Λυμένα προβλήματα Κβαντικής Μηχανικής Ι

Ιανουάριος 2025

1 Ακαριαία αλλαγή δυναμικού

Σωματίδιο βρίσκεται στη θεμελιώδη κατάσταση δυναμικού $V(x) = -g_1\delta(x)$, $g_1 > 0$. Τη στιγμή $t = 0$ το δυναμικό αλλάζει ακαριαία σε $W(x) = -g_2\delta(x)$, $g_2 > 0$.
α) Να βρεθεί η πιθανότητα μέτρησης ενέργειας $E < 0$ αμέσως μετά την αλλαγή του δυναμικού.
β) Να απαντηθεί το ερώτημα (α) για τυχαίο χρόνο $t > 0$.

Λύση
α) Πρώτα βρίσκουμε τη θεμελιώδη κατάσταση του δυναμικού. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, η λύση είναι γνωστή από τις διαλέξεις: η μοναδική δέσμια ιδιοκατάσταση της ενέργειας για το πρώτο δυναμικό είναι $\Psi = \sqrt{\gamma_1}e^{-\gamma_1|x|}$, $\gamma_1 = mg_1/\hbar^2$.
Η ακαριαία αλλαγή από V σε W δεν αλλάζει ακαριαία την κυματοσυνάρτηση. Επομένως, αμέσως μετά την αλλαγή, η πιθανότητα να μετρήσουμε $E < 0$ είναι η πιθανότητα μετάβασης από την Ψ στην αντίστοιχη του W (επίσης μοναδική) $\Phi = \sqrt{\gamma_2}e^{-\gamma_2|x|}$: $P = |(\Phi, \Psi)|^2 = \gamma_1\gamma_2|\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\gamma_1+\gamma_2)|x|}dx|^2$. Το ολοκληρωμα είναι στοιχειώδες και δίνει $P = 4\gamma_1\gamma_2/(\gamma_1 + \gamma_2)^2$. Για $\gamma_1 = \gamma_2$ ($W = V$) βρίσκουμε $P = 1$.

β) Γενικά μπορούμε να πούμε πως η ενέργεια είναι διατηρούμενο μέγεθος, επομένως η κατανομή πιθανότητας της ενέργειας και οι πιθανότητες μετάβασης οποιασδήποτε κατάστασης σε ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας δεν αλλάζουν με το χρόνο. Άρα, αναμένουμε ότι για οποιονδήποτε $t > 0$, το αποτέλεσμα παραμένει το ίδιο.

Για την απόδειξη, μπορούμε να παρατηρήσουμε πως η αρχική κατάσταση Ψ θα αναπτυχθεί σε ιδιοκαταστάσεις του δυναμικού W, ως $\Psi = \sum_n c_n\phi_n$. (Η άθροιση νοείται στις καταστάσεις τόσο του διακριτού όσο και του συνεχούς φάσματος της ενέργειας, δηλαδή μέρος της άθροισης στην πραγματικότητα είναι ολοκλήρωμα στις ενέργειες.) Μεταξύ των ϕ_n η κατάσταση χαμηλότερης ενέργειας είναι η ίδια η Φ από το (α), δηλ. $\phi_0 = \Phi$. Με το πέρασμα του χρόνου, η αρχική κατάσταση αλλάζει ως εξής:

$$\Psi(x,t) = \sum_n e^{-iE_n/\hbar} c_n \phi_n,$$

όπου E_n είναι οι ιδιοτιμές της ενέργειας που αντιστοιχούν στο δυναμικό W και $c_n = (\phi_n, \Psi)$. Σε χρόνο t, η πιθανότητα μετάβασης στην $\phi_0 = \Phi$ είναι

$$P = |(\phi_0, \Psi(t))|^2 = \left|\left(\phi_0, \sum_n e^{-iE_nt/\hbar} c_n \phi_n\right)\right|^2 = \left|\sum_n e^{-iE_nt/\hbar} c_n (\phi_0, \phi_n)\right|^2 = |c_0|^2,$$

όπου ο όρος $n = 0$ έδωσε $(\phi_0, \phi_0) = 1$ από κανονικοποίηση, όλοι οι άλλοι όροι του αθροίσματος ($n \neq 0$) μηδενίζονται από την ορθογωνιότητα, ενώ ο συντελεστής $|e^{-iE_0t/\hbar}|^2 = 1$. Μένει να υπολογίσουμε τον συντελεστή $|c_0|^2$, αλλά το έχουμε ήδη κάνει στο (α), διότι $c_0 = (\phi_0, \Psi_{t=0}) = (\Phi, \Psi_{t=0})$. Άρα $P = |(\Phi, \Psi_{t=0})|^2$, δηλαδή το αποτέλεσμα μένει σταθερό στο χρόνο.

2 Θεώρημα Virial και αρμονικός ταλαντωτής

α) Να δείξετε το θεώρημα Virial σε μία διάσταση:

$$\langle \hat{T} \rangle_n = \frac{1}{2} \left\langle x \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle_n$$

όπου η μέση τιμή λαμβάνεται σε τετραγωνικά ολοκληρώσιμη ιδιοκατάσταση Φ_n του δυναμικού $V(x)$.
β) Εφαρμόστε το (α) για να δείξετε ότι, στον αρμονικό ταλαντωτή, ισχύει $\langle \hat{T} \rangle_n = \langle \hat{V} \rangle_n = \frac{1}{2} E_n$, όπου E_n οι ιδιοτιμές της ενέργειας.
γ) Χρησιμοποιώντας το (β), βρείτε το γινόμενο αβεβαιότητας $(\Delta x)(\Delta p)$ στην κατάσταση Φ_n του αρμονικού ταλαντωτή.

Λύση
α) Η παρουσία του $\langle x\, \partial V/\partial x \rangle$ στο δεξιό μέλος υποδεικνύει να αναζητήσουμε τη μέση τιμή $\langle \hat{x}\hat{p} \rangle$. Αυτή από μόνη της δεν οδηγεί σε κάποια χρήσιμη εξίσωση για την απόδειξη. Ωστόσο, ο μεταθέτης του $\hat{x}\hat{p}$ με την $\hat{H}$ βοηθά, αφού το σύστημα είναι σε ιδιοκατάσταση. Προχωρούμε ως εξής. Για τετραγωνικά ολοκληρώσιμη ιδιοκατάσταση της ενέργειας Φ_n έχουμε

$$\begin{aligned}
\langle [\hat{H}, \hat{x}\hat{p}] \rangle_n &= \left(\Phi_n, \hat{H}\hat{x}\hat{p}\, \Phi_n \right) - \left(\Phi_n, \hat{x}\hat{p}\hat{H}\Phi_n \right) \\
&= \left(\hat{H}\Phi_n, \hat{x}\hat{p}\, \Phi_n \right) - \left(\Phi_n, \hat{x}\hat{p}E_n\Phi_n \right) \\
&= E_n \left(\Phi_n, \hat{x}\hat{p}\, \Phi_n \right) - E_n \left(\Phi_n, \hat{x}\hat{p}\Phi_n \right) \\
&= 0,
\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι ο τελεστής $\hat{H}$ είναι ερμιτιανός.

Από την άλλη, η Χαμιλτονιανή είναι $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(x)$. Έχουμε

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}] &= \hat{x}[\hat{H}, \hat{p}] + [\hat{H}, \hat{x}]\hat{p} \\
&= \hat{x}[\hat{V}, \hat{p}] + \frac{1}{2m}[\hat{p}^2, \hat{x}]\hat{p} \\
&= \hat{x} i\hbar V'(x) + \frac{1}{2m}(\hat{p}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{p}) \\
&= i\hbar x V'(x) - i\hbar \frac{1}{2m} 2\hat{p}^2 \\
&= i\hbar (x V'(x) - 2\hat{T}),
\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τον κανόνα μεταθετών $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$ και τη σχέση $[\hat{V}(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar V'(x)$. Άρα, $0 = \langle [\hat{H}, \hat{x}\hat{p}] \rangle_n = i\hbar \langle x V'(x) - 2\hat{T} \rangle_n$, απ΄ όπου προκύπτει η ζητούμενη σχέση.

β) Για τον αρμονικό ταλαντωτή, $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$, οπότε $xV'(x) = 2V(x)$. Άρα, από το ϑ. Virial, $\langle \hat{T} \rangle_n = \frac{1}{2} \langle x V'(x) \rangle_n = \langle \hat{V} \rangle_n$. Αλλά $E_n = \langle \hat{T} \rangle_n + \langle \hat{V} \rangle_n$. Άρα, $\langle \hat{T} \rangle_n = \langle \hat{V} \rangle_n = \frac{1}{2} E_n$.

γ) Οι ιδιοκαταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή είναι άρτιες ή περιττές, δηλαδή οι $|\Phi_n(x)|^2$ είναι άρτιες. Άρα, $\langle \hat{x} \rangle_n = 0$, οπότε $(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle_n = \langle \hat{V} \rangle_n / (\frac{1}{2} m\omega^2) = E_n/(m\omega^2)$ (από το (β)). Επίσης, σε μία διάσταση οι δέσμιες ιδιοκαταστάσεις μπορούν να γραφούν ως πραγματικές, άρα $\langle \hat{p} \rangle_n = 0$ από γνωστό ϑεώρημα, άρα $(\Delta p)^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle_n = 2m \langle \hat{T} \rangle_n = mE_n$. Καταλήγουμε: $(\Delta x)(\Delta p) = [E_n^2/\omega^2]^{1/2} = (n + \frac{1}{2})\hbar$, όπου λάβαμε υπ΄όψη ότι $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. Για τη ϑεμελιώδη $(n = 0)$, $(\Delta x)(\Delta p) = \frac{1}{2}\hbar$.

3 Τελεστής ομοτιμίας

α) Να δείξετε ότι, για τη δράση σε καταστάσεις Φ_n ($n = 0, 1, 2, \ldots$) του αρμονικού ταλαντωτή, ο τελεστής ομοτιμίας μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας και καραστροφής ως $\hat{P} = \exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})$.
β) Χρησιμοποιώντας το (α), να δείξετε ότι σε μία διάσταση, γενικά, ο τελεστής ομοτιμίας δίνεται από την παραπάνω έκφραση.

Λύση
α) Γνωρίζουμε από τη θεωρία πως οι συναρτήσεις του αρμονκού ταλαντωτή Φ_n, $n = 0, 1, 2, \ldots$, είναι άρτιες για άρτιο n και περιττές για περιττό n. Επίσης γνωρίζουμε πως $\hat{a}^\dagger \hat{a}\, \Phi_n = n\Phi_n$, που δίνει $(\hat{a}^\dagger \hat{a})^k\, \Phi_n = n^k\, \Phi_n$. Άρα,

$$\exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})\, \Phi_n = \sum_k \frac{1}{k!}(i\pi)^k (\hat{a}^\dagger \hat{a})^k\, \Phi_n = \sum_k \frac{1}{k!}(i\pi)^k (n)^k\, \Phi_n = e^{i\pi n}\, \Phi_n = (-1)^n\, \Phi_n.$$

Δηλαδή, $\exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})\, \Phi_n = +\Phi_n$, αν n άρτιος (άρτια Φ_n) και $\exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})\, \Phi_n = -\Phi_n$, αν n περιττός (περιττή Φ_n). Αλλά αυτή είναι ακριβώς η δράση του τελεστή ομοτιμίας σε άρτιες και περιττές συναρτήσεις.

β) Επειδή οι ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή αποτελούν βάση, οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση Ψ του χώρου Hilbert αναπτύσσεται σε αυτές. Γράφοντας την στη μορφή

$$\Psi(x) = \frac{1}{2}[\Psi(x) + \Psi(-x)] + \frac{1}{2}[\Psi(x) - \Psi(-x)] \equiv \Psi_+ + \Psi_-,$$

την χωρίζουμε στο άρτιο και το περιττό της μέρος. Το άρτιο μέρος αναπτύσσεται σε άρτιες ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή, $\Psi_+ = \sum_{n=0,2,4,\cdots} c_n \Phi_n$, ενώ το περιττό σε περιττές, $\Psi_- = \sum_{n=1,3,5,\cdots} c_n \Phi_n$. Από το (α), όλοι οι όροι του άρτιου αναπτύγματος μένουν αναλλοίωτοι υπό τη δράση του $\exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})$, άρα

$$\exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})\, \Psi_+(x) = \Psi_+(x) = \Psi_+(-x).$$

Όλοι οι όροι του περιττού αναπτύγματος αλλάζουν πρόσημο υπό τη δράση του $\exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})$, άρα:

$$\exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})\, \Psi_-(x) = -\Psi_-(x) = \Psi_-(-x).$$

Βάζοντας τα δύο αναπτύγματα μαζί, έχουμε

$$\begin{aligned}
\exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})\, \Psi(x) &= \exp(i\pi \hat{a}^\dagger \hat{a})\, [\Psi_+(x) + \Psi_-(x)] \\
&= \Psi_+(-x) + \Psi_-(-x) \\
&= \Psi(-x).
\end{aligned}$$

Δηλαδή, η δράση του $\exp(i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a})$ σε τυχαία Ψ ταυτίζεται με τη δράση του τελεστή ομοτιμίας.

4 Δυναμικό δ σε απειρόβαθο πηγάδι

Δίνεται απειρόβαθο πηγάδι στο διάστημα $[-L, L]$ και δυναμικό $-g\delta(x)$ εντός αυτού, $g > 0$. Να βρεθεί η οριακή τιμή του g ώστε να παρουσιάζεται δέσμια κατάσταση με $E < 0$. Ποια η μορφή της κυματοσυνάρτησης και ποια η συνθήκη για το g αν $E = 0$;

Λύση

Προφανώς η κυματοσυνάρτηση είναι μη μηδενική μόνο εντός του $(-L, L)$, ενώ υποχρεωτικά μηδενίζεται στα $\pm L$. Ουσιαστικά, έχουμε να λύσουμε το πρόβλημα του δυναμικού συνάρτησης δ, αλλά με μηδενισμό της κυματοσυνάρτησης στα $\pm L$, αντί για τα $\pm\infty$. Για $x < 0$ και $x > 0$, η εξ. ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής γράφεται $\frac{-\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x)$. Για $E < 0$, οι λύσεις είναι της μορφής $ae^{\gamma x} + be^{-\gamma x}$, $\gamma = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}$. Ο μόνος γραμμικός συνδυασμός των δύο εκθετικών που να μηδενίζεται στο $x = -L$ είναι ο $A\sinh[\gamma(x+L)]$, επομένως αναγκαστικά $\Psi(x) = A\sinh[\gamma(x+L)]$ για $x < 0$. Όμοια, ο μόνος γραμμικός συνδυασμός που να μηδενίζεται στο $x = +L$ είναι ο $B\sinh[\gamma(x-L)]$, επομένως αναγκαστικά $\Psi(x) = A\sinh[\gamma(x-L)]$ για $x > 0$. Επίσης, η Ψ πρέπει να είναι συνεχής στο μηδέν, οπότε $B = -A$. Άρα,

$$\Psi(x) = \begin{cases} A\sinh[\gamma(x+L)], & x < 0, \\ -A\sinh[\gamma(x-L)], & x > 0. \end{cases}$$

Η τιμή του γ προσδιορίζεται από την ασυνέχεια της πρώτης παραγώγου για τις ιδιοσυναρτήσεις σε δυναμικά δ, όπως είναι γνωστό από τη θεωρία:

$$\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\Psi(0).$$

Ο υπολογισμός των παραγώγων δίνει $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2}\tanh(\gamma L)$. Η λύση για $\gamma > 0$ ($E < 0$) μπορεί να βρεθεί γραφικά. Για να υπάρχει μη μηδενική λύση, πρέπει το δεξιό μέλος στο μηδέν να έχει κλίση μεγαλύτερη του αριστερού, δηλ. της μονάδας. Άρα, η συνθήκη για $E < 0$ δίνεται από την ανισότητα

$$1 < \frac{mg}{\hbar^2}\left.\frac{\partial\tanh(\gamma L)}{\partial\gamma}\right|_{\gamma=0}, \quad \text{δηλ.} \;\; g > \frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{L}.$$

Οριακά, αν $g = \frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{L}$, έχουμε $\gamma = 0$ και $E = 0$. Τότε, η εξ. ιδιοτιμών της ενέργειας γίνεται $\Psi''(x) = 0$, δηλαδή $\Psi = A(x+L)$ για $x < 0$ και $\Psi = -A(x-L)$ για $x > 0$, όπου λάβαμε υπ'όψη τις απαιτήσεις συνέχειας της συνάρτησης στο μηδέν και μηδενισμού στο $\pm L$.

5 Εύρεση δυναμικού (μία διάσταση)

Δίνεται η κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = Nx\exp(-\gamma|x|)$, $\gamma > 0$, $x \in (-\infty, \infty)$. Το N είναι συντελεστής κανονικοποίησης.
α) Να βρεθεί το N.
β) Να βρεθεί ένα δυναμικό για το οποίο είναι δέσμια ιδιοκατάσταση και η αντίστοιχη τιμή της ενέργειας. Είναι δυνατόν αυτή να μηδενίζεται;

Λύση
α) Η συνάρτηση είναι πρόδηλα περιττή, δηλαδή η $|\Psi|^2$ άρτια, άρα μπορούμε να γράψουμε: $1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 2\int_0^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 2N^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\gamma x} dx = \frac{N^2}{4\gamma^3}$, απ΄όπου $N = 2\sqrt{\gamma^3}$ (το ολοκλήρωμα υπολογίζεται με διπλή ολοκλήρωση κατά παράγοντες, ή εφαρμόζοντας την ταυτότητα $\int_0^{\infty} y^n e^{-y} dy = n!$).

β) Από τη χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger (εξίσωση ιδιοτιμών της ενέργειας), $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$, βρίσκουμε $V(x) - E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Psi''(x)}{\Psi(x)}$. Επομένως μπορούμε να υπολογίσουμε το δυναμικό και την ιδιοτιμή της ενέργειας με αυθαιρεσία μιας προσθετικής σταθεράς, ίδιας και για τα δύο. Έτσι εκφράζεται το γεγονός ότι έχουμε την ελευθερία πρόσθεσης μιας σταθεράς στο δυναμικό χωρίς να αλλάξουν οι προβλέψεις της θεωρίας.
Ο υπολογισμός της Ψ''/Ψ διευκολύνεται παρτηρώντας ότι η Ψ είναι περιττή, άρα η παράγωγος θα είναι άρτια, και άρα η δεύτερη παράγωγος περιττή. Συνεπώς η Ψ''/Ψ είναι άρτια. Επομένως, αρκεί να γίνουν οι πράξεις για $x > 0$: $\Psi''(x) = N(\gamma^2 x - 2\gamma)e^{-2\gamma x}$ και $\Psi''/\Psi = -2\gamma/x + \gamma^2$. Άρα, επεκτείνοντας πλέον και στα $x < 0$:

$$V(x) - E = -\frac{\hbar^2\gamma}{m}\frac{1}{|x|} + \frac{\hbar^2\gamma^2}{2m}.$$

Από εδώ και πέρα, λόγω της αυθαιρεσίας στη σταθερά του δυναμικού και της ενέργειας, μπορούμε να θέσουμε π.χ.

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\gamma}{m}\frac{1}{|x|} \quad \text{και} \quad E = -\frac{\hbar^2\gamma^2}{2m},$$

ή, π.χ.,

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\gamma}{m}\frac{1}{|x|} + \frac{\hbar^2\gamma^2}{2m} \quad \text{και} \quad E = 0.$$

6 Παραβολική προσέγγιση δυναμικού

Άτομο μάζας m προσροφημένο (δηλ. δεσμευμένο) στην επιφάνεια υλικού υπακούει στο δυναμικό

$$W(x) = c_0(e^{-2bx} - e^{-bx}).$$

όπου $c_0 > 0$ γνωστή σταθερά και $b \in \mathbb{R}$ άγνωστη παράμετρος. Μετρήσεις της ενέργειας των δέσμιων καταστάσεων δίνουν τις χαμηλότερες ενέργειες E_0, E_1, E_2, E_3 με $E_n - E_{n-1} = \Delta$, όπου $\Delta \ll c_0$ σταθερά ανεξάρτητη του n. Να συναχθεί η τιμή του b. Γιατί πρέπει να ισχύει η υπόθεση $\Delta \ll c_0$;

Λύση

Δεδομένου ότι οι μετρημένες ιδιοτιμές της ενέργειας ισαπέχουν, προσεγγίζουμε το πρόβλημα με το δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2(x-x_0)^2 + V_0$, όπου η συχνότητα ω προκύπτει από τις μετρήσεις: $E_{n+1} - E_n = \Delta = \hbar\omega$. Οι παράμετροι x_0 και V_0 είναι άγνωστες. Αναπτύσσοντας το δυναμικό γύρω από το ελάχιστο, $W(x) = W(x_0) + \frac{1}{2}W''(x_0)(x-x_0)^2$ (ο γραμμικός όρος δεν εμφανίζεται, διότι στο ελάχιστο έχουμε $W'(x_0) = 0$), έχουμε αμέσως $W''(x_0) = m\omega^2 = m(\Delta/\hbar)^2$.

Υπολογίζουμε $W'(x_0) = c_0 b(-2e^{-2bx_0} + e^{-bx_0})$, $W''(x_0) = c_0 b^2(4e^{-2bx_0} - e^{-bx_0})$. Από την πρώτη, και την απαίτηση $W'(x_0) = 0$, λαμβάνουμε $2e^{-2bx_0} = e^{-bx_0}$, δηλαδή $bx_0 = \ln 2$. Αντικαθιστώντας αυτό στη δεύτερη, βρίσκουμε $W''(x_0) = \frac{1}{2}c_0 b^2$. Έχοντας προσδιορίσει πιο πάνω ότι $W''(x_0) = m(\Delta/\hbar)^2$, καταλήγουμε $b = \sqrt{2m/c_0}\,\Delta/\hbar$.

Η υπόθεση $\Delta \ll c_0$ πρέπει να ισχύει, ώστε η προσέγγιση παραβολικού δυναμικού να είναι επαρκής, τουλάχιστον για τις πρώτες μερικές ιδιοκαταστάσεις. Το δυναμικό μηδενίζεται ασυμπτωτικά στο $+\infty$, ενώ το ελάχιστο του δυναμικού είναι $V(x_0) = -\frac{1}{4}w_0$. Δηλαδή είναι παραβολικό μόνο κοντά στο x_0. Οι ενέργειες $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ που βρίσκονται κοντά στην προσέγγιση αρμονικού ταλαντωτή πρέπει να είναι βαθιά στο δυναμικό, δηλαδή $\Delta = \hbar\omega \ll V(\infty) - V(x_0)$. Συμπεραίνουμε πως πρέπει $\Delta \ll c_0$. Αν αυτό δεν ισχύει, τότε η προσέγγιση αρμονικού ταλαντωτή είναι ανεπαρκής.

7 Σκέδαση σε σκαλοπάτι δυναμικού με συνάρτηση δ

Θεωρήστε δυναμικό της μορφής $V(x) = V_0\,\theta(x) + g\delta(x)$, $V_0 > 0$. Σωματίδιο ενέργειας $E > 0$ προσπίπτει από αριστερά. Να βρεθεί η πιθανότητα ανάκλασης και η πιθανότητα διέλευσης.

Λύση

Η πιθανότητας διέλευσης είναι $|J_t/J_{in}|$ και ανάκλασης $|J_r/J_{in}|$, όπου J_{in} το ρεύμα πιθανότητας της εισερχόμενης δέσμης, J_t εκείνο της διερχόμενης, και J_r εκείνο της ανακλώμενης, όλα για ενέργεια E.

Η ιδιοσυνάρτηση της Χαμιλτονιανής ικανοποιεί τη χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger, $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$. Το δυναμικό $V(x)$ είναι σταθερό $V(x) = 0$, για $x < 0$, και $V(x) = V_0$, για $x > 0$. Στο $x = 0$, λόγω της συνάρτησης δ, θα πρέπει να εφαρμόσουμε τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας της Ψ και ασυνέχειας της Ψ', γνωστές από τη θεωρία. Έχουμε $\Psi''(x) + q^2\Psi(x) = 0$, για $x < 0$, και $\Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0$, για $x > 0$, με $q^2 = 2mE/\hbar^2$, $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Δεδομένου ότι $V = 0$ για $x < 0$, τα σωματίδια που προσπίπτουν από τα $x < 0$ πρέπει να έχουν $E > 0$. Άρα, $q^2 > 0$ και $q \in \mathbb{R}$. Για το k πρέπει να ξεχωρίσουμε τις περιπτώσεις $E > V_0$, οπότε $k^2 > 0$ και $k \in \mathbb{R}$, και $E < V_0$, οπότε $k^2 < 0$ και $ik \in \mathbb{R}$. Στην τελευταία περίπτωση θέτουμε για ευκολία $ik = -\gamma \in \mathbb{R}$. Η λύση για πρόσπτωση από αριστερά είναι λοιπόν:

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{iqx} + re^{-iqx}, & x < 0 \\ te^{ikx}, & x > 0 \end{cases}, \quad E > V_0,$$

και το ίδιο με $-\gamma$ στη θέση του ik για $E < V_0$. Λόγω της πρόσπτωσης από αριστερά, έχουμε $q > 0$, $k > 0$. Για να μην απειρίζεται η κυματοσυνάρτηση στο $+\infty$, έχουμε $\gamma > 0$.

Το ρεύμα πιθανότητας δίνεται από τον τύπο

$$J(x) = \frac{1}{m}\mathrm{Re}[\Psi^*(x)\hat{p}\Psi(x)] = -\frac{i\hbar}{2m}[\Psi(x)^*\Psi'(x) - (\Psi'(x))^*\Psi(x)].$$

Εφαρμόζοντας τον τύπο για την προσπίπτουσα δέσμη, e^{iqx}, βρίσκουμε $J_{in} = \hbar q/m$. Για την ανακλώμενη, re^{-iqx}, βρίσκουμε $J_r = -|r|^2\hbar q/m$. Για τη διερχόμενη, te^{-ikx}, βρίσκουμε $J_t = |t|^2\hbar k/m$, για $E < V_0$, και $J_t = 0$, για $E < V_0$. Ο μηδενισμός του ρεύματος διέλευσης για $E < V_0$ προέρχεται από τη μορφή της κυματοσυνάρτησης $te^{-\gamma x}$ για $x > 0$, η οποία δεν έχει μιγαδική φάση μεταβαλλόμενη με το x.

Μένει ο υπολογισμός των r και t. Η απαίτηση συνάχειας $\Psi(0^-) = \Psi(0^+)$ δίνει $1+r = t$. Η συνθήκη ασυνέχειας της παραγώγου,

$$\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\Psi(0),$$

δίνει $ikt - iq(1-r) = -(2mg/\hbar^2)t$ (με το $-\gamma$ στη θέση του ik για $E < V_0$). Λύνοντας το σύστημα των δύο εξισώσεων, βρίσκουμε:

$$r = \frac{iq - ik - \frac{2mg}{\hbar^2}}{iq + ik + \frac{2mg}{\hbar^2}}, \quad t = \frac{2iq}{iq + ik + \frac{2mg}{\hbar^2}}$$

(με $-\gamma$ στη θέση του ik για $E < V_0$) και

$$|r|^2 = \frac{\left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^2 + (q-k)^2}{\left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^2 + (q+k)^2}, \quad |t|^2 = \frac{4q^2}{\left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^2 + (q+k)^2}, \quad \text{για} \;\; E > V_0,$$

$$|r|^2 = 1, \quad \text{για} \;\; E < V_0.$$

(Το $|t|^2$ δεν παίζει ρόλο για $E < V_0$, διότι το ρεύμα διέλευσης μηδενίζεται.) Επομένως, η πιθανότητες ανάκλασης και διέλευσης είναι:

- $E > V_0$:

$$\left|\frac{J_r}{J_{in}}\right| = |r|^2, \qquad \left|\frac{J_t}{J_{in}}\right| = |t|^2\frac{k}{q}$$

- $E < V_0$:

$$\left|\frac{J_r}{J_{in}}\right| = 1, \qquad \left|\frac{J_t}{J_{in}}\right| = 0.$$

Εύκολα επαληθεύει κανείς πως $|J_r/J_{in}| + |J_t/J_{in}| = 1$

8 Μέση τιμή ορμής

α) Για τετραγωνινά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση $f(x) \in \mathbb{R}$, δείξτε ότι $\langle \hat{p} \rangle_f = 0$.
β) Για τετραγωνινά ολοκληρώσιμη κυματοσυνάρτηση κυματοσυνάρτηση της μορφής $\Psi(x) = e^{ikx} f(x)$, με $f(x) \in \mathbb{R}$ και $k \in \mathbb{R}$, δείξτε ότι $\langle \hat{p} \rangle_\Psi = \hbar k$.

Λύση
α) Έχουμε

$$\langle \hat{p} \rangle_f = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) f'(x) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} f(x) f'(x) dx,$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την υπόθεση πως $f(x) \in \mathbb{R}$. Συνεχίζοντας,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) f'(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[f(x)^2 \right] dx = \frac{1}{2} \left[f(x)^2 \right]_{-\infty}^{\infty} = 0,$$

διότι η f μηδενίζεται στο $\pm\infty$ ως τετραγωνικά ολοκληρώσιμη.

β) Έχουμε

$$\hat{p}\Psi(x) = -i\hbar \left[e^{ikx} f(x) \right]' = \hbar k e^{ikx} f(x) - i\hbar e^{ikx} f'(x) = \hbar k \Psi(x) + e^{ikx} \hat{p} f(x).$$

Άρα:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle_\Psi = (\Psi, \hat{p}\Psi) &= (\Psi, \hbar k \Psi) + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) e^{ikx} \hat{p} f(x) dx \\
&= \hbar k (\Psi, \Psi) + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) e^{ikx} \hat{p} f(x) dx \\
&= \hbar k + \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \hat{p} f(x) dx = \hbar k + (f, \hat{p} f),
\end{aligned}$$

όπου λάβαμε υπ'όψη πως $(\Psi, \Psi) = 1$ και πως η f είναι πραγματική. Ο δεύτερος όρος μηδενίζεται λόγω του (α), επομένως το αποτέλεσμα είναι $\hbar k$.

9 Αναπαράσταση ορμής

α) Βρείτε την $\Psi = Ne^{-\gamma|x-x_0|}$ ($\gamma > 0$, $x_0 \in \mathbb{R}$) σε αναπαράσταση ορμής. Εδώ, N είναι συντελεστής κανονικοποίησης προς υπολογισμό.
β) Δεδομένης της (α), βρείτε την πυκνότητα πιθανότητας $\rho(p)$ να λάβει η ορμή τιμή στο διάστημα $[p, p+dp)$ και την $g(E)$ να λάβει η κινητική ενέργεια τιμή στο διάστημα $[E, E+dE)$.

Λύση
α) Η συνάρτηση είναι συμμετρική (άρτια) γύρω από το x_0. Κάνοντας το μετασχηματισμό $y = x - x_0$, μετατρέπουμε την Ψ σε συμμετρική ως προς το $y = 0$. Βρίσκουμε πρώτα το N:

$$1 = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} [e^{-\gamma|x-x_0|}]^2 dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\gamma|y|} dy = 2N^2 \int_0^{\infty} e^{-2\gamma y} dy = 2N^2/(2\gamma),$$

οπότε $N = \sqrt{\gamma}$. Σε αναπαράσταση ορμής, ο ορισμός δίνει

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x) dx \\
&= \frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} e^{-\gamma|x-x_0|} dx \\
&= \frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip(x-x_0)/\hbar} e^{-\gamma|x-x_0|} dx \\
&= \frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \left[\int_{-\infty}^{0} e^{-ipy/\hbar} e^{+\gamma y} dy + \int_0^{\infty} e^{-ipy/\hbar} e^{-\gamma y} dy \right] \\
&= \frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \left[\frac{1}{i\frac{p}{\hbar} + \gamma} - \frac{1}{-i\frac{p}{\hbar} - \gamma} \right] \\
&= -\frac{2}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \frac{\gamma^{3/2}}{\gamma^2 + p^2/\hbar^2}.
\end{aligned}$$

β) Η πυκνότητα πιθανότητας να λάβει η ορμή τιμή p είναι η πιθανότητα μετάβασης από την Ψ στη γενικευμένη ιδιοσυνάρτηση της ορμής $u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$:

$$\rho(p) = |(u_p, \Psi)|^2 = \left| \int u_p(x)^* \Psi(x) dx \right|^2 = |\tilde{\Psi}(p)|^2 = \frac{2}{\pi\hbar} \frac{\gamma^3}{(\gamma^2 + p^2/\hbar^2)^2}.$$

Η πυκνότητα πιθανότητας να λάβει η ενέργεια τιμή E προκύπτει από την πυκνότητα πιθανότητας της ορμής $\rho(p)$ που βρήκαμε πιο πάνω, αν λάβουμε υπ'όψη τις δύο κατευθύνσεις της ορμής ($\pm p$) που δίνουν ίδια κινητηκή ενέργεια, $E = p^2/2m$. Αρκεί να υπολογίσουμε το αποτέλεσμα για $p > 0$ και να συμπεριλάβουμε έναν παράγοντα 2:

$$\begin{aligned} g(E)dE &= 2[\rho(p)dp]_{p=\sqrt{2mE}} \\ &= 2\rho(\sqrt{2mE})\,\frac{dp}{dE}dE. \end{aligned}$$

Υπολογίζουμε $dp/dE = \frac{1}{2}\sqrt{2m/E}$ και καταλήγουμε:

$$g(E) = \frac{2}{\pi\hbar}\frac{\sqrt{2m}\,\gamma^3}{(\gamma^2 + 2mE/\hbar^2)^2}\,\frac{1}{\sqrt{E}}.$$

10 Ακτινική ορμή

Δίνονται οι ακόλουθες ταυτότητες για τον τελεστή ακτινικής ορμής:

$$\begin{aligned}\hat{p}_r\Psi(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{\mathbf{r}}}{r}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\cdot\frac{\hat{\mathbf{r}}}{r}\right)\Psi(\mathbf{r}) &= -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\Psi(\mathbf{r}) \\ &= -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\Psi(\mathbf{r})\right)\end{aligned}$$

α) Δείξτε ότι ο τελεστής $\hat{p}_r$ είναι ερμιτιανός υπό την προϋπόθεση ότι δρα σε κυματοσυναρτήσεις $\Psi(\mathbf{r})$ τέτοιες ώστε

$$\lim_{r\to 0}\left[r\Psi(\mathbf{r})\right] = \lim_{r\to\infty}\left[r\Psi(\mathbf{r})\right] = 0.$$

β) Δείξτε τη σχέση αβεβαιότητας $(\Delta p_r)(\Delta r) \geq \hbar/2$.

Λύση

α)Για να είναι ο $\hat{p}_r$ ερμιτιανός, αρκεί να ισχύει $(\Psi, \hat{p}_r\Psi) \in \mathbb{R}$. Εξετάζουμε τη συνθήκη για να ισχύει αυτή η απαίτηση. Συμβολίζουμε την ολοκλήρωση στη στερεά γωνία με $\int d\Omega$, άρα $\int d^3r = \int d\Omega \int dr\, r^2$. Έχουμε $(\Psi, \hat{p}_r\Psi) \in \mathbb{R} = \int d\Omega \int dr\, r^2 \Psi^*(\mathbf{r})\hat{p}_r\Psi(\mathbf{r})$. Εφόσον η αναζήτησή μας αφορά μόνο την ακτινική συνιστώσα, για ευκολία εξετάζουμε μόνο την εξάρτηση από το r και γράφουμε $\Psi(\mathbf{r}) = f(r)$. Απαιτούμε λοιπόν

$$\int dr\, r^2\, f^*(r)\hat{p}_r f(r) \in \mathbb{R},$$

δηλαδή

$$\int dr\, r^2\, f^*(r)\hat{p}_r f(r) - \left[\int dr\, r^2\, f^*(r)\hat{p}_r f(r)\right]^* = 0.$$

Έχουμε:

$$\int dr\, r^2\, f^*(r)\hat{p}_r f(r) = -i\hbar\int dr\, r^2\, f^*(r)\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}[rf(r)] = -i\hbar\int dr\, [rf(r)]^*\frac{\partial}{\partial r}[rf(r)].$$

Προχωρώντας με ολοκλήρωση κατά παράγοντες,

$$\begin{aligned}-i\hbar\int dr\,[rf(r)]^*\frac{\partial}{\partial r}[rf(r)] &= -i\hbar\left[|rf(r)|^2\right]_{-\infty}^{\infty} + i\hbar\int dr\frac{\partial}{\partial r}[rf(r)]^*[rf(r)] \\ &= -i\hbar\left[|rf(r)|^2\right]_{-\infty}^{\infty} + \left[-i\hbar\int dr\frac{\partial}{\partial r}(rf(r))(rf(r))^*\right]^* \\ &= -i\hbar\left[|rf(r)|^2\right]_{-\infty}^{\infty} + \int dr\, r^2\, f^*(r)\hat{p}_r f(r).\end{aligned}$$

Άρα η απαίτηση $\int dr\, r^2\, f^*(r)\hat{p}_r f(r) \in \mathbb{R}$ γράφεται $[|rf(r)|^2]_{-\infty}^{\infty} = 0$, δηλαδή

$$\lim_{r\to 0}\left(|rf(r)|\right) = \lim_{r\to\infty}\left(|rf(r)|\right).$$

Για να πεισθούμε πως τα δύο μηδενίζονται, εξετάζουμε το $\lim_{r\to\infty}(|rf(r)|)$. Εάν αυτό δεν μηδενίζεται, τότε η συνάρτηση $\Psi(\mathbf{r})$ δεν μπορεί να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, διότι για μεγάλα r το αντίστοιχο ολοκλήρωμα $\int d\Omega \int dr\, r^2 |\Psi(r)|^2$ θα συμπεριφέρεται ως $\int dr\, r^2 |f(r)|^2 = \int dr\, |rf(r)|^2$, το οποίο αποκλίνει (δηλ. η $rf(r)$ δεν μπορεί να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη, εκτός αν μηδενίζεται για μεγάλα r, όπως ξέρουμε από τα μονοδιάστατα προβλήματα). Άρα, $\lim_{r\to\infty}(|rf(r)|) = 0$, και το ζητούμενο δείχθηκε.

β) Η γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας γράφεται εδώ $(\Delta p_r)(\Delta r) \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{p}_r, \hat{r}]\rangle|$. Υπολογίζουμε τον μεταθέτη μέσω δράσης σε τυχαία $\Psi(r,\theta,\phi)$.

$$\begin{aligned}
[\hat{p}_r, \hat{r}]\Psi = \hat{p}_r(r\Psi) - r\hat{p}_r\Psi &= -i\hbar\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\Psi) - r\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\Psi)\right] \\
&= -i\hbar\left[\frac{1}{r}\left(2r\Psi + r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi\right) - \Psi - r\frac{\partial}{\partial r}\Psi\right] \\
&= -i\hbar\Psi.
\end{aligned}$$

Δηλαδή, $[\hat{p}_r, \hat{r}] = -i\hbar$. Αντικαθιστώντας στη γενικευμένη σχέση αβεβαιότητας, καταλήγουμε $(\Delta p_r)(\Delta r) \geq \hbar/2$.

11 Εύρεση δυναμικού (τρεις διαστάσεις)

Έστω η κυματοσυμάρτηση

$$\Psi(\mathbf{r}) = N\, z\, e^{-\gamma\sqrt{x^2+y^2+z^2}},$$

όπου $\gamma > 0$ και N σταθερά κανονικοποίησης.
α) Δείξτε ότι πρόκειται για ιδιοσυνάρτηση των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ και βρείτε τις αντίστοιχες ιδιοτιμές από γνωστές σχέσεις της θεωρίας.
β) Υπολογίστε το δυναμικό για το οποίο η Ψ είναι ιδιοσυνάρτηση της Χαμιλτονιανής και την αντίστοιχη ιδιοτιμή της ενέργειας (η μάζα m θεωρείται γνωστή).

Λύση
α) Περνώντας σε σφαιρικές συντεταγμένες, όπου $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ και $z = r\cos\theta$, η συνάρτηση γράφεται $\Psi = N\cos\theta\, re^{-\gamma r}$. Αλλά από τις σφαιρικές αρμονικές ξέρουμε ότι $\cos\theta = \sqrt{4\pi/3}\, Y_{1,0}(\theta,\phi)$. Άρα,

$$\Psi = N\sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0}(\theta,\phi)\, re^{-\gamma r}.$$

Πρόκειται πρόδηλα για ιδιοσυνάρτηση των $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$, διότι περιέχει τις γωνίες (θ,ϕ) σε μία μόνο σφαιρική αρμονική: $\hat{L}^2 Y_{1,0}(\theta,\phi) = \hbar^2 1(1+1) Y_{1,0}(\theta,\phi) = 2\hbar^2 Y_{1,0}(\theta,\phi)$ και $\hat{L}_z Y_{1,0}(\theta,\phi) = \hbar \cdot 0 \cdot Y_{1,0}(\theta,\phi) = 0$, δηλαδή η Ψ είναι ιδιοσυνάρτηση του $\hat{L}^2$ με ιδιοτιμή $2\hbar^2$ και του $\hat{L}_z$ με ιδιοτιμή μηδέν.

β) Από την εξίσωση Schrödinger. $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi = E\Psi$, έχουμε

$$V(\mathbf{r}) - E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\Psi}{\Psi} = -\frac{\hat{T}\Psi}{\Psi},$$

όπου $\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$ ο τελεστής της κινητικής ενέργειας.
Αλλά από τη θεωρία γνωρίζουμε πως ο τελεστής της κινητικής ενέργειας γράφεται

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{1}{2m}\frac{1}{r^2}\hat{L}^2,$$

όπου $\hat{p}_r$ ο τελεστής της ακτινικής ορμής. Άρα:

$$\hat{T}\Psi = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2\Psi + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Psi) + \frac{2\hbar^2}{2mr^2}\Psi,$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το συμπέρασμα του (α) πως η Ψ είναι ιδιοσυνάρτηση του τετραγώνου της στροφορμής. Υπολογίζουμε και την

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Psi) = N\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}(\theta,\phi)\,\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r^2e^{-\gamma r}) = N\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}(\theta,\phi)\,\frac{1}{r}\left(\frac{2}{r}-4\gamma+\gamma^2 r\right)re^{-\gamma r}$$

$$= \left(\frac{2}{r^2}-\frac{4\gamma}{r}+\gamma^2\right)\Psi,$$

οπότε

$$\hat{T}\Psi = \left[\frac{2\gamma\hbar^2}{m}\frac{1}{r}-\frac{\hbar^2\gamma^2}{2m}\right]\Psi$$

και

$$V(\mathbf{r})-E = -\frac{2\gamma\hbar^2}{m}\frac{1}{r}+\frac{\hbar^2\gamma^2}{2m}.$$

Στο δυναμικό και την ιδιοτιμή της ενέργειας μπορεί να προστεθεί μια αυθαίρετη σταθερά (η ίδια σταθερά και στα δύο). Συνήθως διευκολύνει να επιλέξουμε τη σταθερά τέτοια ώστε το δυναμικό να μηδενίζεται στο άπειρο, οπότε

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{2\gamma\hbar^2}{m}\frac{1}{r},\quad E = -\frac{\hbar^2\gamma^2}{2m}.$$

Εάν θέσουμε $\gamma = \frac{me^2}{2\hbar^2}$, τότε το δυναμικό γίνεται $V(r) = -e^2/r$ και Ψ συμπίπτει με τη διεγερμένη κατάσταση του ατόμου του Υδρογόνου με $n=2$, $l=1$, $m_l=0$.

12 Αρμονικός ταλαντωτής σε τρεις διαστάσεις

α)Με τη μέθοδο χωριζόμενων μεταβλητών, βρείτε τις ιδιοτιμές του τριδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή,

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2\, r^2,$$

θεωρώντας γνωστή τη λύση σε μία διάσταση.
β) Γράψτε τις ιδιοσυναρτήσεις της θεμελιώδους, της πρώτης διεγερμένης και της δεύτερης διεγερμένης στάθμης.

Λύση
α) Είναι $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ και $\hat{p}^2 = \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 + \hat{p}_z^2$. Άρα η χρονικά ανεξάρτητη εξ. Schrödinger $\frac{1}{2m}\hat{p}^2\Psi + \frac{1}{2}m\omega^2\, r^2\Psi = E\Psi$ γράφεται

$$\left(\frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\Psi + \left(\frac{1}{2m}\hat{p}_y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2\right)\Psi + \left(\frac{1}{2m}\hat{p}_z^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2\right)\Psi = E\Psi,$$

δηλαδή

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\Psi + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2\right)\Psi + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2\right)\Psi = E\Psi.$$

Δοκιμάζουμε χωρισμό μεταβλητών, $\Psi(x, y, z) = f(x)g(y)h(z)$. Αντικαθιστώντας και διαιρώντας τα δύο μέλη με $f(x)g(y)h(z)$ λαμβάνουμε

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{f(x)}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{g(y)}\frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{h(z)}\frac{\partial^2 h(z)}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 = E.$$

Η εξίσωση πλέον έχει τρεις όρους στο αριστερό μέλος, εκ των οποίων ο πρώτος εξαρτάται μόνο από το x, ο δεύτερος μόνο από το y και ο τρίτος μόνο από το z. Ο μόνος τρόπος να έχουν σταθερό άθροισμα ίσο με E είναι να ισούται ο κάθε ένας ξεχωριστά με μια σταθερά. Έτσι,

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{f(x)}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 &= \epsilon_1 \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{g(y)}\frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 &= \epsilon_2 \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{h(z)}\frac{\partial^2 h(z)}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 &= \epsilon_3
\end{aligned}$$

όπου $\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 = E$. Αλλά κάθε μία από τις παραπάνω εξισώσεις ταυτίζεται με την εξίσωση ιδιοτιμών της ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή σε μία διάσταση. Π.χ., η πρώτη γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 f(x) = \epsilon_1 f(x).$$

Οι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες ιδιοσυναρτήσεις $f_n(x)$ και οι ιδιοτιμές $\epsilon_{1,n}$ είναι οι γνωστές από τη θεωρία Φ_n και E_n, αντίστοιχα, για τον αρμονικό ταλαντωτή ($n = 0, 1, 2, \ldots$). Όμοια για τις $g(y)$ και $h(z)$. Άρα, οι ειδικές λύσεις της εξίσωσης Schrödinger του τριδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή γράφονται

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, x) = \Phi_{n_1}(x)\Phi_{n_2}(y)\Phi_{n_3}(z)$$

και οι ιδιοτιμές είναι

$$\begin{aligned} E_{n_1 n_2 n_3} &= \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_3 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \\ &= \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \end{aligned}$$

$n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \ldots$. Η θεμελιώδης στάθμη είναι η $E_{0,0,0} = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

β) Για δεδομένη ενέργεια $E = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$, δηλαδή για δεδομένο άθροισμα $n_1 + n_2 + n_3 \equiv n$, υπάρχουν πολλοί συνδυασμοί των (n_1, n_2, n_3) οι οποίοι το ικανοποιούν. Το πλήθος αυτών είναι ο εκφυλισμός της ενέργειας. Μπορούμε να τον βρούμε με το ακόλουθο σκεπτικό. Αν $n_1 = 0$, το άθροισμα n δίνεται από τους συνδυασμούς $(n_2 = 0, n_3 = n)$, $(n_2 = 1, n_3 = n - 1)$, κτλ., ως $(n_2 = n, n_3 = 0)$, οι οποίοι είναι $n + 1$ το πλήθος. Αν $n_1 = 1$, το άθροισμα n δίνεται από τους συνδυασμούς $(n_2 = 0, n_3 = n - 1)$, $(n_2 = 1, n_3 = n - 2)$, κτλ., ως $(n_2 = n - 1, n_3 = 0)$, οι οποίοι είναι n το πλήθος. Ανάλογα, αν $n_1 = 2$, βρίσκουμε $n - 2$ το πλήθος συνδυασμούς των (n_2, n_3), ώστε να επιτευχθεί $n_1 + n_2 + n_3 = n$. Συνεχίζοντας, καταλήγουμε στο $n_1 = n$ που αντιστοιχεί σε έναν και μοναδικό συνδυασμό, $n_2 = n_3 = 0$. Αθροίζοντας τα επιμέρους πλήθη, έχουμε $(n + 1) + n + (n - 1) + (n - 2) + \cdots + 1 = (n + 1)(n + 2)/2$, που είναι ο εκφυλισμός της ενεργειακής στάθμης $E = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$. Ειδικά η θεμελιώδης στάθμη, $n = 0$, δεν είναι εκφυλισμένη.

Η θεμελιώδης είναι η $\Psi_{0,0,0} = \Phi_0(x)\Phi_0(y)\Phi_0(z)$ με ενέργεια $E_{0,0,0} = \frac{3}{2}\hbar\omega$.
Στην πρώτη διεγερμένη στάθμη, με $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$, αντιστοιχούν οι $\Psi_{1,0,0}$, $\Psi_{0,1,0}$, και $\Psi_{0,1,0}$.
Στη δεύτερη διεγερμένη στάθμη, με $E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$, αντιστοιχούν οι $\Psi_{0,0,2}$, $\Psi_{0,1,1}$, $\Psi_{0,2,0}$, $\Psi_{1,0,1}$, $\Psi_{1,1,0}$, $\Psi_{2,0,0}$.