με $m = -l, -l{+}1, \ldots, l{-}1, l$. Ο αριθμητικός παράγοντας μπροστά φροντίζει για την κανονικοποίηση των σφαιρικών αρμονικών, που ικανοποιούν τη σχέση ορθογωνιότητας

$$\int d\Omega\, Y_{lm}(\theta,\phi) Y_{l'm'}(\theta,\phi) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, Y_{lm}(\theta,\phi) Y_{l'm'}(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\, \delta_{mm'}, \tag{236}$$

τη σχέση πληρότητας

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\theta,\phi) Y_{lm}(\theta,\phi) = \delta(\phi-\phi')\, \delta(\cos\theta - \cos\theta') \tag{237}$$

και αποτελούν βάση στο χώρο των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων συναρτήσεων ορισμένων στη μοναδιαία σφαίρα. Συνεπώς, οποιαδήποτε συνάρτηση $\Psi(\theta,\phi)$ αναπτύσσεται σε σφαιρικές αρμονικές ως

$$\Psi(\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} a_{lm} Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{238}$$

με

$$a_{lm} = (Y_{lm}, \Psi) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, Y^*_{lm}(\theta,\phi) \Psi(\theta,\phi). \tag{239}$$

Οι πρώτες μερικές σφαιρικές αρμονικές δίνονται παρακάτω.

$$\begin{aligned}
Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
Y_{1,\pm 1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi} \\
Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \\
Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi} \\
Y_{2,\pm 1} &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi} \\
Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1) \qquad (240)
\end{aligned}$$

10.5 Φυσική ερμηνεία του φάσματος

Είδαμε ότι το μέτρο και η συνιστώσα z της στροφορμής είναι κβαντισμένες ποσότητες: δεν μπορούν να λάβουν οποιαδήποτε τιμή, διότι το φάσμα τους είναι διακριτό.

Αναμένουμε ότι, σε μια μέτρηση, το μέτρο της στροφορμής δεν μπορεί να είναι μικρότερο από το μέτρο της συνιστώσας z. Αυτό προκύπτει μαθηματικά από τον περιορισμό $-l \le m \le l$, ο οποίος συνεπάγεται $|m|\hbar \le l\hbar < \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$. Η ποσότητα $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ ερμηνεύεται ως ιδιοτιμή του μέτρου της στροφορμής, δεδομένου ότι το $l(l+1)\hbar^2$ είναι η ιδιοτιμή του $\hat{L}^2$. Άρα, για κάθε μετρημένη τιμή του μέτρου της στροφορμής, η μετρημένη τιμή της συνιστώσας z είναι αυστηρά μικρότερη κατ᾽ απόλυτη τιμή (με μόνη εξαίρεση την κατάσταση μηδενικής ολικής στροφορμής, $l = 0$, για την οποία υποχρεωτικά $m = 0$).

Διαισθητικά, αυτό σημαίνει ότι η στροφορμή ποτέ δεν μπορεί να είναι πλήρως παράλληλη στον άξονα z (ή οποιοδήποτε άξονα, μια και ο z επιλέγεται αυθαίρετα). Αυτό είναι ένα καθαρά κβαντικό φαινόμενο και προκύπτει από τις σχέσεις μετάθεσης (209) των $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ και $\hat{L}_z$. Εφόσον οι μεταθέτες δεν μηδενίζονται, μια συλλογή προετοιμασμένη σε ιδιοκατάσταση της $\hat{L}_z$, με $\hat{L}_z\Psi = m\hbar\Psi$, θα έχει υποχρεωτικά διασπορά ως προς μετρήσεις των $\hat{L}_x$ και $\hat{L}_y$. Οι τιμές της διασποράς θα ικανοποιούν τη σχέση αβεβαιότητας (29):

$$(\Delta L_x)(\Delta L_y) \ge \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{L}_x, \hat{L}_y]\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|i\hbar\langle\hat{L}_z\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\left(\Psi, \hat{L}_z\Psi\right)\right| = |m|\frac{\hbar^2}{2}. \qquad (241)$$

Παράλληλα, η μέση τιμή $\langle\hat{L}_x\rangle$ και $\langle\hat{L}_y\rangle$ μηδενίζεται σε ιδιοκατάσταση του $\hat{L}_z$, διότι οι σχέσεις μετάθεσης (209) δίνουν

$$\begin{aligned}
i\hbar\langle\hat{L}_x\rangle &= \langle[\hat{L}_y, \hat{L}_z]\rangle = \left(\Psi, [\hat{L}_y, \hat{L}_z]\Psi\right) = \left(\Psi, \hat{L}_y\hat{L}_z\Psi\right) - \left(\hat{L}_z\Psi, \hat{L}_y\Psi\right) \\
&= \left(\Psi, \hat{L}_y\Psi\right)m - m\left(\Psi, \hat{L}_y\Psi\right) = 0 \qquad (242)
\end{aligned}$$

(και όμοια για την $\langle\hat{L}_y\rangle$). Επομένως, οι συνιστώσες x και y της στροφορμής έχουν υποχρεωτικά διασπορά περί το μηδέν σε ιδιοκαταστάσεις της $\hat{L}_z$. Ακόμα και για τη μέγιστη δυνατή προβολή της στροφορμής στον άξονα z, $m = l$, οι μετρήσεις θα δώσουν μη μηδενική προβολή της στροφορμής στους άξονες x και y, άρα η προβολή στον z πρέπει να είναι μικρότερη από το μέτρο της στροφορμής. Πέραν της σχέσης αβεβαιότητας, μπορούμε να υπολογίσουμε και το μέτρο της προβολής της στροφορμής στο επίπεδο xy. Αυτό δίνεται από τον τελεστή $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2$. Επομένως, οι κοινές ιδιοκαταστάσεις των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ είναι επίσης ιδιοκαταστάσεις του $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$. Αν Ψ_{lm} μια τέτοια κατάσταση με $\hat{L}^2\Psi_{lm} = l(l+1)^2\hbar^2\Psi_{lm}$ και $\hat{L}_z\Psi_{lm} = m\hbar\Psi_{lm}$, τότε

$$(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)\Psi_{lm} = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2)\Psi_{lm} = [l(l+1) - m^2]\hbar^2\Psi_{lm}. \tag{243}$$

Δηλαδή, το μέτρο της προβολής της στροφορμής στο επίπεδο xy είναι $\sqrt{l(l+1) - m^2}\,\hbar$ με μηδενική διασπορά. Η ελάχιστη δυνατή τιμή του προκύπτει για $m = \pm l$ να είναι $\sqrt{l}$.

Τα παραπάνω ισχύουν και για τις ιδιοσυναρτήσεις των $\hat{L}_x$ και $\hat{L}_y$, δεδομένου ότι η επιλογή του άξονα z στο χώρο ήταν εξ αρχής αυθαίρετη.

11 Κίνηση σε κεντρικό δυναμικό—το άτομο του Υδρογόνου

11.1 Διατήρηση της στροφορμής

Ας θεωρήσουμε ένα σωματίδιο σε κεντρικό δυναμικό, δηλαδή, σε δυναμικό για το οποίο $V(\mathbf{r}) = V(r)$ ($r \equiv |\mathbf{r}|$). Το σύστημα παρουσιάζει ισοτροπία, δηλαδή δεν υπάρχει προτιμητέα κατεύθυνση στο χώρο στη Χαμιλτονιανή (και συνεπώς στη χρονική εξέλιξη). Αυτό είναι φανερό από τη μορφή του δυναμικού και από το γεγονός ότι η κινητική ενέργεια είναι επίσης ισοτροπική.

Έστω μια κυματοσυνάρτηση $\Psi_0(\mathbf{r};0)$ σε χρόνο $t=0$, η οποία εξελίσσεται χρονικά στην

$$\Psi_0(\mathbf{r};t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,\Psi_0(\mathbf{r};0). \tag{244}$$

Εξετάζουμε παράλληλα μιαν άλλη κυματοσυνάρτηση, η οποία συνδέεται με την πρώτη μέσω μιας στροφής στο χώρο $\mathcal{R}_{\gamma,\mathbf{e}}$ κατά γωνία γ γύρω από άξονα $\mathbf{e}$:

$$\Psi_\gamma(\mathbf{r};0) = \Psi_0(\mathcal{R}_{\gamma,\mathbf{e}}\mathbf{r};0) = e^{i\gamma\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar}\,\Psi_0(\mathbf{r};0) \tag{245}$$

σύμφωνα με τον τύπο (205).

Λόγω της ισοτροπίας του συστήματος, αναμένουμε ότι είτε πάρουμε τη χρονική εξέλιξη τις στραμμένης κυματοσυνάρτησης σε χρόνο t, είτε πάρουμε τη χρονική εξέλιξη της μη στραμμένης και τη στρέψουμε σε χρόνο t, θα έχουμε το ίδιο αποτέλεσμα. Δηλαδή αναμένουμε

$$\Psi_\gamma(\mathbf{r};t) = e^{i\gamma\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar}\,\Psi_0(\mathbf{r};t) \tag{246}$$

Αντικαθιστώντας τις εκφράσεις στο αριστερό και δεξιό μέλος, λαμβάνουμε

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,e^{i\gamma\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar}\,\Psi_0(\mathbf{r};0) = e^{i\gamma\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar}\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,\Psi_0(\mathbf{r};0) \tag{247}$$

Η ισότητα πρέπει να ισχύει για οποιαδήποτε Ψ_0, επομένως έχουμε ισότητα των τελεστών στα δύο μέλη:

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,e^{i\gamma\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar} = e^{i\gamma\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar}\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \tag{248}$$

Αλλά αυτή η έκφραση σημαίνει ότι οι δύο μοναδιαίοι τελεστές, εκείνος της χρονικής εξέλιξης και εκείνος της τυχαίας στροφής στο χώρο, μετατίθενται. Γράφοντας τον τελεστή χρονικής εξέλιξης για μικρό χρόνο, $\exp[-i\hat{H}t/\hbar] \approx 1 - i(t/\hbar)\hat{H}$, και εκείνον της στροφής για μικρή γωνία, $\exp[i\gamma\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar] \approx 1 + i(\gamma/\hbar)\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}$, η παραπάνω σχέση γίνεται

$$(1 - i\frac{t}{\hbar}\hat{H})(1 + i\frac{\gamma}{\hbar}\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}) = (1 + i\frac{\gamma}{\hbar}\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}})(1 - i\frac{t}{\hbar}\hat{H})$$

από όπου προκύπτει αμέσως $\hat{H}\,\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}\,\hat{H}$, δηλαδή οι δύο ερμιτιανοί τελεστές, $\hat{H}$ και $\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{L}}$ μετατίθενται. Εφόσον αυτό ισχύει για άξονα περιστροφής γύρω από τυχαία διεύθυνση $\mathbf{e}$, θα ισχύει για κάθε συνιστώσα της στροφορμής $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$. Καταλήγουμε λοιπόν στη σχέση

$$\left[\hat{H}, \hat{L}_i\right] = 0, \quad i \in x,y,z \tag{249}$$

Αλλά αυτή η σχέση σημαίνει ότι η στροφορμή είναι διατηρούμενο μέγεθος (βλ. εδάφιο 5.1). Επομένως, καταλήγουμε στο ακόλουθο συμπέρασμα: *Σε ισοτροπικά συστήματα, και ειδικότερα στην περίπτωση κεντρικού δυναμικού, η στροφορμή είναι διατηρούμενο μέγεθος.*

11.2 Κινητική ενέργεια και στροφορμή

Στο εδάφιο (11.1) καταλήξαμε στη διατήρηση της στροφορμής υπό την προϋπόθεση ότι έχουμε ισοτροπικό σύστημα. Ένα κεντρικό δυναμικό είναι προφανώς ισοτροπικό, διότι εξαρτάται μόνο από την απόσταση από το κέντρο των αξόνων. Η κινητική ενέργεια είναι επίσης ισοτροπική, διότι εξαρτάται από το $\hat{p}^2 = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, το οποίο είναι εσωτερικό γινόμενο, επομένως μένει αναλλοίωτο σε στροφές στο χώρο.

Εδώ θα γράψουμε τον τελεστή της κινητικής ενέργειας σε άλλη μορφή, η οποία αναδεικνύει την εξάρτησή της από τη στροφορμή. Αυτό γίνεται σε αναλογία με την κλασική μηχανική, όπου χωρίζουμε το πρόβλημα του κεντρικού δυναμικού σε ακτινική και γωνιακή κίνηση, ορίζουμε την ακτινική συνιστώσα της ορμής, $p_r = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/r$ και γράφουμε την κινητική ενέργεια στη μορφή $\frac{1}{2m}(p_r^2 + \frac{1}{r^2}L^2)$, με L τη στροφορμή. Όμοια, εδώ ορίζουμε την ακτινική συνιστώσα της ορμής,

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{\mathbf{r}}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r}\right) \tag{250}$$

$$= -i\hbar \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r. \tag{251}$$

Η ποσότητα $\hat{\mathbf{r}}/r$ είναι ο τελεστής που αντιστοιχεί στο μοναδιαίο διάνυσμα στην ακτινική κατεύθυνση. Λόγω του ότι η ορμή και η θέση δεν μετατίθενται, τόσο ο πρώτος όσο και ο δεύτερος όρος του δεξιού μέλους της (250) δεν είναι ερμιτιανοί τελεστές, όμως ο συμμετροποιημένος τελεστής $\hat{p}_r$ είναι ερμιτιανός. Η μορφή (251) προκύπτει αν γράψουμε την (250) σε σφαιρικές συντεταγμένες, χρησιμοποιώντας την αντίστοιχη μορφή του ∇ που υπεισέρχεται στην ορμή. Η δράση του (251) σε κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r})$ δίνει $\hat{p}_r\Psi(r,\theta,\phi) = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\Psi(r,\theta,\phi)\right]$. Για την κινητική ενέργεια, που περιέχει το τετράγωνο της ορμής, θα χρειαστούμε τον τελεστή

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \tag{252}$$

με δράση $\hat{p}_r^2\,\Psi(r,\theta,\phi) = -\hbar^2\,\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[r\Psi(r,\theta,\phi)\right]$.[(101)]

Δεδομένου ότι $\hat{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2$, μπορούμε, με βάση τις εξ. (216) και (252) να γράψουμε

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{1}{r^2}\hat{L}^2. \tag{253}$$

Καταλήγουμε στην ακόλουθη έκφραση για τον τελεστή κινητικής ενέργειας:

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 \tag{254}$$

όπου ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους εξαρτάται μόνον από το r και ο δεύτερος μόνον από τις (θ, ϕ). Αυτό είναι το κβαντικό ανάλογο της κλασικής έκφρασης στην οποία αναφερθήκαμε στην αρχή του εδαφίου.

Η έκφραση (254) είναι καλά ορισμένη παντού εκτός από την αρχή των αξόνων, λόγω του όρου $1/r$ στο $\hat{p}_r^2$ και του $1/r^2$ που συνοδεύει το $\hat{L}^2$. Ως αποτέλεσμα, η δράση της σε κυματοσυνάρτηση (και ειδικότερα κατά την εύρεση ιδιοσυναρτήσεων της Χαμιλτονιανής) χρειάζεται έλεγχο στο όριο $r \to 0$.

(101) Σημειώνουμε ότι $\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$.

Συνεπεία της έκφρασης (254) και του γεγονότος ότι ο όρος $\hat{p}_r^2$ εξαρτάται μόνον από το r, ενώ η στροφορμή είναι ανεξάρτητη του r, καταλήγουμε στο συμπέρασμα

$$\left[\hat{T}, \hat{\mathbf{L}}\right] = \left[\hat{T}, \hat{L}^2\right] = 0. \tag{255}$$

το οποίο ειχαμε δικαιολογήσει στο εδάφιο 11.1 με βάση τη φυσική απαίτηση ισοτροπίας της κινητικής ενέργειας. Εάν η Χαμιλτονιανή περιέχει και κεντρικό δυναμικό, γράφεται

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 + V(r), \tag{256}$$

με αποτέλεσμα να μετατίθεται με κάθε συνιστώσα και με το τετράγωνο της στροφορμής:

$$\left[\hat{H}, \hat{L}^2\right] = \left[\hat{H}, \hat{L}_i\right] = 0, \quad i \in x, y, z. \tag{257}$$

11.3 Χωρισμός μεταβλητών και ακτινική εξίσωση

Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger για σωματίδιο σε κεντρικό δυναμικό γράφεται πλέον στη μορφή

$$(\hat{T} + \hat{V})\Psi(r,\theta,\phi) = \left[\frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 + V(r)\right]\Psi(r,\theta,\phi) = E\,\Psi(r,\theta,\phi). \tag{258}$$

Επιχειρούμε επίλυση με τη μέθοδο του διαχωρισμού μεταβλητών. Γράφοντας $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$, η εξίσωση ιδιοτιμών γίνεται

$$\left[\frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2}l(l+1)\hbar^2 + V(r)\right]R(r)Y_{lm}(\theta,\phi) = E\,R(r)Y_{lm}(\theta,\phi), \tag{259}$$

μια και ο τελεστής $\hat{L}^2$ δρα μόνο στη συνάρτηση $Y_{lm}(\theta,\phi)$, δίνοντας την ιδιοτιμή $l(l+1)\hbar^2$. Από την άλλη, ο τελεστής $\hat{p}_r^2$ δρα μόνο στην ακτινική συνάρτηση $R(r)$. Επομένως, η Y_{lm} απλοποιείται και λαμβάνουμε την *ακτινική εξίσωση* για την $R(r)$ εξαρτώμενη από την ιδιοτιμή l, η οποία υπεισέρχεται ως παράμετρος και με την οποία στο εξής δεικτοδοτούμε την ακτινική συνάρτηση, γράφοντας $R_l(r)$:

$$\left[\frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2}l(l+1)\hbar^2 + V(r)\right]R(r) = E\,R_l(r). \tag{260}$$

Αντικαθιστώντας την έκφραση (252) για το $\hat{p}_r^2$, πολλαπλασιάζοντας με r και θέτοντας

$$u_l(r) = rR_l(r), \tag{261}$$

λαμβάνουμε

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right]u_l(r) = E\,u_l(r). \tag{262}$$

Έχουμε λοιπόν μια εξίσωση για τη συνάρτηση $u_l(r)$, η οποία είναι φορμαλιστικά ίδια με τη μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger στο διάστημα $(0,\infty)$, εάν εκείνη είχε δυναμικό

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r). \tag{263}$$

Το $V_{\text{eff}}(r)$ καλείται *ενεργό δυναμικό*. Ο όρος $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$ είναι πάντα θετικός (ή μηδέν, για $l = 0$) και καλείται *φυγοκεντρικό δυναμικό*, κατ΄ αναλογία προς την κλασική μηχανική. Απλοποιούμε περαιτέρω τη μορφή της εξίσωσης, θέτοντας $k^2 = 2mE/\hbar^2$:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]u_l(r) = k^2\,u_l(r). \tag{264}$$

Διερεύνηση της ακτινικής συνάρτησης για $r \to 0$

Διερευνούμε τη συμπεριφορά της λύσης για $r \to 0$, διότι η διαφορική εξίσωση δεν ορίζεται μεν στο $r = 0$, όμως η κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη σε όλο το χώρο, μαζί με το $r = 0$. Κοντά στο $r = 0$, για τα δυναμικά που εξετάζουμε ($V(r) \sim 1/r$ ή $V(r) \to$ (σταθ.) για $r \to 0$), ο όρος του δυναμικού και ο όρος στο δεξιό μέλος γίνονται αμελητέοι σε σχέση με το φυγοκεντρικό δυναμικό (για $l > 0$). Έχουμε τότε

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l(r) = 0, \quad \text{για } r \to 0, \ l \geq 1. \tag{265}$$

Εάν υποθέσουμε ότι $u_l(r) \to r^s$, καθώς $r \to 0$, μπορούμε να βρούμε τη σταθερά s με αντικατάσταση στην παραπάνω εξίσωση και να καταλήξουμε $s(s-1) = l(l+1)$ με λύσεις $s = l+1$ και $s = -l$. Εξετάζουμε την τετραγωνική ολοκληρωσιμότητα των λύσεων. Το ολοκλήρωμα της $|\Psi|^2$ εντός μιας σφαίρας μικρής ακτίνας a κοντά στο μηδέν συμπεριφέρεται ως $\int d^3r\, |\Psi|^2 \sim \int_0^a dr\, r^2\, |R_l(r)|^2 = \int_0^a dr\, |u_l(r)|^2$. Διακρίνουμε τις δύο περιπτώσεις

- Αν $s = l+1$, τότε $\int_0^a dr\, |u_l(r)|^2 \sim \int_0^a dr\, r^{l+1} < \infty$, δηλαδή έχουμε τετραγωνική ολοκληρωσιμότητα.
- Αν $s = -l$, τότε $\int_0^a dr\, |u_l(r)|^2 \sim \int_0^a dr\, r^{-l} \to \infty$ (για $l \geq 1$), δηλαδή δεν έχουμε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση, επομένως η λύση απορρίπτεται.

Για $l = 0$, το φυγοκεντρικό δυναμικό μηδενίζεται. Αν $V(r) \to C =$ (σταθ.) για $r \to 0$, έχουμε

$$u_0''(r) + q^2 u_0(r) = 0, \quad r \to 0, \ l = 0, \tag{266}$$

όπου $q^2 = 2m(E-C)/\hbar^2$, με γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις $u_0 = \sin qr$ και $u_0 = \cos qr$, δηλαδή $R_0(r) = \sin qr/(qr) \sim r^0$ και $R_0(r) = \cos qr/(qr) \sim r^{-1}$. Από αυτές, η πρώτη είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη στο μηδέν, εφόσον τείνει σε μια σταθερά. Η δεύτερη είναι επίσης τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, διότι $\int d^2r |r^{-1}|^2 \sim \int_0^a dr\, r^2\, r^{-2} = \int_0^a dr < \infty$. Ωστόσο, η λύση r^{-1} δεν ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση του Schrödinger σε τρεις διαστάσεις στο ειδικό σημείο $r = 0$, διότι είναι γνωστό πως $\nabla^2 r^{-1} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$. Άρα και πάλι δεχόμαστε μόνο λύσεις της μορφής $u_0(r) \to r$, δηλαδή $R_0(r) \to r^0 =$ (σταθ.), για $r \to 0$.

Μια όμοια διερεύνηση για την περίπτωση $V(r) \sim 1/r$ και $l = 0$ δίνει $u_0(r) \sim r$ άρα $R_0(r) \sim r^0 =$ (σταθ.).

Συνοψίζοντας, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι, αν $V(r) \to$ (σταθ.) ή $V(r) \to C/r$ για $r \to 0$, τότε οι αποδεκτές λύσεις έχουν την ασυμπτωτική συμπεριφορά

$$u_l(r) \sim r^{l+1} \ \text{ και } \ R_l(r) \sim r^l, \quad r \to 0, \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{267}$$

Διερεύνηση της ακτινικής συνάρτησης για $r \to \infty$, αν $V(r) \to 0$

Διερευνούμε στη συνέχεια τη συμπεριφορά της λύσης ασυμπτωτικά, εάν το δυναμικό $V(r) \to 0$ για $r \to \infty$ (όπως είναι η περίπτωση του δυναμικού Coulomb ή του ελεύθερου σωματιδίου). Τότε η εξίσωση γράφεται $u_l''(r) + k^2 u_l(r) = 0$, που έχει ως γενική λύση

$$u_l(r) = k^{-1}(A \sin kr + B \cos kr) \ \text{ και } \ R_l(r) = A\frac{\sin kr}{kr} + B\frac{\cos kr}{kr}, \quad r \to \infty, \tag{268}$$

όπου η σταθερά k^{-1} τέθηκε για διευκόλυνση αργότερα (θα μπορούσε να απορροφηθεί στα A και B).

11.4 Η λύση για το ελεύθερο σωματίδιο

Η απλούστερη εφαρμογή των παραπάνω συμπερασμάτων γίνεται στην περίπτωση του ελεύθερου σωματιδίου, $V(r) = 0$. Η εξίσωση (264) γράφεται

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l(r) = k^2\, u_l(r). \tag{269}$$

Ειδικά για $l = 0$, έχουμε $u_0''(r) + k^2 u_0(r) = 0$ με γενική λύση την (268) σε όλο το διάστημα $(0, \infty)$. Εδώ, η συνοριακή συνθήκη (267) επιβάλλει να δεχτούμε μόνο τον όρο $A \sin kr/(kr)$, διότι συγκλίνει στο $r \to 0$ ($\sin kr/(kr) \to 1$), ενώ η λύση $B \cos kr/(kr)$ αποκλίνει ως $B/(kr)$ για $r \to 0$ και απορρίπτεται (δηλ. πρέπει $B = 0$).

Στη γενικότερη περίπτωση ($l \geq 0$), οι λύσεις $R_l(r) = u_l(r)/r$ που συγκλίνουν στο μηδέν (ικανοποιούν την 267) ονομάζονται *σφαιρικές συναρτήσεις Bessel* και παράγονται από τη σχέση[102]

$$R_l(r) = j_l(kr) = (-1)^l (kr)^l \left(\frac{1}{kr}\frac{d}{d(kr)}\right)^l \left(\frac{\sin kr}{kr}\right). \tag{270}$$

Οι λύσεις εξαρτώνται από το γινόμενο kr, διότι αν διαιρεθούν τα δύο μέλη της εξ. (269) με k^2, και κάνουμε την αλλαγή μεταβλητής $\rho = kr$, $k^{-2}\partial^2/\partial r^2 = \partial^2/\partial\rho^2$, προκύπτει $[-\partial^2/\partial\rho^2 + l(l+1)/\rho^2]\, u_l = u_l$, δηλαδή εξάρτηση της u_l μόνο από το γινόμενο $\rho = kr$.

Οι πρώτες μερικές συναρτήσεις Bessel είναι

$$\begin{aligned} j_0(kr) &= \frac{\sin kr}{kr} \\ j_1(kr) &= \frac{\sin kr}{(kr)^2} - \frac{\cos kr}{kr} \\ j_2(kr) &= = \left(\frac{3}{(kr)^2} - \frac{1}{kr}\right)\sin kr - \frac{3}{(kr)^2}\cos kr \end{aligned} \tag{271}$$

Εξέταση των παραπάνω συναρτήσεων επιβεβαιώνει τη συμπεριφορά $j_l(kr) \sim (kr)^l$ στο όριο $kr \to 0$. Πρόκειται για σφαιρικά κύματα μήκους κύματος $2\pi/k$.

Οι λύσεις του ελεύθερου σωματιδίου στην αναπαράσταση σφαιρικών κυμάτων, δηλαδή οι λύσεις σε σφαιρικές συντεταγμένες που είδαμε στο παρόν εδάφιο, πρέπει να συνδέονται με τις λύσεις επιπέδων κυμάτων που βρίσκουμε σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Η σύνδεση γίνεται μέσω της ταυτότητας

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} i^l\, j_l(kr)\, Y^*_{lm}(\mathbf{k})\, Y_{lm}(\mathbf{r}), \tag{272}$$

όπου υπονοείται πως λαμβάνονται η πολική και η αζιμουθιακή γωνία, θ, ϕ, του διανύσματος στο όρισμα των σφαιρικών αρμονικών.

11.5 Λύσεις δέσμιων καταστάσεων για το άτομο του Υδρογόνου

Το άτομο του Υδρογόνου χαρακτηρίζεται από το ελκτικό δυναμικό Coulomb

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}, \tag{273}$$

[102] Βλ. π.χ. S. Gasiorowicz, *Κβαντική Φυσική*, εκδόσεις Κλειδάριθμος (2015), κεφ. 8.

όπου e το φορτίο του ηλεκτρονίου.[103][104] Δεδομένου ότι $V(r) < 0$ και $V(r) \to 0$ για $r \to \infty$, αναμένουμε ότι οι λύσεις αρνητικής ενέργειας θα αφορούν το άτομο του Υδρογόνου, δηλαδή ηλεκτρόνιο δεσμευμένο στο δυναμικό του πυρήνα, ενώ οι λύσεις θετικής ενέργειας θα αφορούν το σύστημα ηλεκτρονίου και πρωτονίου που αλληλεπιδρούν μεν αλλά τελικά απομακρύνονται μεταξύ τους, δηλαδή επί της ουσίας δεν αποτελούν άτομο Υδρογόνου. Αναζητούμε επομένως τις λύσεις της εξ. (262) για $E < 0$. Θέτουμε για συντομία

$$\kappa^2 = \frac{2m(-E)}{\hbar^2} > 0. \tag{274}$$

Τότε, η ακτινική εξίσωση παίρνει τη μορφή (264), με $-\kappa^2$ στη θέση του k^2:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^2}{r}\right] u_l(r) = -\kappa^2\, u_l(r). \tag{275}$$

Ορίζουμε επίσης την ακτίνα Bohr,[105]

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,529\text{Å}. \tag{276}$$

Διευκολυνόμαστε ορίζοντας τη νέα, αδιάστατη μεταβλητή

$$\rho = 2\kappa r, \tag{277}$$

οπότε η ακτινική εξίσωση γράφεται στην αδιάστατη μορφή

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{1}{\kappa a_0}\frac{1}{\rho} - \frac{1}{4}\right] u_l = 0. \tag{278}$$

Η ιδιοτιμή της ενέργειας περιέχεται στη σταθερά κ.

Ασυμπτωτικά στο μηδέν, ξέρουμε ήδη από το εδάφιο 11.3 ότι $u_l(\rho) \sim \rho^{l+1}$. Ασυμπτωτικά στο $\rho \to \infty$, οι όροι ανάλογοι του $1/\rho^2$ και $1/\rho$ μηδενίζονται, οπότε έχουμε $u_l'' - \frac{1}{4}u_l = 0$, η οποία έχει λύσεις τις $u_l \sim e^{\pm\rho/2}$. Από αυτές, μόνον η $u_l \sim e^{-\rho/2}$ είναι αποδεκτή, διότι η $u_l \sim e^{+\rho/2}$ οδηγεί σε μη τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση. Γράφουμε λοιπόν τη λύση u_l ως γινόμενο τριών συναρτήσεων,

$$u_l(\rho) = \rho^{l+1}\, e^{-\rho/2}\, v_l(\rho), \tag{279}$$

όπου $v_l(\rho)$ άγνωστη συνάρτηση προς προσδιορισμό. Αντικαθιστώντας στην (278) λαμβάνουμε την ακόλουθη εξίσωση για τη v_l:

$$\left[\rho\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + (2l+2-\rho)\frac{\partial}{\partial \rho} - \left(l + 1 - \frac{1}{\kappa a_0}\right)\right] v_l(\rho) = 0. \tag{280}$$

---

[103] Για υδρογονοειδή ιόντα ατομικού αριθμού Z, π.χ. το He^+ με $Z = 2$ ή το Li^{2+} με $Z = 3$, το δυναμικό γίνεται $-Ze^2/r$ και η επίλυση είναι ουσιαστικά ίδια.

[104] Εδώ χρησιμοποιήθηκε το σύστημα μονάδων Gauss, στο οποίο το e^2 έχει μονάδες [ενέργεια]×[μήκος]. Στο SI έχουμε $V(r) = -e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$, με ε_0 την ηλεκτρική διαπερατότητα του κενού.

[105] Στο σύστημα SI, η ακτίνα Bohr είναι $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(me^2)$.

Επιχειρούμε ανάπτυγμα της λύσης σε σειρά:

$$v_l(\rho)=\sum_{j=0}^{\infty} b_j\,\rho^j \quad v_l'(\rho)=\sum_{j=1}^{\infty} b_j\,j\,\rho^{j-1} \quad v_l''(\rho)=\sum_{j=2}^{\infty} b_j\,j(j-1)\,\rho^{j-2}$$

Αντικαθιστώντας στην (280) και εξισώνοντας τους συντελεστές ομοβάθμιων όρων, καταλήγουμε στην αναδρομική σχέση

$$b_{j+1}=\frac{l+j+1-(\kappa a_0)^{-1}}{(2l+2+j)(j+1)}\;b_j. \tag{281}$$

Για μεγάλες τιμές του j ($j\gg l$, $j\gg(\kappa a_0)^{-1}$) η σχέση δίνει $b_{j+1}/b_j\approx 1/(j+1)$, δηλαδή $b_j\sim 1/j!$, ως ασυμπτωτική συμπεριφορά. Αλλά τότε, ασυμπτωτικά, $v_l(\rho)\sim\sum_j \rho^j/j!=e^\rho$. Αυτό σημαίνει ότι $u_l(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho/2}v_l(\rho)\sim e^{+\rho/2}$, οπότε η u_l θα προέκυπτε μη κανονικοποιήσιμη. Εξαίρεση αποτελεί η περίπτωση τερματισμού της σειράς σε κάποιο j, δηλαδή εκείνες οι τιμές του κ για τις οποίες συμβαίνει να μηδενίζεται ο αριθμητής της (281) για κάποια τιμή $j=n'$. Τότε, η σειρά είναι ένα πολυώνυμο βαθμού n':

$$v_l(\rho)=\sum_{j=0}^{n'} b_j\,\rho^j,\quad \text{για}\quad (\kappa a_0)^{-1}=l+n'+1. \tag{282}$$

Αυτή είναι η συνθήκη κβάντωσης, δηλαδή, η συνθήκη που καθορίζει τις φυσικά αποδεκτές, διακριτές τιμές του κ και επομένως της ενέργειας. Βάσει της (274), η συνθήκη γράφεται:

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2=-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\frac{1}{(l+n'+1)},\quad n'=0,1,2,\ldots \tag{283}$$

Ο ακέραιος $n=l+n'+1$ που εμφανίζεται στον παρονομαστή είναι κοινός για όλους τους συνδυασμούς των ακέραιων $l\geq 0$, $n'\geq 0$ που δίνουν άθροισμα θετικό ακέραιο. Αυτό σημαίνει εκφυλισμό ως προς τα l: στην ίδια τιμή ενέργειας, δεδομένης από τον ακέραιο δείκτη $n\geq 1$, αντιστοιχούν όλες οι τιμές $l=0,1,2,\ldots,n-1$. Επίσης υπάρχει εκφυλισμός ως προς τις δυνατές τιμές του $m_l=-l,\ldots,+l$.[106] Λαμβάνοντας υπ΄ όψη τον ορισμό του a_0, οι ιδιοτιμές της ενέργειας γράφονται

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{1}{2}\frac{e^2}{a_0}\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,3,\ldots,\quad l=0,1,2,\ldots n-1,\quad m_l=-l,\ldots,l \tag{284}$$

Ο εκφυλισμός της ενέργειας E_n είναι

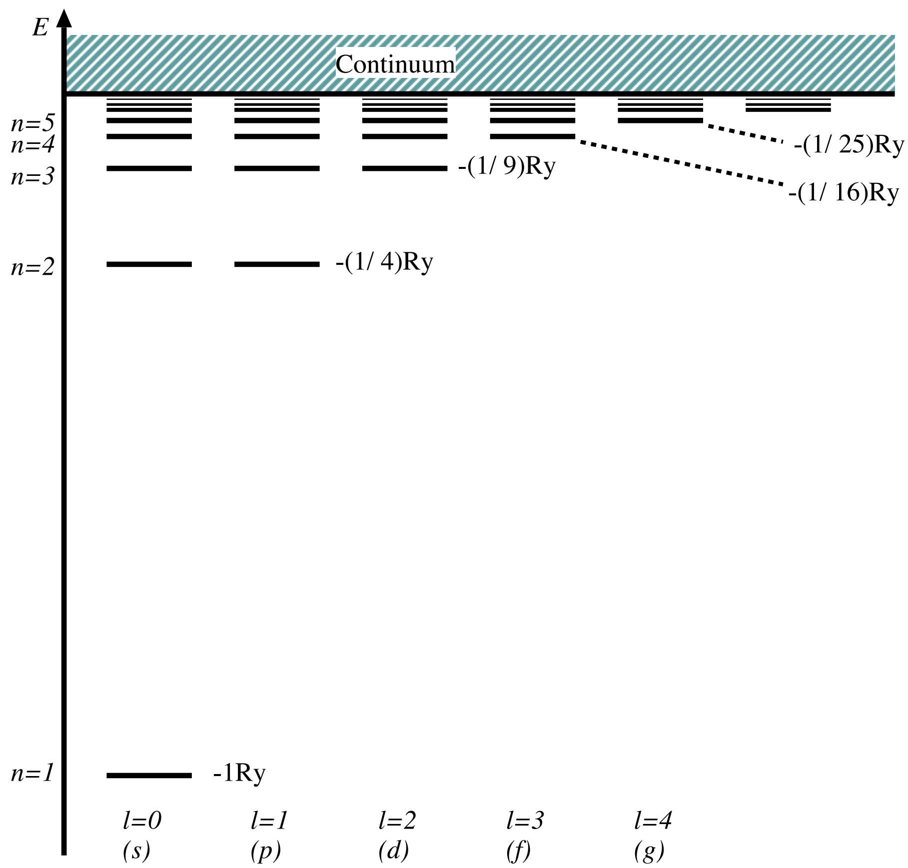
$$\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l}1=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2. \tag{285}$$

Ο ακέραιος n ονομάζεται *κύριος κβαντικός αριθμός*. Η θεμελιώδης στάθμη είναι η

$$E_1=-\frac{1}{2}\frac{e^2}{a_0}=-1\mathrm{Ry}\approx -13{,}6\,\mathrm{eV} \tag{286}$$

και είναι μη εκφυλισμένη.

[106] Ο κβαντικός αριθμός της ιδιοτιμής του $\hat{L}_z$ συμβολίζεται εδώ με m_l, για να διαφοροποιηθεί από τη μάζα m.



Σχήμα 6: Αναπαράσταση του ενεργειακού φάσματος του ατόμου του Υδρογόνου. Παρουσιάζονται οι ιδιοτιμές της ενέργειας E_n σε σχέση με τον κύριο κβαντικό αριθμό $n = 1, 2, 3, \ldots$ και τον δευτερεύοντα κβαντικό αριθμό της στροφορμής $l = 0, 1, 2, \ldots$. Για κάθε ζεύγος (n, l) υπάρχει εκφυλισμός τάξης $(2l + 1)$ λόγω του μαγνητικού κβαντικού αριθμού m. Η θεμελιώδης στάθμη είναι η $E_1 = -1\mathrm{Ry} \approx -13{,}6\,\mathrm{eV}$. Για $E > 0$ έχουμε το συνεχές ενεργειακό φάσμα των καταστάσεων εκέδασης.

Οι ακτινικές ιδιοσυναρτήσεις των δέσμιων καταστάσεων δίνονται από την (279), με τους συντελεστές του πολυώνυμου $v_l(\rho)$ να ικανοποιούν την αναδρομική σχέση (281) και τη συνθήκη τερματισμού (282). Δεδομένου ότι $n = l + n' + 1$, η συνθήκη γράφεται ισοδύναμα

$$v_l(\rho) = \sum_{j=0}^{n-l-1} b_j\, \rho^j, \quad \text{για} \quad (\kappa a_0)^{-1} = n = 1, 2, 3, \ldots \tag{287}$$

Τα πολυώνυμα $v_l(\rho)$ ονομάζονται *συναφή πολυώνυμα Laguerre* και, για δεδομένο n, λαμβάνουν τη μορφή[107]

$$v_l(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) = \sum_{j=0}^{n-l-1} (-1)^j \frac{(n-l-1)!\,(2l+1)!}{(n-l-1-j)!\,(2l+1+j)!\,j!}\,\rho^j. \tag{288}$$

Η ακτινική συνάρτηση $u_l = rR_l$ έχει $n-l-1$ κόμβους για $r > 0$, ίδια τιμή με το βαθμό του πολυωνύμου v_l. (Υπάρχει και ένας επιπλέον μηδενισμός στο $r = 0$ λόγω του όρου r^{l+1}.)[108]

Η θεμελιώδης κατάσταση είναι η $\Psi_{1,0,0} = R_{1,0}Y_{00}$ (όπου η $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ δεν έχει εξάρτηση από τις γωνίες), με

$$R_{1,0} = 2(a_0)^{-3/2}\, e^{-r/a_0}, \tag{289}$$

όπου συμπεριλάβαμε και τη σταθερά κανονικοποίησης. Από αυτήν προκύπτουν οι μέσες τιμές σχετιζόμενες με την απόσταση r του ηλεκτρονίού από τον πυρήνα:

$$\begin{aligned}
\langle r \rangle_{1,0} &= \int_0^\infty dr r^2\, R_{1,0}^2(r)\, r = \frac{3}{2}\, a_0 \\
\langle r^2 \rangle_{1,0} &= 3\, a_0^2 \\
(\Delta r)^2 &= \langle r^2 \rangle_{1,0} - \langle r \rangle_{1,0}^2 = \frac{3}{4}\, a_0^2 \\
\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{1,0} &= \frac{1}{a_0}
\end{aligned} \tag{290}$$

Από την τελευταία έκφραση φαίνεται ότι η δυναμική ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης είναι, κατά μέση τιμή, ίδια με τη δυναμική ενέργεια κλασικού ηλεκτρονίου σε απόσταση a_0: $\langle V \rangle_{1,0} = -e^2/a_0$.

Κλείνοντας, σημειώνουμε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές ενέργειας υδρογονοειδών ατόμων, δηλαδή ιόντων με ατομικό αριθμό $Z > 1$ αλλά μόνον ένα ηλεκτρόνιο, δίνονται από τους ίδιους τύπους με την αντικατάσταση $e^2 \to Ze^2$ (η αντικατάσταση πρέπει να γίνει και στον ορισμό της ακτίνας Bohr a_0, εξ. (276)).

---

[107] Τα συναφή πολυώνυμα Laguerre δίνονται σε διαφορετικές, ισοδύναμες μορφές από διαφορετικούς συγγραφείς. Για τη μορφή που παρουσιάζεται εδώ, βλ. A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol. I, North Holland (1991).

[108] Η ακόλουθη ονοματολογία υιοθετείται στη φασματοσκοπία: οι κβαντικοί αριθμοί $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ συμβολίζονται με s, p, d, f, g, h, αντίστοιχα. Οι καταστάσεις με κβαντικούς αριθμούς (n, l) συμβολίζονται ως $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$, κλπ.

11.6 Το άτομο του Υδρογόνου ως σύστημα δύο κβαντικών σωματιδίων

Το άτομο του Υδρογόνου αντιμετωπίστηκε στο εδάφιο 11.5 ως ένα κβαντικό σωματίδιο (ηλεκτρόνιο) σε δυναμικό Coulomb. Αυτή είναι μια καλή προσέγγιση, μια και η μάζα του πυρήνα (μάζα πρωτονίου) είναι περίπου 1836 φορές μεγαλύτερη από τη μάζα του ηλεκτρονίου. Ωστόσο, στην πραγματικότητα πρόκειται για δύο κβαντικά σωματίδια σε αλληλεπίδραση. Εδώ, θα δούμε πώς μπορεί να γίνει ακριβέστερη αντιμετώπιση του προβλήματος, λαμβάνοντας υπόψη αυτό το γεγονός.

Ας θεωρήσουμε το σύστημα των δύο σωματιδίων, πυρήνα, με χωρικές συντεταγμένες θέσης $\mathbf{r}_\mathrm{N}$ και μάζα m_N, και ηλεκτρονίου, με χωρικές συντεταγμένες θέσης $\mathbf{r}_\mathrm{e}$ και μάζα m_e. Ο χώρος των καταστάσεων του συστήματος είναι εκείνος των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων κυματοσυναρτήσεων έξι μεταβλητών (τριών από την $\mathbf{r}_\mathrm{N}$ και τριών από την $\mathbf{r}_\mathrm{e}$):

$$\Psi(\mathbf{r}_\mathrm{N}, \mathbf{r}_\mathrm{e}) \in \mathbb{C}, \quad \text{με} \quad \int d^3 r_\mathrm{N} \int d^3 r_\mathrm{e} \, |\Psi(\mathbf{r}_\mathrm{N}, \mathbf{r}_\mathrm{e})|^2 = 1. \tag{291}$$

Το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται κατά γενίκευση της περίπτωσης του ενός σωματιδίου από τη σχέση

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int d^3 r_\mathrm{N} \int d^3 r_\mathrm{e} \Psi_1^*(\mathbf{r}_\mathrm{N}, \mathbf{r}_\mathrm{e}) \, \Psi_2(\mathbf{r}_\mathrm{N}, \mathbf{r}_\mathrm{e}) \tag{292}$$

Ο χώρος των καταστάσεων παράγεται από γινόμενα κυματοσυναρτήσεων ενός σωματιδίου. Δηλαδή, αν $\Psi_\mathrm{N}(\mathbf{r}_\mathrm{N})$ μια κυματοσυνάρτηση του πυρήνα εάν το ηλεκτρόνιο απουσιάζει, και $\Psi_\mathrm{e}(\mathbf{r}_\mathrm{e})$ μια κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου εάν ο πυρήνας απουσιάζει, τότε τα γινόμενα του τύπου

$$\Psi_\mathrm{prod}(\mathbf{r}_\mathrm{N}, \mathbf{r}_\mathrm{e}) = \Psi_\mathrm{N}(\mathbf{r}_\mathrm{N}) \Psi_\mathrm{e}(\mathbf{r}_\mathrm{e}) \tag{293}$$

είναι κυματοσυναρτήσεις του συστήματος των δύο σωματιδίων. Όμως, μπορεί κανείς να πάρει γραμμικούς συνδυασμούς, πεπερασμένων ή άπειρων σε αριθμό όρων, από κυματοσυναρτήσεις γινόμενα και να κατασκευάσει νέες κυματοσυναρτήσεις του συστήματος με τη μορφής

$$\Psi(\mathbf{r}_\mathrm{N}, \mathbf{r}_\mathrm{e}) = \sum_n a_n \Psi_{\mathrm{prod},n}(\mathbf{r}_\mathrm{N}, \mathbf{r}_\mathrm{e}) = \sum_{i,j} a_{ij} \Psi_{\mathrm{N},i}(\mathbf{r}_\mathrm{N}) \Psi_{\mathrm{e},j}(\mathbf{r}_\mathrm{e}) \tag{294}$$

οι οποίες δεν είναι παραγοντοποιήσιμες, δηλαδή δεν μπορούν γενικά να γραφούν ως ένα γινόμενο από δύο κυματοσυναρτήσεις, μία του πυρήνα και μία του ηλεκτρονίου. Ωστόσο, οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση του συστήματος δύο σωματιδίων, παραγοντοποιήσιμη ή μη, μπορεί να γραφεί ως τέτοιος γραμμικός συνδυασμός.

Η ορμή του πυρήνα και του ηλεκτρονίου δίνονται, αντίστοιχα, από τους τελεστές

$$\hat{\mathbf{p}}_\mathrm{N} = -i\hbar \nabla_N \quad \text{και} \quad \hat{\mathbf{p}}_\mathrm{e} = -i\hbar \nabla_e \tag{295}$$

όπου ∇_N ο τελεστής παραγώγισης ως προς τις συντεταγμένες του πυρήνα,

$$\nabla_\mathrm{N} = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x_\mathrm{N}} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y_\mathrm{N}} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z_\mathrm{N}}, \tag{296}$$

και όμοια ∇_e ο τελεστής παραγώγισης ως προς τις συντεταγμένες του ηλεκτρονίου.

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος δίνεται από την κινητική ενέργεια του κάθε σωματιδίου συν την ενέργεια αλληλεπίδρασης,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_{\mathrm{N}}}\hat{p}_{\mathrm{N}}^2 + \frac{1}{2m_{\mathrm{e}}}\hat{p}_{\mathrm{e}}^2 + V(|\mathbf{r}_{\mathrm{e}} - \mathbf{r}_{\mathrm{N}}|) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{N}}}\nabla_{\mathrm{N}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{e}}}\nabla_{\mathrm{e}}^2 + V(|\mathbf{r}_{\mathrm{e}} - \mathbf{r}_{\mathrm{N}}|). \end{aligned} \tag{297}$$

Στην τετριμμένη περίπτωση απουσίας αλληλεπίδρασης, $V(|\mathbf{r}_{\mathrm{e}} - \mathbf{r}_{\mathrm{N}}|) = 0$, η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger προσφέρεται για χωρισμό μεταβλητών, οπότε η ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{H}$ γράφονται στη μορφή (293):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{N}}}\nabla_{\mathrm{N}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{e}}}\nabla_{\mathrm{e}}^2\right)\Psi_{\mathrm{N}}(\mathbf{r}_{\mathrm{N}})\Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}}) = E\Psi_{\mathrm{N}}(\mathbf{r}_{\mathrm{N}})\Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}}) \tag{298}$$

η οποία ξαναγράφεται

$$-\frac{1}{\Psi_{\mathrm{N}}(\mathbf{r}_{\mathrm{N}})}\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{N}}}\nabla_{\mathrm{N}}^2\Psi_{\mathrm{N}}(\mathbf{r}_{\mathrm{N}}) - \frac{1}{\Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}})}\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{e}}}\nabla_{\mathrm{e}}^2\Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}}) = E \tag{299}$$

Ο μόνος τρόπος να είναι το άθροισμα των δύο όρων του αριστερού μέλους σταθερό (E) για κάθε τιμή των $\mathbf{r}_{\mathrm{N}}$ και $\mathbf{r}_{\mathrm{e}}$, είναι να είναι ο κάθε όρος ίσος με μια σταθερά. Άρα:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\Psi_{\mathrm{N}}(\mathbf{r}_{\mathrm{N}})}\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{N}}}\nabla_{\mathrm{N}}^2\Psi_{\mathrm{N}}(\mathbf{r}_{\mathrm{N}}) &= E_{\mathrm{N}} \\ -\frac{1}{\Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}})}\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{e}}}\nabla_{\mathrm{e}}^2\Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}}) &= E_{\mathrm{e}} \end{aligned} \tag{300}$$

με $E_{\mathrm{N}} + E_{\mathrm{e}} = E$. Η λύση αυτών των εξισώσεων είναι

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathrm{N}}(\mathbf{r}_{\mathrm{N}}) &= \exp(i\mathbf{k}_{\mathrm{N}} \cdot \mathbf{r}_{\mathrm{N}}) \\ \Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}}) &= \exp(i\mathbf{k}_{\mathrm{e}} \cdot \mathbf{r}_{\mathrm{e}}) \end{aligned} \tag{301}$$

υπό τις συνθήκες $\mathbf{k}_{\mathrm{N}}^2 = 2m_{\mathrm{N}}E_{\mathrm{N}}/\hbar^2$ και $\mathbf{k}_{\mathrm{e}}^2 = 2m_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}/\hbar^2$. Δηλαδή, απουσία δυναμικού αλληλεπίδρασης, οι ειδικές λύσεις είναι επίπεδα κύματα και η γεννική λύση είναι επαλληλία επιπέδων κυμάτων ίδιας ενέργειας.

Αν $V(|\mathbf{r}_{\mathrm{e}} - \mathbf{r}_{\mathrm{N}}|) \neq 0$, ο χωρισμός μεταβλητών του τύπου (293) δεν είναι δυνατός εν γένει. Όμως, χάρη στην εξάρτηση του δυναμικού από τη διαφορά $\mathbf{r}_{\mathrm{e}} - \mathbf{r}_{\mathrm{N}}$, το πρόβλημα προσφέρεται για ένα μετασχηματισμό σε νέο σύστημα συντεταγμένων, στο οποίο είναι δυνατός ο χωρισμός μεταβλητών. Το νέο σύστημα είναι οι συντεταγμένες κέντρου μάζας, $\mathbf{R}$, και σχετικής θέσης, $\mathbf{r}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{m_{\mathrm{N}}\,\mathbf{r}_{\mathrm{N}} + m_{\mathrm{e}}\,\mathbf{r}_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{N}} + m_{\mathrm{e}}} = \frac{m_{\mathrm{N}}}{M}\,\mathbf{r}_{\mathrm{N}} + \frac{m_{\mathrm{e}}}{M}\,\mathbf{r}_{\mathrm{e}} \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_{\mathrm{e}} - \mathbf{r}_{\mathrm{N}}. \end{aligned} \tag{302}$$

Ορίζουμε την ολική μάζα του συστήματος, M, και την ανηγμένη μάζα, (*reduced mass*) m, ως

$$\begin{aligned} M &= m_{\mathrm{N}} + m_{\mathrm{e}} \\ m &= \frac{m_{\mathrm{N}}\,m_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{N}} + m_{\mathrm{e}}}. \end{aligned} \tag{303}$$

Η ανηγμένη μάζα γράφεται και ως

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_\mathrm{N}} + \frac{1}{m_\mathrm{e}} \tag{304}$$

και, λόγω του ότι $m_\mathrm{N} \approx 1836\, m_\mathrm{e}$, είναι λίγο μικρότερη από τη μάζα του ηλεκτρονίου ($m \approx 0{,}99946\, m_\mathrm{e}$).

Ως προς τις νέες συντεταγμένες (302) ορίζονται οι αντίστοιχοι τελεστές παραγώγισης: ∇_CM ως προς τις συντεταγμένες κέντρου μάζας και και ∇ ως προς τις σχετικές συντεταγμένες. Μπορούμε να βρούμε τις αντίστοιχες εκφράσεις αν αντιστρέψουμε τις σχέσεις (302), εκφράζοντας τα $\mathbf{R}$ και $\mathbf{r}$ συναρτήσει των $\mathbf{r}_\mathrm{N}$ και $\mathbf{r}_\mathrm{e}$, και χρησιμοποιώντας τον κανόνα αλυσίδας στην παραγώγιση. Για την ν-οστή συνιστώσα του ∇_CM έχουμε

$$(\nabla_\mathrm{CM})_\nu = \frac{\partial}{\partial R_\nu} = \sum_{\nu'} \left[\frac{\partial r_{\mathrm{N},\nu'}}{\partial R_\nu} \frac{\partial}{\partial r_{\mathrm{N},\nu'}} + \frac{\partial r_{\mathrm{e},\nu'}}{\partial R_\nu} \frac{\partial}{\partial r_{\mathrm{e},\nu'}} \right]. \tag{305}$$

Για το ∇ έχουμε την ίδια σχέση, μόνο με το r_ν στη θέση του R_ν. Με βάση τους νέους τελεστές παραγώγισης, ορίζουμε τη συζυγή ορμή ως προς $\mathbf{R}$ και ως $\mathbf{r}$:

$$\hat{\mathbf{P}}_\mathrm{CM} = -i\hbar \nabla_\mathrm{CM} \;\text{ και }\; \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \tag{306}$$

Προκύπτει η ακόλουθη σχέση μεταξύ των τελεστών ορμής στις αρχικές και στις νέες συντεταγμένες:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}_\mathrm{CM} &= \hat{\mathbf{p}}_\mathrm{N} + \hat{\mathbf{p}}_\mathrm{e} \\ \hat{\mathbf{p}} &= \frac{m_\mathrm{N}\hat{\mathbf{p}}_\mathrm{e} - m_\mathrm{e}\hat{\mathbf{p}}_\mathrm{N}}{m_\mathrm{N} + m_\mathrm{e}} = \frac{m}{m_\mathrm{e}}\hat{\mathbf{p}}_\mathrm{e} - \frac{m}{m_\mathrm{N}}\hat{\mathbf{p}}_\mathrm{N} \end{aligned} \tag{307}$$

Δηλαδή, $\hat{\mathbf{P}}_\mathrm{CM}$ είναι η ολική ορμή του συστήματος και $\hat{\mathbf{p}}$ ένα σταθμισμένο άθροισμα ορμών των δύο σωματιδίων. Δεδομένου ότι $m \approx m_e$ και $m \ll m_N$, αναμένουμε η ορμή $\hat{\mathbf{p}}$ να είναι σχεδόν ίση με την ορμή του ηλεκτρονίου, σε σύστημα αναφοράς όπου το κέντρο μάζας είναι ακίνητο.

Από τον ορισμό (295) προκύπτουν οι σχέσεις μετάθεσης θέσης-ορμής για το ηλεκτρόνιο και τον πυρήνα:

$$[\hat{r}_{\mathrm{N},\mu}, \hat{p}_{\mathrm{N},\nu}] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \quad [\hat{r}_{\mathrm{e},\mu}, \hat{p}_{\mathrm{e},\nu}] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \tag{308}$$

και οι υπόλοιποι μεταθέτες μεταξύ θέσεων, μεταξύ ορμών, και μεταξύ τελεστών θέσης/ορμής του πυρήνα και τελεστών ορμής/θέσης του ηλεκτρονίου μηδενίζονται. Από αυτές τις σχέσεις μετάθεσης, μαζί με τον ορισμό (306) ή, εναλλακτικά, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (307) και εφαρμόζοντας κανόνες μεταθετών, καταλήγουμε στις σχέσεις μετάθεσης θέσης-ορμής για το σύστημα κέντρου μάζας και σχετικής κίνησης. Βρίσκουμε

$$\left[\hat{R}_\mu, \hat{P}_{\mathrm{CM},\nu}\right] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \quad [\hat{r}_\mu, \hat{p}_\nu] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \tag{309}$$

και οι υπόλοιποι μεταθέτες μεταξύ θέσεων, μεταξύ ορμών, και μεταξύ τελεστών θέσης/ορμής του συστήματος κέντρου μάζας και τελεστών ορμής/θέσης του συστήματος σχετικής κίνησης μηδενίζονται.

Προκύπτουν, επίσης, οι ακόλουθες σχέσεις

$$
\begin{aligned}
m_{\mathrm{N}}\, m_{\mathrm{e}} &= M\, m && (310)\\
\frac{1}{2m_{\mathrm{N}}}\hat{p}_{\mathrm{N}}^2 + \frac{1}{2m_{\mathrm{N}}}\hat{p}_{\mathrm{e}}^2 &= \frac{1}{2M}\hat{P}_{\mathrm{CM}}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 && (311)\\
\hat{\mathbf{L}}_{\mathrm{N}} + \hat{\mathbf{L}}_{\mathrm{e}} &= \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{l}}, && (312)
\end{aligned}
$$

όπου ορίσαμε τη στροφορμή για κάθε επιμέρους σύστημα (πυρήνα, ηλεκτρονίου, κέντρου μάζας και σχετικής κίνησης):

$$
\begin{aligned}
&\hat{\mathbf{L}}_{\mathrm{N}} = \mathbf{r}_{\mathrm{N}} \times \hat{\mathbf{p}}_{\mathrm{N}}, \qquad && \hat{\mathbf{L}}_{\mathrm{e}} = \mathbf{r}_{\mathrm{N}} \times \hat{\mathbf{p}}_{\mathrm{e}}\\
&\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}}_{\mathrm{CM}}, \qquad && \hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}. \qquad (313)
\end{aligned}
$$

Με βάση τα προηγούμενα, η Χαμιλτονιανή του συστήματος μετασχηματίζεται στις νέες μεταβλητές ως εξής:

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2m_{\mathrm{N}}}\hat{p}_{\mathrm{N}}^2 + \frac{1}{2m_{\mathrm{e}}}\hat{p}_{\mathrm{e}}^2 + V(|\mathbf{r}_{\mathrm{e}} - \mathbf{r}_{\mathrm{N}}|)\\
&= \frac{1}{2M}\hat{P}_{\mathrm{CM}}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(r). \qquad (314)
\end{aligned}
$$

Σε αυτή τη μορφή της Χαμιλτονιανής, η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger προσφέρεται για χωρισμό μεταβλητών ως προς τις νέες μεταβλητές, $\mathbf{R}$ και $\mathbf{r}$. Θέτοντας για την ιδιοσυνάρτηση της Χαμιλτονιανής

$$
\Psi(\mathbf{r}_{\mathrm{N}}, \mathbf{r}_{\mathrm{e}}) \to \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R})\, \phi(\mathbf{r}), \qquad (315)
$$

η εξίσωση ιδιοτιμών γράφεται

$$
\begin{aligned}
\hat{H}\Psi &= \left(\frac{1}{2M}\hat{P}_{\mathrm{CM}}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(r)\right)\Phi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r})\\
&= \phi(\mathbf{r})\frac{1}{2M}\hat{P}_{\mathrm{CM}}^2\Phi(\mathbf{R}) + \Phi(\mathbf{R})\frac{1}{2m}\hat{p}^2\phi(\mathbf{r}) + V(r)\phi(\mathbf{r})\\
&= E\, \Phi(\mathbf{R})\, \phi(\mathbf{r}). \qquad (316)
\end{aligned}
$$

Προκύπτουν λοιπόν δύο ανεξάρτητες εξισώσεις, μία για το σύστημα κέντρου μάζας και μία για τη σχετική κίνηση:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2M}\hat{P}_{\mathrm{CM}}^2\, \Phi(\mathbf{R}) &= E_{\mathrm{CM}}\, \Phi(\mathbf{R})\\
\frac{1}{2m}\hat{p}^2\, \phi(\mathbf{r}) + V(r)\phi(\mathbf{r}) &= E_{\mathrm{H}}\, \phi(\mathbf{r}) \qquad (317)
\end{aligned}
$$

με $E = E_{\mathrm{CM}} + E_{\mathrm{H}}$ την ολική ενέργεια. Η πρώτη των εξισώσεων έχει τις γνωστές λύσεις επίπεδων κυμάτων,

$$
\Phi(\mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}), \quad K^2 = 2ME_{\mathrm{CM}}/\hbar^2, \qquad (318)
$$

και αντιστοιχεί στην ελεύθερη κίνηση του ατόμου. Η δεύτερη εξίσωση είναι πανομοιότυπη με την εξίσωση σωματιδίου σε κεντρικό δυναμικό $V(r)$ και ισοδύναμη με την εξίσωση (258), με τη διαφορά ότι εδώ εμφανίζεται η ανηγμένη μάζα στη θέση της μάζας του σωματιδίου. Εάν το δυναμικό είναι αυτό του ατόμου του Υδρογόνου, τότε οι λύσεις της είναι πανομοιότυπες με αυτές που γράψαμε για το άτομο του Υδρογόνου, με την ανηγμένη μάζα να εμφανίζεται στη θέση της μάζας του ηλεκτρονίου. Από την εξ. (284) βλέπουμε πως οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι ευθέως ανάλογες της μάζας, επομένως τα φάσματα εκπομπής και απορρόφησης (διαφορά ενέργειας μεταξύ σταθμών) διαμορφώνονται αντίστοιχα. Ωστόσο, η μεταβολή είναι μικρή, δεδομένου ότι $m \approx 0{,}99946\, m_{\rm e}$. Στην περίπτωση του Δευτερίου (με ένα νετρόνιο και ένα πρωτόνιο στον πυρήνα, δηλαδή μάζα πυρήνα περίπου διπλάσια αυτής του ατόμου Υδρογόνου), η διαφορά είναι ακόμα μικρότερη: εκεί, $m \approx 0{,}99973\, m_{\rm e}$.

Ευρετήριο